



UFAM

**UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

**MODELO DE ISING COM INTERAÇÕES COMPETITIVAS:
EFEITOS DO CAMPO EXTERNO E FRUSTRAÇÃO**

ROSANA APARECIDA DOS ANJOS

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

Orientador: Prof. Dr. José Ricardo de Sousa

MANAUS-AM
2006

Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.



UFAM

**UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

**MODELO DE ISING COM INTERAÇÕES COMPETITIVAS:
EFEITOS DO CAMPO EXTERNO E FRUSTRAÇÃO**

ROSANA APARECIDA DOS ANJOS

Orientador: Prof. Dr. José Ricardo de Sousa

MANAUS-AM
2006

Este trabalho foi realizado com o apoio financeiro da CAPES.

À meus pais

AGRADECIMENTOS

Ao Prof^o Dr. José Ricardo de Sousa, pela sua grande orientação e confiança com que me conduziu a este trabalho.

A meus familiares, em especial à meus pais Erasmo e Ana dos Anjos e aos meus irmãos pelo apoio incondicional.

A todos os professores do Departamento de pós-graduação em Física, em especial ao Prof^o Dr. José Wilson por sua imensa colaboração e seus ensinamentos.

Ao Prof^o Dr. Alberto Arruda do departamento de física da UFMT, pelo seu apoio e incentivo.

A todos os colegas do departamento, em especial Zé Roberto por sua orientação neste trabalho, Dílson, Otoniel, Vânia, enfim a todos os colegas e amigos que de forma direta ou indireta contribuíram para a realização deste trabalho.

Sumário

Resumo	ix
I Introdução	1
1.1 Ordenamento Magnético	1
1.2 Modelagem teórica do magnetismo	10
1.3 Transição de fase e fenômenos críticos	16
1.4 Teoria de Landau para pontos tricríticos	30
1.5 Hipótese de Widom e universalidade	36
1.6 Organização da dissertação	40
II Teorias de Campo Efetivo: Modelo de Ising numa Rede Anisotrópica	43
2.1 Introdução	43
2.2 Técnica do operador diferencial	53
2.2.1 Identidade de Callen-Suzuki	54
2.2.2 Teoria de campo efetivo em aglomerado finito	57
2.3 Modelo de Ising numa rede quadrada anisotrópica na presença de campo externo	63
2.3.1 Considerações gerais	63
2.3.2 Técnica do operador diferencial	65
2.3.3 Aproximação de Bethe-Peierls	68
2.3.4 Campo médio	71

2.3.5	Aproximação da cadeia linear	74
2.3.6	Diagramas de fases e discussões	75
III	Modelo de Ising com interações entre primeiros e segundos vizinhos	81
3.1	Considerações gerais	81
3.2	Técnica do operador diferencial	86
3.2.1	Rede quadrada	88
3.3	Diagramas de fases e discussões	100
IV	Conclusão e perspectivas futuras	105

Lista de Figuras

1.1	Comportamento das magnetizações espontâneas dos compostos formados por níquel (Ni), ferro (Fe) e cobalto (Co). As curvas teóricas são baseadas na teoria de Weiss [1].	2
1.2	Magnetização espontânea molar em função da temperatura das granadas de ferro $A_3Fe_5O_{12}$ obtida da Ref. 6.	5
1.3	Comportamento da susceptibilidade a campo nulo em função da temperatura para o composto antiferromagnético $MnCl_2 \cdot 4H_2O$ [7].	7
1.4	Diagrama de fase no plano $T-H$ para o sal antiferromagnético $NiCl_2 \cdot 6H_2O$ obtido experimentalmente na Ref. 9.	8
1.5	Diagrama de fase T versus H para o composto $Dy_3Al_5O_{12}$ [13]. A curva contínua representa a linha crítica e a pontilhada uma linha de coexistência (primeira ordem). O círculo cheio representa o ponto tricrítico.	9
1.6	Diagrama de fase no plano $T-H$ obtido via aproximação de campo molecular. (a) matamagneto fortemente anisotrópico, (b) metamagneto fracamente anisotrópico. As curvas contínuas são linhas críticas (segunda ordem). As curvas tracejadas e pontilhadas são linhas de coexistência (primeira ordem).	10

1.7	Comportamento da magnetização espontânea em função da temperatura reduzida $\frac{T}{T_c}$ para o filme de uma única camada de Cr depositado em ouro Ag(001)[33]. A linha contínua representa a solução de Onsager [34] para o modelo de Ising na rede quadrada. Os pontos (●) e quadrados(□) representam os resultados experimentais.	19
1.8	Comportamento de $\ln M_o$ versus $\ln(-t)$, $\ln \chi_o^{-1}$ versus $\ln t$ e $\ln M$ versus $\ln H$ para a liga metálica $\text{Fe}_{1-x}\text{Al}_x$ com $x = 0.10$. As inclinações das curvas determinam os expoentes críticos β , γ e δ , respectivamente [45].	24
1.9	(a) Capacidade térmica molar isobárica C_p do níquel como função da temperatura. (b) Gráfico log-log de $\frac{dC_p}{dt}$ versus $ T - T_c $. A inclinação da reta ajustada aos dados vale -0.90 que representa um expoente $\alpha = -0.10$ [46].	25
1.10	Diagrama de fase esquemático do modelo descrito pelo Hamiltoniano Eq.(1.34) no espaço de parâmetro (T, H, H_S) . S_1 e S_2 representam as superfícies de primeira ordem. PTC representa o ponto tricrítico.	34
1.11	Diagrama de fase esquemático da energia livre de Landau até ordem m_S^6 . As várias formas da energia livre nas regiões particulares são mostradas na figura.	37
1.12	Comportamento do escalonamento (<i>scaling</i>) $\frac{H}{ t ^\Delta}$ versus $\frac{M(t,H)}{ t ^\beta}$ para o composto ferromagneto CrBr_3 obtido experimentalmente na Ref. 6. Observe os colapsos nas duas curvas, uma para $T > T_c$ e a outra para $T < T_c$, confirmando o escalonamento (43), e conseqüentemente a hipótese de Widom.	39
2.1	Esquema do aglomerado com N spins numa rede 1d para tratar o modelo de Ising 1d na aproximação de campo médio com N sítios (MFA-N).	47
2.2	Estruturas topológicas de redes (a) Kagomé, (b) quadrada, (c) triangular, (d) cúbica simples.	62

2.3	Dependência da temperatura crítica reduzida $k_B T_N / J_x$ como uma função da razão $r = J_y / J_x$ para o modelo de Ising numa rede quadrada anisotrópica na ausência de campo externo. MFA (a) encontra valores incorretos para o limite da rede linear ($r = 0$). As curvas (b), (c), (d) e (e) são encontrados usando LCA[96], EFT-1 (presente trabalho), BP (presente trabalho) e solução exata, Eq. (2.62), respectivamente.	76
2.4	Dependência da temperatura crítica reduzida $k_B T_N / J_x$ com campo reduzido H / J_x para o modelo de Ising numa rede quadrada anisotrópica com $r = 1$. MFA (a) encontra valores incorretos no limite de baixas temperatura que é a presença de transição de primeira ordem, onde existe um ponto tricrítico nas coordenadas (1.756, 2.667). As curvas (b), (c) e (d) e (e) são encontrados usando LCA[96], EFT-1 (presente trabalho) e BP (presente trabalho), respectivamente.	78
2.5	Dependência da temperatura crítica reduzida $k_B T_N / J_x$ como uma função do campo reduzido H / J_x para o modelo de Ising numa rede quadrada anisotrópica com $r = 1$. Comparamos o resultado da linha crítica obtida via aproximação BP (presente trabalho) (curva a) com a forma exata (curva b).	79
3.1	Configurações dos spins em $T = 0$ no estado ferromagnético (F) numa rede quadrada.	83
3.2	Configurações dos spins em $T = 0$ no estado antiferromagnético (AF) numa rede quadrada.	84
3.3	Configurações dos spins em $T = 0$ no estado superantiferromagnético (SAF) numa rede quadrada.	84

3.4	Diagrama de fase T versus α para o modelo de Ising com interações entre primeiros e segundos vizinhos numa rede quadrada obtida via simulação de Monte Carlo[102, 103]. Na região $0.5 < \alpha < 1.144$ a transição de fase é de primeira ordem, e o ponto tricrítico está marcada por uma quadrado aberto.	85
3.5	Diagrama de fase T versus α para o modelo de Ising com interações entre primeiros e segundos vizinhos numa rede cúbica simples obtida via método variacional[104]. As linhas contínuas e tracejadas correspondem, respectivamente, a transição de fase de primeira e segunda ordem. O ponto tricrítico está marcado por um círculo preto. O gráfico da esquerda corresponde ao caso de interação de quatro spins nula ($J_3 = 0$) e o da direita com $J_3 = 1/3$	87
3.6	Aglomerado com quatro spin usado na técnica do operador diferencial . . .	93
3.7	Estado fundamental da fase laminar para uma célula unitária de uma rede cúbica simples	98
3.8	Diagrama de fase T versus α para o modelo de Ising com interações entre primeiros e segundos vizinhos numa rede quadrada obtida por EFT-1. Na região $0.5 < \alpha < 0.68$ a transição de fase é de primeira ordem, e o ponto tricrítico está marcada por um ponto em negrito. As linhas de transições de fases de primeira e segunda ordem estão representadas por linhas contínuas e pontilhadas, respectivamente. A transição de fase F-P apresenta erroneamente um ponto tricrítico.	101
3.9	Diagrama de fase T versus α para o modelo de Ising com interações entre primeiros e segundos vizinhos numa rede quadrada obtida por EFT-4. Na região $0.5 < \alpha < 0.95$ a transição de fase é de primeira ordem, e o ponto tricrítico está marcada por um ponto em negrito. As linhas de transições de fases de primeira e segunda ordem estão representadas por linhas contínuas e pontilhadas, respectivamente.	103

3.10 Diagrama de fase T versus α para o modelo de Ising com interações entre primeiros e segundos vizinhos numa rede cúbica simples obtida por EFT-1. O ponto tricrítico entre as fases F e P está marcado por um ponto em negrito. As linhas de transições de fases de primeira e segunda ordem estão representadas por linhas contínuas e pontilhadas, respectivamente. 104

Lista de Tabelas

1.1	Valores teóricos e experimentais dos expoentes críticos, $\beta, \gamma, \alpha, \delta, \nu, \eta$. . .	28
2.1	Valores da temperatura crítica reduzida $k_B T_c / J$ para diversas redes 2d e 3d no modelo de Ising -1/2, obtidas da Eq. (2.60), comparadas com resultados exatos (2d) e simulação de Monte Carlo (3d) [92]	63

Resumo

Neste trabalho estudaremos o diagrama de fase de dois modelos de Ising com interações competitivas. Primeiro, o modelo de Ising numa rede quadrada anisotrópica na presença de um campo externo será estudado pelos métodos aproximativos: Bethe-Peierls e operador diferencial. O modelo consiste de cadeias ao longo do eixo-x interagindo ferromagneticamente com acoplamento de *exchange* J_x e antiferromagneticamente entre sítios de cadeias diferentes (ao longo do eixo-y) com acoplamento de *exchange* J_y . O estado fundamental ($T = 0$) deste modelo consiste de cadeias com spins paralelos (ferromagnético) alternados de sinais ao longo do eixo-y (tipo fase superantiferromagnética), ou seja, $\langle + - + - + \dots \rangle$. A presença do campo H na direção do eixo de fácil magnetização (eixo z positivo), tem como objetivo inverter os spins que estão orientados para baixo. Em $T = 0$, existe um campo crítico $H_c = 2J_y$ no qual o sistema sofre uma transição de fase contínua (2^a ordem). Para $H < H_c$ temos um ordenamento tipo SAF e para $H > H_c$ o sistema fica desordenado com uma magnetização induzida por campo externo. Na ausência de campo externo ($H = 0$) este modelo apresenta solução exata com uma transição de fase na temperatura crítica $\frac{K_B T_c}{J_y} \simeq 2.269$. Com $H \neq 0$ este modelo só tem solução aproximada. Veremos que MFA apresenta uma solução qualitativa para o diagrama de fase no plano ($T - H$) errônea, pois prevê uma transição de primeira ordem na região de altos valores do campo externo ($H \simeq H_c$), com um ponto tricrítico separando a linha crítica da linha de primeira ordem. Outros métodos obtêm apenas transição de segunda ordem em toda região de $H \in [0, H_c]$, com alguns deles indicando um comportamento reentrante ao redor do ponto crítico $H = H_c$. Nosso objetivo será analisar a existência ou não da reentrância no diagrama de fase, discutindo a potencialidade de diversos métodos. Outro sistema que iremos estudar, é o modelo de Ising com interações antiferromagnéticas entre primeiros (J_1) e segundos vizinhos (J_2) nas redes quadrada e cúbica simples na ausência de campo externo, que será discutido através dos métodos aproximativos mencionados acima. O estado fundamental deste modelo apresenta dois tipos de ordenamento de spins dependente do valor de $\alpha = \frac{J_2}{J_1}$. O papel da interação J_2 é

induzir frustração, destruindo assim a fase antiferromagnética (AF) que ocorre $\alpha < \alpha_c$. Para $\alpha > \alpha_c$, temos ordenamento dos spins alternados paralelamente e antiparalelamente entre cadeias (rede quadrada) e planos (rede cúbica simples). Na fase AF temos uma linha crítica $T_c(\alpha)$ que decresce à medida que α cresce, se anulando no ponto multicrítico $\alpha = \alpha_c = \frac{z_1}{2z_2}$ (onde z_1 e z_2 são os números de coordenações entre primeiros e segundos vizinhos, respectivamente). Para a rede quadrada temos $z_1 = z_2 = 4$ e a rede cúbica simples $z_2 = 2z_1 = 12$. Denotaremos para $\alpha > \alpha_c$ a fase colinear (para o caso particular da rede quadrada é conhecida pela fase superantiferromagnética) de uma forma genérica. A temperatura de transição $T_c(\alpha)$ na fase colinear cresce à medida que α cresce, sendo que para a rede quadrada temos linha de primeira ordem para $\alpha_c < \alpha < \alpha_t$ e segunda ordem para $\alpha > \alpha_t$, que se interceptam no ponto tricrítico (T_t, α_c) . No caso da rede cúbica simples temos linha de primeira ordem para todos os valores de $\alpha > \alpha_c = \frac{1}{4}$. Propomos um esquema, baseado na análise do comportamento térmico do parâmetro de ordem, para obtenção da linha de primeira ordem usando a técnica do operador diferencial, que na literatura apenas tem sido aplicada na obtenção de linha crítica, de modelos que apresentam transição de 1ª ordem.

Capítulo I

Introdução

1.1 Ordenamento Magnético

É conhecido desde a antiguidade que algumas substâncias apresentam propriedades magnéticas. Porém, somente a partir do início do século XX o magnetismo foi interpretado do ponto de vista qualitativo por Pierre Weiss [1], em 1907. Weiss apresentou uma teoria fenomenológica que era capaz de explicar qualitativamente o comportamento dos materiais ferromagnéticos. Estes materiais têm magnetização espontânea (sem campo externo) abaixo de uma temperatura crítica T_c (temperatura de Curie), tornando-se paramagnéticos para $T > T_c$ (magnetização nula).

A idéia básica da teoria de Weiss (campo molecular) é que um único momento magnético, associado a um dado íon do material, interage com o restante do cristal através de um campo, que ele chamou de campo molecular, que é proporcional à magnetização (média dos momentos magnéticos) do material. Mesmo sendo introduzida vários anos antes do modelo atômico de Bohr, a teoria de Weiss ainda representa o ponto de partida para investigações de sistemas magnéticos interagentes. Na figura 1-1 apresentamos os comportamentos das magnetizações em função da temperatura reduzida T/T_c para os compostos ferromagnéticos constituídos pelo ferro (Fe), níquel (Ni) e cobalto (Co). Comparamos os resultados experimentais com os obtidos teoricamente usando a teoria

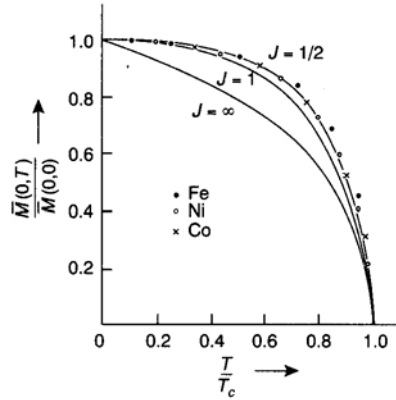


Figura 1.1: Comportamento das magnetizações espontâneas dos compostos formados por níquel (Ni), ferro (Fe) e cobalto (Co). As curvas teóricas são baseadas na teoria de Weiss [1].

de Weiss (ver Ref.2). Numa linguagem moderna, dizemos que quando atingimos a temperatura de Curie [por exemplo $T_c(Fe) = 770^\circ C$, $T_c(Ni) = 358^\circ C$, $T_c(Co) = 1122^\circ C$], o sistema sofreu uma transição de fase, onde para $T > T_c$ temos uma fase desordenada com mais simetria (paramagnética) e $T < T_c$ temos uma fase ordenada com menos simetria (ferromagnética) - quebra espontânea da simetria.

Apesar da teoria de Weiss ser capaz de reproduzir qualitativamente várias propriedades magnéticas dos compostos ferromagnéticos (ex.: MnSb, CrTe, CrO₂, CrBr₃, EuO, EuS), esta apresenta sérias inconsistências do ponto de vista quantitativo. Por exemplo, Weiss imaginava que os momentos magnéticos interagiam no interior destes materiais, dando um ordenamento ferromagnético, cuja energia de interação era do tipo dipolo-dipolo. Esta energia dipolar $\Delta E_d \simeq \frac{\mu^2}{a^3}$ (μ é o momento magnético do íon e a é o parâmetro de rede cristalina) não é capaz de explicar fisicamente os altos valores de T_c . Vejamos o raciocínio qualitativo: suponhamos que nos compostos ferromagnéticos o ordenamento dos momentos magnéticos ocorre porque a energia de interação, aqui representada pela dipolar ΔE_d , é suficientemente maior do que a energia térmica $k_B T$ (k_B é a constante de Boltzmann), isto é, $\Delta E_d \gg k_B T$. À medida que a temperatura aumenta, a magnetização decresce

conforme mostra a figura 1-1, e quando atingimos T_c a ordem é destruída por causa fundamentalmente da energia térmica ser da mesma magnitude de ΔE_d , isto é, $\Delta E_d \simeq k_B T_c$. Portanto, usando $\mu \simeq \mu_B$ (magneton de Bohr), $a \simeq 1\text{\AA}$ e o valor da constante k_B , estimamos $T_c \simeq 10^{-1}K$ muito inferior aos resultados experimentais $T_c \simeq 10^3K$! Concluimos assim que a origem microscópica do forte magnetismo (altos valores de T_c) não deve-se a interação magnética entre os íons nos compostos ferromagnéticos¹. Modernamente as propriedades magnéticas estão associadas aos momentos magnéticos localizados nos íons. O elétron é o responsável pelo magnetismo, com o seu momento angular intrínseco, o spin. A existência de um momento magnético permanente tem sua origem nas camadas eletrônicas internas d ou f quando estas se encontram incompletas [4]. Cinco grupos de elementos na tabela periódica apresentam essas características. São os grupos do ferro (camada 3d), paládio (camada 4d), lantânio (camada 4f), platina (camada 5d) e actíneo (camada 5f). Como a camada f é mais localizada e fortemente ligada ao átomo, as propriedades magnéticas dos isolantes são melhores explicadas se considerarmos sua origem nessas camadas. No caso de metais, o magnetismo é explicado pela interação s-d, onde o elétron da camada s é delocalizado. Esse elétron itinerante, torna-se temporariamente residente no átomo em um estado tipo d antes de tunelar de volta ao estado delocalizado [5]. No entanto se tratarmos um íon de metal isoladamente, teremos um sistema compreendido por um spin delocalizado mais os elétrons itinerantes. A população de elétrons s em torno do íon tem polarização de spin contrária ao do momento magnético do íon. Esta nuvem de spins antiferromagnéticos em ressonância próxima do íon é chamada de compensação de Nagaoka de ligante de Kondo. Abaixo de uma temperatura característica T_K , a temperatura de Kondo, os spins antiparalelos neutralizam o momento magnético do íon e reduzem a zero seu valor observável, no limite teórico.

¹Devemos salientar que nos compostos magnéticos a interação dipolar sempre está presente, porém por ser de natureza extremamente fraca ela sozinha não explica o forte magnetismo. Por outro lado, materiais orgânicos apresentam baixos valores para T_c o que torna a interação dipolar indispensável para descrever as propriedades magnéticas destes novos compostos [3].

Resumindo, o magnetismo presente na matéria pode ter uma das duas origens:

- a) Devido aos spins localizados: magnetismo localizado (isolante);
- b) Devido aos spins dos elétrons em movimento: magnetismo itinerante (metal).

Neste trabalho nos restringimos ao estudo de modelos magnéticos localizados, descritos por Hamiltonianos tipo Ising com interações competitivas, com o objetivo de analisar diagramas de fases.

Outra característica marcante nos materiais ferromagnéticos é apresentar divergência na grandeza susceptibilidade magnética à campo nulo $\chi_o = \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_{H=0}$ quando a temperatura crítica T_c é atingida. Por outro lado, existem materiais que apresentam divergência de χ_o em $T = T_c$ mas não são ferromagnéticos. Por exemplo, a magnetita (Fe_3O_4), mineral conhecido desde a antigüidade, assim como outros óxidos de ferro com a estrutura cristalina do espinélio material, tais como, o MgFe_2O_4 , MnFe_2O_4 , NiFe_2O_4 , CoFe_2O_4 e CuFe_2O_4 , apesar de apresentarem uma magnetização espontânea à temperatura ambiente, são na realidade classificados como ferrimagnéticos. Estes compostos têm spins ordenados antiparalelamente com valores distintos (S_1 e S_2 , por exemplo). Este desbalanceamento dos spins na rede cristalina, faz com que a magnetização total dos ferrimagnetos com estrutura cristalina da granada apresentem um comportamento diferente da magnetização total do apresentado na figura 1-1 para os compostos ferromagnéticos. À medida que a temperatura cresce nos compostos ferrimagnéticos, as magnetizações das sub-redes M_1 (íons com spin- S_1 apontados para cima) e M_2 (íons com spin- S_2 apontados para baixo, com $S_2 < S_1$) decresce monoticamente e atinge uma temperatura de compensação T_{comp} , onde a magnetização total $M = M_1 + M_2$ ($M_1 > 0$ e $M_2 < 0$) se anula, mas não caracteriza uma transição de fase propriamente dita. Para $T > T_{comp}$, a magnetização total cresce e à medida que a temperatura aumenta, M atinge um ponto de máximo e decresce até finalmente se anular novamente na temperatura crítica T_c , onde para $T > T_c$ não temos mais ordem magnética e o sistema torna-se paramagnético. Os ferrimagnetos com esta característica marcante de existência de temperatura de compensação são descritos pela fórmula química $A_3(\text{Fe}_5\text{O}_{12})$, onde A é um metal trivalente. Vejamos

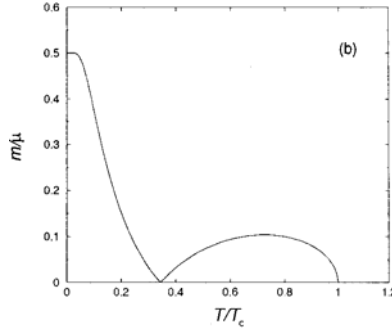


Figura 1.2: Magnetização espontânea molar em função da temperatura das granadas de ferro $A_3Fe_5O_{12}$ obtida da Ref. 6.

alguns exemplos: $Yb_3Fe_5O_{12}[T_{comp} = 0K, T_c = 548K]$, $Er_3Fe_5O_{12}[T_{comp} = 83K, T_c = 556K]$, $Ho_3Fe_5O_{12}[T_{comp} = 137K, T_c = 567K]$, $Dy_3Fe_5O_{12}[T_{comp} = 226K, T_c = 563K]$, $Tb_3Fe_5O_{12}[T_{comp} = 246K, T_c = 568K]$, $Gd_3Fe_5O_{12}[T_{comp} = 286K, T_c = 564^\circ K]$. Na figura 1-2 apresentamos o comportamento da magnetização espontânea em função da temperatura para as granadas de ferro do tipo $A_3Fe_5O_{12}$ (A é um dos elementos dos metais das terras-raras) obtidos experimentalmente por Pauthenet [6].

Existem, porém, outros materiais, como, por exemplo a hematita (Fe_2O_3) e os óxidos CoO e Cr_2O_3 , que na ausência de campo externo apresentam magnetização total zero e não são propriamente paramagnéticos. Estes materiais são denominados de antiferromagnéticos (AF) abaixo de uma dada temperatura característica, conhecida como temperatura de Néel (T_N). Para temperaturas altas (i.e., $T > T_N$), os dipolos apontam em direções aleatórias destruindo assim a ordem magnética AF. No estado AF, os dipolos magnéticos na rede cristalina interagem de tal maneira a se orientarem (mínimo de energia) antiparalelamente. Os compostos antiferromagnéticos mais simples são os fluoretos $FeF_2[T_N = 90K]$ e $MnF_2[T_N = 75K]$ que apresentam uma estrutura cristalina de corpo centrado, e os compostos com F_3 , $KMnF_3[T_N = 95K]$, $KNiF_3[T_N = 275K]$ e $RbMnF_3[T_N = 82K]$ com estrutura de perovskita numa rede cúbica simples. A estrutura

cristalina desses materiais é constituída por uma rede magnética que se divide em apenas duas subredes equivalentes (A e B) e interpenetrantes. Devido à interação de troca (*exchange*) negativa ($J < 0$), os momentos magnéticos são orientados antiparalelamente sobre toda a rede cristalina, e na ausência de campo externo temos $m_B = -m_A$ (m_A e m_B são as magnetizações das subredes A-*up* e B-*down*, respectivamente). Por outro lado, existem outros antiferromagnetos que possuem estruturas mais complexas, constituídas por várias subredes magnéticas como, por exemplo, os compostos magnéticos de face centrada MnO($T_N = 120K$), FeO($T_N = 198K$), CoO($T_N = 291K$) e NiO($T_N = 530K$), cujas magnetizações das subredes são todas colineares. Esses compostos antiferromagnéticos apresentam em comum a propriedade da susceptibilidade magnética total $\chi_o = \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_{H=0}$ ($M = M_A + M_B$, $H \rightarrow 0$) exibir um ponto de máximo na temperatura T_N , diferindo drasticamente dos materiais ferromagnéticos que em $T = T_c$ têm uma divergência em χ_o . Na figura 1-3 mostramos os resultados experimentais de χ_o versus T para o composto antiferromagnético MnCl₂.4H₂O obtido por Lasher, van der Broek e Gorter [7]. As curvas c e b correspondem a $\chi_o(T)$ de um monocristal obtidas ao longo do campo aplicado paralelo e perpendicular ao eixo fácil de magnetização, respectivamente. A curva p corresponde à susceptibilidade do pó. Rigorosamente falando, segundo Fisher, T_N não corresponde ao valor máximo de χ_o e sim ao ponto de inflexão, que ocorre ligeiramente abaixo deste máximo, conforme pode ser visto na curva da direita na figura 1-3.

Por outro lado, diferente dos compostos ferromagnéticos, que na presença de campo magnético externo na direção do eixo fácil da magnetização a transição de fase é destruída (não existe T_c , por exemplo), os antiferromagnetos na presença do campo externo podem exibir diversos tipos de ordenamento magnético no diagrama de fase no plano $T - H$. Do ponto de vista teórico, os primeiros estudos das propriedades magnéticas em compostos antiferromagnéticos foram desenvolvidos por Néel [8]. A teoria de Néel corresponde à aplicação da teoria do campo molecular de Weiss, onde dividimos o sistema antiferromagnético em duas ou mais subredes interpenetrantes. Com esta teoria é possível explicar qualitativamente os comportamentos da susceptibilidade apresentadas na figura 1-3.

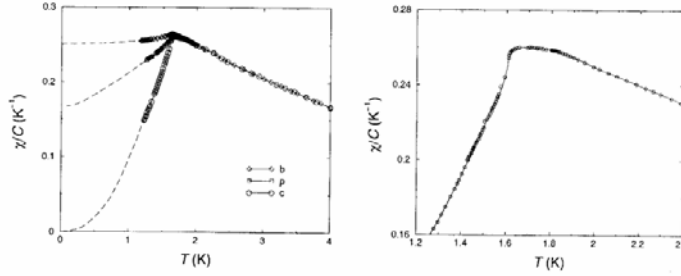


Figura 1.3: Comportamento da susceptibilidade a campo nulo em função da temperatura para o composto antiferromagnético $\text{MnCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ [7].

O comportamento de materiais antiferromagnéticos uniaxiais em campos externos depende fortemente das intensidades relativas de suas energias de anisotropia e de intercâmbio. Existem aqueles que são fracamente anisotrópicos permitindo assim a rotação dos spins em torno do eixo de fácil magnetização, e, tipicamente, as transições de fase nestes sistemas são acompanhados de uma rotação nas direções dos spins. Exemplos destes tipos de materiais antiferromagnéticos são MnF_2 , FeF_2 , KCoF_3 , KNiF_3 , RbMnF_3 , Cr_2O_3 , $\text{NiCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$. O diagrama de fase no plano $T - H$ apresenta três fases distintas: i) antiferromagnética (AF), ii) spin-*flop* (SF), iii) paramagnética (P). A uma temperatura abaixo da temperatura de Néel e para pequenos valores do campo, a direção média dos spins nas duas subredes é paralela na subrede A e antiparalela na subrede B, o que corresponde à fase AF. Quando o campo é aumentado acima de um valor crítico, o sistema experimenta uma transição de fase de primeira ordem para a fase SF onde os spins nas duas subredes são orientados segundo um ângulo de *flop* com a direção do campo. Aumentando ainda mais o campo nesta região SF, o ângulo de *flop* vai continuamente a zero, ocorrendo então uma transição de fase de segunda ordem (ou contínua) para a fase paramagnética. Este fenômeno de *flop* dos spins foi previsto teoricamente por Néel [8] e

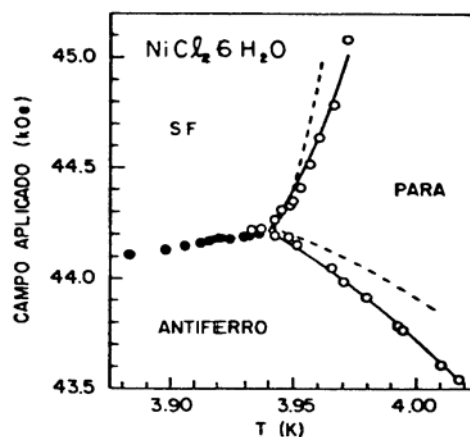


Figura 1.4: Diagrama de fase no plano $T - H$ para o sal antiferromagnético $\text{NiCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ obtido experimentalmente na Ref. 9.

tem sido observado experimentalmente num grande número de materiais com anisotropia pequena. Por exemplo, na figura 1-4 apresentamos os resultados do diagrama de fase T versus H para o composto antiferromagnético $\text{NiCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ obtido nos anos setenta por Nei Oliveira, Paduan e Salinas [9]. O ponto de interseção das três fronteiras de fase foi identificado por Fisher e Nelson [10] como sendo o *ponto bicrítico*.

Existem, porém, outros materiais antiferromagnéticos que são fortemente anisotrópicos, o que vincula os spins a permanecerem paralelos ou antiparalelos ao eixo de fácil magnetização tal que as transições nestes materiais são geralmente caracterizadas por simples reversões nas direções dos spins. Estes materiais, denominados de metamagnéticos, apresentam apenas transição de fase AF diretamente para a fase P em todo o intervalo de temperatura. Observe que o termo metamagnetismo que usamos tem o significado mais amplo dado por Stryjewski e Giordano [11]. Como exemplo de materiais metamagnéticos temos CrSb , MnTe , CrCl_2 , FeCl_2 , CoCl_2 , $\text{Dy}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$, e são constituídos

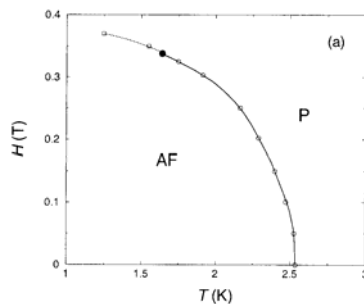


Figura 1.5: Diagrama de fase T versus H para o composto $\text{Dy}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ [13]. A curva contínua representa a linha crítica e a pontilhada uma linha de coexistência (primeira ordem). O círculo cheio representa o ponto tricrítico.

por uma sucessão de camadas ferromagnéticas que se alternam em sinais.

Para estes compostos metamagnéticos, a anisotropia faz com que a fase SF não apareça no diagrama de fase no plano $T - H$, observando apenas as fases AF e P. As camadas (planos) nestes compostos estão ordenados ferromagneticamente e alternadas em direções opostas. Teoricamente dizemos que os spins nas camadas interagem ferromagneticamente (J_1) e entre camadas antiferromagneticamente (J_2). Com esta competição, o diagrama de fase apresenta uma transição contínua AF-P para baixos (altas) campos (temperaturas) e de primeira ordem para altos (baixas) valores de campos (temperaturas). Existe um ponto, denominado de ponto tricrítico [12], que separa as transições contínuas e descontínuas. Na figura 1-5 apresentamos os resultados experimentais do diagrama de fase no plano $T - H$ para o composto $\text{Dy}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ obtido por Landau, Keen, Schneider e Wolf [13]. Vale a pena mencionar que o ponto tricrítico indicado na figura 1-5 só foi denominado posteriormente, logo após o trabalho teórico de Griffiths [12].

