

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA TERRA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

MODELO DE ISING DE SPINS MISTOS COM INTERAÇÃO
ALEATÓRIA DE CAMPO CRISTALINO

JOÃO MARCOS COELHO

ORIENTADOR: PROF. Dr. ALBERTO S. DE ARRUDA

Cuiabá - MT, Agosto de 2007

Livros Grátis

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

Milhares de livros grátis para download.

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA TERRA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

MODELO DE ISING DE SPINS MISTOS COM INTERAÇÃO
ALEATÓRIA DE CAMPO CRISTALINO

JOÃO MARCOS COELHO

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Mato Grosso, como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Física

ORIENTADOR: PROF. Dr. ALBERTO S. DE ARRUDA

Cuiabá - MT, Agosto de 2007

*Dedico com todo amor a minha mãe Balduina, a minha esposa Janaina,
filhas Ester e Ana Julia, e sobrinha Rubia*

Agradecimentos

Gostaria agradecer ao Prof. Dr. Alberto Sebastião de Arruda, pela orientação, pelas sugestões e acompanhamento desta dissertação. Além de sua paciência e dedicação, sem as quais este trabalho não lograria êxito.

Agradeço também aos demais professores do programa do Mestrado, que souberam conduzir de forma brilhante e eficiente as disciplinas, de diversas formas, que nos auxiliaram durante o Curso de Mestrado. As suas críticas, sugestões, foram imprescindíveis para o nosso crescimento acadêmico e cultural.

Agradeço a toda à Coordenação do Curso e do Departamento, bem como a Secretaria do Curso que sempre nos apoiaram e realizaram seu trabalho com dedicação.

A todos os colegas e companheiros do mestrado, os meus sinceros agradecimentos pela amizade e a oportunidade de realizarmos trabalhos em grupo, vislumbrando novos horizontes para o engrandecimento do conhecimento, sem os quais confesso que não seria possível.

Aos amigos, em especial Hiram, França (Gasparzinho), Adriano, Paulo Moreira (Paulo Caixão), Itacy (Vermelhinho), Walter, Rosely, Devair, Dorilson (popular Mãozinha), André, Sidney, Elizângela, Maria Jannaira, Jorge (Hulk), Sandro Silva e Costa e Romildo, agradeço pela atenção, amizade e sinceridade em todos os momentos.

À minha família, sou grato pelo amor, dedicação e confiança nos projetos aos quais tenho me dedicado. Ao meu pai, in memoriam do qual herdei o nome, João Martins Coelho, meu exemplo maior de conduta, coragem e determinação e amor; minha mãe, Balduina, a guerreira, aquela que vence, a qual me ensinou as mais importantes lições, o respeito a família e ao próximo; a minha irmã, Nara Rúbia Coelho (in memoriam), por tudo que você me ensinou e por sua filha maravilhosa a Rúbia que nos trouxe e traz tantas alegrias.

À minha esposa, Janaina, agradeço o companheirismo, a paciência e o amor, além das duas filhas maravilhosas que nos temos, Ester e Ana Júlia, que fazem acreditar em um presente e futuro melhor.

Sumário

Agradecimentos	i
Lista de Figuras	iv
Resumo	v
Abstract	vi
1 Introdução	1
1.1 Magnetismo	1
1.1.1 Ferromagnetismo	3
1.1.2 Antiferromagnetismo	4
1.1.3 Ferrimagnetismo	4
1.2 Diamagnetismo	5
1.3 Paramagnetismo	6
2 Transições de Fases e Fenômenos Críticos de Sistemas Magnéticos	7
2.1 Introdução	7
2.2 Sistemas Magnéticos não Interagentes	9
2.2.1 A hipótese do Campo Molecular	13
2.2.2 Expoentes Críticos para a Teoria de Campo Médio	15
2.2.3 O Expoente β da Magnetização	17
2.2.4 Expoente da Isoterma Crítica δ	18
2.2.5 Expoente do Calor Específico α e α'	18
2.2.6 Susceptibilidade - Expoente γ e γ'	19
2.2.7 Os Expoentes Δ_l e Δ'_l	20

2.3	O Modelo de Ising	22
2.3.1	Solução Exata do Modelo de Ising em Uma Dimensão em Campo Magnético Nulo	23
2.3.2	Solução Exata do Modelo de Ising em uma Dimensão em um campo Magnético	24
2.3.3	Solução Exata do Modelo de Ising em Duas Dimensões em um campo Magnético Nulo	29
2.3.4	Solução Aproximada do modelo de Ising em 3 dimensões	30
2.3.5	Desigualdade de Bogoliubov	31
2.3.6	Aproximação de Campo Médio Para o Modelo de Ising	32
2.3.7	Expansão de Landau	35
3	Modelo Ising de Spins Mistos com Interação Aleatória de Campo Cristalino via Método Variacional de Peierls-Bogoliubov	37
3.1	Introdução	37
3.2	O modelo e a aproximação de campo médio	39
3.3	Expansão de Landau	42
3.4	Cálculo das Susceptibilidades	45
4	Resultados e Conclusões	46
4.1	Introdução	46
4.2	Diagrama de Fase	48
4.2.1	Diagrama de Fase para o caso $p = 0$	48
4.2.2	Diagrama de Fase para o caso $0 < p < 0.1$	50
4.2.3	Diagrama de Fase para o caso $0.1 \leq p < 1$	52
4.3	Propriedades Termodinâmicas	53
4.3.1	Comportamento Termodinâmico da Magnetização na região de Transição de Fase de Segunda Ordem	53
4.3.2	Comportamento Termodinâmico da Magnetização na região de Transição de Fase de Primeira Ordem	56
4.3.3	Susceptibilidade Magnética	57

4.4	Conclusões	59
4.5	Perspectivas	60
	Referências Bibliográficas	62

Lista de Figuras

2.1	<i>Dependência da magnetização reduzida $\sigma \equiv M/M_o \equiv M(T, H)/M(0, 0)$ sob $\bar{\mu}HS/KT$ para um sistema magnético no limite de não interação. As curvas são aquelas das funções de Brillouin $B_S(Sx)$, a qual reduz a tangente hiperbólica e a função de Langevin no limite $S = 1/2$ e $S = \infty$ respectivamente.</i>	11
2.2	Rede linear com N sítios com energia de interação J_i e spin S . O índice i indica que a energia pode ter várias magnitudes.	24
3.1	<i>Modelo de um Ferrimagneto em uma rede bidimensional dividida duas sub-redes interpenetrantes equivalentes A (circulo cheio preto) e B(circulo vazio), onde os primeiros vizinhos estão localizados em sub-rede diferentes, e os segundos vizinhos estão na mesma sub-rede. A energia de interação entre os primeiros vizinhos é $-J$ e a interação entre os segundos vizinhos é J'.</i>	38
3.2	Rede bidimensional dividida em duas sub-redes interpenetrantes equivalentes a (circulo cheio preto) e B(circulo vazio), onde os primeiros vizinhos estão localizados em sub-rede diferentes, e os segundos vizinhos estão na mesma sub-rede. A energia de interação entre os primeiros vizinhos é J .	40
4.1	<i>Dependência da anisotropia em relação a temperatura para o caso puro, $p = 0$. A linha cheia representa a linha de transição de fase de segunda ordem, e a linha pontilhada representa a linha de primeira ordem. O ponto escuro (P_T) representa o ponto tricrítico.</i>	49