Do ponto de vista teórico, os diagramas de fases experimentais mostrados nas figuras 1-4 e 1-5 para os metamagnetos com fraca e forte anisotropia, respectivamente, podem ser analisados qualitativamente usando a teoria de Néel [8]. Na figura 1-6, mostramos os resultados obtidos nesta aproximação de campo molecular (teoria de Néel).

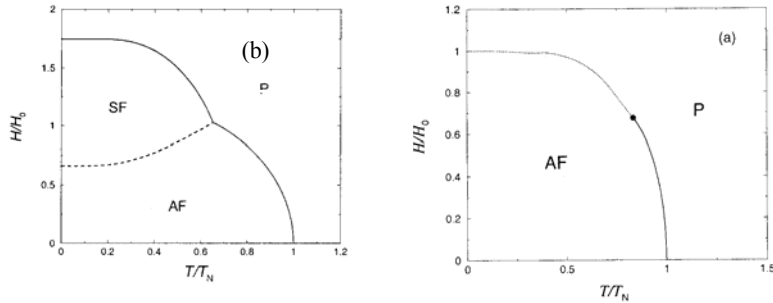


Figura 1.6: Diagrama de fase no plano $T-H$ obtido via aproximação de campo molecular. (a) matamagneto fortemente anisotrópico, (b) metamagneto fracamente anisotrópico. As curvas contínuas são linhas críticas (segunda ordem). As curvas tracejadas e pontilhadas são linhas de coexistência (primeira ordem).

Vimos que devido aos arranjos dos momentos magnéticos numa rede cristalina, onde leva-se em consideração os valores dos spins, anisotropias, topologia da rede, etc, podemos ter diversos tipos de ordenamentos magnéticos [14]. A presença dos materiais magnéticos em nossas vidas é observada desde o ímã que colocamos na geladeira até a memória (HD) do computador. O estudo dos fenômenos magnéticos cria interface entre a Física e outras ciências, por exemplo, a medicina. Medir os campos magnéticos produzidos por organismos vivos pode ser útil no entendimento de sistemas biofísicos, diagnóstico e terapia de humanos. Tais campos têm origem nas correntes que são produzidas pela atividade de despolarização das células (cérebro, coração, nervos).

1.2 Modelagem teórica do magnetismo

Na seção anterior, apresentamos de forma sucinta alguns tipos de ordenamento magnético na matéria, bem como discutimos diagramas de fases induzidos por campo magnético externo em compostos antiferromagnéticos. Para explicar o forte magnetismo do ponto de vista microscópico, Heisenberg [15] propôs que o alinhamento dos spins decorria de seus

vizinhos mais próximos. A interação eletrostática entre elétrons das camadas externas de íons adjacentes, tratada quanticamente via teoria de perturbação, produz uma separação dos níveis de energia eletrônicos, que pode ser entendida como a quantidade de energia necessária para trocar os elétrons do átomo. Por exemplo, para um sistema de dois elétrons [14, 16], o princípio de exclusão de Pauli obriga que as auto-funções de onda dos dois elétrons (férmions) sejam antisimétricas, e usando teoria de perturbação obtém-se as auto-energias dadas por

$$E_{\pm} = E_o \pm J_{12} \quad (1)$$

com

$$J_{12} = \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \phi_1^*(\vec{r}_2) \phi_2^*(\vec{r}_1) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \phi_1(\vec{r}_1) \phi_2(\vec{r}_2) \quad (2)$$

onde E_o é a auto-energia na ausência da perturbação coulombiana, $\phi_i(\vec{r}_i)$ é a auto-função da partícula $i = 1, 2$ no estado l do sistema não perturbado. A energia de troca (ou *exchange*) $J_{12} = E_{\uparrow\downarrow}(S = 0) - E_{\uparrow\uparrow}(S = 1)$ (onde $E_{\uparrow\uparrow}(S = 1)$ e $E_{\uparrow\downarrow}(S = 0)$ são as auto-energias dos estados tripleto e singleto, respectivamente) foi proposta independentemente por Frenkel [17] e Dorfman [18]. Quando $J_{12} > 0$, o estado de menor energia é o tripleto e, portanto, prevalece a orientação dos spins paralelos (estado ferromagnético); para $J_{12} < 0$ o estado de menor energia é o singleto, prevalecendo a orientação dos spins antiparalelos (estado antiferromagnético). A energia de troca J_{12} tem a propriedade de decrescer rapidamente com a distância entre os íons (decaimento exponencial), em contraste com a interação coulombiana que decresce mais lentamente ($\sim \frac{1}{r}$). A razão é que J_{12} , Eq.(1.2), contém o produto de funções de onda de elétrons ligados em diferentes núcleos, portanto, J_{12} dependerá do recobrimento (*overlap*) das funções de onda, e este *overlap* decresce exponencialmente com a distância. Desta maneira, a interação de troca corresponde à uma interação de curto-alcance, diferindo da interação dipolar que é de natureza de interação de longo alcance ($\sim \frac{1}{r^3}$).

Usando as relações dos operadores de spin \vec{S}^2 e $\vec{S}_i^2 (i = 1, 2)$, onde $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$ ($S = 0, 1$), e com base nas auto-funções correspondentes às auto-energias dadas pela Eq. (1.1), Dirac [19] propôs o seguinte Hamiltoniano efetivo de spins²

$$\mathcal{H}_{12} = E_o - \frac{J_{12}}{2}(1 + 4\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2), \quad (3)$$

pois, de fato temos

$$\mathcal{H}_{12} = |\phi_{\pm}\rangle = E_{\pm} |\phi_{\pm}\rangle, \quad (4)$$

onde $|\phi_{+}\rangle$ e $|\phi_{-}\rangle$ correspondem os auto-estados associados aos estados singlete e tripleto, respectivamente. Generalizando para uma rede cristalina de N spins localizados, o Hamiltoniano efetivo, onde a interação de intercâmbio (*exchange*) domina, é descrito por

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (5)$$

onde $\langle i, j \rangle$ representa o somatório sobre todos os pares de spins i e j (primeiros, segundos, etc vizinhos), $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ indica o operador de spin no sítio i . A Eq.(1.5) é conhecida na literatura como modelo de Dirac-Heisenberg. Para $J_{ij} > 0$ ($J_{ij} < 0$) dizemos ser o Hamiltoniano de Heisenberg ferromagnético (antiferromagnético).

Os materiais magnéticos isolantes encontrados na natureza são, com raras exceções, antiferromagnéticos [20, 21]. O estado fundamental do Hamiltoniano de Heisenberg ferromagnético corresponde à todos os spins alinhados paralelamente. Por outro lado, o estado fundamental deste mesmo Hamiltoniano antiferromagnético não corresponde à todos os spins orientados antiparalelamente (estado Néel), pois este não é auto-estado do Hamiltoniano. Existe uma infinidade de estados de spin total nulo ($S^z = 0$), que devem ser combinados para formar o estado fundamental do sistema [22]. A dificuldade em estabelecer um estado fundamental é o maior problema teórico que surge no estudo

²Para uma dedução do Hamiltoniano efetivo, Eq.(1.3), recomendamos ver as notas do Prof. Galvão Ramos [16].

do antiferromagnetismo do modelo de Heisenberg.

A interação de troca (*exchange*) se caracteriza pelo fato de ser independente da orientação dos spins, ou seja, o Hamiltoniano de Heisenberg, Eq. (1.5), apresenta simetria de rotação dos spins. Esta transformação implica que o Hamiltoniano de Heisenberg deve conter apenas pares de operadores S_i^μ , onde a forma aproximada dada pela Eq. (1.5) representa o Hamiltoniano bilinear [16]. Vários outros termos (de origem coulombiana) podem ser deduzidos via teoria de perturbação de ordem superior, como, por exemplo, o termo biquadrático

$$\mathcal{H}_1 = - \sum_{\langle i,j \rangle} J'_{ij} \left(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \right)^2, \quad (6)$$

ou a interação entre quatro spins

$$\mathcal{H}_2 = - \sum_{\langle i,j,l,k \rangle} J''_{ijkl} \left(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \right) \left(\vec{S}_l \cdot \vec{S}_k \right), \quad (7)$$

etc.

O tipo de estrutura magneto-cristalina é determinada pela natureza e magnitude das interações entre os momentos magnéticos dos íons que formam o cristal. A interação de troca, de origem eletrostática (+ princípio de exclusão de Pauli) e responsável pelo ordenamento magnético na matéria é de natureza isotrópica, não sendo capaz de definir alguma orientação dos momentos magnéticos com respeito aos eixos cristalográficos, mas ela produz um ordenamento mútuo dos spins em vários sítios da rede. Uma vez que a distribuição de spins ordenados é sempre orientada numa dada direção (eixo de fácil magnetização), definida com respeito ao eixo cristalino, devemos ter algum outro tipo de interação que torne o Hamiltoniano de Heisenberg anisotrópico. Fisicamente, as interações magnéticas (dipolar, quadrupolar, etc) são responsáveis pela existência da anisotropia magneto-cristalina, que se manifesta com a dependência da energia do cristal nas orientações dos momentos magnéticos dos íons com relação ao eixo cristalino. Podemos dizer que num cristal existem campos magnéticos efetivos internos que tendem a orientar

os momentos magnéticos em uma dada direção privilegiada. Este campo pode alterar algumas vezes as orientações mútuas dos momentos magnéticos dos átomos, distorcendo assim a estrutura magneto-cristalina.

Um primeiro tipo de anisotropia adicional na Eq. (1.5) é a interação dipolar, que é representada pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_{dipolar} = -4\mu_B^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \left\{ \frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - 3 \left(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{S}_i \right) \left(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{S}_j \right)}{r_{ij}^3} \right\}, \quad (8)$$

onde $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$ é o vetor posição que separa os íons i e j , $\hat{r}_{ij} = \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}}$ é o vetor unitário, e μ_B é o magneton de Bohr. Note que o somatório acima é feito sobre todos os pares i e j de spins sobre a rede cristalina, e representa uma interação de longo alcance. Devido à simetria rotacional do Hamiltoniano de Heisenberg, Eq.(1.5), prova-se que numa rede bidimensional as interações (*exchange*) bilineares entre primeiros vizinhos não são capazes de ordenar os momentos magnéticos em temperatura finita, ou seja, a magnetização espontânea é nula [23]. A presença da interação de longo alcance, tipo dipolar variando com a distância $\frac{1}{r_{ij}^3}$, no Hamiltoniano de Heisenberg Eq.(1.5), pode induzir ordenamento magnético em $T > 0$ numa rede 2d [24].

O magnetismo dos elementos de transição do grupo do ferro é sempre associado ao momento magnético dos spins. Isto ocorre porque nos cristais, formados por estes elementos, o campo cristalino geralmente remove a degenerescência orbital do estado eletrônico responsável pelo magnetismo. O valor esperado do momento orbital de um estado não degenerado é zero, (o que se convencionou chamar *quenching* do momento orbital), isto é, numa primeira aproximação a susceptibilidade estática não recebe contribuição do momento orbital. Esta contribuição apenas aparece se levarmos em conta a interação spin-órbita, que é descrita pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_{LS} = \sum_i \xi(r_i) \vec{L}_i \cdot \vec{S}_i, \quad (9)$$

onde $\xi(\vec{r}_i) = \frac{1}{2m^2r_i} \frac{dV}{dr_i}$, $V(r_i)$ é a energia potencial elétrica (núcleo-elétron), \vec{L}_i e \vec{S}_i são os operadores de momento angular orbital e spin, respectivamente, no sítio i .

Usando teoria de perturbação de 2ª ordem para a energia de interação spin-órbita, a Eq. (1.9), poderá ser reescrita na forma

$$\mathcal{H}_{\vec{S}, \vec{L}} = \sum_i \sum_{\alpha, \beta} \Lambda_i^{\alpha\beta} S_i^\alpha S_i^\beta, \quad (10)$$

sendo

$$\Lambda_i^{\alpha\beta} = 2\xi^2 \sum_{l \neq p} \frac{\langle p | L_i^\alpha | l \rangle \langle l | L_i^\beta | p \rangle}{E_p^o - E_l^o}, \quad (11)$$

o tensor de anisotropia spin-órbita, $\xi^2 = \langle \xi^2(\vec{r}_i) \rangle$ e E_n^o é a auto-energia do Hamiltoniano não perturbado.

O Hamiltoniano usado habitualmente para descrever anisotropias ortorrômicas leva em conta apenas os termos diagonais; assim sendo, a Eq. (1.10) ficará:

$$\mathcal{H}_o = -D \sum_i (S_i^z)^2 + E \sum_i [(S_i^x)^2 - (S_i^y)^2], \quad (12)$$

onde $E = 0$ reduz-se ao caso da anisotropia uniaxial. Observe que o Hamiltoniano (12) representa a interação do sítio i com ele mesmo (auto-interação), que é denominada de anisotropia de íon-único. A Eq. (1.12) só é relevante para sistemas com spin $S > 1/2$, pois no caso particular de spin $S = 1/2$ temos $(S_i^\nu)^2 = 1/4$ ($\hbar \equiv 1$) para qualquer componente $\nu = x, y, z$ e, conseqüentemente, este termo se reduzirá a uma constante não sendo relevante nos cálculos das propriedades magnéticas.

A interação spin-órbita também pode induzir anisotropia na interação de troca, Eq. (1.5). Segundo van Vleck [25], a anisotropia uniaxial deste tipo tem origem no acoplamento dos momentos orbitais dos átomos adjacentes, que depende não só da orientação relativa dos dois momentos, como também da orientação destes com relação ao eixo que une os dois átomos. Em termos dos spins, esse acoplamento pode ser simulado

por uma interação dipolar, cujo coeficiente é inteiramente disposto do coeficiente da interação magnética real dada pela Eq. (1.8). Neste caso, a perturbação é dada por $W_{ij} = \xi(\vec{r}_i)\vec{L}_i\cdot\vec{S}_j + \lambda\vec{L}_i\cdot\vec{S}_j$ e o Hamiltoniano efetivo será escrito por

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\alpha,\beta} J_{ij}^{\alpha\beta} S_i^\alpha S_j^\beta, \quad (13)$$

onde $J_{ij}^{\alpha\beta}$ é a interação entre os sítios i e j associados às componentes α e β dos spins. O Hamiltoniano generalizado dado pela Eq. (1.13) contém a parte simétrica $J_{ij}^\alpha (\alpha = \beta) = J_{ji}^\alpha$ e anti-simétrica ($\alpha \neq \beta, J_{ij}^{\alpha\beta} \neq J_{ji}^{\alpha\beta}$). O termo anti-simétrico surge em redes com baixa simetria [26], e é responsável em alguns compostos antiferromagnéticos pela existência de um pequeno valor de magnetização (*pequeno ferromagnetismo*).

1.3 Transição de fase e fenômenos críticos

Da Eq. (1.13) temos, dependendo dos valores das interações J_{ij}^α , três limites particulares de modelos de spins:

a) Modelo de Ising

Corresponde ao caso em que $J_{ij}^z \gg J_{ij}^{x,y}$, e portanto podemos aproximar o Hamiltoniano (13) para um modelo com interação entre a componente z dos spins³, isto é,

$$\mathcal{H}_I = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i^z S_j^z. \quad (14)$$

O Hamiltoniano (1.14) é o sistema mais simples da mecânica estatística e apresenta solução exata em rede unidimensional e bidimensional (sem campo externo) [27]. Contrário ao caso do modelo Heisenberg antiferromagnético, o estado Néel, representado por spins dispostos em direções alternadas sobre a rede cristalina, é auto-estado do Hamil-

³Não estamos levando em consideração a anisotropia de íon-único, Eq. (1.10), nem mesmo o acoplamento do spin com um campo magnético externo (energia Zeeman).

toniano de Ising antiferromagnético. Na ausência de campo externo, as propriedades termodinâmicas do modelo de Ising ferromagnético são equivalentes ao caso antiferromagnético, isto porque temos a invariância da função de partição $Z_F(J_{ij}) = Z_{AF}(-J_{ij})$. A inclusão do campo magnético quebra esta invariância, $Z_{AF}(-J_{ij}) \neq Z_F(J_{ij})$, uma vez que, o modelo de Ising antiferromagnético com interações entre primeiros e segundos vizinhos na presença de um campo (direção axial) externo, descrito pelo Hamiltoniano

$$\mathcal{H}_I = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} S_i^z S_j^z - H \sum_i S_i^z, \quad (15)$$

descreve adequadamente o diagrama de fase dos metamagnetos fortemente anisotrópicos, tais como FeBr_2 , FeCl_2 , no plano $T - H$ dependendo do valor de $\alpha = \frac{J_2}{J_1}$. Para $\alpha = 0$, numa rede cúbica simples, por exemplo, temos uma linha crítica (transição de fase de segunda ordem) que separa as fases AF e P, onde em $T = 0$ (estado fundamental) temos o ponto crítico $H_c(0) = 6J_1$. Recentemente, o modelo (1.15) com $\alpha = 0$ foi reestudado por Neto e de Sousa [28] que mostraram que para a rede cúbica simples (coordenação $z = 6$) a temperatura de Néel $T_N(H)$ decresce monotonicamente a zero à medida que aumentamos o valor do campo, se anulando no ponto crítico $H_c(0) = 6J_1$. Por outro lado, para uma rede cúbica de corpo centrado (coordenação $z = 8$) foi observado um comportamento similar para $T_N(H)$ com o surgimento do fenômeno da reentrância (duas temperaturas críticas) ao redor do campo crítico $H_c(0) = 8J_1$. A presença da interação (competitiva) de segundo vizinho ($\alpha \neq 0$), introduz no sistema o efeito de frustração. Neste sistema, os primeiros vizinhos querem ficar orientados antiparalelamente ($J_1 > 0$) e surge um conflito com os segundos vizinhos (sítios situados nas diagonais), que também querem ficar antiferromagnéticos ($J_2 > 0$), dizemos então que para pequenos valores de $\alpha (< 1/4)$ este parâmetro de frustração não é capaz de desestabilizar o ordenamento AF. Para altos valores de $\alpha (> 1/4)$, o ordenamento AF entre os segundos vizinhos é predominante e o sistema sofre uma transição de fase, onde agora temos os spins ordenados ferromagneticamente nos planos alternados ao longo da direção do eixo de fácil magnetização (eixo

z). Este ordenamento dos spins na rede cúbica simples é denominado de fase colinear ou super-antiferromagnética (laminar)- SAF. Em $T = 0$, à medida que o campo aumenta, o sistema sofre uma transição de fase de primeira ordem no ponto de transição $H_c(0)$ entre as fases AF (ou SAF) e P. Desta maneira, para $\alpha > 1/4$, o diagrama de fase no plano $T - H$ obtido através de alguma técnica aproximativa é semelhante ao representado pela figura 1.6 (b). Neste trabalho de dissertação, o modelo (1.15) na ausência de campo externo ($H = 0$) será estudado via técnica do operador diferencial (capítulo 3).

Recentemente, o desenvolvimento de técnicas experimentais sofisticadas tem sido capaz de reduzir a dimensionalidade de um cristal magnético tornando-o bidimensional (filme com uma única camada). A transição de fase ferromagnética-paramagnética de muitos compostos ultrafinos ($L = 1, 2$), onde L é o número de camadas de átomos, tais como: Co/Cu(111) [29], Fe/W(110) [30], Fe/Pd (100) [31], Fe/Ag(100) [32], Mr ou Cr/Ag(001) [33], são bem descritos pelo modelo de Ising 2d, Eq. (1.14). Próximo da criticalidade, a magnetização espontânea do tipo $M(T) \simeq (T_c - T)^\beta$, onde $\beta = 1/8$ foi encontrada nestes compostos anisotrópicos ultrafilos em concordância com o resultado exato do modelo de Ising numa rede quadrada [34]. Devemos salientar (ver uma discussão, por exemplo, na Ref. 33) que a boa concordância teoria -experimento só se verifica próxima da região crítica ($T \simeq T_c$), o que significa que a expressão exata $M(T) = \{1 - \sinh^{-4}(\beta J)\}^{1/8}$ para o modelo de Ising na rede quadrada [34] não é capaz de reproduzir exatamente o comportamento da magnetização destes compostos em todo intervalo de temperatura (ver figura 1.7), visto que outras interações relevantes devem ser consideradas a fim de reproduzir quantitativamente os resultados experimentais em todo o intervalo de temperatura, como, por exemplo, anisotropia de íon único. Na região crítica estas interações são irrelevantes.

b) Modelo XY (ou planar)

Corresponde ao caso em que $J_{ij}^{x,y} \gg J_{ij}^z$, desta maneira podemos aproximar o Hamiltoniano (1.13) para um Hamiltoniano (XY ou planar) com interação entre x e y as

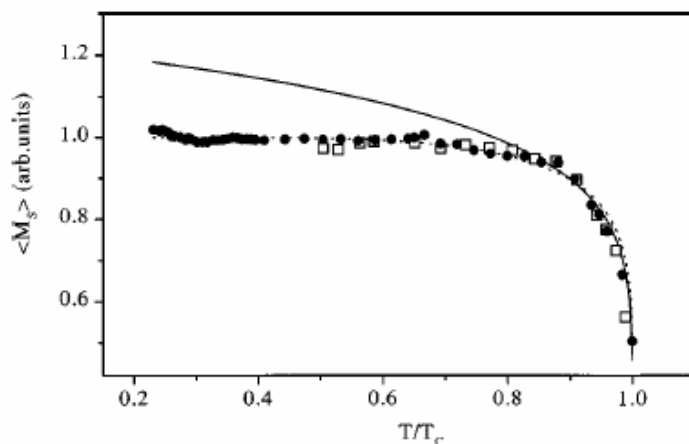


Figura 1.7: Comportamento da magnetização espontânea em função da temperatura reduzida $\frac{T}{T_c}$ para o filme de uma única camada de Cr depositado em ouro Ag(001)[33]. A linha contínua representa a solução de Onsager [34] para o modelo de Ising na rede quadrada. Os pontos (•) e quadrados(□) representam os resultados experimentais.

componentes dos spins, ou seja,

$$\mathcal{H}_{xy} = -\sum_{\langle i,j \rangle} (J_{ij}^x S_i^x S_j^x + J_{ij}^y S_i^y S_j^y) \quad (16)$$

O modelo XY ou planar foi introduzido na literatura por Matsubara e Matsuda [35] e tem solução exata em uma dimensão [36]. Em duas dimensões este modelo não apresenta ordem magnética (magnetização espontânea) em temperatura não nula. Kosterlitz e Thouless[37] propuseram um tipo diferente de transição de fase, onde foi definida uma ordem de longo alcance topológica, caracterizada por uma súbita mudança na resposta do sistema à perturbações externas. Definiram uma temperatura de transição T_{kT} , tal que para $T > T_{kT}$ a função de correlação spin-spin decai exponencialmente com a distância entre os pares e para $T < T_{kT}$ a função de correlação tem um decaimento segundo uma lei de potência. Acredita-se que esta transição de fase seja causada por um mecanismo de desligamento de pares de vórtice- antivórtice. Um vórtice (anti-vórtice) é uma excitação topológica na qual os spins em um caminho fechado ao redor do centro da excitação gira

de $2\pi(-2\pi)$ no mesmo sentido. Experimentalmente o modelo XY 3d tem sido usado para descrever as propriedades magnéticas dos compostos CoBr_2 e CoCl_2 [3] bem como para explicar as configurações de vórtices na fase superfluida no filme (monocamada) de He^4 [38].

c) Modelo de Heisenberg

Neste caso, os três termos de exchange J_{ij}^α ($\alpha = x, y, z$) são da mesma ordem. No limite isotrópico $J_{ij}^\alpha = J_{ij}$, o Hamiltoniano anisotrópico (1.13) reduz-se ao modelo de Heisenberg isotrópico descrito pela Eq. (1.5). O estado fundamental ($T = 0$) e algumas excitações elementares do Hamiltoniano (1.5) numa rede unidimensional com spin $S = 1/2$ foram resolvidos exatamente por Bethe [39] e Hulthín [40]. A generalização para incluir anisotropia do tipo: $J_{ij}^x = J_{ij}^y = \eta J$ e $J_{ij}^z = J$ foi feita anos mais tarde por Walker [41], cuja energia por partículas do estado fundamental é dada por.

$$E_o(\eta) = \frac{J}{2} \left\{ \frac{1}{2} - \tanh(a) \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{4}{1 + e^{2\eta a}} \right] \right\}, \quad (17)$$

onde $\text{sech}(a) = \eta$.

Outro resultado exato para o modelo de Heisenberg numa rede d -dimensional ($d = 1, 2$) é o teorema de Mermin e Wagner [23], que afirma que este sistema não apresenta ordem de longo-alcance a $T > 0$ no limite isotrópico, que podemos resumidamente expressar pelas desigualdades:

$$|M(T, H)| \leq \left\{ \begin{array}{l} \left[\frac{\pi^2 \beta^2 W}{\tanh^{-1} \left[\sqrt{\frac{\pi^2 S(S+1)W}{|M(T, H)|}} \right]} \right]^{\frac{1}{3}} S(S+1)H^{1/3}, d = 1 \\ \left[\frac{4\pi\beta W}{\log \left[1 + \frac{\pi^2 S(S+1)W}{H|M(T, H)|} \right]} \right]^{\frac{1}{2}} S(S+1), d = 2 \end{array} \right\} \quad (18)$$

onde $W = \sum_{(i,j)} J_{ij} \left| \vec{r}_i - \vec{r}_j \right|^2 < \infty$, S é a magnitude do spin, H o campo externo e $\beta = \frac{1}{K_B T}$. No limite de campo nulo ($H = 0$), a partir das desigualdades (1.18) temos

que a única solução possível é $M(T, H = 0) = 0$ ($T \neq 0$).

O estudo do modelo de Heisenberg antiferromagnético de spin 1/2 tem sido motivado sobretudo por causa da possível conexão com os compostos supercondutores de altas temperaturas formados por planos de CuO_2 [42, 43], como, por exemplo, os compostos $\text{YBa}_3\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ e $\text{La}_{2-x}\text{B}_{ax}\text{CuO}_4$. São compostos fortemente anisotrópicos, havendo um forte acoplamento entre os íons de cobre pertencentes ao plano de CuO_2 e um fraco acoplamento entre os planos. Em baixas temperaturas, as flutuações quânticas antiferromagnéticas são relevantes comparadas com as térmicas.

De uma maneira geral, a transição de fase de um sistema é caracterizada pela existência de singularidades nos potenciais termodinâmicos e suas derivadas. Defini-se o parâmetro de ordem como sendo a grandeza que é nula acima de uma temperatura crítica (fase desordenada). No sistema ferromagnético a magnetização é o parâmetro de ordem, no antiferromagneto o parâmetro de ordem é a diferença das magnetizações das sub-redes A e B, $m_S = \frac{(m_A - m_B)}{2}$. Para um ferromagneto canônico que sofre transição de 2ª ordem (contínua), ao redor do ponto crítico ($H = 0, T = T_c$) as grandezas termodinâmicas apresentam os seguintes comportamentos assintóticos:

i) magnetização

$$M(T, H) = -\frac{\partial g}{\partial H} = \left\{ \begin{array}{l} M(t, H = 0) \simeq (-t)^\beta, (t \rightarrow 0^-) \\ M(t = 0, H) \simeq H^{\frac{1}{\delta}}(H \rightarrow 0^+) \end{array} \right\} \quad (19)$$

onde $t = \frac{T - T_c}{T_c}$ e $g(t, H)$ é a energia livre de Gibbs.

ii) susceptibilidade

$$\chi_o(t) = -\left(\frac{\partial^2 g}{\partial H^2}\right)_{H=0} \simeq |t|^{-\gamma}, \quad (20)$$

iii) calor específico

$$C_o(t) = -T \left(\frac{\partial^2 g}{\partial T^2}\right) \simeq |t|^{-\alpha}, \quad (21)$$

iv) **função de correlação**

$$G_c(r) = \langle \vec{\sigma}(0)\vec{\sigma}(\vec{r}) \rangle - \langle \vec{\sigma}(0) \rangle \langle \vec{\sigma}(\vec{r}) \rangle$$

$$G_c(r) \simeq \frac{e^{-\frac{r}{\xi}}}{r^{d-2+\eta}}. \quad (r \rightarrow \infty), \quad (22)$$

onde $\xi \simeq |t|^{-\gamma}$ é o comprimento de correlação que mede o tamanho médio dos aglomerados correlacionados.

Baseados em argumentos de estabilidade dos potenciais termodinâmicos, na década de sessenta vários autores obtiveram relações de desigualdade entre os expoentes críticos, tais como [44]:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \alpha + 2\beta + \gamma \geq 2 & \text{(Rushbrooke,1963) (a)} \\ \alpha + \beta(1 + \delta) \geq 2 & \text{(Griffiths,1965) (b)} \\ \nu d \geq 2 - \alpha & \text{(Josephson,1967) (c)} \\ (2 - \eta)\nu \geq \gamma & \text{(Fisher,1969) (d)} \end{array} \right. \quad (23)$$

A determinação experimental dos expoentes críticos $\{\beta, \delta, \gamma, \alpha, \eta, \nu\}$ depende especialmente da escolha do intervalo para a variável t , e o intervalo considerado pequeno é uma escolha delicada que fortemente é influenciada pelo tipo de material analisado. Dizendo de outra maneira, o primeiro problema técnico para os físicos experimentais é identificar a região crítica (intervalo para t), região esta onde temos fortes flutuações térmicas⁴. Para sistemas magnéticos escolhe-se para região crítica $|t| \lesssim 10^{-3}$, enquanto nos supercondutores temos $|t| \lesssim 10^{-10}$, na transição lambda (H_e^4) $|t| \lesssim 10^{-7}$, e assim por diante. Esta escolha da região crítica é feita baseada no fato de que a medida do expoente crítico não é afetada por esta escolha, e conseqüentemente a inclinação da curva

⁴Do teorema da flutuação-dissipação temos que a susceptibilidade magnética, que diverge em $T = T_c$ ($H = 0$), está relacionada com a flutuação da magnetização e representa na realidade a função de correlação das flutuações dos spins (função de correlação correlacionada).

reta do gráfico $\ln f(t)$ versus $\ln |t|$ está relacionada com o seu expoente crítico associado. Na figura 1-8, apresentamos os comportamentos assintóticos das grandezas magnetização espontânea e susceptibilidade magnética para determinar os expoentes críticos β , δ e γ , respectivamente da liga metálica $\text{Fe}_{1-x}\text{Al}_x$, obtidos experimentalmente por Salazar [45]. Para concentração $x = 0.10$ encontra-se $\beta = 0.409$, $\gamma = 1.325$ e $\delta = 4.280$, que pouco variam com a concentração indicando ser esta liga descrita por um Hamiltoniano tipo Heisenberg.

Das Eqs.(1.23a) e (1.23b) encontramos $\Delta \equiv \beta(1 - \delta) + \gamma \geq 0$ e usando os resultados experimentais obtidos na figura 1-8 observamos que a desigualdade não é satisfeita (!), onde é encontrado $C \simeq -0.01652$, mais próxima de uma igualdade.

Do comportamento assintótico (1.21) temos que quando $\alpha > 0$, o calor específico diverge na temperatura crítica $T = T_c$ ($t = 0$); por exemplo, o matamagneto FeF_2 (forte anisotropia) tem $\alpha \simeq 0.14$, mas o matamagneto fracamente anisotrópico RbMnF_3 tem $\alpha \simeq -0.14$. Portanto, quando $\alpha < 0$, o calor específico $C_{H=0}$ não diverge em $T = T_c$, porém continua com o comportamento singular. Neste caso para caracterizar de forma apropriada a sua singularidade usamos

$$C_{H=0} \simeq \Delta C_o + A_{\pm} |t|^{-\alpha}, \quad (24)$$

onde ΔC_o representa a descontinuidade da derivada do calor específico em $T = T_c$. Para determinar o expoente α na Eq. (1.24), analisamos o comportamento assintótico da grandeza $\frac{dC_H}{dT} \simeq |t|^{-1-\alpha}$ eliminando assim a constante ΔC_o . Na figura 1-9 mostra a capacidade molar do níquel cujo expoente α é negativo obtido experimentalmente por Connelly, Loomis e Mapother [46].

Podemos, ainda, ter uma singularidade para o calor específico onde $\alpha = 0(\log)$. Esta singularidade ocorre na solução exata do modelo de Ising 2d [34], que próximo de $T \simeq T_c$ tem o seguinte comportamento assintótico para C_o :

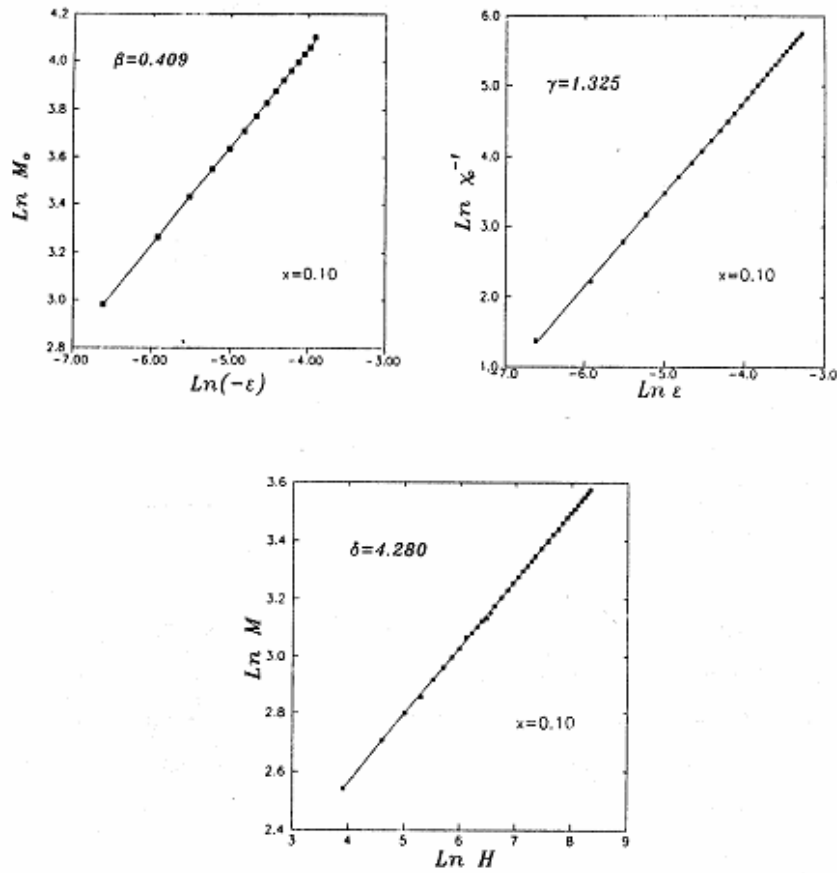


Figura 1.8: Comportamento de $\ln M_o$ versus $\ln(-t)$, $\ln \chi_o^{-1}$ versus $\ln t$ e $\ln M$ versus $\ln H$ para a liga metálica $\text{Fe}_{1-x}\text{Al}_x$ com $x = 0.10$. As inclinações das curvas determinam os expoentes críticos β , γ e δ , respectivamente [45].

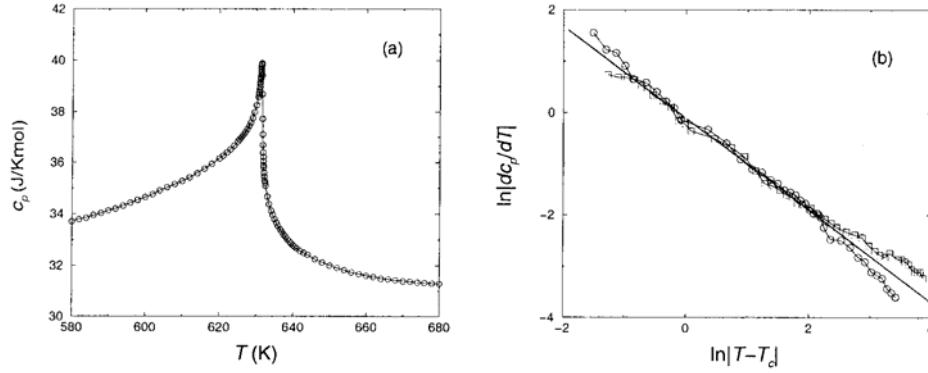


Figura 1.9: (a) Capacidade térmica molar isobárica C_p do níquel como função da temperatura. (b) Gráfico log-log de $\frac{dC_p}{dT}$ versus $|T - T_c|$. A inclinação da reta ajustada aos dados vale -0.90 que representa um expoente $\alpha = -0.10$ [46].

$$\frac{C_o}{k_B} \simeq -0.4945 \ln |t| + cte. \quad (25)$$

A descontinuidade do calor específico em $T = T_c$ (campo médio) também corresponde a $\alpha = 0$ (desc). A solução exata do modelo de Ising 2d, dá os seguintes expoentes críticos $\{\beta = \frac{1}{8}, \gamma = \frac{7}{4}, \delta = 15, \alpha = 0(\log), \nu = 1, \eta = \frac{1}{4}\}$ que na realidade satisfazem às igualdades das relações (1.23). Assim sendo, esperamos que para qualquer sistema os expoentes críticos não sejam independentes mas que guardem certas relações entre si:

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha + 2\beta + \gamma = 2 \\ \alpha + \beta(\delta + 1) = 2 \\ \gamma = \beta(\delta - 1) \\ \nu d = 2 - \alpha \\ (2 - \eta)\nu = \gamma \end{array} \right\} \quad (26)$$

onde d é a dimensionalidade do sistema, onde para o modelo de Ising acima temos $d = 2$.

O modelo de Ising numa rede anisotrópica, onde J e J' são as interações entre primeiros vizinhos nas direções horizontal e vertical, respectivamente, foi discutido por Onsager [34], e também por Chang [47], mostrando que os expoentes críticos deste modelo independem da razão $\frac{J'}{J} > 0$, indicando uma certa universalidade nos valores dos expoentes críticos. Considerando a variável de spin S_i^z do Hamiltoniano (1.14) como sendo contínua, variando de $-\infty$ a ∞ , Berlin e Kac [48] obtiveram as propriedades termodinâmicas (exatas) deste modelo, denominado de modelo esférico. O modelo esférico apresenta ordem de longo-alcance para dimensão $d > 2$, e os expoentes críticos são dados por:

i) região $2 < d < 4$

$$\left\{ \alpha = \frac{d-4}{d-2}, \beta = \frac{1}{2}, \gamma = \frac{2}{d-2}, \delta = \frac{d+2}{d-2}, \nu = \frac{1}{d-2}, \eta = 0, \right\} \quad (27)$$

que corresponde aos mesmos expoentes críticos obtidos para o gás de bósons d -dimensional [49]. Gunton e Buckingham [49] também generalizaram o estudo da condensação de Bose-Einstein incluindo um espectro de energia na forma $w \simeq K^\sigma$, onde σ é um número positivo não necessariamente igual a 2. Eles observaram transição de fase ($T_c \neq 0$) para $\sigma > d$ e os expoentes críticos na região $d < \sigma < 2d$ são $\left\{ \beta = \frac{1}{2}, \gamma = \frac{\sigma}{d-\sigma}, \alpha = \frac{d-2\sigma}{d-\sigma}, \delta = \frac{d+\sigma}{d-\sigma}, \nu = \frac{1}{d-\sigma}, \eta = 2 - \sigma \right\}$ e satisfazem as relações (1.26), que para o caso particular $\sigma = 2$ reproduz os resultados (1.27).

ii) caso crítico $d = 4$

$$\left\{ \begin{array}{l} m_o \simeq \frac{|t|}{\ln\left(\frac{1}{|t|}\right)} \quad \text{para } (H = 0) \\ \chi_o \simeq \frac{|t|^{-1}}{\ln\left(\frac{1}{|t|}\right)} \\ C_o \simeq \frac{|t|}{\ln\left(\frac{1}{|t|}\right)} \\ m_c \simeq \left\{ |t| \ln\left(\frac{1}{|t|}\right) \right\}^{\frac{1}{3}} \quad \text{para } (T = T_c) \end{array} \right\} \quad (28)$$

iii) região de campo médio $d > 4$

$$\left\{ \alpha = 0, \beta = \frac{1}{2}, \gamma = 1, \delta = 3, \nu = \frac{1}{2}, \eta = 0 \right\} \quad (29)$$

Observe que os resultados apresentados na Eqs. (1.27) e (1.29) satisfazem as relações de escala (1.26).

Na tabela 1.1 apresentamos, resumidamente, os valores dos expoentes críticos de modelos teóricos que apresentam transição de fase de segunda ordem, e comparamos com alguns valores experimentais.

Modelo	β	γ	δ	α	ν	η
Ising 2d	$\frac{1}{8}$	$\frac{7}{4}$	15	0 (log)	1	$\frac{1}{4}$
Ising 3d	0.33	1.24	4.8	0.10	0.63	0.04
XY 3d	0.34	1.30	4.8	0.01	0.66	0.04
Heisenberg 3d	0.36	1.39	4.8	-0.12	0.71	0.04
Campo médio	$\frac{1}{2}$	1	3	0 (disc)	$\frac{1}{2}$	0
Materiais	β	γ	δ	α	ν	η
Fe	0.39	1.33	4.35	-0.11	-	-
Co	0.44	1.23	3.35	-0.095	-	-
Ni	0.38	1.34	4.58	-0.10	-	-
Fe _{0.90} Al _{0.10}	0.41	1.33	4.28	-0.16	-	-
Fe _{0.80} Al _{0.20}	0.42	1.35	4.26	-0.20	-	-
Gd ₆₇ Co ₃₃	0.41	1.16	3.60	0.02	-	-
Gd ₈₀ Au ₂₀	0.44	1.29	3.96	-0.17	-	-

Tabela 1.1: Valores teóricos e experimentais dos expoentes críticos, $\beta, \gamma, \alpha, \delta, \nu, \eta$.

Os resultados dos expoentes obtidos via aproximação de campo médio são universais, independem da dimensão e simetria do Hamiltoniano. Na tabela 1.1, observamos que para a simetria Ising os expoentes críticos são distintos quando analisados em dimensões diferentes $d = 2$ e $d = 3$, mas para topologias diferentes numa mesma dimensão estes expoentes são únicos. Ou seja, os expoentes críticos do modelo de Ising 3d numa rede cúbica simples e numa rede cúbica de corpo centrado, são os mesmos. A aproximação de campo médio despreza as flutuações térmicas, que são relevantes na criticalidade, e por isto foi argumentado por Ginzburg (conhecido como crítico de Ginzburg [50]) que para $d > 4$ os expoentes críticos são universais, independem do tipo de modelo analisado e que os valores de campo médio são considerados exatos. De uma outra maneira, dizemos que para altas dimensões $d > 4$ as flutuações são irrelevantes. Outro resultado teórico interessante observado na tabela 1.1, está relacionado com a universalidade dos expoentes δ e η para os três modelos analisados⁵, cujos valores são corroborados por cálculos de

⁵Para $d = 3$ na Eq. (1.27) temos que o expoente crítico $\delta = 5$ para o modelo esférico está na mesma barra de erro dos valores correspondentes aos três modelos discutidos na tabela 1.1.

grupo de renormalização no espaço real [51].

Dos resultados apresentados para os expoentes críticos na tabela 1.1, vemos que estes expoentes não são independentes entre si, satisfazem as igualdades das relações dadas na Eq. (1.26), e pertencem a uma certa classe de universalidade que de uma maneira geral é caracterizada pelos seguintes critérios:

i) Dependência do número de componentes do Hamiltoniano (simetria); por exemplo, para os modelos Ising, XY e Heisenberg temos $n = 1$, $n = 2$, $n = 3$ como sendo, respectivamente, o número de componentes do parâmetro de ordem (ou componentes de interações no Hamiltoniano);

ii) Dependência da dimensão espacial (d) do sistema. Não depende da topologia da rede;

iii) Alcance das interações. Para sistemas com interações de longo-alcance os expoentes críticos são universais e equivalentes aos de campo médio⁶.

A princípio, os expoentes críticos, definidos d , n e o alcance das interações, são independentes dos detalhes microscópicos do Hamiltoniano. Por exemplo, os expoentes críticos do modelo de Ising numa rede quadrada apresentam valores independentes dos valores de J_x (interação ao longo eixo- x) e J_y (interação ao longo do eixo- y) [34]. Portanto, os critérios i), ii) e iii) mencionados acima para definir a classe de universalidade é uma hipótese que é aceita para grande parte de sistemas cooperativos [44]. Porém, existem alguns modelos que violam este critério de universalidade. O primeiro exemplo que temos é o modelo de oito vértices, que apresenta solução exata [27]. Este modelo tem uma linha crítica no diagrama de fase definido pelos parâmetros do modelo, na qual os expoentes críticos variam continuamente. Definindo o parâmetro μ no modelo, tem-se $\alpha = 2 - \frac{\pi}{\mu}$, $\beta = \frac{\pi}{16\mu}$ e $\nu = \frac{\pi}{2\mu}$ que violam claramente os critérios i), ii) e iii), mas satisfazem às relações de escala (1.26).

⁶Interação de longo-alcance variando na forma $J_{ij} = \frac{J}{r_{ij}^{d+\sigma}}$, os expoentes críticos ($\sigma > 0$) dependem fortemente do valor de σ . Por exemplo, solução do modelo esférico [48,49] obtém $\{\alpha = \frac{d-2\sigma}{d-\sigma}, \beta = \frac{1}{2}, \gamma = \frac{\sigma}{1-\sigma}, \delta = \frac{d+\sigma}{d-\sigma}, \nu = \frac{1}{d-\sigma}, \eta = 2 - \sigma\}$ para $0 < \sigma < 2d$ e $\{\alpha = 0, \beta = \frac{1}{2}, \gamma = 1, \delta = 3, \nu = \frac{1}{\sigma}, \eta = 2 - \sigma\}$ para $d < \sigma < 2d$ (campo médio).

O modelo de Ising numa rede quadrada com interação entre primeiros e segundos vizinhos, Eq. (1.15) com $H = 0$, mostra um comportamento não universal para $\left| \frac{J_2}{J_1} \right| < \frac{1}{2}$ (fase superantiferromagnética)⁷. Os primeiros estudos indicaram que o expoente crítico γ varia continuamente com este parâmetro $r = \frac{J_2}{J_1}$ nesta região, e para $r > \frac{1}{2}$ a universalidade é reestabelecida [52, 56]. Existe um outro modelo que viola esta hipótese de universalidade, denominado de modelo Ashkin-Teller (AT) [27]. O modelo AT contém no seu Hamiltoniano interação entre quatro átomos diferentes, e é equivalente ao modelo de Ising com camadas interagindo via um potencial de quatro corpos. Desta maneira, podemos concluir que modelos com interações competitivas podem violar a hipótese de universalidade mas continuam satisfazendo as relações entre os expoentes críticos (1.26). Sendo assim, não devemos nos deter a interpretar os critérios i), ii), iii) por serem estes violados para alguns sistemas.

1.4 Teoria de Landau para pontos tricríticos

A teoria de Landau nos permite determinar qualitativamente os diagramas de fases nas vizinhanças dos pontos críticos e multicríticos. Trata na realidade da transição entre fases que possuem simetrias distintas. Antes do desenvolvimento desta teoria fenomenológica, vamos a seguir fazer algumas considerações relevantes para o seu entendimento.

Seja um sistema com n variáveis termodinâmicas independentes, caracterizado por $n + 1$ campos $\{H_o, H_1 \dots H_n\}$, sendo um deles (H_o , por exemplo) função dos demais. Por exemplo, temperatura (T), pressão (P), potencial químico (μ), campo magnético (\vec{H}) e elétrico (\vec{E}) são denominados genericamente de campos. O campo dependente, para o qual usaremos o símbolo $\phi(H_1, H_2, H_n)$, será chamado de potencial termodinâmico. As grandezas canonicamente conjugadas são denominadas de densidades $\{\rho_i\}$ e podem ser obtidas por simples derivadas.

⁷No capítulo 3 desta dissertação estudaremos esta fase superantiferromagnética em duas e três dimensões usando a técnica do operador diferencial.

$$\rho = - \left(\frac{\partial \phi}{\partial H_j} \right)_{\{H_i\}} \quad \text{com } (i \neq j) . \quad (30)$$

É sempre possível escolher o potencial $\phi(H_1, H_2, H_n)$ como uma função côncava dos campos, implicando na estabilidade termodinâmica do sistema. Para tornar as coisas mais claras, vamos aplicar estas noções a alguns sistemas físicos.

(a) **Transições líquido-gás no fluido**

Nestes sistemas temos $\phi = g(T, P) \equiv \mu(T, P)$ (energia livre de Gibbs por mol \equiv potencial químico), $H_1 \equiv -P$ $H_2 \equiv T$, assim sendo teremos

$$\begin{aligned} \rho_1 &= -\frac{\partial g}{\partial H_1} = \frac{\partial g}{\partial P} = V \quad (\text{volume específico}) \\ \rho_2 &= -\frac{\partial g}{\partial H_2} = -\frac{\partial g}{\partial T} = s \quad (\text{entropia por mol}) \end{aligned} \quad (31)$$

(b) **Transições ferromagneto-paramagneto (uniaxial)**

Nestes sistemas $\phi = g(T, H)$ (energia livre de Gibbs), $H_1 \equiv H$ e $H_2 \equiv T$, obtendo

$$\begin{aligned} \rho_1 &= -\frac{\partial g}{\partial H} = m \quad (\text{magnetização por spin}) \\ \rho_2 &= -\frac{\partial g}{\partial T} = s \quad (\text{entropia por spin}) \end{aligned} \quad (32)$$

(c) **Transição λ no \mathbf{H}_e^4**

Neste sistema $\phi(T, P, \eta) \equiv g(T, P, \eta)$, $H_1 = T$, $H_2 = -P$ e $H_3 = \eta$ (este campo não é acessível à experiência; ele corresponderia ao conjugado do parâmetro de superfluidez), ficando⁸:

⁸Na transição λ uma fração dos átomos de hélio se condensa num mesmo estado quântico. O parâmetro de ordem para tal transição é a função de onda deste estado, $\Psi(\vec{r})$. Como esta função de onda é complexa, temos, portanto, um parâmetro de ordem com duas componentes (módulo e fase), pertencendo assim à mesma classe de universalidade do modelo XY

$$\begin{aligned}
\rho_1 &= -\frac{\partial g}{\partial T} = s \quad (\text{entropia por mol}) \\
\rho_2 &= \frac{\partial g}{\partial P} = V \quad (\text{volume específico}) \\
\rho_3 &= -\frac{\partial g}{\partial \eta} \equiv \Psi \quad (\text{parâmetro de ordem}).
\end{aligned} \tag{33}$$

É importante mencionar que um parâmetro muito utilizado pela experiência na transição λ é a densidade de superfluido (ρ_s). Quando o superfluido se move com velocidade \vec{V}_s , seu fluxo de massa é dado por uma corrente $\vec{J} = \rho_s \vec{V}_s$. Segundo a teoria Landau-Ginzburg [57], ρ_s é simplesmente proporcional ao quadrado do módulo da função de onda, isto é, $\rho_s \simeq |\Psi(\vec{r})|^2$. O resultado de Landau e Ginzburg não funciona próximo à transição λ e a relação correta entre a densidade de superfluido e o parâmetro de ordem $\Psi(\vec{r})$ foi obtida por Josephson [58].

Quando duas fases I e II estão em equilíbrio, cada campo deve ter o mesmo valor em ambas as fases, isto é, $H_j^I = H_j^{II} (j = 0, 1, \dots, n)$. Se pensarmos no espaço dos n campos independentes, esta condição de equilíbrio definirá uma hipersuperfície de dimensão $(n - 1)$ neste espaço. Desde que pelo menos uma das densidades seja uma função descontínua dos campos nesta hipersuperfície, então teremos uma superfície de coexistência ou de transição de primeira ordem. Caso contrário teremos uma superfície crítica, onde as diferenças de densidade entre duas fases tendem a zero continuamente.

No diagrama de fase pode existir pontos nos quais várias fases coexistem, e são denominados de pontos multicríticos. De acordo com as regras de Gibbs e Zernike, a observação de tais pontos numa mistura de substâncias pura é possível apenas acima de um certo número de componentes. Um ponto bicrítico (duas fases críticas em coexistência ou duas linhas críticas que se interceptam), só pode ser observado numa mistura com pelo menos 4 componentes. Um ponto tetracrítico (quatro fases ordinárias se tornam idênticas), só pode ser observado numa mistura de no mínimo cinco componentes, etc. Seguindo a notação de Gibbs, uma fase ordinária é representada pela letra A; uma fase crítica (duas fases ordinárias se tornam idênticas), pela letra B; uma fase tricrítica, em que três fases ordinárias se tornam idênticas, pela letra C, e assim por diante. Um estado composto

por duas fases ordinárias em coexistência é representado por A^2 , o ponto triplo por A^3 , um ponto crítico terminal por AB , um ponto bicrítico por B^2 , etc. Em geral, um ponto multicrítico é representado por $A^{m_1} B^{m_2} C^{m_3} D^{m_4} \dots$. De acordo com as regras de Gibbs, o número mínimo de componentes necessário para observar este ponto multicrítico é $c = m_1 + 3m_2 + 5m_3 + 7m_4 + \dots - 2$.

Neste trabalho de dissertação nos deteremos ao estudo de ponto tricrítico (ver fig. 1.5), que corresponde o ponto onde três fases se tornam idênticas ou três linhas críticas se interceptam. Do ponto de vista teórico, podemos simular um ponto tricrítico, tipo o descrito no diagrama de fase da Fig. 1.5, a partir do Hamiltoniano (1.15) introduzindo o campo *staggered* H_s que se acopla com o parâmetro de ordem $m_s = \frac{1}{2}(m_A - m_B) = -\left(\frac{\partial g}{\partial H_s}\right)_{T,H}$, então a Eq. (1.15) ficará reescrita na forma

$$H = J_1 \sum_{\mathbf{nn}} \sigma_i \sigma_j + J_2 \sum_{\mathbf{nnn}} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i - H_S \sum_{i \in A} \sigma_i + H_S \sum_{j \in B} \sigma_j, \quad (34)$$

onde \mathbf{nn} e \mathbf{nnn} representam a soma sobre os primeiros (*nearest-neighbor*) e segundos (*next-nearest-neighbor*) vizinhos, respectivamente. O campo H_S é uma grandeza experimentalmente inacessível, conjugada ao parâmetro de ordem m_s . Na figura 1.10 mostramos esquematicamente o diagrama de fase tridimensional no espaço dos parâmetros (T, H, H_S) . A linha pontilhada (L_1) representa, no plano (T, H) , a linha de transição de primeira ordem (coexistência das fases AF e P). A linha contínua (L_2) representa, no plano (T, H) , a transição de fase de segunda ordem. Se considerarmos $H_S \neq 0$ podemos obter duas superfícies S_1 e S_2 de transição de fase de acordo com $H_S < 0$ e $H_S > 0$, respectivamente. De qualquer forma, a interseção de S_1 com o plano $H_S = 0$ será a linha L_2 , do mesmo modo que S_2 intercepta no mesmo plano seguindo a mesma linha L_2 . Conseqüentemente, o ponto $(T_t, H_t, 0)$ foi denominado por Griffiths [12] de ponto tricrítico.

Ao redor do ponto tricrítico $t \equiv \frac{T-T_t}{T_t} \ll 1$ e $H = H_t$ (metamagneto), as grandezas termodinâmicas apresentam comportamentos de leis de potências com expoentes críticos

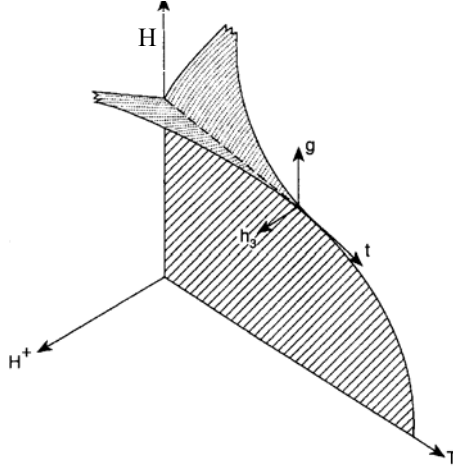


Figura 1.10: Diagrama de fase esquemático do modelo descrito pelo Hamiltoniano Eq.(1.34) no espaço de parâmetro (T, H, H_s) . S_1 e S_2 representam as superfícies de primeira ordem. PTC representa o ponto tricrítico.

diferentes dos relacionados ao longo da linha crítica. Por exemplo, na aproximação de campo médio $\beta_t = \frac{1}{2}$ na linha crítica e $\beta_t = \frac{1}{4}$ ao redor do PTC. Seja m_s o parâmetro de ordem que ao redor de PTC vai a zero na forma $m_s \simeq (-t,)^{\beta_t}$, portanto, Landau supôs que a energia livre $g(T, m_s)$ apresenta a seguinte expansão analítica em lei de potência de m_s :

$$g(T, m_s) = \frac{a}{2}m_s^2 + \frac{b}{4}m_s^4 + \frac{c}{6}m_s^6 - \frac{m_s H_s}{K_B T}, \quad (35)$$

onde escolhemos $c > 0$, mas a e b são parâmetros variáveis. Usando $H_s = 0$, minimizando a Eq. (1.35) ficaremos com:

$$\begin{aligned} \frac{\partial g}{\partial m_s} &= a m_s + b m_s^3 + c m_s^5 = 0(a) \\ \frac{\partial^2 g}{\partial m_s^2} &= a + 3b m_s^2 + 5c m_s^4 < 0(b) \end{aligned} \quad (36)$$

Da Eq. (1.36a) encontramos cinco raízes, que são

$$m_s = 0, \pm m_{s+}, \pm m_{s-} \quad (37)$$

onde $m_{s\pm}^2 = \frac{1}{2c} (-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac})$. Se $a < 0$, a solução $m_s = 0$ é um ponto de máximo, então apenas as soluções $\pm m_{s\pm}$ são fisicamente aceitáveis, e assim sendo a Eq.(1.36b) ficará reescrita nesta solução por

$$\left(\frac{\partial^2 g}{\partial m_s^2} \right)_{m_s=m_{s\pm}} = \pm \frac{1}{c} \sqrt{b^2 - 4ac} m_{s\pm}^2 \quad (38)$$

portanto, m_{s-} corresponde um ponto de máximo e m_{s+} a um ponto de mínimo.

Considere agora $a > 0$, então a solução $m_s = 0$ é um ponto de mínimo. Se $b > 0$, as soluções $m_s = \pm m_{s\pm}$ são complexas. Assim sendo, o único ponto de mínimo é a solução desordenada $m_s = 0$, e dizemos que o eixo positivo $b > 0$ é uma linha crítica, como mostrada na figura 1.11.

Por outro lado, se $a > 0$ e $b < 0$ as três soluções $m_s = 0, \pm m_{s+}$ são pontos de mínimos. Escolhendo como referência $g(T, 0) = 0$, obtemos da Eq. (1.35)

$$m_{s+}^2 = -\frac{4a}{b},$$

e comparando com a solução $m_{s+}^2 = \frac{1}{2c} (-b + \sqrt{b^2 - 4ac})$ obtida acima, obteremos

$$b = -4\sqrt{\frac{ac}{3}}$$

que é uma linha de primeira ordem, onde m_s tem uma descontinuidade que vai a zero na forma

$$m_{s+} = \sqrt{\frac{-4a}{b}} = \left(\frac{3a}{c} \right)^{\frac{1}{4}}, \quad (39)$$

sendo $a = a_o t$ ($a_o > 0$). Então vemos da Eq. (1.40) que o expoente tricrítico vale $\beta_t = \frac{1}{4}$.

Na figura 1.11 apresentamos o diagrama de fase no plano $a - b$. O ponto $a = b = 0$, $c > 0$ que indica o término da linha de segunda ordem e início da linha de primeira

ordem, é o ponto que Griffiths denotou de ponto tricrítico.

1.5 Hipótese de Widom e universalidade

A solução exata do modelo de Ising em duas dimensões sem campo externo [34], representa o marco da época moderna do estudo de transição de fase e fenômenos críticos. Com conhecimento prévio desta solução exata, Widom [59], e Domb e Hunter [60], observaram que quando os parâmetros que caracterizam a região crítica $t \equiv \frac{T-T_c}{T_c}$ e H variam, as funções termodinâmicas preservam a dependência funcional, mudando apenas em escala. Assim, o comportamento crítico de um sistema é ditado pela parte singular das funções termodinâmicas, a qual pode ser descrita apenas em termos dos parâmetros que traduzem as “distâncias ” ao ponto crítico. Desta maneira, foi assumida para a parte singular da energia livre uma função homogênea generalizada do tipo

$$g_{\text{sing}}(\lambda^x t, \lambda^y H) = \lambda g_{\text{sing}}(t, H), \quad (40)$$

onde os dois parâmetros x e y definem o grau de homogeneidade, fazendo com que a Eq. (1.40) valha para qualquer valor de λ .

A hipótese moderna de escala para a energia livre, Eq. (40), é mais fraca do que a de Landau que propõe uma expansão analítica em potências do parâmetro de ordem. Embora não permita uma abordagem microscópica dos fenômenos críticos, a hipótese de escala aponta um caminho para generalizar a equação de Curie-Weiss, obtendo apenas os expoentes críticos em função dos parâmetros x e y , isto é,

$$\left\{ \begin{array}{l} \beta = \frac{1-y}{x} \\ \gamma = \frac{2y-1}{x} \\ \delta = \frac{y}{1-y} \\ \alpha = \frac{2x-1}{x} \end{array} \right\}. \quad (41)$$

Combinando as relações acima, mostramos, por exemplo, as identidades de Rushbrooke:

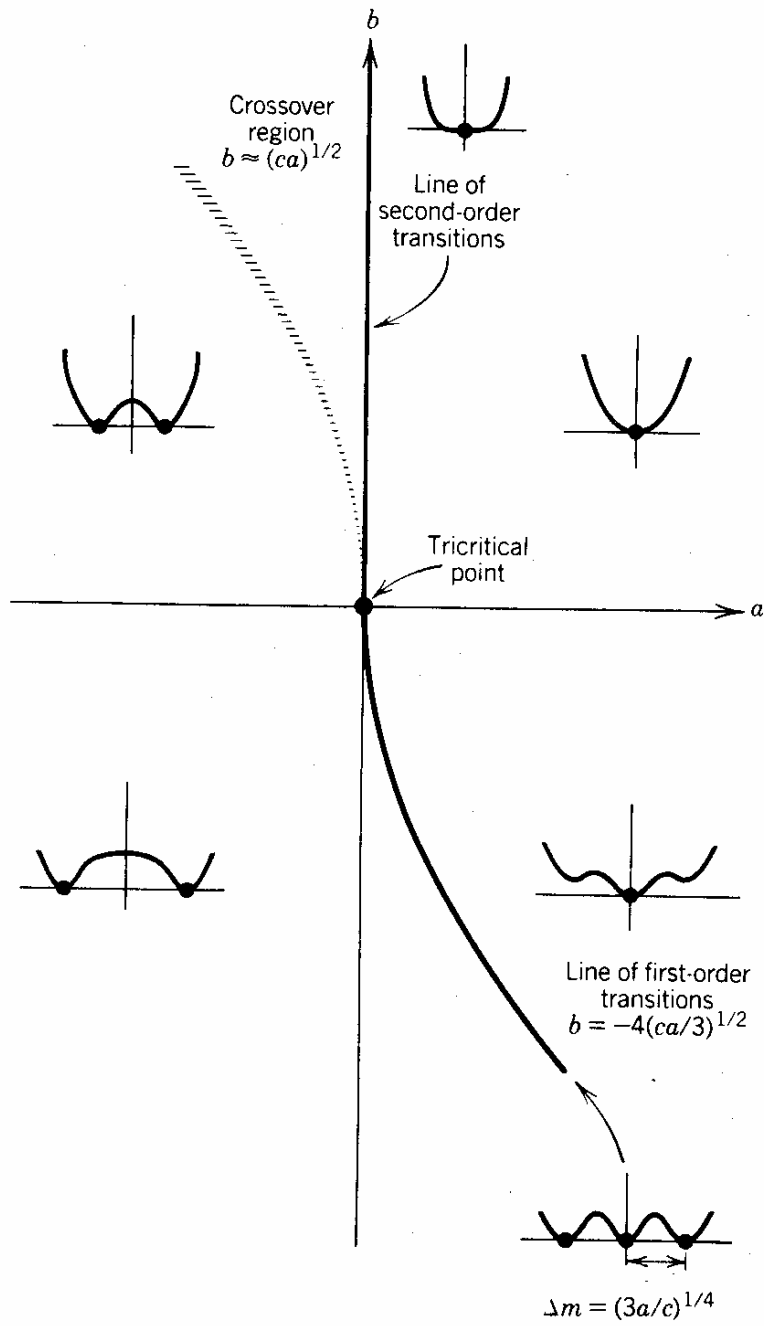


Figura 1.11: Diagrama de fase esquemático da energia livre de Landau até ordem m_S^6 . As várias formas da energia livre nas regiões particulares são mostradas na figura.

$\alpha + 2\beta + \gamma = 2$, Griffiths: $\alpha + \beta(\delta + 1) = 2$ e Widom: $\gamma = \beta(\delta - 1)$.

Além de relacionar os expoentes críticos por intermédio de igualdades, Eq. (1.26), a hipótese de escala (1.40) faz previsões específicas com relação à equação de estado magnética. Diferenciando ambos os lados da Eq. (1.40) em relação à variável H , obtemos

$$M(\lambda^x t, \lambda^y H) = \lambda^{1-y} M(t, H),$$

escolhendo $\lambda^x |t| = 1$, encontramos

$$\frac{M(t, H)}{|t|^\beta} = M\left(\frac{t}{|t|}, \frac{H}{|t|^\Delta}\right) \quad (42)$$

onde usamos as relações (1.41), sendo $\Delta \equiv \beta\delta = \beta + \gamma$. Em termos das variáveis $m \equiv \frac{M(t, H)}{|t|^\beta}$ e $h \equiv \frac{H}{|t|^\Delta}$ denominadas de magnetização e campo escalar, respectivamente, a Eq. (1.42) pode ser reescrita na forma reduzida

$$m = F_\pm(h), \quad (43)$$

onde o lado direito da Eq. (1.43) é uma função apenas da variável renormalizada h e o sinal \pm está relacionado com $T \rightarrow T_c^\pm$. A Eq. (1.43) é uma equação de estado magnética ou de escala visto que ela relaciona as variáveis M , H e T . Além disso, esta relação implica que m como uma função de h recai sobre duas curvas universais diferentes; $F_+(h)$ para temperaturas acima de T_c e $F_-(h)$ para temperaturas abaixo de T_c . Na figura 1.12 temos os resultados experimentais para o ferromagneto CrBr_3 [61].