4.2	<i>Dependência da anisotropia em relação a temperatura para $p=0.04$. A linha cheia representa a transição de fase de segunda ordem, a linha pontilhada representa linha de primeira ordem. Os pontos (P_t) representa ponto tricrítico estável, (P_{ce}) é o ponto crítico final e (P_{cs}) é o ponto crítico simples.</i>	51
4.3	<i>Dependência da anisotropia em relação a temperatura para $p=0.1$. A linha cheia representa a transição de fase de segunda ordem.</i>	52
4.4	<i>Dependência da magnetização das sub-redes M_1, M_2 e a magnetização total M_t em relação a temperatura para o caso puro, $p = 0$ e $D = 0$. . . .</i>	54
4.5	<i>Dependência da magnetização das sub-redes M_1, M_2 e a magnetização total M_t em relação a temperatura para o caso puro $p = 0$ e $D = 0.01$. . . .</i>	55
4.6	<i>Dependência da magnetização das sub-redes M_1, M_2 e a magnetização total M_t em relação a temperatura para o caso puro, $p = 0$ e $D = 0.5$. . . .</i>	56
4.7	<i>Dependência das magnetizações das sub-redes M_1, M_2 e a magnetização total M_t em relação a temperatura para o caso puro, $p = 0$ e $D = 1.9$. . . .</i>	57
4.8	<i>Dependência Susceptibilidade em relação a temperatura para o caso puro, $p = 0$ e indicando uma temperatura crítica de $T_c = 1.6322$.</i>	58
4.9	<i>Dependência Susceptibilidade em relação a temperatura para o caso puro, $p = 0$ e indicando uma temperatura crítica de $T_c = 1.5299$.</i>	59

Resumo

Estudamos o diagrama de fase e o comportamento termodinâmico do modelo de Ising de Spin Misto ($\sigma = \pm 1/2$) e ($S = \pm 1, 0$) com anisotropia aleatória de campo cristalino através da teoria de campo médio derivado do princípio variacional de Bogoliubov. O diagrama de fase exhibe comportamento tricrítico e transição de fase entre duas fases ordenadas. O comportamento termodinâmico das magnetizações de sub-redes e a susceptibilidade magnética refletem o comportamento do diagrama de fase.

Abstract

We study the phase diagram and the thermodynamic behavior of the Ising Model Mixing Spin with random anisotropy of crystalline field, through of the mean field theory derived from the variational principle of Bogoliubov. The phase diagram shows tricritical behavior and phase transition phases ordered. The thermodynamic behavior of the magnetizations of sub-nets and the magnetic susceptibility reflects the behavior of the phase diagram.

Capítulo 1

Introdução

1.1 Magnetismo

A utilização de tecnologias altamente eficazes, nas atividades cotidianas tornou-se uma necessidade da vida moderna. Na medicina, desde administração de medicamentos às cirurgias extremamente delicadas e complexas só são possíveis devido a essas tecnologias. O uso de cartões magnéticos, para consulta de saldo/extratos bancários, saques, transferências, compras a débito, a crédito e pagamentos de faturas de energia, de telefone, de despesas em lojas, Shoppings, postos de gasolina, livrarias, etc. Na segurança eletrônica das residências, escritórios, lojas de departamento, fábricas, instituições de um modo geral. Estes recursos, só foram de fatos obtidos, a partir do conhecimento e do entendimento das características magnéticas e elétricas de diversos materiais.

A muito tempo as propriedades magnéticas da matéria vêm intrigando o homem, pois a referências a estes fenômenos datam a mais de 2800 anos. Têm-se notícias de que os primeiros ímãs foram encontrados na Ásia, em algum lugar da Grécia antiga, região esta chamada Magnésia, daí a origem do termo magnetismo, usado para o estudo de fenômenos e suas relações com as propriedades magnéticas.

O magnetismo foi um tema que foi citado pela Filosofia Grega a cerca de 800 a.C. e mantido sob esta óptica por aproximadamente vinte e três séculos. O grande filósofo grego Thales de Mileto, acreditava que a magnetita possuía alma, portanto tendo vontade própria. Outra linha de pensamento, os mecanicistas ou atomistas, atribuíam as

propriedades da magnetita a existência de umidade no ferro, e que a magnetita com sua *secura* se alimentava. Foi observado por Platão e Lucrecius, que além dos materiais magnéticos se atraírem, eles também poderiam se repelir. Esta explicação ainda aguardava a elaboração do conceito de pólo magnético, para uma melhor explicação dos fenômenos de atração e de repulsão(1). No século III a.C., na china, os ímãs eram usados por "adivinhadores". Os "adivinhos", ficaram convencidos de que se tratavam de objetos mágicos, inicialmente foram construídos objetos em forma de colher. Com o passar do tempo o uso desses objetos deixaram de ser exclusividade dos mágicos.