Resultados análogos para a susceptibilidade $\chi(t, H)$ e calor específico a campo constante $C_H(t, H)$ podem ser obtidos a partir de diferenciação da Eq. (1.40) e escolhendo também $\lambda^x |t| = 1$. Assim sendo encontramos os seguintes escalonamentos:

$$\tilde{\chi} \equiv \frac{\chi(t, H)}{|t|^{-\gamma}} = \chi\left(\frac{t}{|t|}, \frac{H}{|t|^\Delta}\right) \equiv G_\pm(h) \quad (44)$$

e

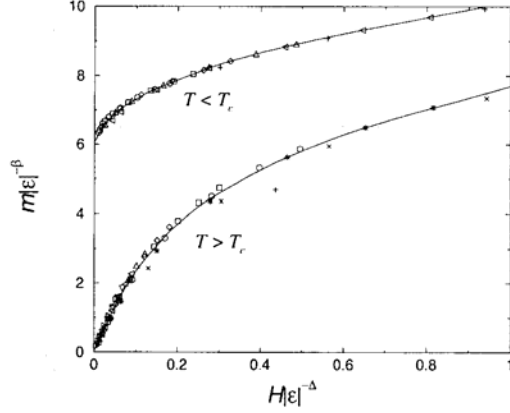


Figura 1.12: Comportamento do escalonamento (*scaling*) $\frac{H}{|t|^\Delta}$ versus $\frac{M(t,H)}{|t|^\beta}$ para o composto ferromagneto CrBr_3 obtido experimentalmente na Ref. 6. Observe os colapsos nas duas curvas, uma para $T > T_c$ e a outra para $T < T_c$, confirmando o escalonamento (43), e conseqüentemente a hipótese de Widom.

$$\tilde{C}_H \equiv \frac{C_H(t, H)}{|t|^{-\alpha}} = C_H \left(\frac{t}{|t|}, \frac{H}{|t|^\Delta} \right) \equiv Y_\pm(h) \quad (45)$$

onde $G_\pm(h)$ e $Y_\pm(h)$ são outras funções universais⁹.

Certificando que a hipótese de scaling (1.40) é verdadeira, necessita-se de uma explicação microscópica para tal relação. Baseado no fato de que, próximo do ponto crítico as correlações do sistema têm alcance muito grande ($\xi \rightarrow \infty$) e detalhes de curto-alcance não são fundamentais para seu comportamento, Kadanoff [62] apresentou um argumento heurístico para chegar à Eq. (1.40). Este argumento baseia-se em dividir a rede de tamanho a^d (d é a dimensão e a o parâmetro de rede) em células de tamanho a'^d (onde

⁹Próximo do ponto tricrítico representado esquematicamente na figura 1.10, as variáveis $t \equiv \frac{T-T_t}{T_t}$, $g \equiv \frac{H-H_t}{H_t}$ e H_s são muito pequenas e medem a "distância" ao PTC. Assim sendo, a relação de *scaling* para energia livre é generalizada para

$$g_{\text{sing}}(\lambda^x t, \lambda^y H_s, \lambda^z g) = \lambda g_{\text{sing}}(t, H_s, g).$$

$a' = la$, e $a \ll la \ll \xi$ perto de T_c). Substituindo cada célula por um único spin (o que corresponde à eliminação de graus de liberdade) e supondo que o Hamiltoniano do novo sistema terá a mesma forma do Hamiltoniano original, com parâmetros renormalizados, é possível escrever a Eq. (1.40) admitindo a invariância da função de partição, identificando l com o fator de escala da renormalização.

1.6 Organização da dissertação

Estudos da criticalidade e termodinâmica de modelos de spins clássicos e quânticos com interações competitivas têm motivado os teóricos, por causa sobretudo do surgimento de diversos tipos de ordenamentos (fases moduladas, colineares, spin-líquido, vidro de spin, etc.) e pontos multicríticos (bicríticos, tricríticos, Lifshitz, etc.). Neste trabalho, discutimos diagramas de fases de dois modelos de Ising antiferromagnéticos, onde serão utilizados diversos métodos aproximativos: campo médio (MFA), Bethe-Peierls (BP), cadeia linear (LCA), operador diferencial (EFT), grupo de renormalização na aproximação de campo médio (MFRG) e campo efetivo (EFRG).

No capítulo 2, o modelo de Ising numa rede quadrada anisotrópica na presença de um campo externo será estudado pelos métodos aproximativos: MFA, BP(=MFRG), LCA, EFT numa análise de escala de rede finita e EFRG. O modelo consiste de cadeias ao longo do eixo-x interagindo ferromagneticamente com acoplamento de *exchange* J_x e antiferromagneticamente entre sítios de cadeias diferentes (ao longo do eixo-y) com acoplamento de *exchange* J_y . O estado fundamental ($T = 0$) deste modelo consiste de cadeias com spins paralelos (ferromagnético) alternados de sinais ao longo do eixo-y (tipo fase superantiferromagnética¹⁰), ou seja, $\langle + - + - + \dots \rangle$. A presença do campo H na direção do eixo da fácil magnetização (eixo z positivo), tem como objetivo inverter os spins que estão orientados para baixo. Em $T = 0$, existe um campo crítico $H_c = 2J_y$ no qual o sistema sofre uma transição de fase contínua (2ª ordem). Para $H < H_c$

¹⁰A fase superantiferromagnética (SAF) é caracterizada no modelo de Ising frustrado com interação entre primeiros e segundos vizinhos numa rede quadrada.

temos um ordenamento tipo SAF e para $H > H_c$ o sistema fica desordenado com um magnetização induzida por campo externo. Na ausência de campo externo ($H = 0$) este modelo apresenta solução exata [34] com uma transição de fase na temperatura crítica $\frac{K_B T_c}{J_y} \simeq 2.269$. Com $H \neq 0$ este modelo só tem solução aproximada. Veremos que MFA apresenta uma solução qualitativa para o diagrama de fase no plano $(T - H)$ errônea, pois prevê uma transição de primeira ordem na região de altos valores do campo externo ($H \simeq H_c$), com um ponto tricrítico separando a linha crítica da linha de primeira ordem. Outros métodos obtêm apenas transição de segunda ordem em toda região de $H \in [0, H_c]$, com alguns deles indicando um comportamento reentrante ao redor do ponto crítico $H = H_c$. Nosso objetivo será analisar a existência ou não da reentrância no diagrama de fase, discutindo a potencialidade de diversos métodos [63].

No capítulo 3, o diagrama de fase do modelo de Ising com interações antiferromagnéticas entre primeiros (J_1) e segundos vizinhos (J_2) nas redes quadrada e cúbica simples na ausência de campo externo será discutido através dos métodos aproximativos mencionados acima. O estado fundamental deste modelo apresenta dois tipos de ordenamento de spins dependendo do valor de $\alpha = \frac{J_2}{J_1}$. A presença da interação J_2 é induzir frustração, destruindo assim a fase antiferromagnética (AF) ($\alpha < \alpha_c$). Para $\alpha > \alpha_c$, temos ordenamento dos spins alternados paralelamente e antiparalelamente entre cadeias (rede quadrada) e planos (rede cúbica simples). Na fase AF temos uma linha crítica $T_c(\alpha)$ que decresce à medida que α cresce, se anulando no ponto multicrítico $\alpha = \alpha_c = \frac{z_1}{2z_2}$ (onde z_1 e z_2 são os números de coordenações entre primeiros e segundos vizinhos, respectivamente). Para a rede quadrada temos $z_1 = z_2 = 4$ e para a rede cúbica simples $z_2 = 2z_1 = 12$. Denotaremos para $\alpha > \alpha_c$ a fase colinear (que para o caso particular da rede quadrada é conhecida como fase superantiferromagnética) de uma forma genérica. A temperatura de transição $T_c(\alpha)$ na fase colinear cresce à medida que α cresce, sendo que para a rede quadrada temos linha de primeira ordem para $\alpha_c < \alpha < \alpha_t$ e segunda ordem para $\alpha > \alpha_t$, que se interceptam no ponto tricrítico (T_t, α_c) . No caso da rede cúbica simples temos linha de primeira ordem para todos os valores de $\alpha > \alpha_c = \frac{1}{4}$.

Propomos um esquema, baseado na análise do comportamento térmico do parâmetro de ordem, para obtenção da linha de primeira ordem usando a técnica do operador diferencial, que na literatura apenas tem sido aplicada na obtenção da linha crítica de modelos que apresentam transição de 1^a ordem.

Finalmente, no capítulo 4 apresentamos nossas conclusões e perspectivas futuras.

Capítulo II

Teorias de Campo Efetivo: Modelo de Ising numa Rede Anisotrópica

2.1 Introdução

Na ausência de solução exata para muitos modelos de spins[27], o primeiro passo na descrição das propriedades magnéticas dos mais variados modelos estatísticos é usualmente a aplicação de uma teoria de campo efetivo[64]. A aproximação de campo médio (MAF), nas suas diversas formas (campo molecular, desigualdade de Bogoliubov, interação de longo-alcance, Bragg-Williams), é a primeira e mais simples metodologia utilizada para estudar fenômenos críticos, onde o conceito de campo molecular introduzido inicialmente por Weiss[1] para o ferromagnetismo e posteriormente por Néel[8] para o antiferromagnetismo, constitui ainda técnica muito utilizada na literatura[65]. MFA encontra certas inconsistências nas propriedades magnéticas quando comparamos seus resultados com resultados experimentais, sobretudo por causa do “desprezo” das funções de correlações presentes no tratamento de muitos corpos interagentes. Por exemplo, MFA prediz erroneamente uma transição de fase para o modelo de Ising 1d ($T_c \neq 0$); obtém expoentes

críticos universais¹ $\{\beta = \frac{1}{2}, \gamma = 1, \delta = 3, \alpha = 0$ (disc), $\eta = 0, \nu = \frac{1}{2}\}$ independentes da dimensão- d e simetria do Hamiltoniano.

Desejando dar uma idéia geral de algumas teorias de campo efetivo, vamos calcular a temperatura crítica T_c do modelo de Ising com dois estados descrito pelo Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad (\sigma_i = \pm 1) , \quad (1)$$

onde a soma $\langle i,j \rangle$ é feita sobre os primeiros vizinhos e $J > 0$ (ferromagnetismo). Podemos reescrever o Hamiltoniano (2.1) na forma

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left[-J \sigma_i \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}} \right] .$$

Denotando por $H_i(\sigma_i) = J \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}}$ o campo interno aplicado no spin σ_i devido aos spins primeiros vizinhos (z) que tendem a se orientar paralelamente, teremos o “novo” Hamiltoniano na forma:

$$\mathcal{H} = - \sum_i H_i(\sigma_i) \sigma_i . \quad (2)$$

Dada a dimensão- d e a topologia da rede, no Hamiltoniano (2.2), o ponto de partida da mecânica estatística é calcular a função de partição

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta \mathcal{H}(\{\sigma_i\})} , \quad (3)$$

onde $\{\sigma_i\}$ representa as configurações possíveis dos N spins sobre a rede cristalina (2^N estados acessíveis).

Para rede 1d ($z = 2$) e diversas redes 2d [quadrada ($z = 4$), honeycomb ($z = 3$), Kagomé ($z = 4$), triangular ($z = 6$)], a função de partição (2.3) é calculada de forma

¹À medida que a dimensão espacial cresce, as flutuações térmicas decrescem e dizemos que para $d > 4$ as flutuações são irrelevantes, tornando a solução MFA exata.

exata[27]. O modelo de Ising 1d não apresenta ordem de longo-alcance em $T > 0$, o que significa que $T_c = 0$. Por outro lado, no caso do modelo de Ising 2d temos uma transição de fase² em $T = T_c(z)$, onde o valor de T_c é dependente do número de coordenação z e da topologia da rede (arranjos microscópicos dos íons magnéticos numa rede cristalina). Em particular, no caso da rede quadrada, Onsager[34] obteve uma expressão exata para a temperatura crítica dada por

$$\sinh\left(\frac{2J}{k_B T_c}\right) = 1 ,$$

o que equivale numericamente ao valor $\frac{k_B T_c}{J} \simeq 2.269\dots$. Valores de T_c para outras topologias de redes 2d foram também obtidas exatamente[27]; nos limitamos aqui apenas a analisar a rede quadrada.

Bem antes da solução de Onsager, em 1944, para o modelo de Ising na ausência de campo numa rede quadrada, o tratamento qualitativo da transição de fase em sistemas ferromagnéticos foi aplicado por Pierre Weiss[1]. Numa visão moderna³, podemos interpretar a teoria do campo molecular de Weiss aproximando o campo interno $H_i(\sigma_i)$ presente no Hamiltoniano (2.2) por uma média, ou seja,

$$H_i^{MFA} \simeq \langle H_i(\sigma_i) \rangle = zJm , \quad (4)$$

onde $m = \langle \sigma_i \rangle \forall i$, e a função de partição (2.3) poderá ser calculada exatamente e conseqüentemente a magnetização por spin $m(T)$ será dada por

$$m(T) = \tanh(\beta z J m) . \quad (5)$$

²Em $T=T_c$, o calor específico apresenta uma divergência logarítmica (expoente $\alpha = 0(\log)$), a magnetização espontânea vai a zero continuamente na forma $m(T) \simeq \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{\frac{1}{8}}$ ($\beta = \frac{1}{8}$), etc., o que caracteriza assim uma transição de fase de segunda ordem.

³Na época de Weiss, a mecânica quântica ainda ensaiava os primeiros passos, portanto, o campo molecular era pensado como sendo de origem dipolar, não podendo assim explicar os altos valores de T_c para os ferromagnetos. Somente com o desenvolvimento da mecânica quântica é que a verdadeira origem (eletrostática) da interação entre os íons foi compreendida microscopicamente (*exchange*).

Devido à média tomada na Eq. (2.4), dizemos que estamos tratando o modelo de Ising na aproximação de campo médio (*mean-field approximation*-MFA). No limite de magnetização nula, obtemos o valor de T_c por

$$\frac{k_B T_c}{J} = z \quad (6)$$

onde para a rede 1d ($z = 2$) encontramos erroneamente um valor finito para $\frac{k_B T_c}{J} = 2$ (onde $T_c = 0$ é a solução exata), e para a rede quadrada ($z = 4$) (ou Kagomé) $\frac{k_B T_c}{J} = 4$ que é comparada com a solução exata $\frac{k_B T_c}{J} = 2.269$.

Oguchi[66] desenvolveu um formalismo para corrigir MFA, onde foi usado um Hamiltoniano formado por pares não interagentes na forma

$$\mathcal{H}_p^{MFA} = -J\sigma_{1p}\sigma_{2p} - (z-1)Jm(\sigma_{1p} + \sigma_{2p}), \quad (7)$$

onde $(z-1)Jm$ é o campo molecular nos sítios do par de spins, σ_{1p} e σ_{2p} provocado pelos (z) primeiros vizinhos excluindo os sítios do par na interação, que corresponde ao primeiro termo do Hamiltoniano (2.7). Nesta aproximação de campo médio em aglomerado com dois spins (MFA-2) ou aproximação de Oguchi, a magnetização por spin pode ser facilmente obtida⁴, e no limite $m \rightarrow 0$ encontramos a temperatura crítica resolvendo auto-consistentemente a expressão

$$\frac{2(z-1)J}{k_B T_c} = 1 + e^{\frac{-2J}{k_B T_c}}. \quad (8)$$

Da Eq.(2.8) obtemos ainda erroneamente $T_c(z=2) \neq 0$, e para o caso da rede quadrada temos uma pequena melhora para $\frac{k_B T_c}{J} \simeq 3.893$ em comparação com a solução exata.

⁴Usando o Hamiltoniano (2.7) podemos obter a magnetização por spin definida abaixo:

$$m = \left\langle \frac{1}{2}(\sigma_{1p} + \sigma_{2p}) \right\rangle = \frac{\sum_{\sigma_1 \sigma_2} \frac{1}{2}(\sigma_{1p} + \sigma_{2p}) e^{-\beta \mathcal{H}_p^{MFA}}}{\sum_{\sigma_1 \sigma_2} e^{-\beta \mathcal{H}_p^{MFA}}} = \frac{\sinh [2\beta (z-1) Jm]}{\cosh [2\beta (z-1) Jm] + 2^{-2\beta J}}$$

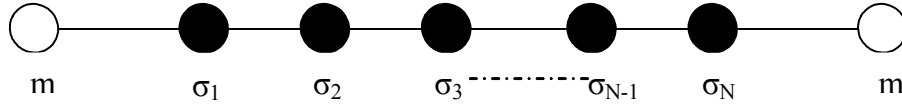


Figura 2.1: Esquema do aglomerado com N spins numa rede 1d para tratar o modelo de Ising 1d na aproximação de campo médio com N sítios (MFA- N).

Para uma rede 1d, podemos construir sistematicamente MFA em aglomerado com N spins, cujo Hamiltoniano aproximado será dado por

$$\mathcal{H}^{MFA}(N) = -J \sum_{i=1}^{N-1} \sigma_i \sigma_{i+1} - Jm (\sigma_1 + \sigma_N), \quad (9)$$

onde o somatório na Eq. (2.9) é realizado sobre todos os pares do aglomerado de N spins conforme está esquematizado na Figura 2-1.

Do Hamiltoniano (2.9) podemos obter a função de partição usando o *software* MAPLE, que é dada por

$$Z_N(m) = \sum_{\{\sigma_1, \dots, \sigma_N\}} \prod_{i=1}^{N-1} e^{K\sigma_i \sigma_{i+1}} \cdot e^{Km(\sigma_1 + \sigma_N)}, \quad (10)$$

onde $K \equiv \beta J$. Encontrando explicitamente $Z_N(m)$, podemos calcular a magnetização por spin $m = \langle \frac{1}{2} (\sigma_1 + \sigma_N) \rangle$ por simples derivação da Eq. (2.10), ou seja,

$$m = \frac{1}{2} \frac{\partial \ln Z_N(m)}{\partial Km} \equiv \Psi_N(m, T), \quad (11)$$

onde por simetria $\Psi_N(m)$ é uma função ímpar da magnetização m [ver por exemplo a Eq. (2.5) para $N = 1$]. Desejando calcular a temperatura crítica $T_c(N)$, fazemos o limite $m \rightarrow 0$ na Eq. (2.11) e teremos que resolver numericamente a seguinte expressão:

$$\Lambda_N(T_N) \equiv \left(\frac{\partial \Psi_N(m, T)}{\partial m} \right)_{m=0} = 1 . \quad (12)$$

Usando o processo de extrapolação desenvolvido por Henkel e Schütz[67], podemos mostrar que no limite $N \rightarrow \infty$ a temperatura crítica T_c^* tende para o valor exato $T_c = 0$.

Estendendo MFA-N para tratar uma rede quadrada, Suzuki e Katori[68] utilizaram aglomerados com $N = 9, 21, 45, 69, 99$ e 148 spins e obtiveram, respectivamente $\frac{k_B T_c}{J} = 3.125, 2.915, 2.748, 2.679, 2.631$ e 2.575 , mostrando uma certa convergência em direção ao resultado exato $\frac{k_B T_c}{J} = 2.269$, com o grande empecilho do aumento do tempo computacional. Todo este esforço para se obter bons resultados para T_c , não elimina a inconsistência dos valores clássicos para os expoentes críticos. Uma alternativa para encontrar valores não clássicos para os expoentes críticos, mas mantendo a idéia simplificada de MFA, foi proposto na literatura por Suzuki[69], uma metodologia chamada de método da anomalia coerente (*Cohrent Anomaly Method-CAM*).

Por outro lado, Bethe[70] desenvolveu um método aproximativo para tratar modelos de ordem-desordem, e que posteriormente foi aplicado no modelo de Ising por Peierls[71] e no modelo de Heisenberg por Weiss[72]. A aproximação de Bethe -Peierls (BP) inclui correlações de spins locais e flutuações, onde um aglomerado de tamanho N é tratado exatamente e os spins circundantes são tratados via aproximação de campo molecular simulado pelo campo efetivo H_{eff} . Este campo H_{eff} é determinado auto-consistentemente impondo a condição: o valor médio dos spins do aglomerado é igual ao valor médio dos spins circundantes (z vizinhos). Assim sendo, o Hamiltoniano (2.1) na aproximação BP é escrito na forma

$$\mathcal{H}^{BP}(N) = -J\sigma_o \sum_{i=1}^z \sigma_i - H_{eff} \sum_{i=1}^z \sigma_i . \quad (13)$$

A função de partição para o Hamiltoniano (2.13) será dada por[73]

$$Z = Z(+) + Z(-) , \quad (14)$$

sendo

$$Z(\sigma_o) = [2 \cosh (\beta H_{eff} + \beta J \sigma_o)]^z . \quad (15)$$

O valor médio do spin central $m_o = \langle \sigma_o \rangle$ é dado por

$$m_o = \frac{Z(+)-Z(-)}{Z} , \quad (16)$$

e o valor médio dos spins circundantes ao spin central $m = \left\langle \frac{1}{z} \sum_{i=1}^z \sigma_i \right\rangle$ será obtido pela derivação

$$m = \frac{1}{z} \frac{\partial \ln Z}{\partial L_{eff}} , \quad (17)$$

onde $L_{eff} = \beta H_{eff}$, ou seja, substituindo (2.14) em (2.17) obtemos

$$m = \frac{1}{z} \{Z(+)\tanh(L_{eff} + \beta J) + Z(-)\tanh(L_{eff} - \beta J)\} . \quad (18)$$

Impondo a condição $m_o = m$ e então igualando a Eq. (2.16) com a Eq. (2.17), encontramos a seguinte equação auto-consistente para obter o campo efetivo

$$Z(+)\{1 - \tanh(L_{eff} + \beta J)\} = Z(-)\{1 + \tanh(L_{eff} - \beta J)\} . \quad (19)$$

Substituindo (2.15) em (2.19) e fazendo algumas manipulações algébricas, finalmente encontramos

$$L_{eff} = \frac{z-1}{2} \ln \left\{ \frac{\cosh(L_{eff} + \beta J)}{\cosh(L_{eff} - \beta J)} \right\} . \quad (20)$$

Na ausência de interação ($J = 0$), da Eq. (2.20) vemos que o campo efetivo é nulo ($L_{eff} = 0$), como esperado fisicamente. Na presença de interação ($J \neq 0$), o campo efetivo normalizado L_{eff} tem o papel de ordenar o sistema para $T < T_c$. No limite $L_{eff} \rightarrow 0$, a magnetização vai a zero continuamente, quando atingimos a temperatura

crítica. Assim sendo, expandindo a Eq. (2.20) em potências de L_{eff} obtemos

$$L_{eff} \simeq (z-1) \tanh \beta J \left\{ L_{eff} - \sec h^2(\beta J) \frac{L_{eff}^3}{3} + \dots \right\} . \quad (21)$$

Fazendo $L_{eff} \rightarrow 0$, da Eq. (2.21) encontramos a temperatura crítica

$$\frac{k_B T_c}{J} = \frac{2}{\ln\left(\frac{z}{z-2}\right)}, \quad (22)$$

que para a rede 1D a aproximação BP, Eq. (2.22), encontra solução exata $T_c = 0$, e para rede quadrada ($z = 4$) $\frac{k_B T_c}{J} = \frac{2}{\ln 2} \simeq 2.885$.

Kurata, Kikuchi e Watari[74] estudaram o modelo de Ising numa árvore de Cayley. Construímos a árvore de Cayley com n camadas partindo inicialmente de um spin central σ_o . Conectamos a este sítio, z outros sítios vizinhos que chamaremos de primeira geração ($n = 1$). Novamente conectamos a cada sítio da 1ª geração, z outros sítios que chamaremos de segunda geração ($n = 2$). Repetindo o processo até n -ésima geração, obtem-se a função de partição Z_n exata para a árvore de Cayley com n camadas. No limite da rede de Cayley infinita ($n \rightarrow \infty$), as propriedades termodinâmicas são equivalentes às obtidas na aproximação BP. Posteriormente, Domb[75] mostrou que a aproximação BP resolve exatamente o modelo de Ising na árvore de Cayley, baseada nas expansões dos diagramas de Mayer dados por Rusbrooke e Scans[76].

Recentemente, Wysin e Kaplan[77] desenvolveram uma nova aproximação de campo médio levando em consideração efeitos de flutuações. Assumiram que o campo molecular (2.4) é agora reescrito na forma

$$\mathcal{H}_i^{MFA} = zJ (\delta_{\sigma_i, 1} m^+ + \delta_{\sigma_i, -1} m^-) , \quad (23)$$

desta maneira a magnetização $m = \langle \sigma_i \rangle$ será dada por

$$m = \frac{e^{z\beta J m^+} - e^{-z\beta J m^-}}{e^{z\beta J m^+} + e^{-z\beta J m^-}} . \quad (24)$$

Agora vamos obter os valores médios dos spins vizinhos σ_j do sítio i , considerando em separado $\sigma_i = 1$ e $\sigma_i = -1$. Existe $(z - 1)$ vizinhos ao redor do sítio j que são segundos vizinhos do sítio i , e podemos supor numa primeira aproximação que eles têm os mesmos valores médios. Desta maneira teremos

$$m^\pm = \langle \sigma_j \rangle \Big|_{\sigma_i = \pm 1} = \frac{\sum_{\sigma_j} \sigma_j e^{\beta[\sigma_j(z-1)Jm + J\sigma_i]}}{\sum_{\sigma_j} e^{\beta[\sigma_j(z-1)Jm + J\sigma_i]}} \Big|_{\sigma_i = \pm 1}$$

obtendo

$$m^\pm = \tanh \beta J [(z - 1) m \pm 1] , \quad (25)$$

Substituindo (2.25) em (2.24), e fazendo $m \rightarrow 0$ encontramos a temperatura crítica T_c pela expressão

$$\cosh \left(\frac{J}{k_B T_c} \right) = \frac{J}{k_B T_c} \sqrt{z(z-1)} . \quad (26)$$

Para a rede 1d ($z = 2$), da Eq. (2.26) encontramos $T_c = 0$ de acordo com a solução exata, enquanto para a rede quadrada temos $\frac{k_B T_c}{J} \simeq 3.312$ com resultado ligeiramente pior do que a solução obtida na aproximação de BP $\frac{k_B T_c}{J} \simeq 2.885$ (onde $\frac{k_B T_c}{J} \simeq 2.269$ é a

solução exata). A aproximação de campo médio correlacionado contém um interessante efeito físico, que é um valor não nulo para os campos locais m^\pm , Eq. (2.25), para $T > T_c$ ($m_+ = -m_- \neq 0$), porém a magnetização global m é nula. Considerando o campo médio correlacionado $H_j^{MFA} = (z - 1)J (\delta_{\sigma_j, 1} m^+ + \delta_{\sigma_j, -1} m^-)$ encontramos

$$m^\pm = \langle \sigma_j \rangle \Big|_{\sigma_i = \pm 1} = \frac{e^{\beta J [(z-1)m^+ \pm 1]} - e^{-\beta J [(z-1)m^- \pm 1]}}{e^{\beta J [(z-1)m^+ \pm 1]} + e^{-\beta J [(z-1)m^- \pm 1]}} . \quad (27)$$

Resolvendo as Eqs. (2.24) e (2.27), encontramos uma nova expressão para temperatura crítica T_c dada por

$$\cosh\left(\frac{J}{k_B T_c}\right) = \sqrt{\frac{(z-1)J}{k_B T_c}}, \quad (28)$$

onde esta Eq. (2.28) obtém resultados para T_c melhores do que BP. Por exemplo, $T_c(z=2) = 0$ e $\frac{k_B T_c}{J} \simeq 2.595$ para a rede quadrada ($z=4$).

Um método sistemático para corrigir os resultados de MFA foi desenvolvido anos atrás por Callen e colaboradores[78], onde uma expansão diagramática foi obtida. A expansão de ordem zero representa a solução MFA, enquanto aproximações de ordens superiores a zero encontram um valor superestimado para T_c no modelo de Ising (i.e., $T_c > T_e^{\text{exato}}$).

Utilizando o formalismo da função de Green dependente de dois tempos e temperatura, Callen[79] mostrou⁵ que para o modelo de Ising com dois estados ($S = \frac{1}{2}$), Eq. (2.1), a magnetização por spin $m = \langle \sigma_i \rangle$ satisfaz a seguinte identidade:

$$m = \langle \sigma_i \rangle = \left\langle \tanh \left(K \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{i+\vec{\delta}} \right) \right\rangle, \quad (29)$$

onde na Eq. (2.29), conhecida como identidade de Callen-Suzuki, temos no lado direito uma média estatística dos argumentos da função tangente hiperbólica de variáveis de spins (vizinhos ao sítio i). MFA equivale a reescrever a Eq. (2.29) como uma média no argumento, obtendo assim uma expressão auto-consistente para a magnetização do tipo dado pela Eq. (2.5). A identidade de Callen-Suzuki foi primeiramente usada para se obter funções de correlações e temperatura crítica do modelo de Ising 2d usando o método da expansão em série de altas temperaturas [81]

Diversos autores, tais como: Matsudaira[82], Frank e Mitran[83], Tanaka e Uryû[84], Zhang e colaboradores[85], usaram a identidade de Callen-Suzuki para se obter as propriedades críticas do modelo de Ising - $\frac{1}{2}$.

Na próxima seção, abordaremos a metodologia da técnica do operador diferencial,

⁵Suzuki[80] generalizou o resultado (2.29) para o caso do modelo Ising com spin $S \geq \frac{1}{2}$, que ficou assim conhecido na literatura como identidade de Callen-Suzuki.

desenvolvida no final da década de setenta por Honmura e Kaneyoshi[86], que para um aglomerado com um spin terá como ponto de partida a identidade de Callen-Suzuki, facilitando assim o manuseio das variáveis de spins.

2.2 Técnica do operador diferencial

Da mecânica estatística do equilíbrio, o valor médio de uma grandeza representado pelo operador \hat{A} é definido no *ensemble* canônico por

$$\langle A \rangle = \frac{Tr \left[\hat{A} e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} \right]}{Tr \left[e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} \right]}, \quad (30)$$

onde Tr é o funcional traço no espaço de todos os spins interagentes e descrito por um Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$ e $Z = Tr e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}}$ é a função de partição.

Dividindo o sistema de N partículas interagentes em duas partes: uma representando um aglomerado Ω finito com $n < N$ spins que descreve as interações dentro do aglomerado e com a sua vizinhança, e a parte restante Ω' que não possui nenhum spin pertencente ao aglomerado Ω , desta forma o Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$ total poderá ser decomposto na forma

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_{\Omega} + \hat{\mathcal{H}}'_{\Omega'} . \quad (31)$$

Seja $\hat{O}(\Omega)$ um operador de variáveis pertencente ao aglomerado Ω e $[\hat{\mathcal{H}}_{\Omega}, \hat{\mathcal{H}}'_{\Omega'}] = 0$, então é possível fatorar o traço na Eq. (2.30) por $Tr \equiv Tr' Tr_{\Omega}$, onde Tr_{Ω} é realizado no sub-espaço de $n < N$ spins (Ω) e Tr' no sub-espaço restante de $n' = N - n$ spins. Desta maneira, o valor médio da grandeza $\hat{O}(\Omega)$ será reescrito, segundo a definição da Eq. (2.30), por

$$\langle O(\Omega) \rangle = \frac{Tr' Tr_{\Omega} \left\{ \hat{O}(\Omega) e^{-\beta(\hat{\mathcal{H}}_{\Omega} + \hat{\mathcal{H}}'_{\Omega'})} \right\}}{Tr' Tr_{\Omega} \left\{ e^{-\beta(\hat{\mathcal{H}}_{\Omega} + \hat{\mathcal{H}}'_{\Omega'})} \right\}} .$$

Sendo $[\widehat{\mathcal{H}}_\Omega, \widehat{\mathcal{H}}'_\Omega] = 0$, então a expressão acima poderá ser reescrita na forma

$$\langle O(\Omega) \rangle = \frac{\text{Tr}' e^{-\beta \widehat{\mathcal{H}}'_\Omega} \text{Tr}_\Omega \widehat{O}(\Omega) e^{-\beta \widehat{\mathcal{H}}_\Omega}}{\text{Tr}' e^{-\beta \widehat{\mathcal{H}}'_\Omega} \text{Tr}_\Omega \widehat{O}(\Omega) e^{-\beta \widehat{\mathcal{H}}_\Omega}} . \quad (32)$$

Multiplicando a Eq. (2.32) pelo fator unitário $1 \equiv \frac{\text{Tr} e^{-\beta \widehat{\mathcal{H}}_\Omega}}{\text{Tr} e^{-\beta \widehat{\mathcal{H}}_\Omega}}$ e combinando adequadamente com as propriedades de separação do traço e do Hamiltoniano, ficaremos com:

$$\langle O(\Omega) \rangle = \frac{\text{Tr} \left\{ \left[\frac{\text{Tr}_\Omega \widehat{O}(\Omega) e^{-\beta \widehat{\mathcal{H}}_\Omega}}{\text{Tr}_\Omega e^{-\beta \widehat{\mathcal{H}}_\Omega}} \right] e^{-\beta \widehat{\mathcal{H}}} \right\}}{\text{Tr} \left\{ e^{-\beta \widehat{\mathcal{H}}} \right\}} . \quad (33)$$

Comparando a Eq. (2.33) com a definição da média, Eq. (2.30), temos que o valor médio de $\widehat{O}(\Omega)$ fica reduzido ao cálculo do traço parcial no aglomerado finito, ou seja,

$$\langle O(\Omega) \rangle = \left\langle \frac{\text{Tr}_\Omega \left\{ \widehat{O}(\Omega) e^{-\beta \widehat{\mathcal{H}}_\Omega} \right\}}{\text{Tr}_\Omega \left\{ e^{-\beta \widehat{\mathcal{H}}_\Omega} \right\}} \right\rangle . \quad (34)$$

Para o caso de modelos quânticos temos que $[\widehat{\mathcal{H}}_\Omega, \widehat{\mathcal{H}}'_\Omega] \neq 0$ e, portanto, a Eq. (2.34) não é exata. Sá Barreto e Fittipaldi[87] usaram de forma aproximada a Eq. (2.34) para estudar o modelo de Ising- $\frac{1}{2}$ com campo transverso, e os resultados foram satisfatórios quando comparados com métodos mais elaborados (expansão em série).

2.2.1 Identidade de Callen-Suzuki

Escolhendo por simplicidade o Hamiltoniano Ising, Eq. (2.1), para um aglomerado de apenas um spin teremos

$$\widehat{\mathcal{H}}_1 = -J \sigma_1 \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}} , \quad (35)$$

onde $\vec{\delta}$ denota o vetor primeiros vizinhos.

Substituindo a Eq. (2.35) na expressão exata (2.34), obtemos a magnetização por

spin $m = \langle \sigma_1 \rangle$ dada por

$$m = \left\langle \tanh \left(K \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}} \right) \right\rangle, \quad (36)$$

que representa a identidade de Callen-Suzuki, Eq. (2.29), obtida aqui através da média termodinâmica.

Definindo $\{g\}$ como sendo qualquer grandeza que não contenha variável do aglomerado Ω , a Eq. (2.34) poderá ser reescrita por

$$\langle \{g\} O(\Omega) \rangle = \left\langle \{g\} \frac{\text{Tr}_{\Omega} \left\{ \hat{O}(\Omega) e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_{\Omega}} \right\}}{\text{Tr}_{\Omega} \left\{ e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_{\Omega}} \right\}} \right\rangle. \quad (37)$$

Para o caso do aglomerado com um spin, Eq. (2.35), teremos a identidade de Callen-Suzuki generalizada dada por

$$\langle \{g\} \sigma_1 \rangle = \left\langle \{g\} \tanh \left(K \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}} \right) \right\rangle, \quad (38)$$

onde $\{g\}$ representa qualquer operador que não contenha a variável σ_1 ; por exemplo, $\{g\} = \sigma_2 \sigma_3$.

Seja $F(x)$ uma função contínua definida para qualquer valor de x e $\hat{D}_x \equiv \frac{d}{dx}$ o operador diferencial; então é possível mostrar a seguinte identidade⁶:

$$e^{\alpha \hat{D}_x} F(x) = F(x + \alpha) \quad (39)$$

Usando $F(x) = \tanh(x)$ e a identidade (2.39), podemos reescrever a Eq. (2.36) na

⁶Expandindo em série de potência o operador $e^{\alpha \hat{D}_x} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \alpha^n \hat{D}_x^n$, então aplicando na função $F(x)$ ficaremos

$$e^{\alpha \hat{D}_x} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \alpha^n F^{(n)}(x),$$

onde $F^{(n)}(x) = \frac{d^n F}{dx^n}$. Usando a definição de série de Taylor $F(x + \alpha)$ em torno de $\alpha = 0$, mostramos a equivalência com a expressão acima, Eq. (2.39).

forma

$$m = \left\langle e^{\frac{K \sum_{1+\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}} \widehat{D}_x}{\vec{\delta}}} \right\rangle F(x) |_{x=0} , \quad (40)$$

ou expandindo o somatório $\sum_{\vec{\delta}}$ ficaremos com

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^z e^{K \widehat{D}_x \sigma_{1+\vec{\delta}}} \right\rangle F(x) |_{x=0} , \quad (41)$$

onde z é o número de coordenação da rede.

Como estaremos tratando do modelo de Ising com dois estados, temos a seguinte identidade de van der Waerdan:

$$e^{\lambda \sigma_i} = \cosh(\lambda) + \sigma_i \sinh(\lambda), \quad (\sigma_i = \pm 1) \quad (42)$$

Aplicando a identidade⁷ (2.42), a Eq. (2.41) ficará finalmente reescrita na forma

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^z \left(\widehat{\alpha}_x + \sigma_{1+\vec{\delta}} \widehat{\beta}_x \right) \right\rangle F(x) |_{x=0} , \quad (43)$$

onde $\widehat{\alpha}_x = \cosh(K \widehat{D}_x)$ e $\widehat{\beta}_x = \sinh(K \widehat{D}_x)$.

A Eq. (2.43) é exata, mas de difícil manipulação matemática, pois envolve no segundo membro funções de correlações de muitos spins, gerando assim, com auxílio da Eq. (2.38), um conjunto infinito de equações acopladas de funções de correlações. Para o caso particular de uma rede unidimensional ($z = 2$), Sá Barreto e Fittipaldi[89] mostraram que é possível calcular as propriedades termodinâmicas de forma exata, mas para $z > 2$ apenas solução aproximada é conhecida. Uma denotação para este acoplamento de funções de correlação entre spins é conhecida como equações de Dobrushim-Lanford-Ruelle[90], e também muito utilizada em teoria de campos[91].

⁷Para spin S -geral, a identidade de van der Waerdan foi generalizada por Balcerzak[88].

2.2.2 Teoria de campo efetivo em aglomerado finito

Desejando melhor ilustrar o produtório na Eq. (2.43), vamos desenvolvê-lo para o caso $z = 4$ (rede quadrada) e representamos por $\{\sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \sigma_5\}$ os spins externos ao aglomerado com apenas um único spin (σ_1). Sendo $F(-x) = -F(x)$ uma função ímpar, então qualquer operador $\widehat{\varphi}_{\text{par}}(\widehat{D}_x)$ aplicado nesta função no limite de $x = 0$ tem valor nulo, isto é, $\widehat{\varphi}_{\text{par}}F(x) |_{x=0} = 0$. Assim sendo, usando esta propriedade de simetria a Eq. (2.43) expandida ficará

$$m = \frac{A_1(K)}{4} \sum_{p=2}^5 \langle \sigma_p \rangle + \frac{A_3(K)}{4} \sum_{\substack{l, p, q = 2 \\ l \neq p \neq q}}^5 \langle \sigma_l \sigma_p \sigma_q \rangle \quad , \quad (44)$$

sendo

$$A_1(K) = 4\widehat{\alpha}_x^3 \widehat{\beta}_x F(x) |_{x=0} = \frac{1}{2} [F(4K) + 2F(2K)] \quad (45)$$

e

$$A_3(K) = 4\widehat{\alpha}_x \widehat{\beta}_x^3 F(x) |_{x=0} = \frac{1}{2} [F(4K) - 2F(2K)] \quad , \quad (46)$$

onde $F(x) = \tanh(x)$ e $K = \beta J$.

A Eq. (2.44) é exata e por causa da função de correlação de três spins $\langle \sigma_l \sigma_p \sigma_q \rangle$ ($l \neq p \neq q$), mas o cálculo da magnetização $m(T)$ fica impossibilitado, e para contornar este obstáculo o uso de algum tipo de desacoplamento é inevitável. Numa primeira aproximação, usamos o seguinte desacoplamento:

$$\langle \sigma_l \sigma_p \dots \sigma_q \rangle \simeq \langle \sigma_l \rangle \langle \sigma_p \rangle \dots \langle \sigma_q \rangle \quad , \quad (47)$$

com $l \neq p \dots \neq q$. Usando o desacoplamento (2.47) e a simetria translacional $\langle \sigma_i \rangle = m \forall i$, a Eq. (2.44) ficará escrita na forma aproximada por

$$m = \sqrt{\frac{1 - A_1(T)}{A_3(T)}} . \quad (48)$$

A Eq. (2.48) representa a teoria de campo efetivo em aglomerado com um spin, denotada por EFT-1 (*effective field theory*). Nesta aproximação, e qualquer outra descrita anteriormente em que a magnetização é obtida auto-consistentemente pela expressão $m = \Psi(m, T)$, os expoentes críticos são todos clássicos. A temperatura crítica ($m \rightarrow 0$) é obtida resolvendo-se numericamente $A_1(T_c) = 1$, cujo valor encontrado foi $\frac{k_B T_c}{J} \simeq 3.087$.

Outras redes com número de coordenação z podem ser tratadas no esquema EFT-1, e a Eq. (2.43) ficará escrita na forma aproximada por

$$m = \left(\widehat{\alpha}_x + m \widehat{\beta}_x \right)^z F(x) |_{x=0} ,$$

Usando a propriedade $\widehat{\varphi}_{\text{par}}(\widehat{D}_x)F(x) |_{x=0} = 0$, ficaremos com

$$m = \Psi(m, T) = \sum_{p=0}^z A_{2p+1}^z(K) m^{2p+1} \quad (49)$$

sendo

$$A_n^z(K) = \frac{\theta(z-n) z!}{(z-n)! n!} \widehat{\alpha}_x^{z-n} \widehat{\beta}_x^n F(x) |_{x=0} , \quad (50)$$

onde $\theta(x) = 1$ e 0 quando $x > 0$ e $x \leq 0$, respectivamente. No limite $m \rightarrow 0$ (transição de fase de segunda ordem), obtemos a temperatura crítica T_c resolvendo numericamente a expressão abaixo

$$A_1^z(T_c) = 1 , \quad (51)$$

que para uma rede linear ($z = 2$) obtemos a solução exata $T_c = 0$ e para a rede cúbica simples ($z = 6$) $\frac{k_B T_c}{J} \simeq 5.073$ que pode ser comparada com o resultado $\frac{k_B T_c}{J} \simeq 4.5103$ de simulação de Monte Carlo[92]. À medida que o número de coordenação z cresce, o

sistema fica mais correlacionado e portanto, necessitamos de mais energia térmica ($k_B T_c$) para destruir a ordem magnética, conseqüentemente T_c cresce monotonicamente. No limite de coordenação infinita ($z \rightarrow \infty$) teremos um dado sítio da rede cristalina interagindo, em média com mesma energia, com infinitos sítios da rede, o que equivale ao modelo de Ising com interação de longo-alcance (campo médio); desta maneira esperamos o limite $\frac{k_B T_c}{zJ} \rightarrow 1$.

A aproximação de campo médio em aglomerados com um spin (MFA-1) pode ser obtida deste presente formalismo, onde devemos aproximar a média do produtório de exponenciais na Eq. (2.41) por produtos de médias dos argumentos das exponenciais, ou seja,

$$m = \prod_{\frac{\vec{\delta}}{\delta}}^z e^{\langle K \hat{D}_x \sigma_{1+\vec{\delta}} \rangle} F(x) |_{x=0} = e^{zK \hat{D}_x m} F(x) |_{x=0},$$

aplicando a propriedade (2.39) obtemos

$$m = \tanh(zKm), \quad (52)$$

que corresponde ao mesmo resultado da teoria de Weiss expresso pela Eq. (2.5).

Matematicamente falando, o que difere MFA de EFT está no tratamento exato das auto-correlações nesta última aproximação (i.e., $\sigma_i^{2n} = 1$ e $\sigma_i^{2n+1} = \sigma_i$, relação de cinemática de spin $-\frac{1}{2}$, $\sigma_i = \pm 1$)⁸ resultando na identidade de van der Waerdan, Eq. (2.42), enquanto MFA trata estas auto-correlações de forma aproximada (i.e., $\langle \sigma_i^2 \rangle \simeq \langle \sigma_i \rangle^2$), induzindo erroneamente a uma transição de fase para o modelo Ising 1d ($T_c \neq 0$).

Além dos valores de campo médio para os expoentes críticos, EFT-1 apresenta resultados qualitativos discrepantes para a temperatura crítica, que é não distinguir a

⁸De uma maneira geral, a relação de cinemática para spin S geral é descrito pela propriedade:

$$\prod_{r=-S}^S (S_i^Z - r) = 0,$$

onde S_i^Z é a componente z do operador de spin no sítio i.

topologia da rede e encontra T_c , Eq. (2.51), dependente apenas do número de coordenação (z). Resultados exatos para T_c no modelo de Ising 2d em diversas topologias foram encontrados[27]. Por exemplo, para a rede quadrada temos $\frac{k_B T_c}{J} \simeq 2.269$ e para a rede Kagomé $\frac{k_B T_c}{J} \simeq 2.143$, sendo que ambas têm mesmo número de coordenação $z = 4$, enquanto a rede 2d triangular tem $\frac{k_B T_c}{J} \simeq 3.641$ diferente da rede cúbica simples (3d) $\frac{k_B T_c}{J} \simeq 4.511$, e ambas apresentam $z = 6$. Desejando elucidar o tratamento da topologia da rede usando a técnica do operador diferencial, Siqueira[93] e Bobak e Jascur[94] independentemente, usaram como ponto de partida para a identidade (2.34) um Hamiltoniano com dois spins dado por

$$-\beta\mathcal{H}_2 = K\sigma_1\sigma_2 + a_1\sigma_1 + a_2\sigma_2, \quad (53)$$

onde $a_p = K \sum_{\vec{\delta}_p} \sigma_{p+\vec{\delta}_p}$ ($p = 1, 2$).

Substituindo (2.53) na Eq.(2.34), obtemos a seguinte expressão para a magnetização por spin $m = \langle \frac{1}{2} (\sigma_1 + \sigma_2) \rangle$

$$m = \left\langle \frac{\sinh(a_1 + a_2)}{\cosh(a_1 + a_2) + e^{-2K} \cosh(a_1 - a_2)} \right\rangle \quad (54)$$

Podemos generalizar a identidade (2.39) para uma função de n variáveis, em particular para $n = 2$ teremos

$$e^{a\hat{D}_x + b\hat{D}_y} G(x, y) = G(x + a, y + b), \quad (55)$$

onde $\hat{D}_\mu \equiv \frac{\partial}{\partial \mu}$ ($\mu = x, y$) é o operador diferencial.

Usando a identidade (2.55), reescrevemos a Eq. (2.54) na forma

$$m = \left\langle e^{\frac{K}{\delta_1} \sum_{\vec{\delta}_1} \sigma_{1+\vec{\delta}_1} \hat{D}_x + \frac{K}{\delta_2} \sum_{\vec{\delta}_2} \sigma_{2+\vec{\delta}_2} \hat{D}_y} \right\rangle G(x, y) \Big|_{x,y=0}, \quad (56)$$

sendo

$$G(x, y) = \frac{\sinh(x + y)}{\cosh(x + y) + e^{-2K} \cosh(x - y)} \quad (57)$$

Uma análise mais cuidadosa na Eq. (2.56) evidencia logo a presença de dois tipos de vizinhos, expressos através dos somatórios $\sum_{\vec{\delta}_1}$ e $\sum_{\vec{\delta}_2}$. Dependendo da topologia da rede, os spins σ_1 e σ_2 podem admitir vizinhos comuns (z'), desta maneira podemos expandir a Eq. (2.56) ficando

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}_1}^{z-1-z'} e^{K\hat{D}_x\sigma_{1+\vec{\delta}_1}} \prod_{\vec{\delta}_2}^{z-1-z'} e^{K\hat{D}_y\sigma_{2+\vec{\delta}_2}} \prod_{\vec{\delta}}^{z'} e^{K(\hat{D}_x+\hat{D}_y)\sigma_{\vec{\delta}}} \right\rangle G(x, y) |_{x,y=0} . \quad (58)$$

Claramente, a forma explícita de vizinhos, comuns ou não, aos sítios 1 e 2 no aglomerado com dois spins assegura a distinção da topologia da rede. Para ilustrar a topologia da rede no aglomerado com dois spins, na figura 2-2 apresentamos as redes Kagomé ($z = 4, z' = 1$), quadrada ($z = 4, z' = 0$), triangular ($z = 6, z' = 2$) e cúbica simples ($z = 6, z' = 0$).

Da Eq. (2.58) temos que a função $G(x, y)$, Eq. (2.57), é ímpar, e, portanto, a aplicação de qualquer operador par $\hat{\varphi}_{\text{par}}(D_x, D_y)$ nesta função com os limites de $x = y = 0$ dará valor nulo. Usando a identidade de van der Waerden e a aproximação linear, a Eq. (2.58) ficará escrita na forma:

$$m = (\hat{\alpha}_x + m\hat{\beta}_x)^{z-1-z'} (\hat{\alpha}_y + m\hat{\beta}_y)^{z-1-z'} (\hat{\alpha}_{xy} + m\hat{\beta}_{xy})^{z'} G(x, y) |_{x,y=0} \quad (59)$$

onde $\hat{\alpha}_\mu = \cosh(K\hat{D}_\mu)$, $\hat{\beta}_\mu = \sinh(K\hat{D}_\mu)$, $\hat{\alpha}_{xy} = \cosh[K(\hat{D}_x + \hat{D}_y)]$ e $\hat{\beta}_{xy} = \sinh[K(\hat{D}_x + \hat{D}_y)]$. No limite de $m \rightarrow 0$, da Eq. (2.59) obtemos a temperatura crítica (EFT-2) resolvendo numericamente a seguinte expressão:

$$A_1^{z,z'}(K_c) = 1, \quad (60)$$

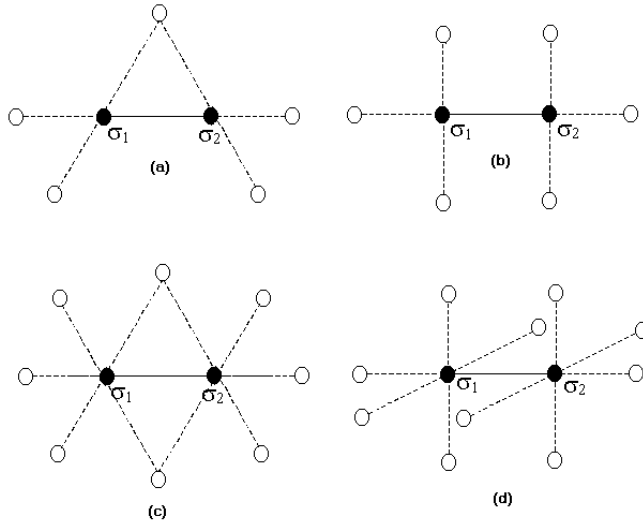


Figura 2.2: Estruturas topológicas de redes (a) Kagomé, (b) quadrada, (c) triangular, (d) cúbica simples.

sendo

$$A_1^{z,z'}(K_c) = \left[2(z-1-z')\hat{\alpha}_x^{z-z'-2}\hat{\alpha}_y^{z-z'-1}\hat{\beta}_x + z'\hat{\alpha}_y^{z-z'-1}\hat{\alpha}_x^{z-z'-1}\hat{\alpha}_{xy}^{z-1}\hat{\beta}_{xy} \right] G(x,y) |_{x,y=0} \quad (61)$$

Da Eq. (2.60) obtemos as temperaturas críticas T_c para diversas topologias de redes, e que estão esquematizadas na figura 2-2. Na Tabela 2-1 apresentamos os resultados de T_c obtidos por EFT-1 e EFT-2, que foram comparadas com soluções exatas em redes 2d e simulação de Monte Carlo para a rede cúbica simples (3d). Observamos claramente a superioridade de EFT-2, do ponto de vista qualitativo, quando deparamos com análise da topologia de rede. Porém, os resultados quantitativos para T_c não estão em boa concordância com os valores rigorosos. Uma análise de *finite-size-scaling* pode também ser desenvolvida para melhorar os valores de T_c , mantendo ainda a simplicidade do esquema utilizado na aproximação de campo médio por Suzuki e Katori[68], onde no próximo capítulo desta dissertação usaremos aglomerados com quatro spins (chamado de EFT-4) para estudar o diagrama de fase do modelo de Ising com interações de primeiros e segundos

vizinhos.

Redes	z	z'	EFT-1	EFT-2	Exato/Monte Carlo
Kagomé	4	1	3.089	2.923	2.143
Quadrada	4	0	3.089	3.025	2.269
Triangular	6	2	5.073	4.950	3.641
Cúbica simples	6	0	5.073	5.039	4.511

Tabela 2.1: Valores da temperatura crítica reduzida $k_B T_c / J$ para diversas redes 2d e 3d no modelo de Ising $-1/2$, obtidas da Eq. (2.60), comparadas com resultados exatos (2d) e simulação de Monte Carlo (3d) [92]

2.3 Modelo de Ising numa rede quadrada anisotrópica na presença de campo externo

2.3.1 Considerações gerais

O Hamiltoniano de Ising tem sido um dos modelos mais estudado na literatura, e devido à sua simplicidade teórica tem aplicações em diversos sistemas, tais como, sistemas biológicos (enzima alostérica, neurônios, etc), tráfego, etc. Este modelo apresenta solução exata em duas dimensões (2d)[27] na ausência de campo externo. Vimos que na ausência de solução exata para diversos modelos de spins, em particular o modelo de Ising antiferromagnético na presença de campo magnético, várias métodos aproximativos foram propostos (ver sec. 2.1). Um modelo interessante que não apresenta solução exata (nem mesmo simulação de Monte Carlo!) é o descrito pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = -J_x \sum_{i, \delta_x} \sigma_i \sigma_{i+\delta_x} + J_y \sum_{i, \delta_y} \sigma_i \sigma_{i+\delta_y} - H \sum_i \sigma_i, \quad (\sigma_i = \pm 1), \quad (62)$$

onde J_x (J_y) é a interação de *exchange* ao longo da direção x (y) numa rede quadrada, δ_x (δ_y) é o vetor primeiros vizinhos $z_x = 2$ ($z_y = 2$) ao longo desta direção x (y) e H é o campo magnético externo (tomamos $\mu_B \equiv 1$).

Na ausência de campo externo ($H = 0$), o Hamiltoniano acima tem solução exata[27], e a temperatura crítica é obtida numericamente através da seguinte expressão:

$$\sinh\left(\frac{2J_x}{k_B T_c}\right) \sinh\left(\frac{2J_y}{k_B T_c}\right) = 1, \quad (63)$$

onde para o caso particular da rede isotrópica $J_x = J_y = J$ temos a solução $k_B T_c/J = 2/\ln(1 + \sqrt{2}) \simeq 2.269$.

O estado fundamental ($T = 0$) do modelo acima é caracterizado por cadeias ferromagnéticas ao longo da direção do eixo x e com spins alternados ao longo da direção do eixo y, caracterizando assim um estado super-antiferromagnético (SAF). Definindo o parâmetro $r = J_y/J_x$ na Eq. (2.62), podemos mostrar que no limite de $r \rightarrow 0$ a temperatura crítica apresenta o seguinte comportamento assintótico:

$$k_B T_c/J_x \simeq A/\ln(1/r), \quad (64)$$

que para o caso unidimensional ($r = 0$) obtemos $T_c = 0$. Por outro lado, a solução de campo médio encontra $k_B T_c/J_x = 2 + 2r$, o que contradiz a solução exata $T_c = 0$ para a rede 1d.

O comportamento logarítmico da Eq (2.64) na região crítica ($T = 0, r = 0$) pode ser entendido fisicamente como segue: No limite 1d ($r = 0$), o comprimento de correlação a baixas temperaturas apresenta o comportamento exponencial do tipo $\xi(T) \simeq e^{b/T}$. No limite de temperatura nula ($T = 0$), esperamos um comportamento divergente em lei de potência do tipo $\xi(r) \simeq r^{-1/\phi}$ (onde ϕ é o expoente de *crossover*). Igualando os dois tipos de comportamentos para o comprimento de correlação, isto é, $\xi(T) = \xi(r)$ mostramos o desejado, Eq. (2.64). O valor médio em $T = 0$ do Hamiltoniano (2.62) por partícula (N) no estado SAF é dado por

$$u_{SAF} = \frac{\langle \mathcal{H} \rangle_{T=0}}{N J_x} = -1 - r,$$

onde o valor médio $m = \sum_i \langle \sigma_i \rangle$ do último termo da Eq. (2.62) é nulo porque temos metade dos spins apontando para baixo e a outra metade apontando para cima. À medida que aumentamos o campo magnético, teremos acréscimo de energia para inverter os spins que estão apontando para baixo. Portanto, teremos um valor crítico do campo $H = H_c$ no qual todos os spins estarão apontando para cima, e dizemos estar no estado paramagnético (P) induzido por campo externo. Neste estado paramagnético, a energia média por spin é dado por

$$u_P = \frac{\langle \mathcal{H} \rangle_{T=0}}{NJ_x} = -1 + r - H$$

Desta maneira, igualando as energias nas duas fases (SAF e P) encontramos o campo da transição de primeira ordem $H_c = 2r$.

A principal motivação de estudar o modelo (2.62), está particularmente na falta de resultados exatos ou mesmo rigorosos através de simulação de Monte Carlo, e nas diversas aplicações cujos resultados são bastante contraditórios. A seguir discutiremos diversos métodos aproximativos aplicados no Hamiltoniano (2.62) para calcular o diagrama de fase no plano $T-H$, onde desenvolveremos em particular a técnica do operador diferencial e a aproximação de Bethe-Peierls. Este trabalho foi recentemente aceito para publicação no **Physical Review B** (ver apêndice).

2.3.2 Técnica do operador diferencial

Como estamos interessado em estudar a linha de estabilidade entre as fases SAF e P, vamos dividir a rede em duas subredes interpenetrantes (A e B). Para um aglomerado com um spin na subrede A, temos o seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_1^A = \left[-J_x \sum_{\delta_x} \sigma_{(1+\delta_x)A} + J_y \sum_{\delta_y} \sigma_{(1+\delta_y)B} - H \right] \sigma_{1A} \quad (65)$$

De acordo com a identidade para a magnetização proposta na Eq. (2.34) obtemos a

magnetização da subrede A $m_A = \langle \sigma_{1A} \rangle$

$$m_A = \left\langle \tanh \left(K_x \sum_{\delta_x} \sigma_{(1+\delta_x)A} - K_y \sum_{\delta_y} \sigma_{(1+\delta_y)B} + L \right) \right\rangle \quad (66)$$

onde $K_x = \beta J_x$, $K_y = \beta J_y$ e $L = \beta H$.

Usando a técnica do operador diferencial, a Eq. (2.66) pode ser reescrita na forma

$$m_A = \left\langle \exp \left[K_x \sum_{\delta_x} \sigma_{(1+\delta_x)A} - K_y \sum_{\delta_y} \sigma_{(1+\delta_y)B} \right] D_x \right\rangle F(x)|_{x=0} \quad (67)$$

onde $F(x) = \tanh(x + L)$.

Expandindo o somatório da Eq. (2.67), ficaremos com:

$$m_A = \left\langle \prod_{\delta_x}^2 \exp [K_x \sigma_{(1+\delta_x)A} D_x] \cdot \prod_{\delta_y}^2 \exp [-K_y \sigma_{(1+\delta_y)B} D_x] \right\rangle F(x)|_{x=0}. \quad (68)$$

Usando agora a identidade de van der Warden, definida pela Eq. (2.42), reescreveremos a Eq. (2.68) na forma

$$m_A = \left\langle \prod_{\delta_x}^2 [\alpha_x + \sigma_{(1+\delta_x)A} \beta_x] \cdot \prod_{\delta_y}^2 [\alpha_y - \sigma_{(1+\delta_y)B} \beta_y] \right\rangle F(x)|_{x=0}. \quad (69)$$

onde $\alpha_\nu = \cosh(K_\nu D_x)$ e $\beta_\nu = \sinh(K_\nu D_x)$.

Como foi visto anteriormente na Sec. 2.2, a Eq. (2.69) possui funções de correlação de vários spins, então o cálculo da magnetização por spin só é possível aplicando-se algum tipo de desacoplamento; neste caso, aplicaremos a aproximação de ordem zero dada pela Eq. (2.47) e então a Eq. (2.69) ficará:

$$m_A = (\alpha_x + m_A \beta_x)^2 \cdot (\alpha_y - m_B \beta_y)^2 F(x)|_{x=0}, \quad (70)$$

De maneira análoga à que desenvolvemos os cálculos para a subrede A, podemos obter

a magnetização da subrede B na aproximação linear, que será dada por

$$m_B = (\alpha_x + m_B \beta_x)^2 \cdot (\alpha_y - m_A \beta_y)^2 F(x)|_{x=0}. \quad (71)$$

Definindo duas novas variáveis, a magnetização total $m = \frac{1}{2}(m_A + m_B)$ e a magnetização *staggered* $m_s = \frac{1}{2}(m_A - m_B)$,

$$m_s = A_1(m)m_s + A_3(m)m_s^3 \quad (72)$$

$$m = A_0(m) + A_2(m)m^2 + A_4(m)m^4, \quad (73)$$

sendo

$$A_0(m) = \alpha_x^2 \alpha_y^2 + 2(\alpha_x \beta_x \alpha_y^2 - \alpha_y \beta_y \alpha_x^2) m + (\alpha_x^2 \beta_y^2 + \alpha_y^2 \beta_x^2 - \alpha_x \beta_x \alpha_y \beta_y) m^2 + 2(\alpha_x \beta_x \alpha_y^2 - \alpha_y \beta_y \alpha_x^2) m^3 + \beta_x^2 \beta_y^2 m^4 \} F(x)|_{x=0}, \quad (74)$$

$$A_1(m) = 2 \{ (\alpha_x \beta_x \alpha_y^2 + \alpha_y \beta_y \alpha_x^2) - (\alpha_x \beta_x \beta_y^2 + \alpha_y \beta_y \beta_x^2) m \} F(x)|_{x=0}, \quad (75)$$

$$A_2(m) = \{ \alpha_x^2 \beta_y^2 + \alpha_y^2 \beta_x^2 + 4\alpha_x \alpha_y \beta_x \beta_y + 2(\alpha_x \beta_x \beta_y^2 - \alpha_y \beta_y \beta_x^2) m - 2\beta_x^2 \beta_y^2 m^2 \} F(x)|_{x=0} \quad (76)$$

$$A_3(m) = 2(\alpha_x \beta_x \beta_y^2 + \alpha_y \beta_y \beta_x^2) F(x)|_{x=0}, \quad (77)$$

e

$$A_4(m) = \beta_x^2 \beta_y^2 F(x)|_{x=0}. \quad (78)$$

onde os coeficientes $A_r(m)$ são determinados usando a identidade $e^{aD_x} F(x) = F(x + a)$ em conjunto com o *software* **MAPLE 9.0**. Resolvendo numericamente as Eqs. (2.72) e (2.73), obtemos uma transição de fase contínua em $T = T_N(H)$ para todo valor de $H \in [0, H_c)$. Temos que $T_N(H)$ decresce monotonicamente com o aumento do campo externo, se anulando no valor $H = H_c = 2r$, onde $r = J_y/J_x$.