A substituição da colher pela agulha magnética, possibilitou sua utilização na orientação dos navios chineses cem anos antes de sua adoção, pelos países ocidentais. Sabe-se atualmente que a magnetita chamada de "pedra amante" pelos chineses na antiguidade, expressão essa que originou a palavra ímã (do francês, *aimant = amante*) é um composto de ferro (Fe_2O_3), sendo um ímã natural. Um importante estudioso do magnetismo, Willian Gilbert (1544-1063), em 1600 apresentou em seu livro *De Magnete*, uma profunda discussão sobre: o comportamento da bússola, a descoberta de que diversos corpos ficam eletrizados ao serem atritados com âmbar, a confirmação de que polos de mesmo nome se repelem e de nomes opostos se atraem, a descoberta de que o ímã ao ser aquecido perde suas propriedades magnéticas. Gilbert foi o primeiro a afirmar que a terra é um ímã, sendo assim possui um campo magnético próprio(1).

Até o ano de 1820, o pensamento vigente era de que os fenômenos elétricos e magnéticos eram totalmente independentes. Porém neste ano um físico dinamarquês H. Oersted, professor da Universidade de Copenhague, realizou uma experiência que revolucionou essas idéias. Ele fez passar uma corrente elétrica por um fio, a qual originou um efeito magnético, mudando a orientação da agulha de um bússola. Mais tarde Ampère formulou uma lei que relacionava o campo magnético gerado com a intensidade de corrente no fio. Já Faraday e Henry demonstraram que um campo magnético variável induzia uma corrente elétrica em um fio. Já no século XX, o aparecimento da mecânica quântica possibilitou o avanço no entendimento do magnetismo de diversos materiais, gerando toda essa revolução tecnológica que vivenciamos em nosso dia a dia. Os principais fenômenos magnéticos apresentados pelos diversos materiais são chamados de diamagnetismo,

paramagnetismo,ferromagnetismo, antiferromagnetismo e ferrimagnetismo.

1.1.1 Ferromagnetismo

Ocorre em materiais cujos átomos possuem momentos de dipolos magnético permanentes. Isso também ocorre nos materiais paramagnéticos, porém nos ferromagnéticos existe uma forte interação entre os momentos de dipolo atômicos vizinhos que os mantêm alinhados, mesmo quando o campo magnético externo é removido. Os materiais que são ferromagnéticos em temperatura ambiente são o ferro, o níquel e o cobalto. Há também elementos ferromagnéticos menos conhecidos, alguns exibindo o comportamento ferromagnéticos somente à temperaturas muito abaixo da temperatura ambiente, são os elementos das terras raras, por exemplo, o gadolínio, o diprócio. Compostos ou ligas podem ser também ferromagnéticas, por exemplo CrO_2 , componente básico da fita magnética, é ferromagnético, embora nem o cromo, nem o oxigênio seja ferromagnético na temperatura ambiente. Podemos diminuir a efetividade do acoplamento entre vizinhos que origina ferromagnetismo, aumentando a temperatura do material. A temperatura em que um material ferromagnético passa a ser paramagnético é chamada de temperatura de Curie. A temperatura de Curie para o ferro é de 770 C . acima da qual ele é paramagnético. Já para o gadolínio a temperatura de Curie é 16°C , à temperatura ambiente portanto o gadolínio é paramagnético. A aproximação de um material ferromagnético da saturação se dá através de um mecanismo diferente do que ocorre com um material paramagnético. Um material como o ferro é composto de um grande número de átomos dispostos em rede cristalina tridimensional, a qual é dividida em diversas regiões chamadas de domínios. No interior de cada domínio magnético, (regiões de tamanho de aproximadamente $0,01\text{ mm}$) o acoplamento dos dipolos magnéticos atômicos produz essencialmente um alinhamento perfeito de todos os dipolos. Existem muito domínios magnetizados em direções diferentes, e o resultado da soma desses domínios de dipolo num material ferromagnético (não magnetizado) dá uma magnetização igual a zero(2). Quando um material ferromagnético é posto em presença de um campo magnético externo, pode ocorrer dois efeitos: Na fronteira dos domínios alinhados com o campo, os dipolos alinhados em outros sentidos podem girar até ficarem alinhados com o campo,