2.3.3 Aproximação de Bethe-Peierls

Tomaremos como ponto de partida o Hamiltoniano para certo aglomerado contendo um spin central σ_{oA} associado a subrede A, sob a ação de um campo externo H , com quatro spins periféricos, sendo que dois são da subrede A (B) sob a ação de um campo efetivo H_E^A (H_E^B) que tem o papel de simular o efeito do restante da rede cristalina. Assim sendo, o Hamiltoniano para este spin específicos será dado por

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{oA} = & -H\sigma_{oA} - (H + H_E^A)(\sigma_{1A} + \sigma_{2A}) - (H + H_E^B)(\sigma_{1B} + \sigma_{2B}) \\ & -J_x\sigma_{oA}(\sigma_{1A} + \sigma_{1A}) + J_y\sigma_{oA}(\sigma_{1B} + \sigma_{2B}). \end{aligned} \quad (79)$$

Da Eq. (2.79) podemos obter de imediato a função de partição

$$Z_{oA}(L, L_A, L_B) = \sum_{\sigma_{oA}, \sigma_{jA,B}=\pm 1} e^{\sigma_{oA}L + L_A(\sigma_{1A} + \sigma_{2A}) + L_B(\sigma_{1B} + \sigma_{2B})} e^{K_x\sigma_{oA}(\sigma_{1A} + \sigma_{2A})} e^{-K_y\sigma_{oA}(\sigma_{1B} + \sigma_{2B})} \quad (80)$$

onde $L \equiv \beta H$, $L_A \equiv L + \beta H_E^A$, $L_B \equiv L + \beta H_E^B$, $K_x \equiv \beta J_x$ e $K_y \equiv \beta J_y$, que após algumas manipulações algébricas ficaremos

$$\begin{aligned} Z_{oA}(L, L_A, L_B) = & 2 \{ e^{2(L_A + L_B)} \cosh(L + 2K_x - 2K_y) + 2e^{2L_A} \cosh(L + 2K_x) + \\ & e^{2(L_A - L_B)} \cosh(L + 2K_x + 2K_y) + 2e^{2L_B} \cosh(L - 2K_y) + \\ & 4 \cosh(L) + 2e^{-2L_B} \cosh(L + 2K_y) + e^{-2(L_A - L_B)} \cosh(L - 2K_x - 2K_y) + \\ & 2e^{-2L_A} \cosh(L - 2K_x) + e^{-2(L_A + L_B)} \cosh(L - 2K_x + 2K_y) \}, \end{aligned} \quad (81)$$

As magnetizações m_{oA} e m_A podem ser obtidas por derivação direta da função de partição Z_{oA} , ou seja,

$$m_{oA} = \langle \sigma_{oA} \rangle = \frac{\partial \ln Z_{oA}}{\partial L} \quad (82)$$

e

$$m_A = \frac{1}{2} \langle \sigma_{1A} + \sigma_{2A} \rangle = \frac{1}{2} \frac{\partial \ln Z_{oA}}{\partial L_A}. \quad (83)$$

Substituindo a Eq. (2.81) nas Eqs. (2.82) e (2.83), obtemos m_{oA} e m_A , respectivamente, pelas seguintes expressões:

$$\begin{aligned} m_{oA} = 2 \{ & e^{2(L_A+L_B)} \sinh(L + 2K_x - 2K_y) + 2e^{2L_A} \sinh(L + 2K_x) + \\ & e^{2(L_A-L_B)} \sinh(L + 2K_x + 2K_y) + 2e^{2L_B} \sinh(L - 2K_y) + \\ & 4 \sinh(L) + 2e^{-2L_B} \sinh(L + 2K_y) + e^{-2(L_A-L_B)} \sinh(L - 2K_x - 2K_y) + \\ & 2e^{-2L_A} \sinh(L - 2K_x) + e^{-2(L_A+L_B)} \sinh(L - 2K_x + 2K_y) \} / Z_{oA} \end{aligned} \quad (84)$$

e

$$\begin{aligned} m_A = 2 \{ & e^{2(L_A+L_B)} \cosh(L + 2K_x - 2K_y) + 2e^{2L_A} \cosh(L + 2K_x) + \\ & e^{2(L_A-L_B)} \cosh(L + 2K_x + 2K_y) - e^{-2(L_A-L_B)} \cosh(L - 2K_x - 2K_y) - \\ & 2e^{-2L_A} \cosh(L - 2K_x) - e^{-2(L_A+L_B)} \cosh(L - 2K_x + 2K_y) \} / Z_{oA} \end{aligned} \quad (85)$$

O mesmo procedimento pode ser efetuado para a subrede B, onde o Hamiltoniano será dado por

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{oB} = & -H\sigma_{oB} - (H + H_E^A) (\sigma_{1A} + \sigma_{2A}) - (H + H_E^B) (\sigma_{1B} + \sigma_{2B}) \\ & -J_x\sigma_{oB} (\sigma_{1B} + \sigma_{1B}) + J_y\sigma_{oB} (\sigma_{1A} + \sigma_{2A}), \end{aligned} \quad (86)$$

A função de partição $Z_{oB}(L, L_A, L_B)$ é definida como na Eq. (2.80), com a simples substituição de H_{oA} por H_{oB} , ou seja,

$$Z_{oB}(L, L_A, L_B) = \sum_{\sigma_{oB}, \sigma_{jA, B} = \pm 1} e^{L\sigma_{oB} + L_A(\sigma_{1A} + \sigma_{2A}) + L_B(\sigma_{1B} + \sigma_{2B})} e^{K_x\sigma_{oB}(\sigma_{1B} + \sigma_{2B})} e^{-K_y\sigma_{oB}(\sigma_{1A} + \sigma_{2A})}. \quad (87)$$

Comparando a Eq. (2.79) com a Eq. (2.86), observando a seguinte propriedade

de simetria por inversão: $L_A \rightarrow L_B$ e $L_B \rightarrow L_A$, prova-se que $Z_{oB}(L, L_A, L_B) = Z_{oA}(L, L_B, L_A)$. Analogamente podemos definir as magnetizações da subrede B por

$$m_{oB} = \langle \sigma_{oB} \rangle = \frac{\partial \ln Z_{oB}}{\partial L}, \quad (88)$$

e

$$m_B = \frac{1}{2} \langle \sigma_{1B} + \sigma_{2B} \rangle = \frac{1}{2} \frac{\partial \ln Z_{oB}}{\partial L_B} \quad (89)$$

Substituindo a Eq. (2.87) nas Eqs. (2.88) e (2.89), obtemos

$$\begin{aligned} m_{oB} = 2 \{ & e^{2(L_A+L_B)} \sinh(L + 2K_x - 2K_y) + 2e^{2L_B} \sinh(L + 2K_x) + \\ & e^{-2(L_A-L_B)} \sinh(L + 2K_x + 2K_y) + 2e^{2L_A} \sinh(L - 2K_y) + \\ & 4 \sinh(L) + 2e^{-2L_A} \sinh(L + 2K_y) \} / Z_{oB} \end{aligned} \quad (90)$$

e

$$\begin{aligned} m_B = 2 \{ & e^{2(L_A+L_B)} \cosh(L + 2K_x - 2K_y) + 2e^{2L_B} \cosh(L + 2K_x) + \\ & e^{-2(L_A-L_B)} \cosh(L + 2K_x + 2K_y) - e^{2(L_A-L_B)} \cosh(L - 2K_x - 2K_y) - \\ & 2e^{-2L_B} \cosh(L - 2K_x) - e^{-2(L_A+L_B)} \cosh(L - 2K_x + 2K_y) \} / Z_{oB} \end{aligned} \quad (91)$$

Definindo as novas variáveis:

$$\left\{ \begin{array}{l} m_{oS} = \frac{1}{2} (m_{oA} - m_{oB}) \\ m_S = \frac{1}{2} (m_A - m_B) \\ m_o = \frac{1}{2} (m_{oA} + m_{oB}) \\ m = \frac{1}{2} (m_A + m_B) \\ L_t = \frac{1}{2} (L_A + L_B) \\ L_S = \frac{1}{2} (L_A - L_B) \end{array} \right. \quad (92)$$

os campos efetivos H_E^A e H_E^B são determinados como uma função de T , H e $r = J_y/J_x$

assumindo-se a seguinte condição (hipótese de Bethe):

$$\begin{cases} m_{oA} = m_A \\ m_{oB} = m_B \end{cases}, \quad (93)$$

ou em função das magnetizações total m e *staggered* m_s podemos reescrever a condição (93) na forma

$$\begin{cases} m_{oS}(L_t, L_s) = m_S(L_t, L_s) \\ m_o(L_t, L_s) = m(L_t, L_s) \end{cases}, \quad (94)$$

onde da Eq. (2.94) determinamos os campos L_t e L_s .

Fixando valores para r e H , e resolvendo numericamente a Eq. (2.94) observamos que o parâmetro de ordem m_s decresce continuamente a zero ($L_s \rightarrow 0$) quando nos aproximamos do valor crítico $T = T_N(H)$. A forma como a temperatura crítica T_N decresce com o aumento da temperatura será analisada mais adiante, quando compararemos os diversos resultados discutidos nesta dissertação e outros existentes na literatura.

2.3.4 Campo médio

Existem algumas formas diferentes de resolver um Hamiltoniano de spins interagentes via aproximação de campo médio (campo molecular de Weiss, interação de longo-alcance, Bragg-Williams); a seguir usaremos a forma variacional que usa como ponto de partida a desigualdade de Bogoliubov. Separando o Hamiltoniano \mathcal{H} na forma

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_o + \mathcal{H}', \quad (95)$$

é possível mostrar a seguinte desigualdade (exata)

$$G(\mathcal{H}) \leq \Phi \equiv G(\mathcal{H}_o) + \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_o \rangle_o, \quad (96)$$

sendo

$$G(\mathcal{H}_o) = -k_B T \ln Z_o, \quad (97)$$

e

$$\langle A \rangle_o = \frac{\text{Tr}\{Ae^{-\beta\mathcal{H}_o}\}}{Z_o \text{Tr}\{e^{-\beta\mathcal{H}_o}\}}, \quad (98)$$

onde $Z_o = \text{Tr}\{e^{-\beta\mathcal{H}_o}\}$.

Na aproximação de campo médio, usamos a desigualdade (2.96) para um Hamiltoniano \mathcal{H}_o escrito numa forma trivial em função de parâmetro(s) variacional. Para aglomerado com um spin, consideramos o seguinte Hamiltoniano trivial

$$\mathcal{H}_o = -(\eta_A + H) \sum_{i \in A} \sigma_{iA} - (\eta_B + H) \sum_{i \in B} \sigma_{iB} \quad (99)$$

onde η_A e η_B são os parâmetros variacionais a serem determinados com a minimização do funcional $\Phi(\eta_A, \eta_B)$.

Substituindo o Hamiltoniano (2.99) na Eq.(2.96) e usando as relações (2.97) e (2.98), obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\phi(\eta_A, \eta_B)}{NJ_x} &= -\frac{t}{2} \ln [4 \cosh \beta (H + \eta_A) \cosh \beta (H + \eta_B)] + rm_A m_B - \frac{1}{2} (m_A^2 + m_B^2) + \\ &\quad \frac{\eta_A}{2J_x} m_A + \frac{\eta_B}{2J_x} m_B, \end{aligned} \quad (100)$$

sendo

$$m_\mu = \langle \sigma_{i\mu} \rangle = \tanh \beta (H + \eta_\mu), \quad (\mu = A, B) \quad (101)$$

Minimizando a Eq. (2.100) com relações às magnetizações das subredes A e B, obtemos os parâmetros variacionais por

$$\frac{\eta_\mu}{J_x} = \begin{cases} 2m_A - 2rm_B, & \text{se } \mu = A \\ 2m_B - 2rm_A, & \text{se } \mu = B \end{cases} \quad (102)$$

Finalmente, substituindo a Eq. (2.102) nas Eqs. (2.100) e (2.101) ficaremos

$$m_A = \tanh \left[\frac{1}{t} (h + 2m_A - 2rm_B) \right], \quad (103)$$

$$m_B = \tanh \left[\frac{1}{t} (h + 2m_B - 2rm_A) \right] \quad (104)$$

e a energia livre

$$f = -t \ln \left[4 \cosh \frac{1}{t} (h + 2m_A - 2rm_B) \cosh \frac{1}{t} (h + 2m_B - 2rm_A) \right] - rm_A m_B + \frac{1}{2} (m_A^2 + m_B^2). \quad (105)$$

onde $t = k_B T / J_x$ e $h = H / J_x$. Definindo as novas variáveis $m = \frac{1}{2} (m_A + m_B)$ e $m_S = \frac{1}{2} (m_A - m_B)$, podemos reescrever as Eqs. (2.102), (2.103) e (2.104) na seguinte forma simplificada

$$f(m_s) = -t \sum_{p=0}^1 \ln \left\{ 2 \cosh \frac{1}{t} [h + (1-r)m + 2(-1)^p (1+r)m_S] \right\} + (1-r)m^2 + (1+r)m_S^2 \quad (106)$$

$$m = \frac{1}{2} \sum_{p=0}^1 \tanh \frac{1}{t} [h + 2(1-r)m + 2(-1)^p (1+r)m_S], \quad (107)$$

$$m_S = \frac{1}{2} \sum_{p=0}^1 (-1)^p \tanh \frac{1}{t} [h + 2(1-r)m + 2(-1)^p (1+r)m_S] \quad (108)$$

Resolvendo numericamente as Eqs. (2.107) e (2.108), em conjunto com a condição da igualdade entre as energias livres entre as duas fases SAF ($m_s \neq 0$) e P ($m_s = 0$), isto é, $f_{SAF}(m_s) = f_P(0)$ (construção de Maxwell), mostramos que para pequenos valores de campo a transição é de segunda ordem ($m_s = 0$) e para altos valores temos a presença de uma transição de primeira ordem ($m_s \neq 0$). O ponto que separa no diagrama de fase no plano $T - H$ as linhas de transições de primeira e segunda ordem é denominado de ponto

tricrítico (PTC). Devemos salientar, que os resultados de campo médio para estudar este modelo anisotrópico foram tratados preliminarmente por Katsura e Fijimori[95], onde a versão de Bragg-Williams foi utilizada; aqui apresentamos a versão do método variacional.

2.3.5 Aproximação da cadeia linear

Vimos na Sec. 2.1 que a aproximação de campo médio (MFA) pode ser aplicada no esquema de *finite size scaling*. Por outro lado, o modelo (2.62) tem sido tratado na literatura na aproximação da cadeia linear (LCA)[96]. O método LCA consiste em tratar de forma exata uma cadeia linear usando o método da matriz de transferência, onde as interações entre as cadeias são feitas via aproximação de campo médio. Seja uma dada cadeia linear (que supomos ser ao longo da direção do eixo x , sem perda de generalidade) composta de sítios da subrede A, então teremos o seguinte Hamiltoniano efetivo:

$$\mathcal{H}_A = -J_x \sum_i \sigma_{iA} \sigma_{(i+1)A} - H_E^A \sum_i \sigma_{iA}, \quad (109)$$

onde $H_E^A = H - 2J_y m_B$. O modelo efetivo (2.109) pode ser resolvido de forma exata usando a técnica da matriz de transferência, e o resultado para a magnetização da subrede A é dado por

$$m_A = \frac{e^{2K_x} \sinh(L - 2K_y m_B)}{\sqrt{1 + e^{4K_x} \sinh^2(L - 2K_y m_B)}}. \quad (110)$$

De forma análoga podemos obter a magnetização para a subrede B, que é dada por

$$m_B = \frac{e^{2K_x} \sinh(L - 2K_y m_A)}{\sqrt{1 + e^{4K_x} \sinh^2(L - 2K_y m_A)}}. \quad (111)$$

Inserindo $m_A = m + m_s$ e $m_B = m - m_s$ nas Eqs. (2.110) e (2.111), obtemos, resolvendo numericamente, m_s (parâmetro de ordem) e m , como uma função de T , H e r . A magnetização *staggered* m_s tende a zero continuamente quando a temperatura se

aproxima do valor crítico $T_N(H)$ (r fixo), caracterizando assim uma transição de fase para qualquer valor de $H \in [0, H_c)$. Desta maneira, fazendo $m_s \rightarrow 0$ encontramos o seguinte conjunto de equações acopladas para obter T_N como uma função do campo externo H :

$$m_o = \frac{e^{2/T_N} \sinh [(h - 2rm_o) / T_N]}{W} \quad (112)$$

e

$$\frac{2re^{2/T_N} [W - \sinh^2 [(h - 2rm_o) / T_N]] \cosh [(h - 2rm_o) / T_N]}{W^3 T_N} = 1 \quad (113)$$

sendo

$$W = \sqrt{1 + e^{4/T_N} \sinh^2 [(h - 2rm_B) / T_N]} \quad (114)$$

onde $T_N \equiv k_B T_N / J_x$ e $h = H / J_x$.

2.3.6 Diagramas de fases e discussões

Podemos analisar o diagrama de fase do modelo (2.62) nos planos $T - r$ e $T - H$. Na ausência de campo externo ($H = 0$) este modelo apresenta solução exata, e existe uma temperatura crítica $T_N(r)$ que pode ser obtida numericamente da Eq. (2.63). A magnetização vai a zero continuamente (transição de fase de segunda ordem), com um expoente crítico $\beta = 1/8$ que é independente da razão $r = J_y / J_x \neq 0$. Por outro lado, as aproximações de campo efetivo (EFT-1, BP, MFA e LCA) desenvolvidas anteriormente⁹ apresentam em comum a existência de transição contínua com o expoente crítico clássico $\beta = 1/2$. No caso de MFA, a temperatura crítica T_N decresce com a diminuição do parâmetro r , porém não se anula no limite da rede unidimensional (i.e., para $r = 0$ temos $T_N = 0$ correspondendo à solução exata). Observamos que T_N apresenta o comporta-

⁹Devemos salientar que as contribuições originais deste trabalho de dissertação de mestrado estão nos cálculos de EFT-1 e BP, LCA e MFA foram tratados por outros autores anteriormente.

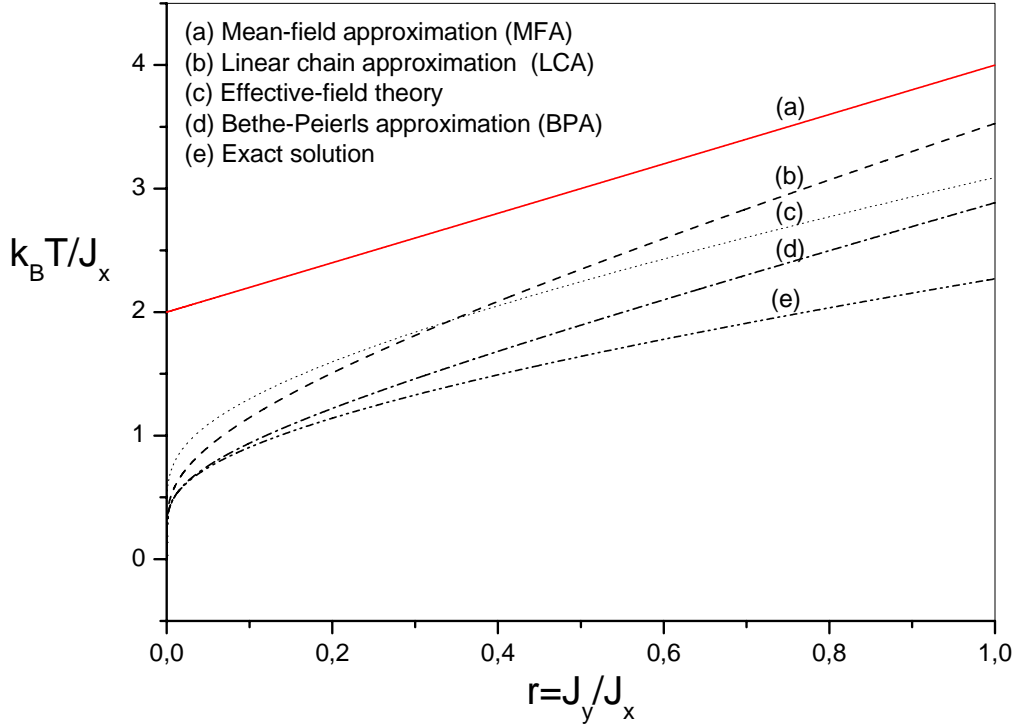


Figura 2.3: Dependência da temperatura crítica reduzida $k_B T_N / J_x$ como uma função da razão $r = J_y / J_x$ para o modelo de Ising numa rede quadrada anisotrópica na ausência de campo externo. MFA (a) encontra valores incorretos para o limite da rede linear ($r = 0$). As curvas (b), (c), (d) e (e) são encontrados usando LCA[96], EFT-1 (presente trabalho), BP (presente trabalho) e solução exata, Eq. (2.62), respectivamente.

mento linear $k_B T_N / J_x = 2 + 2r$, mostrando claramente o resultado errôneo em $r = 0$ ($T_N > 0$). Por outro lado, LCA, BP e EFT-1 encontram a solução exata $T_N = 0$ para a rede linear ($r = 0$), com o comportamento assintótico no limite de $r \rightarrow 0$ dado pela Eq. (2.64). Na figura 2-3 apresentamos os resultados numéricos obtidos pelos métodos MFA (curva a), LCA (curva b), EFT-1 (curva c), aproximação BP (curva d) e comparamos com a solução exata (curva e).

Outro caso de nosso interesse é analisar o diagrama de fase no plano $T - H$ variando r . A análise feitas por todos os métodos analisados, e outros existentes na literatura,

não é afetado pela mudança do valor de r , apenas uma translação da curva $T_N(H)$ foi observada. Por esta razão, sem perda de generalidade, vamos nos fixar no valor de $r = 1$. Na aproximação de campo médio (MFA) temos presença de transição de 1^a e 2^a ordem, e um ponto tricrítico (PTC) separa estas duas linhas. A presença do PTC (resultado espúrio) no diagrama de fase é uma consequência do uso de MFA, que sabemos ser uma metodologia não muito adequada para tratar diagramas de fases de modelos de baixa dimensionalidade. MFA despreza todas as correlações, assim sendo é uma boa aproximação para altas dimensões ($d > 2$) e exata para dimensão infinita ($z \rightarrow \infty$). Tratando ligeiramente melhor as correlações, LCA encontra transição de 2^a ordem para todo intervalo do campo magnético H , sendo que ao redor de $H_c/J_x = 2.0$ temos a presença de duas temperaturas críticas, fenômeno este conhecido como reentrância. Usando EFT-1 e comportamento reentrante não foi observado, apenas o decaimento logarítmico de T_N quando nos aproximamos de $H/J_x = 2.0$, isto é,

$$k_B T_N / J_x \simeq |\ln(2 - H/J_x)|, \quad H \rightarrow H_c^- = 2J_x, \quad (115)$$

Por outro lado, quando usamos a aproximação de BP retornamos a prever o comportamento reentrante predito por LCA. Os resultados obtidos por BP para a temperatura crítica em modelos de spin é superior ao encontrado por EFT-1 (ver fig. 2-3 para comparação), assim sendo esperamos que esta reentrância seja o verdadeiro comportamento qualitativo para o diagrama de fase deste modelo anisotrópico. Prevemos, também, o comportamento assintótico (2.115) também com LCA. Na figura 2-4 temos apresentamos os resultados do diagrama de fase no plano $T - H$ obtido por MFA (curva a), LCA (curva b), EFT-1 (curva c) e aproximação BP (curva d).

Na figura 2-5 comparamos o resultado obtido neste trabalho usando a aproximação BP com a solução *exata*[97], conhecido como método da interface, corroborando do ponto de vista qualitativo a existência deste comportamento reentrante. Há bastante tempo resultados rigorosos têm mostrado comportamento reentrante no diagrama de fase do modelo de Ising 2d com interações competitivas[98]. Mais recentemente, esta análise tem

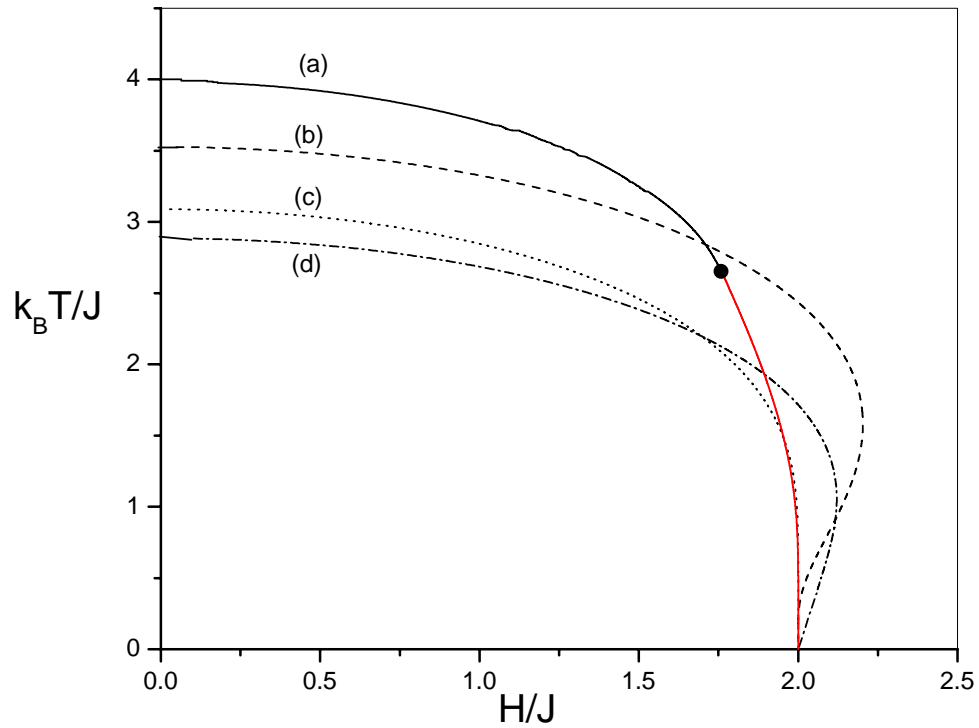


Figura 2.4: Dependência da temperatura crítica reduzida $k_B T_N / J_x$ com campo reduzido H / J_x para o modelo de Ising numa rede quadrada anisotr ópica com $r = 1$. MFA (a) encontra valores incorretos no limite de baixas temperatura que é a presença de transição de primeira ordem, onde existe um ponto trcrítico nas coordenadas $(1.756, 2.667)$. As curvas (b), (c) e (d) e (e) são encontrados usando LCA[96], EFT-1 (presente trabalho) e BP (presente trabalho), respectivamente.

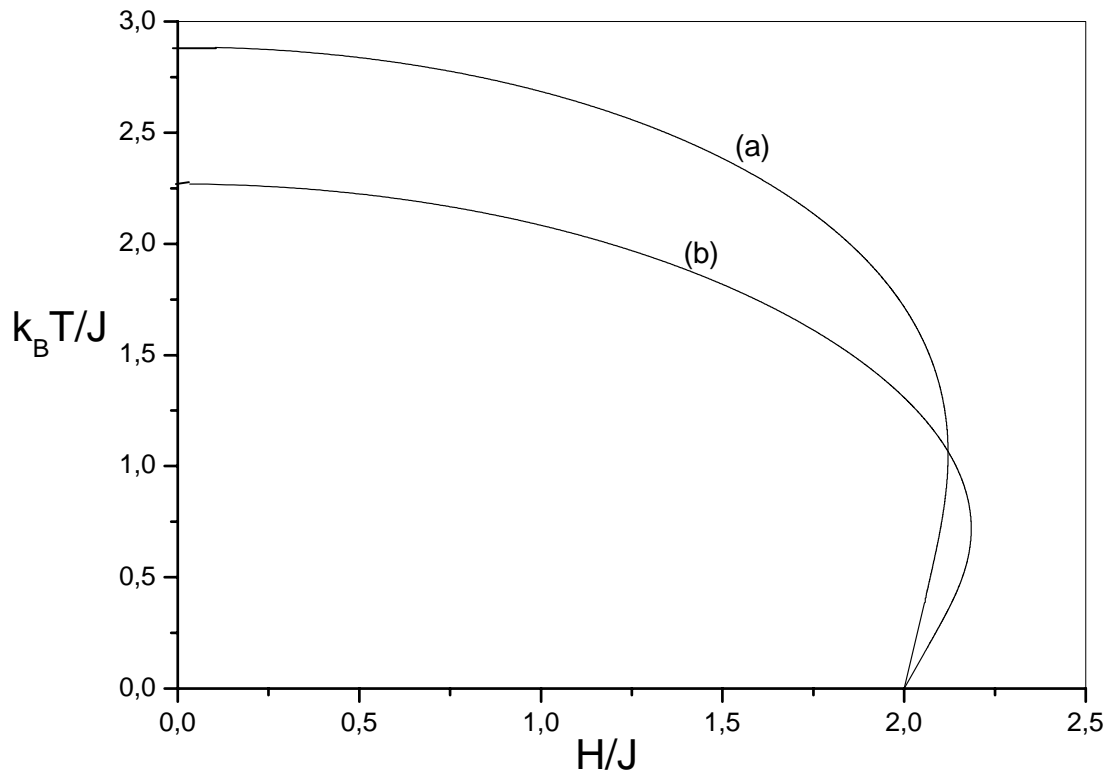


Figura 2.5: Dependência da temperatura crítica reduzida $k_B T_N/J_x$ como uma função do campo reduzido H/J_x para o modelo de Ising numa rede quadrada anisotrópica com $r = 1$. Comparamos o resultado da linha crítica obtida via aproximação BP (presente trabalho) (curva a) com a forma exata (curva b).

resurgido na literatura para estudar reentrância em redes 3d[28]. Podemos aplicar EFT para investigar o comportamento reentrante no esquema de *finite size scaling* (FSS) ou incluir efeitos de correlações entre primeiros vizinhos[99]. No caso do esquema de FSS de Neto e de Sousa[28], o diagrama de fase do modelo de Ising AF na presença de um campo magnético longitudinal externo nas redes cúbica simples (sc) e cúbica de corpo centrado (bcc), apresenta reentrância apenas para o caso da rede bcc.

Capítulo III

Modelo de Ising com interações entre primeiros e segundos vizinhos

3.1 Considerações gerais

O Hamiltoniano de Ising tem sido um dos modelos mais ativamente estudados na mecânica estatística nos últimos anos. Soluções exatas têm sido obtidas para modelos unidimensionais e certas classes de redes bidimensionais, bem como soluções rigorosas de simulação de Monte Carlo[92] foram obtidas em redes 3d. Embora as propriedades de spin $\frac{1}{2}$ do modelo Ising numa rede quadrada com interação entre primeiros vizinhos J_1 são obtidas exatamente, este modelo simples ainda é incapaz de explicar diversos fenômenos reais, ocorridos sobretudo em sistemas 2d e quase-2d [100]. O oxigênio disposto na base do plano $\text{XBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_\delta$, onde X é um átomo de terra rara e $0 \leq \delta \leq 1$, é um bom e interessante contra-exemplo da inaplicabilidade do uso do Hamiltoniano de Ising na sua forma simplificada com interação apenas entre primeiros vizinhos. Para explicar algumas propriedades físicas desse sistema, será necessário considerar interações de longo alcance. Contudo, quando interações mais distantes são incluídas, ou quando um campo magnético

é aplicado no sistema, o Hamiltoniano é de difícil solução e só será possível com algum tipo de aproximação.

Em particular, o diagrama de fase no estado fundamental ($T = 0$) do modelo Ising com interações entre primeiros e segundos vizinhos numa rede d -dimensional é bem conhecido. As possíveis fases encontradas numa rede quadrada são: ferromagnética (F), antiferromagnética (AF) e superantiferromagnética (SAF). A fase F corresponde a todos os spins orientados na mesma direção (figura 3-1), a fase AF spins orientados antiparalelamente (figura 3-2) e, finalmente a fase SAF tem spins orientados paralelamente ao longo de uma dada direção da rede e com spins alternados em ao longo da direção perpendicular (figura 3-3). Estas fases são fortemente dependentes da razão entre as interações entre segundos e primeiros vizinhos, que denominamos de parâmetro $\alpha = J_2/J_1$. Além disso, uma vez que sob transformações apropriadas, o sistema ferromagnético e o antiferromagnético são equivalentes¹ e os resultados são independentes do valor da interação J_1 , portanto nos restringiremos apenas ao caso de $J_1 < 0$ (acoplamento antiferromagnético). Para um modelo de Heisenberg com interações J_1 e J_2 (spin quântico) este mapeamento não é mais possível, isto por causa das relações de comutações existentes entre os spins.

A presença da interação de segundos vizinhos induz o fenômeno da **frustração**, que corresponde ao conflito de mais de um tipo de configurações microscópicas. Este ingrediente é um fator necessário (mais não suficiente) para a existência de um outro estado magnético na matéria, que é a fase vidro de spin. Comparando a energia do estado fundamental na fase F (ou AF) com a energia da fase SAF, mostramos que existe um valor crítico (transição de primeira ordem) $\alpha_c = \frac{z_1}{2z_2} = 1/2$ (onde z_1 e z_2 são os números de coordenação de primeiros e segundos vizinhos, respectivamente) para o qual $\alpha > 1/2$ e $\alpha < 1/2$ as fases SAF e F(ou AF) são estáveis, respectivamente[100]. Temos como ponto

¹O estado F (J_1 positivo) pode ser mapeado no estado AF invertendo todos os spins $\sigma_i \rightarrow -\sigma_i$, tornando assim as interações J_1 negativas, ou seja,

$$\mathcal{H}^F(J_1) = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \rightarrow \mathcal{H}^{AF}(J_1) = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j$$

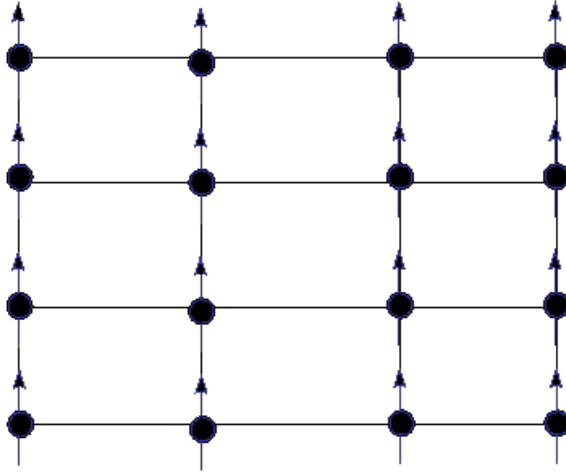


Figura 3.1: Configurações dos spins em $T = 0$ no estado ferromagnético (F) numa rede quadrada.

de interesse particular $\alpha = 0.5$. Na fase SAF, os expoentes críticos variam continuamente com o parâmetro α (*quebra da universalidade*).

Em temperatura finita este modelo não é resolvido exatamente. Resultados de simulação de Monte Carlo.[102, 103], têm indicado alguns pontos importantes: i) na região de $\alpha < 0.5$, os expoentes críticos são os mesmos do modelo de Ising 2d (mesma classe de universalidade); ii) na região $\alpha > 0.5$, os expoentes críticos são funções do parâmetro α , indicando uma quebra da classe de universalidade; iii) na fase AF (ou F) a temperatura de Néel $T_N(\alpha)$ decresce com o aumento do parâmetro α , e a transição de fase é contínua para todo valor de $\alpha \in (-\infty, 0.5)$, enquanto na fase SAF temos $T_N(\alpha)$ crescendo com o parâmetro α , sendo que para $0.5 \leq \alpha < \alpha_t$ e $\alpha > \alpha_t$ a transição de fase é de primeira e segunda ordem, respectivamente, onde (α_t, T_t) corresponde ao ponto tricrítico (PTC). Os resultados apresentados por essa técnica podem ser verificado na figura 3-4, onde posteriormente compararemos com os resultados da técnica do operador diferencial.