crescendo assim às custas dos domínios vizinhos. Os dipolos de domínios não alinhados podem girar em conjunto tendendo a ficar alinhados com o campo aplicado. Retirando o campo externo aplicado, as fronteiras dos domínios não retornam completamente às suas posições iniciais e o material retém uma magnetização no sentido do campo magnético aplicado. Esta magnetização é chamada de magnetização espontânea.

1.1.2 Antiferromagnetismo

O comportamento antiferromagnético é apresentado por alguns materiais, sendo que o protótipo é o óxido de manganês (MnO). O MnO é um material cerâmico com caráter iônico e a sua estrutura cristalina é FFC do tipo NaCl. O momento magnético associado aos íons O^{2-} é zero. Os íons Mn^{2+} apresentam momento magnético permanente, mas eles estão arranjados na estrutura de modo que os íons adjacentes têm momentos opostos ou antiparalelos. O material como um todo não apresenta magnetização. Vários compostos de metais de transição apresentam comportamento antiferromagnético(3). Os materiais antiferromagnéticos apresentam temperatura crítica, denominada temperatura de Néel (θ_n). A susceptibilidade magnética dos materiais antiferromagnéticos é da mesma ordem de grandeza da dos materiais paramagnéticos (no passado os materiais antiferromagnéticos eram considerados paramagnéticos anômalos) e diminui com o aumento da temperatura (T):

$$\chi_m \simeq \frac{C}{T \pm \theta}$$

onde C é a constante de Curie e θ é diferente de θ_n . Estes materiais possuem muito pouco uso na indústria de alta tecnologia devidos não apresentarem magnetização espontânea.

1.1.3 Ferrimagnetismo

Alguns materiais cerâmicos também apresentam magnetização permanente, denominado ferrimagnetismo. Estes materiais são denominados ferritas. As características macroscópicas do ferromagnetismo e do ferrimagnetismo são similares. As diferenças encontram-se na origem do momento magnético. As ferritas podem ser representadas pela fórmula geral $MF_e_2O_4$, onde M é um elemento metálico. O protótipo das ferritas é

a magnetita, Fe_3O_4 , que pode ser reescrita como $Fe^{++}O^{--}(Fe^{+++})_2(O^{--})_3$. Por outro lado, os momentos magnéticos dos dois tipos de íons de ferro não se cancelam totalmente e o material apresenta magnetismo permanente. Alguns exemplos de ferritas mais comuns são: $NiFe_2O_4$ e $(Mn, Mg)Fe_2O_4$. Os materiais ferrimagnéticos também apresentam temperatura crítica, também denominada temperatura de Curie θ_C . A susceptibilidade dos materiais ferrimagnéticos é da mesma ordem de grandeza da dos materiais ferromagnéticos e diminui com o aumento da temperatura (T):

$$\chi_m \simeq \frac{C}{T \pm \theta}$$

onde C é uma constante e θ é diferente de θ_C (2).