O comportamento crítico do modelo Ising com interações J_1 e J_2 na rede quadrada, estudado há anos atrás, está bem definido, porém para o caso tridimensional pouco

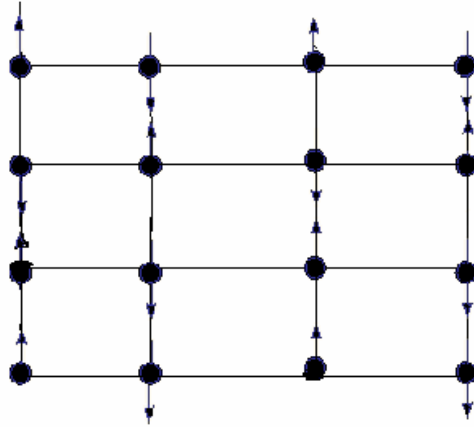


Figura 3.2: Configurações dos spins em $T = 0$ no estado antiferromagnético (AF) numa rede quadrada.

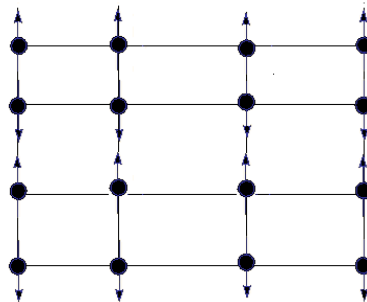


Figura 3.3: Configurações dos spins em $T = 0$ no estado superantiferromagnético (SAF) numa rede quadrada.

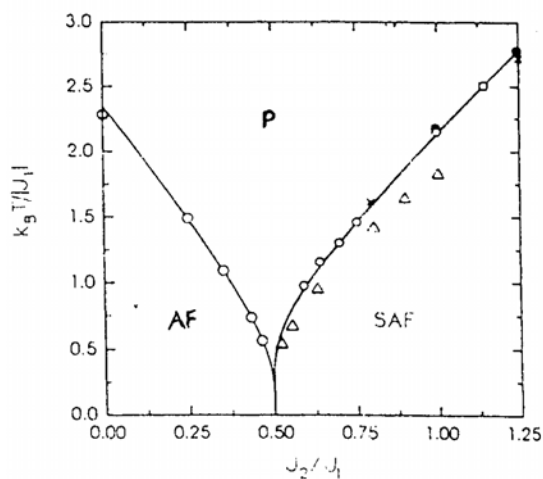


Figura 3.4: Diagrama de fase T versus α para o modelo de Ising com interações entre primeiros e segundos vizinhos numa rede quadrada obtida via simulação de Monte Carlo[102, 103]. Na região $0.5 < \alpha < 1.144$ a transição de fase é de primeira ordem, e o ponto tricrítico está marcada por uma quadrado aberto.

se tem sido feito. Cálculos de campo médio mostraram que o modelo exibe um rico diagrama de fase[101], com presença de fase laminar e ordenadas bicontínuas, estrutura desordenada e regiões não estruturadas, e ainda coexistências das fases ferromagnética e paramagnética com um transição de 1ª ordem. Estes resultados, nos propõem uma investigação mais profunda das propriedades críticas do modelo além do esquema de campo médio, focando principalmente atenção nos pontos multicríticos, bem como nos pontos de transições de fases, ferromagnética, laminar e paramagnética. A fase laminar é caracterizada por apresentar planos ferromagnéticos orientados antiparalelamente na direção perpendicular, ou seja, são planos com magnetizações alternadas em sinais.

Usando pequenos *clusters* em conjunto com o método variacional em cubos (CVPAM)[104], pode-se estudar este modelo com a inclusão de uma interação de quatro spins². Conforme mostra a figura 3-5, os resultados obtidos para o diagrama de fase $k_B T / J_1$ (ou J_1^{-1})

²A interação de quatro spins adicionada ao modelo de Ising J_1 e J_2 é descrito pelo seguinte Hamiltoniano: $\mathcal{H}_4 = -J_3 \sum_{\langle i,j,k,l \rangle} \sigma_i \sigma_j \sigma_k \sigma_l$

versus $\alpha = -J_2/J_1$ foi obtido para uma rede cúbica simples usando dois valores particulares de $\omega = J_3/J_1$. Na ausência da interação de quatro spins (i.e., $w = 0$), observa-se uma transição de fase contínua entre as fases F (ou AF) e paramagnética, mas agora a transição é de primeira ordem para qualquer valor de $\alpha > 0.25$ entre as fases laminar (semelhante a fase SAF na rede quadrada, sendo que agora temos planos e não linhas alternadas) e paramagnética. A transição de fase é de primeira ordem entre as fases laminar e F. Para $w > 0$, teremos uma decomposição da linha de primeira ordem entre as fases laminar e paramagnética em linhas de primeira e segunda ordem, separadas por um ponto tricrítico. Em particular, na figura 3-5 está apresentado (curva a direita) o diagrama de fase para $w = 1/3$. Devemos salientar que o presente diagrama de fase não é conclusivo, por isto a maior motivação de se aplicar um formalismo alternativo para estudar o comportamento multicrítico deste modelo em três dimensões.

3.2 Técnica do operador diferencial

Neste capítulo, desenvolveremos a técnica do operador diferencial em aglomerados com $N = 1$ e 4 spins, estudado preliminarmente no capítulo 2 desta dissertação, para calcular o diagrama de fase do modelo de Ising-1/2 com interação de primeiros e segundos vizinhos nas redes quadrada (2d) e cúbica simples (3d), que é descrito pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \sigma_i \sigma_j, (\sigma_i \pm 1) \quad (1)$$

onde J_1 (J_2) representa a interação de *exchange* entre primeiros (segundos) vizinhos, a primeira soma é sobre os z_1 primeiros vizinhos e a segunda soma é sobre os z_2 segundos vizinhos. Para nosso propósito, a rede quadrada tem $z_1 = z_2 = 4$ e a rede cúbica simples $z_1 = 6$ e $z_2 = 12$. Para $J_2 > 0$ temos um conflito de orientação entre os spins na rede d -dimensional, e os casos ferro ($J_1 > 0$) e antiferromagnético ($J_1 < 0$) são equivalentes

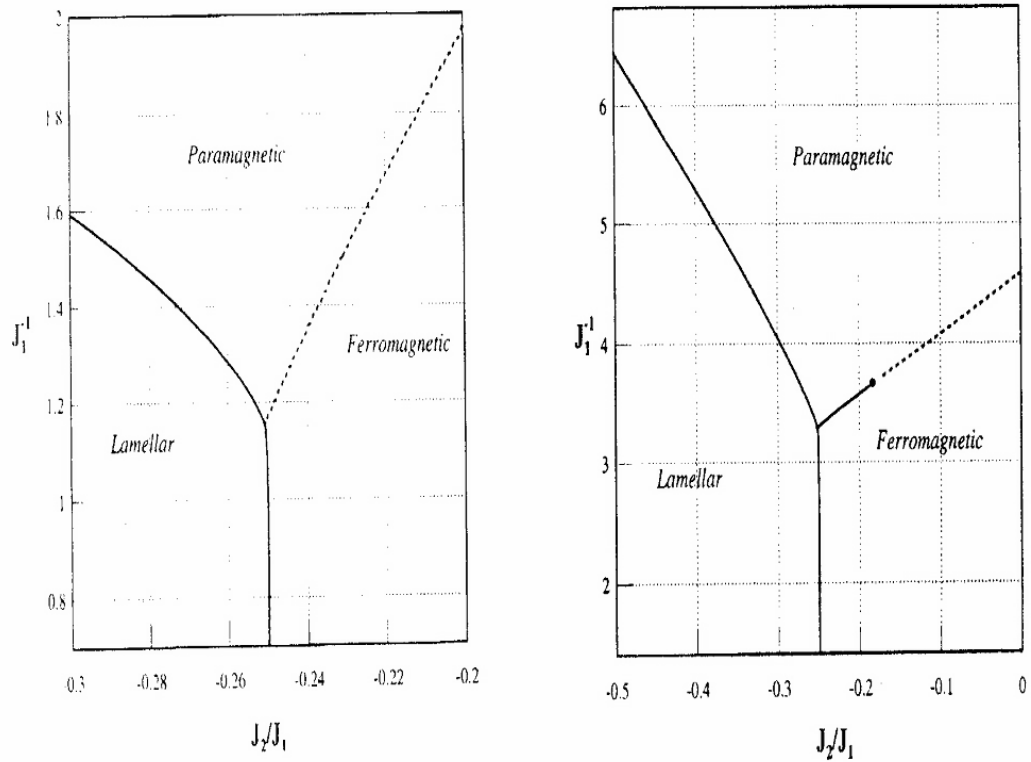


Figura 3.5: Diagrama de fase T versus α para o modelo de Ising com interações entre primeiros e segundos vizinhos numa rede cúbica simples obtida via método variacional[104]. As linhas contínuas e tracejadas correspondem, respectivamente, a transição de fase de primeira e segunda ordem. O ponto tricrítico está marcado por um círculo preto. O gráfico da esquerda corresponde ao caso de interação de quatro spins nula ($J_3 = 0$) e o da direita com $J_3 = 1/3$.

e correspondem a um estado frustrado. Vamos então tratar a rede ferromagnética para $d = 2$ e $d = 3$ e para isto usaremos como ponto de partida a Eq. (2.34).

3.2.1 Rede quadrada

Para tratar o diagrama de fase do modelo (3.1) via técnica do operador diferencial numa rede quadrada, desenvolveremos a teoria de campo efetivo em aglomerados com um ($N = 1$) e quatro ($N = 4$) spins.

Teoria de campo efetivo com um sítio (EFT-1)

i) Fase Ferromagnética (F)

Nesta fase F usaremos apenas uma subrede, desta maneira o Hamiltoniano (3.1) para aglomerado com um ($N = 1$) spin será escrito por:

$$-\beta\mathcal{H}_o = \sigma_o \left(K \sum_{i=1}^{z_1} \sigma_i - \alpha K \sum_{j=1}^{z_2} \sigma_j \right) \quad (2)$$

Substituindo (3.2) em (2.34) obteremos a magnetização por spin $m = \langle \sigma_o \rangle$

$$m = \left\langle \tanh \left(K \sum_{i=1}^{z_1} \sigma_i - \alpha K \sum_{j=1}^{z_2} \sigma_j \right) \right\rangle. \quad (3)$$

Definindo a função $f(x, y) = \tanh(x + y)$ e usando a identidade $e^{aD_x + bD_y} f(x, y) = f(x + a, y + b)$, a Eq. (3.3) ficará reescrita na forma

$$m = \left\langle \exp \left(K \sum_{i=1}^{z_1} \sigma_i D_x - \alpha K \sum_{j=1}^{z_2} \sigma_j D_y \right) \right\rangle f(x, y)|_{x,y=0}. \quad (4)$$

Expandindo o somatório (3.4) obtemos

$$m = \left\langle \prod_{i=1}^{z_1} \exp(K\sigma_i D_x) \prod_{j=1}^{z_2} \exp(-\alpha K\sigma_j D_y) \right\rangle f(x, y)|_{x,y=0} \quad (5)$$

Agora, usando a identidade de van der Waerden $e^{\lambda\sigma_i} = \cosh \lambda + \sigma_i \sinh \lambda$, podemos reescrever a Eq. (3.5) na forma

$$m = \left\langle \prod_{i=1}^{z_1} [\cosh(KD_x) + \sigma_i \sinh(KD_x)] \prod_{j=1}^{z_2} [\cosh(\alpha KD_y) - \sigma_j \sinh(\alpha KD_y)] \right\rangle f(x, y)|_{x,y=0} . \quad (6)$$

A Eq. (3.6) é *exata* mas de difícil manipulação matemática, porque envolve um conjunto infinito de equações acopladas de funções de correlação. Aplicando o desacoplamento Eq. (2.47), podemos escrever a Eq. (3.6) na seguinte forma aproximada

$$m = (a_x + b_x m)^{z_1} (a_y - b_y m)^{z_2} f(x, y)|_{x,y=0} , \quad (7)$$

onde $a_x \equiv \cosh(KD_x)$, $b_x \equiv \sinh(KD_x)$, $a_y \equiv \cosh(\alpha KD_y)$ e $b_y \equiv \sinh(\alpha KD_y)$.

Na ausência de campo externo, temos simetria por inversão do spin, então temos que a expansão da Eq. (3.7) em potências de m conterá apenas potências ímpares, ou seja, para a rede quadrada ($z_1 = z_2 = 4$) ficaremos com:

$$m = \sum_{p=0}^3 A_{2p+1}(T, \alpha) m^{2p+1} , \quad (8)$$

onde $T = K^{-1}$ e os coeficientes $A_p(T, \alpha)$ são obtidos analiticamente usando a identidade $e^{aD_x + bD_y} f(x, y) = f(x + a, y + b)$ em conjunto com o software **MAPLE 9.0**. A Eq. (3.8) corresponde à equação de estado obtida através da minimização de uma certa energia livre $\Psi(m)$ desconhecida. Em particular, propomos o seguinte funcional para energia livre

$$\Psi(m) = \lambda_1(T, \alpha) + \lambda_2(T, \alpha) \left[\frac{m^2}{2} - \sum_{p=0}^3 A_{2p+1}(T, \alpha) \frac{m^{2p+2}}{2p+2} \right] , \quad (9)$$

onde minimizando ($\Psi(m) = 0$) a Eq. (3.9) encontramos a equação de estado (3.8), $\lambda_{1,2}(T, \alpha)$ são parâmetros arbitrários irrelevantes na determinação do diagrama de fase que será obtido usando a construção de Maxwell (igualdade entre as energias livres das fases ferro e paramagnética ($m = 0$)), ou seja, teremos mais uma equação a ser resolvida

dada por

$$\sum_{p=0}^3 \frac{A_{2p+1}(T, \alpha)}{p+1} m^{2p} = 1. \quad (10)$$

Resolvendo simultaneamente³ as Eqs. (3.8) e (3.10) para um dado valor do parâmetro α , encontramos T_c (temperatura de transição de fase) e a magnetização m em $T = T_c$. Para transição de fase contínua (segunda ordem) temos $m = 0$, enquanto na transição de primeira ordem observamos uma descontinuidade na magnetização e portanto $m \neq 0$. observamos transição de fase F-P de primeira (baixas temperaturas) e segunda (altas temperaturas) ordem no diagrama de fase, com um ponto tricrítico separando as duas linha, em contradição com os resultados de simulação de Monte Carlo, figura 3-4, que apenas encontra transição contínua para $\alpha \in (-\infty, 0.5)$. Usamos também aglomerado com dois sítios e o resultado espúrio ainda persiste. Mais adiante desenvolveremos a técnica do operador diferencial para aglomerado com quatro spins e eliminaremos de vez esta inconsistência.

ii) Fase superantiferromagnética (SAF)

Iremos agora dividir o Hamiltoniano em duas subredes interpenetrantes (A e B). Consideremos os sítios primeiros vizinhos ao longo do eixo x na subrede A e na direção y na subrede B. Para o caso de segundos vizinhos teremos os spins diagonais sempre na subrede B. Assim sendo, para um aglomerado com um ($N = 1$) spin na subrede A, o Hamiltoniano (3.1) ficará escrito na forma

$$-\beta\mathcal{H}_o^A = -\sigma_o^A \left(K \sum_{i=1}^2 \sigma_i^A + K \sum_{i=3}^4 \sigma_i^B - \alpha K \sum_{i=5}^6 \sigma_i^B \right), \quad (11)$$

Substituindo (3.11) em (2.34) obteremos a magnetização da subrede A por spin $m_A =$

³Temos usado o algoritmo de Newton-Raphson para o cálculo de raízes de sistemas de equações não lineares.

$\langle \sigma_o^A \rangle :$

$$m_A = \left\langle \tanh \left(K \sum_{i=1}^2 \sigma_i^A + K \sum_{i=3}^4 \sigma_i^B - \alpha K \sum_{i=5}^6 \sigma_i^B \right) \right\rangle. \quad (12)$$

Definindo outra vez a função auxiliar $f(x, y) = \tanh(x + y)$ e usando a identidade $e^{aD_x + bD_y} f(x, y) = f(x + a, y + b)$, a Eq. (3.3) ficará :

$$m = \left\langle \exp \left[\left(K \sum_{i=1}^2 \sigma_i^A + K \sum_{i=3}^4 \sigma_i^B \right) D_x - \alpha K \sum_{i=5}^6 \sigma_i^B D_y \right] \right\rangle f(x, y)|_{x,y=0}. \quad (13)$$

Usando os mesmos procedimentos na obtenção da Eq. (3.6), a Eq. (3.13) poderá ser reescrita na forma

$$m_A = \left\langle \prod_{i=1}^2 (a_x + b_x \sigma_i^A) \prod_{i=3}^4 (a_x + b_x \sigma_i^B) \prod_{i=5}^6 (a_y - b_y \sigma_i^B) \right\rangle f(x, y)|_{x,y=0}. \quad (14)$$

Aplicando a aproximação de Zernike, Eq. (2.47), na Eq. (3.14) ficaremos com:

$$m_A = (a_x + b_x m_A)^2 (a_x + b_x m_B)^2 (a_y - b_y m_B)^4 f(x, y)|_{x,y=0}. \quad (15)$$

Seguindo os mesmos procedimentos para a subrede B, obtemos a seguinte equação de estado

$$m_B = (a_x + b_x m_A)^2 (a_x + b_x m_B)^2 (a_y - b_y m_A)^4 f(x, y)|_{x,y=0}. \quad (16)$$

A fase SAF é caracterizada, na ausência de campo externo, por apresentar uma condição de contorno⁴ em que $m_A = -m_B = -m_s$, assim sendo da Eq. (3.15) ou (3.16) ficaremos com:

$$m_s = (a_x + b_x m_s)^2 (a_x - b_x m_s)^2 (a_y + b_y m_s)^4 f(x, y)|_{x,y=0}. \quad (17)$$

⁴Na fase F a condição de contorno para se obter a equação de estado é caracterizada por $m_A = m_B = m$, e, portanto, da Eq.(3.15) ou (3.16) reproduzimos os resultados previamente deduzidos na Eq. (3.7)

Podemos expandir a Eq. (3.17) em potências ímpares do parâmetro de ordem m_s , como foi feito para o caso ferromagnético na Eq. (3.8), e também encontrar um funcional do tipo apresentado pela Eq. (3.10), ficando assim com duas equações polinomiais (equação de estado e igualdade entre os funcionais das energias livres) para serem resolvidas simultaneamente, ou seja,

$$\begin{cases} m_s = \sum_{p=0}^3 B_{2p+1}(T, \alpha) m_s^{2p+1} \\ \sum_{p=0}^3 \frac{B_{2p+1}(T, \alpha)}{p+1} m_s^{2p} = 1 \end{cases} . \quad (18)$$

As Eqs.(3.18) serão essenciais mais adiante na determinação do diagrama de fase no plano $(T - \alpha)$ e na identificação do tipo de transição de fase (1ª ou 2ª ordem).

Teoria de campo efetivo com quatro sítios (EFT-4)

Devido ao efeito da frustração, o aglomerado mais apropriado com quatro spins será na forma de uma cadeia linear, conforme está esquematizado na figura 3-6, onde temos um total de 14 primeiros e segundos vizinhos. Assim sendo, o Hamiltoniano (3.1) associado a uma subrede A ficará escrito para este aglomerado como:

$$-\beta\mathcal{H}_4 = K(\sigma_1^A\sigma_2^A + \sigma_2^A\sigma_3^A + \sigma_3^A\sigma_4^A) + \sigma_1^A C_1 + \sigma_2^A C_2 + \sigma_3^A C_3 + \sigma_4^A C_4. \quad (19)$$

sendo

$$\begin{cases} C_1 = K (\sigma_a^A + \sigma_n^B + \sigma_c^B - \alpha\sigma_b^B - \alpha\sigma_o^B - \alpha\sigma_d^B - \alpha\sigma_m^B) \\ C_2 = K (\sigma_d^B + \sigma_m^B - \alpha\sigma_c^B - \alpha\sigma_n^B - \alpha\sigma_l^B - \alpha\sigma_e^B) \\ C_3 = K (\sigma_e^B + \sigma_l^B - \alpha\sigma_f^B - \alpha\sigma_j^B - \alpha\sigma_d^B - \alpha\sigma_m^B) \\ C_4 = K (\sigma_h^A + \sigma_f^B + \sigma_j^B - \alpha\sigma_e^B - \alpha\sigma_l^B - \alpha\sigma_g^B - \alpha\sigma_i^B) \end{cases} \quad (20)$$

Do Hamiltoniano (3.19) podemos calcular a função de partição $Z_4 = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta\mathcal{H}_4(\{\sigma_i\})}$,

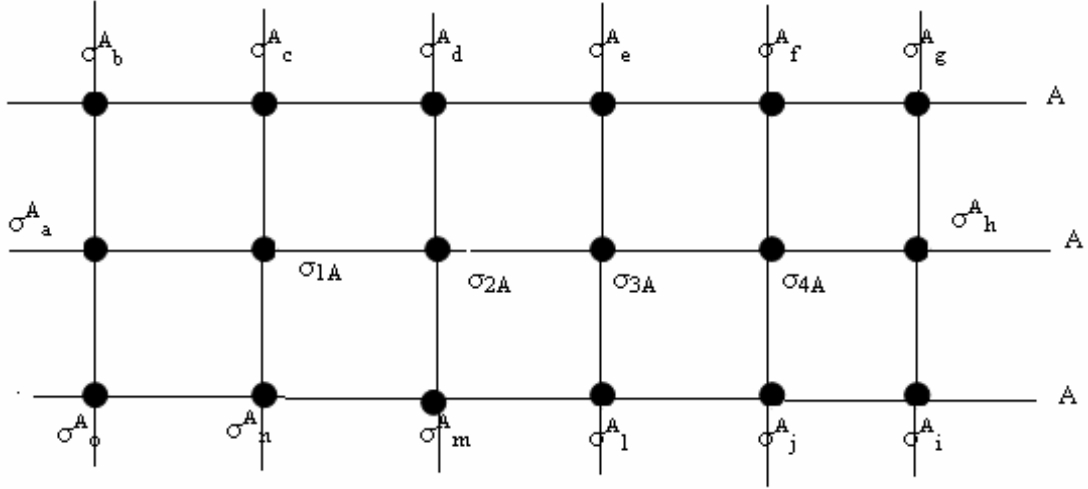


Figura 3.6: Aglomerado com quatro spin usado na técnica do operador diferencial

que após algumas manipulações fica:

$$\begin{aligned}
 Z_4 = 2 \{ & \exp(3K) \cosh(C_1 + C_2 + C_3 + C_4) + \exp(K) \cosh(C_1 + C_2 + C_3 - C_4) + \\
 & \exp(-K) \cosh(C_1 + C_2 - C_3 + C_4) + \exp(-K) \cosh(C_1 - C_2 + C_3 + C_4) + \\
 & \exp(K) \cosh(-C_1 + C_2 + C_3 + C_4) + \exp(K) \cosh(C_1 + C_2 - C_3 - C_4) + \\
 & \exp(-3K) \cosh(C_1 - C_2 + C_3 - C_4) + \exp(-K) \cosh(C_1 - C_2 - C_3 - C_4) \}.
 \end{aligned} \tag{21}$$

Com auxílio da Eq. (3.21) podemos calcular a magnetização da subrede A $m_A = \langle \sigma_1^A \rangle$, que é dada por

$$m_A = \left\langle \frac{\partial \ln Z_4}{\partial C_1} \right\rangle = \langle F(C_1, C_2, C_3, C_4) \rangle, \tag{22}$$

onde a função $F(C_1, C_2, C_3, C_4)$ é obtida analiticamente por derivação direta da Eq. (3.21), onde sempre fazemos uso do *software* **MAPLE**. Generalizando a propriedade do

operador diferencial para quatro variáveis teremos

$$e^{a_1 D_x + a_2 D_y + a_3 D_z + a_4 D_w} F(x, y, z, w) = F(x + a_1, y + a_2, z + a_3, w + a_4). \quad (23)$$

Podemos reescrever a Eq. (3.22) na forma

$$m = \langle \exp(C_1 D_x + C_2 D_y + C_3 D_z + C_4 D_w) F(x, y, z, w) \rangle_{x,y,z,w=0} \quad (24)$$

sendo

$$F(x, y, z, w) = \frac{G_1(x, y, z, w)}{G_2(x, y, z, w)}, \quad (25)$$

$$\begin{aligned} G_1(x, y, z, w) = & \exp(3K) \sinh(x + y + z + w) + \exp(K) \sinh(x + y + z - w) + \\ & \exp(-K) \sinh(x + y - z + w) + \exp(-K) \sinh(x - y + z + w) - \\ & \exp(K) \sinh(-x + y + z + w) + \exp(K) \sinh(x + y - z - w) + \\ & \exp(-3K) \sinh(x - y + z - w) + \exp(-K) \sinh(x - y - z - w) \end{aligned} \quad (26)$$

e

$$\begin{aligned} G_2(x, y, z, w) = & \exp(3K) \cosh(x + y + z + w) + \exp(K) \cosh(x + y + z - w) + \\ & \exp(-K) \cosh(x + y - z + w) + \exp(-K) \cosh(x - y + z + w) + \\ & \exp(K) \cosh(-x + y + z + w) + \exp(K) \cosh(x + y - z - w) + \\ & \exp(-3K) \cosh(x - y + z - w) + \exp(-K) \cosh(x - y - z - w). \end{aligned} \quad (27)$$

Substituindo (3.20) na expressão da magnetização Eq. (3.24), observamos que existem vizinhos comuns devido à presença da interação de segundos vizinhos. Desta maneira, levando em consideração este aspecto, podemos reescrever esta equação na forma

$$m_A = \langle \widehat{\Omega}_1 \cdot \widehat{\Omega}_2 \rangle F(x, y, z, w) \Big|_{x,y,z,w=0}, \quad (28)$$

sendo

$$\widehat{\Omega}_1 = e^K [(\sigma_a^A - \alpha \sigma_b^B - \alpha \sigma_c^B) D_x + (\sigma_h^A - \alpha \sigma_g^B - \alpha \sigma_i^B) D_w] \quad (29)$$

e

$$\begin{aligned}\widehat{\Omega}_2 &= e^{K[(\sigma_c^B + \sigma_n^B)(D_x - \alpha D_y)]} \cdot e^{K[(\sigma_d^B + \sigma_m^B)(D_y - \alpha D_x - \alpha D_z)]} \cdot \\ &e^{K[(\sigma_l^B + \sigma_e^B)(D_z - \alpha D_y - \alpha D_w)]} \cdot e^{K[(\sigma_f^B + \sigma_j^B)(D_w - \alpha D_z)]}.\end{aligned}\quad (30)$$

A Eq. (3.28) é exata, e nesta dissertação iremos aplicar a identidade de van der Waerden e aproximação de Zernike para podermos desacoplar o conjunto de equações de funções de correlação. Assim sendo, a equação de estado ficará

$$m_A = \Lambda(m_A, m_B) = \langle \widehat{\Omega}_1 \rangle \langle \widehat{\Omega}_2 \rangle F(x, y, z, w)|_{x,y,z,w=0}, \quad (31)$$

sendo

$$\begin{aligned}\langle \widehat{\Omega}_1 \rangle &= \left[\widehat{a}(D_x) + m_A \widehat{b}(D_x) \right] \left[\widehat{a}(\alpha D_x) - m_B \widehat{b}(\alpha D_x) \right]^2 \cdot \\ &\left[\widehat{a}(D_w) + m_A \widehat{b}(D_w) \right] \left[\widehat{a}(\alpha D_w) - m_B \widehat{b}(\alpha D_w) \right]^2\end{aligned}\quad (32)$$

e

$$\begin{aligned}\langle \widehat{\Omega}_2 \rangle &= \left[\widehat{a}(D_x - \alpha D_y) + m_B \widehat{b}(D_x - \alpha D_y) \right]^2 \cdot \left[\widehat{a}(D_w - \alpha D_z) + m_B \widehat{b}(D_w - \alpha D_z) \right]^2 \cdot \\ &\left[\widehat{a}(D_y - \alpha D_x - \alpha D_z) + m_B \widehat{b}(D_y - \alpha D_x - \alpha D_z) \right]^2 \cdot \\ &\left[\widehat{a}(D_z - \alpha D_y - \alpha D_w) + m_B \widehat{b}(D_z - \alpha D_y - \alpha D_w) \right]^2\end{aligned}\quad (33)$$

onde $\widehat{a}(KX) = \cosh(KX)$ e $\widehat{b}(KX) = \sinh(KX)$. A Eq. (3.31) foi resolvida analiticamente usando o *software* **MAPLE** para gerar todos os coeficientes, e as expressões são demasiadamente grandes para colocarmos neste trabalho. Vamos a seguir analisar cada fase separadamente:

i) Fase ferromagnética

As condições de contorno para determinar a equação de estado na fase F correspondem a $m_A = m_B = m$, e assim sendo da Eq. (3.31) teremos

$$m = \Phi_F(m) = \Lambda(m, m). \quad (34)$$

Resolvendo numericamente a Eq. (3.34) temos que para $\alpha < 0.5$ a magnetização é uma função monotonicamente decrescente com a temperatura, o que caracteriza uma transição de fase de 2ª ordem.

ii) Fase superantiferromagnética

As condições de contorno para determinar a equação de estado na fase SAF correspondem a $m_A = -m_B = m_s$, e assim sendo da Eq. (3.31) teremos

$$m_s = \Phi_{SAF}(m_s) = \Lambda(m_s, -m_s). \quad (35)$$

Fixando um dado valor de $\alpha > 0.5$ podemos resolver numericamente a Eq. (3.35) e determinar o parâmetro de ordem m_s como uma função de T . Observamos que para certos valores de α no intervalo $0.5 < \alpha < \alpha_t$, m_s apresenta um comportamento anômalo o que vai caracterizar uma transição de fase de primeira ordem. Neste caso, m_s não decai a zero continuamente como uma transição de fase de segunda ordem, que é observada para $\alpha > \alpha_t$. A descontinuidade do parâmetro de ordem na região onde temos transição de fase de primeira ordem, poderá ser determinada usando a construção de Maxwell (igualdade entre a energia livre entre as fases P e SAF), e para isto propomos o seguinte funcional para a energia livre:

$$\Psi(m_s) = \lambda_1(T, \alpha) + \lambda_2(T, \alpha) \left[\frac{m_s^2}{2} - \int_0^{m_s} \Phi_{SAF}(x) dx \right], \quad (36)$$

onde $\lambda_1(T, \alpha)$ e $\lambda_2(T, \alpha)$ são parâmetros arbitrários, e a Eq. (3.35) é obtida diretamente da Eq. (3.36) pelo processo de minimização. Obtivemos analiticamente a expressão para a energia livre $\Psi(m_s)$ que omitimos aqui por ser muito grande, e para determinar a descontinuidade do parâmetro de ordem resolvemos simultaneamente a Eq. (3.35) (equação de estado) e a expressão abaixo [$\Psi_{SAF}(m_s) = \Psi_P(m_s = 0)$]

$$m_s^2 = 2 \int_0^{m_s} \Phi_{SAF}(x) dx. \quad (37)$$

Rede cúbica simples

Para a rede cúbica simples, o estado laminar, que está esquematizado na figura 3-7, é caracterizado por apresentar planos com spins ordenados ferromagneticamente e alternados de sinais ao longo da direção perpendicular aos planos. Por simplicidade, vamos usar apenas aglomerado com um spin para desenvolver a técnica do operador diferencial. Localizando o spin central S_1 na figura 3-7, vemos que este apresenta seis primeiros vizinhos ($z_1 = 6$), dos quais quatro deles pertencem à mesma subrede e dois (planos adjacentes) deles estão em subrede oposta. Temos ainda doze segundos vizinhos ($z_2 = 12$), sendo que quatro pertencentes ao mesmo plano e portanto mesma subrede, e oito em planos adjacentes (subredes opostas).

Usando a notação para S_1^A como sendo o spin central e σ_i^μ ($i = 1 - 18$) os spins circundantes primeiros e segundos vizinhos, o Hamiltoniano (3.1) para este aglomerado de um spin será escrito como:

$$-\beta \mathcal{H}_1^A = \left[K \left(\sum_{i=1}^2 \sigma_i^A + \sum_{i=3}^6 \sigma_i^B \right) - \alpha K \left(\sum_{i=7}^{10} \sigma_i^A + \sum_{i=11}^{18} \sigma_i^B \right) \right] S_1^A. \quad (38)$$

Seguindo os mesmos procedimentos para obter a Eq. (3.513) na rede quadrada, conseguimos as novas variáveis x e y , correspondendo respectivamente a $\left[K \left(\sum_{i=1}^4 \sigma_i^A + \sum_{i=5}^6 \sigma_i^B \right) \right]$ e $\left[\alpha K \left(\sum_{i=7}^{10} \sigma_i^A + \sum_{i=11}^{18} \sigma_i^B \right) \right]$, ficaremos com

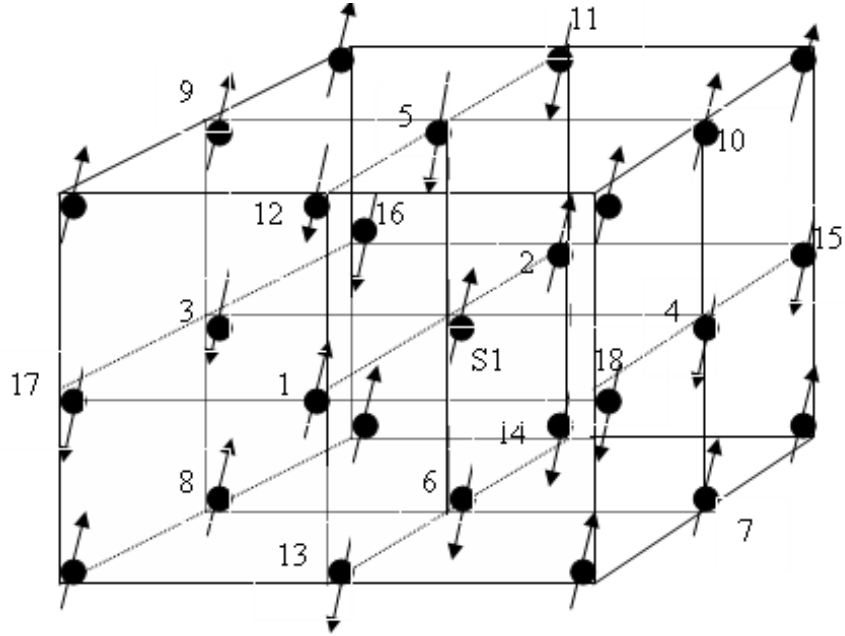


Figura 3.7: Estado fundamental da fase laminar para uma célula unitária de uma rede cúbica simples

$$m_A = \left\langle \exp K \left(\sum_{i=1}^4 \sigma_i^A + \sum_{i=5}^6 \sigma_i^B \right) D_x - \alpha K \left(\sum_{i=7}^{10} \sigma_i^A + \sum_{i=11}^{18} \sigma_i^B \right) D_y \right\rangle f(x, y)|_{x,y=0} \quad (39)$$

ou, reescrevendo com uso da identidade de van der Waerden:

$$m_A = \left\langle \prod_{i=1}^4 (a_x + \sigma_i^A b_x) \prod_{i=5}^6 (a_x + \sigma_i^B b_x) \prod_{i=7}^{10} (a_y - \sigma_i^A b_y) \prod_{i=11}^{18} (a_y - \sigma_i^B b_y) \right\rangle f(x, y)|_{x,y=0}. \quad (40)$$

Agora, aplicando a aproximação de Zernike, a Eq. (3.40) ficará

$$m_A = (a_x + m_A b_x)^4 (a_x + m_B b_x)^2 (a_y - m_A b_y)^4 (a_y - m_B b_y)^8 f(x, y)|_{x,y=0} \quad (41)$$

Da Eq. (3.41) podemos analisar o comportamento do parâmetro de ordem nas fases

F e SAF, basta usarmos as condições de contorno apropriadas. Vejamos a seguir cada fase isoladamente:

i) fase ferromagnética

Usando a condição de contorno representando os spins paralelamente em média sobre toda a rede cúbica $m_A = m_B = m$, da Eq. (3.41) obtemos a seguinte equação de estado:

$$m = (a_x + mb_x)^4 (a_x + mb_x)^2 (a_y - mb_y)^4 (a_y - mb_y)^8 f(x, y)|_{x,y=0} = \Phi_F(m). \quad (42)$$

De forma semelhante à Eq. (3.36), onde propomos um funcional para a energia livre, podemos ter uma expressão para a energia livre na fase F dada por

$$\Psi_F(m) = \lambda_{1F}(T, \alpha) + \lambda_{2F}(T, \alpha) \left[\frac{m^2}{2} - \int_0^m \Phi_F(x) dx \right], \quad (43)$$

que usando a igualdade entre as energias livres das fases P e F, obtemos da Eq. (3.43)

$$m^2 = 2 \int_0^m \Phi_F(x) dx. \quad (44)$$

Resolvendo simultaneamente as Eqs. (3.42) e (3.44) para o parâmetro de frustração α fixo, encontramos T_c e m . Para uma transição de fase de primeira ordem, obtemos um valor não nulo para m caracterizando assim a descontinuidade do parâmetro de ordem na temperatura de transição T_c . Para o caso da transição de fase de segunda ordem, $m = 0$, mostrando que a magnetização vai a zero continuamente na temperatura crítica T_c . Assim sendo, obtemos $T_c(\alpha)$ como uma função do parâmetro α .

ii) fase laminar

Nesta fase laminar (L) temos planos orientados ferromagneticamente e alternados

antiparalelamente, assim a condição de contorno para esta fase corresponde a $m_A = -m_B = m_s$, e, portanto, a equação de estado correspondente será

$$m_s = (a_x + m_s b_x)^4 (a_x - m_s b_x)^2 (a_y - m_s b_y)^4 (a_y + m_s b_y)^8 f(x, y)|_{x,y=0} = \Phi_L(m_s), \quad (45)$$

e o funcional de energia livre

$$\Psi_L(m_s) = \lambda_{1L}(T, \alpha) + \lambda_{2L}(T, \alpha) \left[\frac{m_s^2}{2} - \int_0^{m_s} \Phi_L(x) dx \right]. \quad (46)$$

Semelhantemente ao tratamento anterior para a fase F, da construção de Maxwell obteremos

$$m_s^2 = 2 \int_0^{m_s} \Phi_L(x) dx. \quad (47)$$

Temos a mesma linha de raciocínio dada anteriormente para na fase F para obtenção das linhas de transições de fase de primeira e segunda ordem.

3.3 Diagramas de fases e discussões

Nesta seção iremos analisar o diagrama de fase no plano $T - \alpha$ para o modelo (3.1) nas redes quadrada (2d) e cúbica simples (3d) usando a técnica do operador diferencial em aglomerados com $N = 1$ e $N = 4$ spins. Nosso referencial qualitativo para os diagramas de fases está baseado nos resultados das figuras 3-4 e 3-5, respectivamente para as redes 2d e 3d. Vale salientar que os resultados para a rede 2d (figura 3-4) são bastante conclusivos, em particular por se tratar de cálculos rigorosos de simulação de Monte Carlo. Por outro lado, para o caso da rede 3d (figura 3-5) não podemos dizer o mesmo, pois os cálculos foram baseados em métodos aproximativos (não conclusivos). Esta dissertação tem como principais objetivos analisar o aspecto do diagrama de fase da rede 3d e reproduzir a solução da rede 2d, considerada exata.

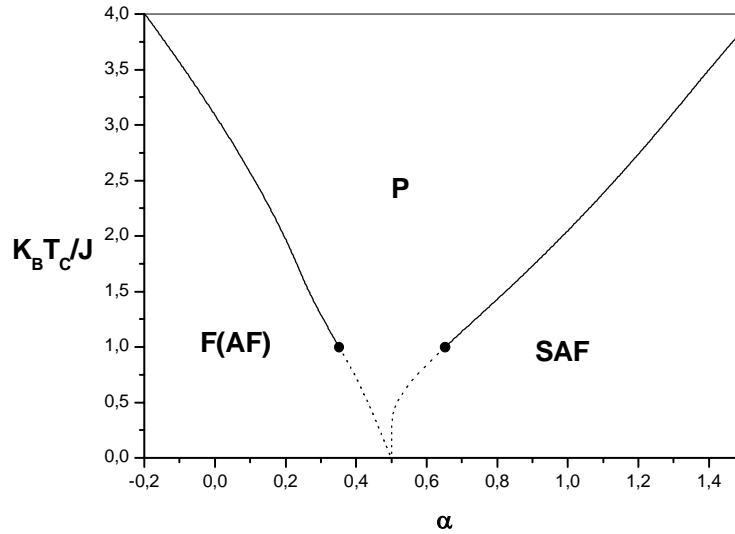


Figura 3.8: Diagrama de fase T versus α para o modelo de Ising com interações entre primeiros e segundos vizinhos numa rede quadrada obtida por EFT-1. Na região $0.5 < \alpha < 0.68$ a transição de fase é de primeira ordem, e o ponto tricrítico está marcada por um ponto em negrito. As linhas de transições de fases de primeira e segunda ordem estão representadas por linhas contínuas e pontilhadas, respectivamente. A transição de fase F-P apresenta erroneamente um ponto tricrítico.

Inicialmente, tratamos a rede quadrada e verificamos que usando teoria de campo efetivo em aglomerado com um spin (EFT-1) encontramos resultados espúrios para o diagrama de fase na fase F. Observamos erroneamente a existência de um ponto tricrítico, resultado este não prevista por simulação de Monte Carlo (figura 3-4) onde foi previsto apenas transição de segunda ordem (ponto tricrítico inexistente). Por outro lado, para a transição de fase entre SAF e P os resultados qualitativos estão em boa concordância, onde um ponto tricrítico foi previsto, com uma região de transição de fase de primeira ordem menor que a observada na figura 3-4. Na figura 3-8 apresentamos os resultados do diagrama de fase obtido por EFT-1.

Atribuímos o resultado espúrio do diagrama de fase F, obtido por EFT-1, na figura 3-8 ao efeito de tamanho finito do aglomerado utilizado. Estendemos inicialmente os cálculos

para aglomerado com dois spins, mas o resultado espúrio ainda persiste. Devido ao efeito da frustração na rede, o uso de um aglomerado com quatro spin na forma de um quadrado não é muito apropriado, principalmente por refletir no próprio aglomerado o problema da degenerescência implícita provocada pela frustração. Da nossa análise na rede quadrada a melhor topologia de aglomerado com quatro spins foi na forma linear (ver figura 3-7). Assim sendo, desenvolvemos a teoria de campo efetivo com quatro spins (EFT-4). Resolvendo numericamente as Eqs. (3.42), (3.44), (3.45) e (3.47) podemos obter todas as linhas de transições entre as fases F-P e SAF-P. Com este pequeno estudo de *finite size scaling*, foi possível eliminar o resultado espúrio da fase F, obtendo definitivamente o comportamento qualitativo correto do diagrama de fase em comparação com os resultados de simulação de Monte Carlo (figura 3-4). Em particular, a região da ocorrência da transição de fase de primeira ordem entre as fases SAF e P foi ampliada, mostrando claramente uma certa convergência lenta em direção à solução rigorosa de Monte Carlo. Na figura 3-9 apresentamos os resultados do diagrama de fase obtido por EFT-4 para o modelo (3.1) na rede quadrada.

Finalmente, a análise do diagrama de fase para a rede cúbica simples é bastante complexa do ponto de vista computacional, o que dificultou bastante uma análise de *finite size scaling*. Os nossos cálculos sempre foram feitos em duas etapas: na primeira usamos o *software* **MAPLE** para gerar todos os coeficientes e depois migramos para o programa de Newton-Raphson (FORTRAN) para calcular as raízes das expressões algébricas não lineares obtidas previamente no **MAPLE**. Para aglomerado de um spin (EFT-1) utilizado neste trabalho, geramos um programa FORTRAN de aproximadamente 250 mil linhas!, o que nos impediu tecnicamente (tempo de dissertação!) de analisar aglomerados maiores nesta dissertação. Nossos resultados do diagrama de fase obtido por EFT-1 para a rede cúbica simples estão apresentados na figura 3-10. O resultado da linha de transição de fase de primeira ordem para $\alpha > 1/4 = 0.25$ (fase laminar ou aqui denotada genericamente de SAF) está de acordo com o previsto na figura 3-5. Por outro lado, na fase F temos a presença de um ponto tricrítico que difere dos resultados da figura 3-5.

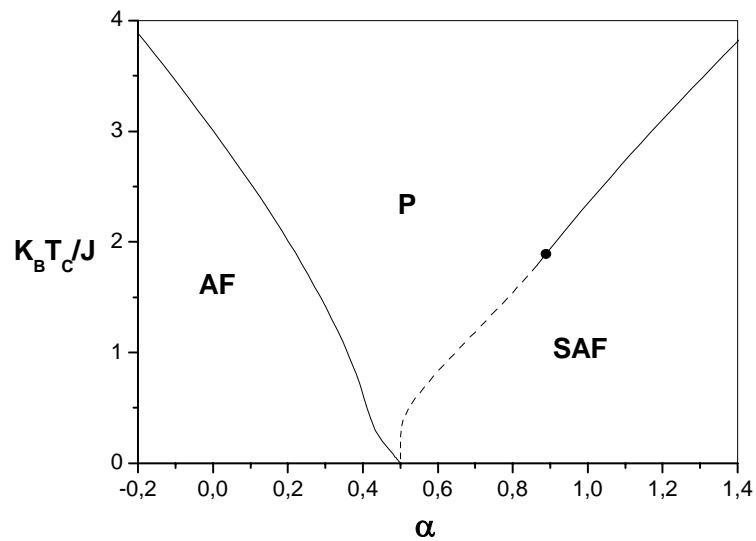


Figura 3.9: Diagrama de fase T versus α para o modelo de Ising com interações entre primeiros e segundos vizinhos numa rede quadrada obtida por EFT-4. Na região $0.5 < \alpha < 0.95$ a transição de fase é de primeira ordem, e o ponto tricrítico está marcada por um ponto em negrito. As linhas de transições de fases de primeira e segunda ordem estão representadas por linhas contínuas e pontilhadas, respectivamente.

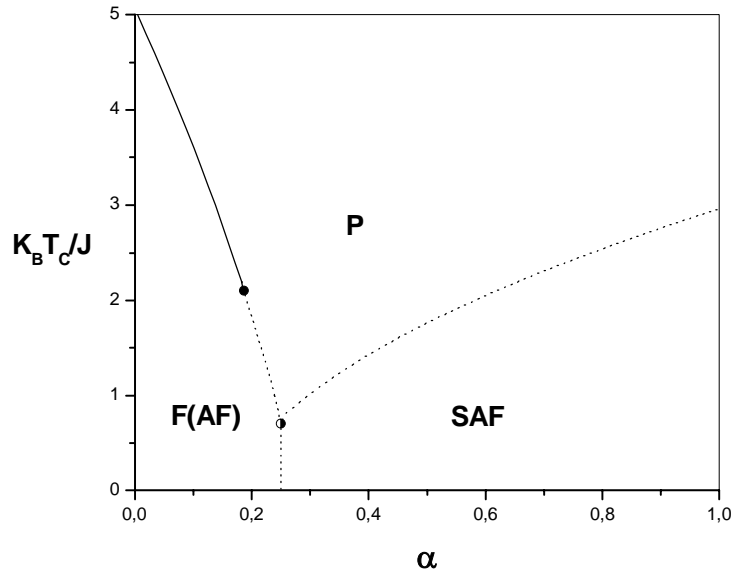


Figura 3.10: Diagrama de fase T versus α para o modelo de Ising com interações entre primeiros e segundos vizinhos numa rede cúbica simples obtida por EFT-1. O ponto tricrítico entre as fases F e P está marcado por um ponto em negrito. As linhas de transições de fases de primeira e segunda ordem estão representadas por linhas contínuas e pontilhadas, respectivamente.

A princípio, podemos associar esta discrepância do diagrama de fase na fase F ao efeito de tamanho, assim como foi analisado na rede 2d, mas os resultados da figura 3-5 não são considerados conclusivos, e, portanto, pode haver certa possibilidade do diagrama de fase obtido neste trabalho estar qualitativamente correto. Um argumento, um tanto simplificado, para acharmos que os nossos resultados qualitativos estão corretos, baseia-se no fato de que para grande dimensionalidade o efeito de tamanho finito é pequeno.

Capítulo IV

Conclusão e perspectivas futuras

Neste trabalho tivemos como principal objetivo estudar o diagrama de fase de dois modelos com interações competitivas usando teorias de campo efetivo. No capítulo 1, apresentamos uma breve panorama do estudo de comportamento multicrítico em modelos de spins e resultados experimentais de compostos magnéticos.

No capítulo 2, calculamos o diagrama de fase no plano $(T - H)$ para modelo de Ising de spin $1/2$ numa rede quadrada anisotrópica na presença de um campo longitudinal, que consiste de ligações ferromagnéticas ao longo do eixo x e antiferromagnética ao longo do eixo y . O estado fundamental deste modelo é conhecido exatamente: para $H < 2J_y$ o estado é superantiferromagnético e para $H > 2J_y$ temos um estado ferromagnético. Aplicamos as aproximações de Bethe-Peierls (BP) e teoria de campo efetivo em aglomerado com um spin (EFT-1), e verificamos que a primeira metodologia obtém um comportamento reentrante ao redor do valor $H = 2J_y$, em concordância com resultados rigorosos[97]. EFT-1 obteve uma temperatura crítica monotonicamente decrescente com o aumento do campo que se anula no campo $H = 2J_y$. Estudos preliminares em outros tipos de sistemas de Ising[28] indicam um comportamento correto de diagramas de fases quando usamos uma análise de *finite size scaling*. Assim sendo, esperamos que aumentando o tamanho do aglomerado ou mesmo usando o esquema de grupo de renormalização na aproximação de campo efetivo (EFRG) o comportamento reentrante no

diagrama de fase seja obtido através da técnica do operador diferencial, em concordância com os nossos resultados da aproximação de BP e solução rigorosa. Estes resultados foram aceitos recentemente para publicação no **Physical Review B** (ver apêndice).

No capítulo 3, o diagrama de fase no plano $(T - \alpha)$ do modelo de Ising com interação entre primeiros e segundos vizinhos nas redes quadrada e cúbica simples foi obtido através da técnica do operador diferencial em aglomerados finitos. Este modelo apresenta duas fases ordenadas, a ferromagnética (ou equivalentemente antiferromagnética) e a superantiferromagnética (ou laminar para rede 3d) dependendo do parâmetro de frustração α . Existe um valor característico $\alpha_c = \frac{z_1}{2z_2}$, tal que para $\alpha > \alpha_c$ e $\alpha < \alpha_c$ o estado fundamental será SAF e F, respectivamente. O efeito térmico induz, dependendo do valor de α e da dimensão d , comportamento multicrítico no diagrama de fase. No caso da rede 2d obtivemos preliminarmente um resultado contraditório usando EFT-1, que foi um ponto tricrítico na fase F. Quando usamos EFT-4 recuperamos o diagrama de fase qualitativo correto obtido por simulação de Monte Carlo. A fase SAF apresenta um ponto tricrítico ligeiramente inferior ao resultado considerado exato. Os cálculos nesta dissertação sempre fizeram uso do *software* **MAPLE** para gerar as expressões analíticas (equação de estado e funcional de energia livre), que depois foram resolvidas numericamente através do algoritmo de Newton-Raphson para calcular as raízes de sistemas de equações não lineares. Para o caso da rede 3d, usando apenas EFT-1, geramos um programa computacional de aproximadamente 250 mil linhas, o que seriamente nos impossibilitou de usar *finite size scaling*. O diagrama de fase obtido por EFT-1 para a rede cúbica simples, na fase F, é diferente do obtido na Ref.105, onde foi previsto neste trabalho um ponto tricrítico. No caso da fase laminar (ou SAF) obtivemos um linha de primeira ordem.

Os formalismos aqui desenvolvidos podem ser facilmente aplicados em outros sistemas similares; vejamos alguns exemplos:

- i) estudar o efeito do campo transversal no modelo de Ising na rede quadrada anisotrópica;
- ii) analisar o efeito de diluição no modelo de Ising na rede quadrada anisotrópica;
- iii) generalizar os cálculos do capítulo 2 para tratar uma rede cúbica 3d anisotrópica;

- iv) estudar a transição de fase quântica no modelo do capítulo 3 na presença de um campo transversal. Este estudo está sendo feito por Viana na sua tese de doutoramento;
- v) aplicar finite size scaling no modelo do capítulo 3 na rede cúbica simples; etc.

Na nossa opinião, no que se trata de um trabalho de dissertação, achamos ter alcançado o objetivo.

Referências

- [1] P. Weiss, *J. Phys. Radium* 4, 661 (1907).
- [2] S. J. Barnett, *Proc. Am. Acad. Arts and Sci.* 75, 109 (1944), G. G. Scott, *Phys. Rev.* 82, 542 (1951), *Ibid* 87, 697 (1952).
- [3] L. de Jongh e A. R. Miedema, *Adv. Phys.* 23, 1(1974).
- [4] P. S. Allen, *Contemp. Phys.* 17, 387 (1976).
- [5] A. E. Bell e A. D. Caplin, *Contemp. Phys.* 16, 375 (1975).
- [6] R. Pauthenit, *Ann. Physique* 3, 424 (1958).
- [7] M. A. Lasher, J. van der Broek e C. J. Garter, *Physica* 24, 1061, 1076 (1958).
- [8] L. Néel, *Ann. Physique* 18, 5 (1932).
- [9] N. F. Oliveira, A. Paduan-Filho e S. R. Salinas, *AIP Conference Proceedings* 29, 463 (1975).
- [10] M. E. Fisher e D. R. Nelson, *Phys. Rev. Lett.* 32, 1350 (1974).
- [11] E. Stryjewski e N. Giordano, *Adv. Phys.* 26, 487 (1977).
- [12] R. B. Griffiths, *Phys. Rev. B* 7, 545 (1973).
- [13] D. P. Landau, B. E. Keen, B. Schneider, e W. P. Wolf, *Phys. Rev. B* 3, 2310 (1970)

- [14] D. C. Malttis, *The Theory of Magnetism I* (Springer-Verlag, New York, 1985).
- [15] W. K. Heisenberg, *Z. Phys.* 49, 619 (1928).
- [16] J. G. Ramos, *II Simpósio Brasileiro de Física Teórica*, Rio de Janeiro, 1969.
- [17] Y. Frenkel, *Z. Phys.* 49, 619 (1928).
- [18] Y. Dorfman, *Nature* 119, 353 (1928).
- [19] P. A. M. Dirac, *The Principles of quantum mechanics*, (Clarendon Press, Oxford, 1958).
- [20] L. J. de Jongh e A.R.Miedema, *Experiments on simple magnetic model systems* (Taylor and Francis Ltd., London, 1974), Pag.133.
- [21] E. J. Samuelsen, et al., *Phys. Rev. B* 3, 157 (1971).
- [22] K. Yosida, *Theory of Magnetism* (Springer-Verlag, New York, 1996), Pag.125.
- [23] N. D. Mermin e H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* 22, 1133 (1966).
- [24] J. Ricardo de Sousa e N. S. Branco, *Phys. Rev. B* 72, 13442 (2005).
- [25] J. H. van Vleck, *J.Phys. Rad.* 12, 262 (1931); *Phys. Rev.* 52, 1178 (1937).
- [26] T. Moryia, *Magnetism*, Ed. G. T. Rado e H. Suhl, (Academic Press, 1963) vol 1.
- [27] R. J. Baxter, *Exactly solved models in statistical mechanics* (Academic Press, New York, 1982)
- [28] Minos A. Neto e J. Ricardo de Sousa, *Phys. Rev. B* 70, 22443 (2004).
- [29] J. Kohlepp, H. J. Elmers, S. Cordes, e V. Gradmann, *Phys. Rev. B* 45, 12287 (1992).

- [30] H. J. Elmers, J. Hauschild, e V. Gradmann, *J. Magn. Magn. Matter.* 140 – 144, 1559 (1995); 140 – 144, 671 (1995); C. H. Back, Ch. Würsch, A. Vaterlaus, V. Ramsperger, V. Maier, e D. Pescia, *Nature* 378, 597 (1995).
- [31] C. Rau, P. Mahavadi, e M. Lu, *J. Appl. Phys.* 73, 6757 (1993).
- [32] Z. Q. Qiu, J. Pearson, e S. D. Bader, *Phys. Rev. B* 49, 8797 (1994).
- [33] M. C. Hanf, C. Krembel, D. Bolmont, e G. Gewinner, *Phys. Rev. B* 68, 144419 (2003).
- [34] L. Onsager, *Phys. Rev.* 65, 117 (1944).
- [35] T. Matsubara e H. Matsuda, *Progr. Theor. Phys.* 16, 416 (1956).
- [36] E. H. Lieb, *Phys. Rev. Lett.* 18, 1046 (1967); ibi 19, 108 (1967).
- [37] J. M. Kosterlitz e D. J. Thouless, *J. Phys. C* 6, 1181 (1973). Ver também o trabalho de revisão D. R. Nelson, *Phase transitions and critical phenomena*, ed. C. Domb e J. L. Lebowitz, vol. 7, (Academic Press, New York, 1983).
- [38] A. N. Berker e D. R. Nelson, *Phys. Rev. B* 19, 2488 (1979).
- [39] H. Bethe, *Z. Phys.* 71, 205 (1931).
- [40] H. Hulthén, *Arkiv. Nat. Astron. Fys.* 26A, 11 (1938).
- [41] P. Walker, *Phys. Rev.* 116, 1089 (1959).
- [42] G. Shirane, Y. Endoh, R. J. Birgeneau, M. A. Kastner, Y. Hidaka, M. Oda, M. Suzuki, e T. Murakami, *Phys. Rev. Lett.* 59, 1613 (1987).
- [43] Y. Endoh, et.al., *Phys. Rev. B* 37, 7443 (1988).
- [44] H. E. Stanley, *Introduction to phase transitions and critical phenomena* (1971), cap.4.

- [45] Nelson Moreno Salazar, *Propriedades magnéticas intrínsecas e comportamento crítico da liga metálica $Fe_{1-x}Al_x$* , dissertação de mestrado, UFPE (1994).
- [46] D. L. Connelly, J. S. Loomis e D. E. Mapother, *Phys. Rev. B* 3, 924 (1971).
- [47] C. H. Chang, *Phys. Rev.* 88, 1422 (1952).
- [48] T. H. Berlin e M. Kac, *Phys. Rev.* 86, 821 (1952). Ver também G. A. Baker Jr., *Quantitative Theory of critical Phenomena* (Academic Press, New York, 1990).
- [49] J. D. Gunon e M. J. Buckingham, *Phys. Rev.* 116, 152 (1968).
- [50] V. L. Ginzburg, *Sov. Phys. Solid State* 2, 1824 (1960). Ver também J. Als-Nielsen e R. J. Birgeneau, *Am. J. of Phys.* 45, 554 (1977).
- [51] J. Ricardo de Sousa, *Phys. Rev. Lett. A* (1997).
- [52] J. M. J. van Leeuwen, *Phys. Rev. Lett.* 34, 1056 (1975)
- [53] M. P. Nightngale, *Phys. Lett. A* 59, 486 (1977).
- [54] R. H. Swendsen e S. Krinsky, *Phys. Rev. Lett.* 43, 177 (1979).
- [55] M. N. Barber, *J. Phys. A: Math. Gen.* 12, 679 (1979).
- [56] J. Oitamaa, *J. Phys. A: Math. Gen.* 14, 1159 (1981).
- [57] V. L. Ginzburg e L. P. Pitaevskii, *Sov. Phys. JETP* 34, 858 (1958)
- [58] B. D. Josephson, *Phys. Lett.* 21, 608 (1966).
- [59] B. Widom, *J. Chem. Phys.* 43, 3892 (1965); *ibid* 43, 3898 (1965).
- [60] C. Domb e D. L. Hunter, *Proc. Phys. Soc.* 86, 1147 (1965).
- [61] J. T. Ho e J. D. Lister, *Phys. Rev. Lett.* 22, 603 (1969).
- [62] L. P. Kadanoff, *Physics* 2, 263 (1966), *Ann. Phys.* 100, 559 (1976).

- [63] Minos A. Neto, Rosana A. dos Anjos e J. Ricardo de Sousa, *Phys. Rev. B* 73, 1 (2006) a ser publicado.
- [64] J. Smart, *Effective Field Theories of Magnetism* (Sounders, Philadelphia, 1996).
- [65] K. K. Zhuravlev, *Phys. Rev. E* 72, 056104 (2005).
- [66] T. Oguchi, *Progr. Theor. Phys.* 13, 148 (1955). Ver também J. H. van Vleck, *Phys. Rev.* 52, 1178 (1937).
- [67] M. Henkel e G. Schütz, *J. Phys. A* 21, 2617 (1988).
- [68] M. Suzuki e M. Katori, *J. Phys. Soc. Jpn.* 55, 1 (1986).
- [69] M. Suzuki, *J. Phys. Soc. Jpn.* 55, 4205 (1986). Ver também, *Cohrent Anomaly Method: Mean Field, Fluctuations and Systematics* (World Scientific, London, 1995).
- [70] H. A. Bethe, *Proc. Roy. Soc. London Ser. A* 150, 552 (1935).
- [71] R. E. Peierls, *Proc. Cambridge Philos. Soc.* 32, 477 (1936).
- [72] P. R. Weiss, *Phys. Rev.* 74, 1493 (1949).
- [73] R. K. Pathria, *Statistical Mechanics*, 2ª edição (Pergamon, New York, 2000), Sec. 11.6, Pag. 328.
- [74] M. Kurata, R. Kikuchi e T. Watari, *J. Chem. Phys.* 21, 434 (1953).
- [75] C. Domb, *Adv. Phys.* 9, 145 (1960).
- [76] G. S. Rushbrooke e H. I. Scoins, *Proc. Roy. Soc. A* 230, 74 (1955).
- [77] G. M. Wysin e J. Kaplan, *Phys. Rev. E* 61, 6399 (2000).
- [78] G. Horwitz e H. B. Callen, *Phys. Rev.* 124, 1757 (1961); B. Strieb, H. B. Callen e G. Horwitz, *Phys. Rev. A* 136, 1675 (1964).

- [79] H. B. Callen, *Phys. Lett.* 4, 161 (1963).
- [80] N. Suzuki, *Phys. Lett* 19, 267 (1965).
- [81] R. A. Tahir-Kheli, *Phys. Rev.* 188, 1142 (1969); G. B. Taggart e R. A. Tahir-Kheli, *Physica* 68, 93 (1973).
- [82] N. Matsudaira, *J. Phys. Soc. Jpn.* 35, 1493 (1973).
- [83] B. Frank e O. Mitran, *J. Phys. C* 10, 2641 (1977); 11, 2087 (1978).
- [84] Y. Tanaka e N. Uryû, *Phys. Rev.* 21, 1994 (1980).
- [85] H. I. Zhang e A. K. Rajagopal, *J. Phys. C* 12, L 277 (1979); H. I. Zhang e B. I. Min, *J. Phys. C* 14, 1769 (1981); B. I. Min e H. I. Zhang, *J. Phys. C* 14, 1779 (1981); H. I. Zhang e D. Kim, *Phys. Rev. B* 21, 4173 (1980).
- [86] R. Honmura e T. Kaneyoshi, *J. Phys. C* 12, 3970 (1979).
- [87] F. C. Sá Barreto e I. P. Fittipald, *Physica A* 129, 360 (1985).
- [88] T. Balcerzak, *J. Magn. Magn. Matter.* 246, 213 (2002).
- [89] F. C. Sá Barreto e I. P. Fittipald, *Rev. Bras. Física* 11, 745 (1981).
- [90] R. L. Dobrushim, *Theor. Prob. Appl.* 13, 197 (1969); O. E. Lanford e D. Ruelle, *Comm. Math. Phys.* 13, 194 (1969).
- [91] G. Parisi, *Statistical Field Theory* (Addison - Wesley, New York, 1988).
- [92] D. P. Landau e K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics* (Cambridge University Press, 2000)
- [93] Antônio Fernandes Siqueira, *Transições de fase e propriedades termodinâmicas de sistema de Ising anisotrópico exibindo interações de alta ordem*, Tese de doutorado, UFPE (1986).

- [94] A. Bobak e M. Jascur, *Phys.Stat. Sol. Sol. B* **135**, K9 (1986).
- [95] S. Katsura e S. Fijimori, *J. Phys. C* **7**, 2506 (1974).
- [96] J. Chalupa e M. R. Giri, *Solid State Commun.* **29**, 313 (1979).
- [97] Xiang-Zhi Wang e Jain Sam Kim, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 413 (1997); *Phys. Rev. E* **56**, 2793 (1997).
- [98] H. Kitatani, S. Miyshita e M. Suzuki, *J. Phys. Soc. Jpn.* **55**, 231 (1968); ibid *Phys. Lett. A* **108**, 45 (1985); H. Nakano, *Prog. Theor. Phys.* **40**, 231 (1968); I. Syozi, *Prog. Theor. Phys.* **39**, 1367 (1968); S. Miyazima, *Prog. Theor. Phys.* **40**, 462 (1968); T. Morita, *Physica A* **98**, 566 (1979).
- [99] T. Kaneyoshi, I. P. Fittipaldi e T. Manbe, *Phys. Rev. B* **24**, 481 (1981).
- [100] J. L. Morán-López, F. Aguilera-Graja e J. M. Sanchez, *Phys. Rev. B* **48**, 5 (1993).
- [101] N. M. Emílio Cirillo e G. Gonnella e A. Pelizzola, *Phys Rev E* **55**, 1 (1997).
- [102] R. H. Swedensen e S. Krinsky, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 177 (1979).
- [103] H. W. J. Böte, A. Compagner, e H. Hoogland, *Physica A* **141**, 375 (1987).
- [104] A. Pelizzola, *Phys. Rev. E* **49**, R2503 (1994).

Livros Grátis

(<http://www.livrosgratis.com.br>)

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)
[Baixar livros de Matemática](#)
[Baixar livros de Medicina](#)
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)
[Baixar livros de Meteorologia](#)
[Baixar Monografias e TCC](#)
[Baixar livros Multidisciplinar](#)
[Baixar livros de Música](#)
[Baixar livros de Psicologia](#)
[Baixar livros de Química](#)
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)
[Baixar livros de Serviço Social](#)
[Baixar livros de Sociologia](#)
[Baixar livros de Teologia](#)
[Baixar livros de Trabalho](#)
[Baixar livros de Turismo](#)