1.2 Diamagnetismo

Faraday descobriu em 1847 que uma amostra de bismuto era repelida por um ímã potente. Ele chamou tais substâncias de diamagnéticas. O fenômeno do diamagnetismo ocorre em todos os materiais, mas por ser um efeito muito fraco é mascarado por outros efeitos magnéticos. O efeito do diamagnetismo é análogo ao efeito dos campos elétricos induzidos na eletrostática, em materiais diamagnéticos, os átomos não possuem momentos de dipolo magnético permanentes, mas adquirem momentos de dipolo induzidos, quando colocados num campo magnético externo. O diamagnetismo resulta do movimento orbital dos elétrons que ao circular em torno do núcleo, acabam formando um anel eletrônico de corrente, produzindo um campo magnético. Neste caso não se forma um campo magnético externo ao material, pois para cada órbita têm-se dois elétrons em direções opostas, sendo que assim nenhum momento magnético é produzido. Na presença de um campo externo, o emparelhamento de elétrons fica desbalanceados. Independentemente da direção do campo magnético de um elétron, o elétron sempre se oporá ao campo aplicado, podendo diminuir, ou aumentar sua velocidade, porém devido ao campo aplicado, a soma vetorial dos momentos no material não é mais nula. O resultado de todos os átomos do material, será uma reação contrária ao campo magnético aplicado, o que explica macroscopicamente a tendência deste material se afastar do campo aplicado(1).

1.3 Paramagnetismo

Ocorre em materiais em que os átomos possuam momento de dipolo magnéticos permanentes, não fazendo diferença alguma se esses dipolos são do tipo orbital ou spin. Nos materiais paramagnéticos, em ausência de campo magnético aplicado, os momentos de dipolos magnéticos estão inicialmente aleatoriamente orientados, tendo uma magnetização total igual a zero, pois os vetores quando somados se anulam. A aplicação de um campo magnético externo, tende alinhar os dipolos magnéticos em sua direção, tornando a magnetização não nula. Por outro lado a agitação térmica dos átomos tende a perturbar o alinhamento dos dipolos e conseqüentemente, a magnetização diminui com o aumento de temperatura.

A relação entre M e a temperatura T , foi descoberta por Pierre Curie(2) em 1895 e é dada por: $M = C \frac{B_0}{T}$, que é conhecida como lei de Curie, sendo C denominada de constante de Curie. Como a magnetização depende do vetor soma de seus dipolos magnéticos atômicos, a magnetização alcança o valor máximo, quando todos os dipolos estão paralelos. Sendo N o número de dipolos no volume V , o valor máximo da magnetização ocorre quando todos os N dipolos magnéticos estão paralelos. Quando a magnetização alcança este valor de saturação, qualquer acréscimo no campo, não tem mais nenhum efeito sobre ela. A lei de Curie, M aumenta linearmente com a razão B_0/T , quando a magnetização está longe do ponto de saturação.

Nesta dissertação, estudaremos o diagrama de fase do modelo de Ising de Spins Mistos com Anisotropia Aleatória de campo cristalino, através das aproximações de campo médio (Método Variacional de Peierls-Bogoliubov) . No capítulo 2, abordaremos a teoria de transições de fases, onde nos limitaremos a sistemas magnéticos, o qual está fortemente baseado nos livros de Stanley(4) e Salinas(5). No capítulo 3 será abordado o tema da nossa dissertação, "Modelo de Spins Mistos com Interação aleatória de campo cristalino". Este tema já foi estudado por Vieira e Salinas(6; 7), utilizando outras aproximações de campo médio nas versões de Curie-Weiss e rede de Beth-Pierls.

No capítulo 4 apresentaremos os principais resultados, conclusões e apresentaremos algumas sugestões para trabalhos posteriores.

Capítulo 2

Transições de Fases e Fenômenos Críticos de Sistemas Magnéticos

2.1 Introdução

Em nosso cotidiano é comum depararmos com a matéria em suas diversas fases. Sendo a água uma das mais observadas pelo o homem, pois se apresenta nas fases líquida, sólida e gasosa. Em outras fases , como a sólida serve para refrigerar bebidas em geral, bem como conservar comidas, polpas de frutas, etc. Na fase gasosa sobe ao céu para depois cair como chuva. Esses fenômenos de mudança de uma fase para outra é chamada de transição de fase. A natureza reservou um papel muito importante para o fenômeno da transição de fase. Certamente estaríamos vivendo em um mundo muito diferente, se a água não se apresentasse nas três fases familiares.

Diversos sistemas exibem transições de fase, tais como: a transição metal - isolante, a transição condutor - supercondutor, a ferromagnética - paramagnética, Hélio I - Hélio II, a do estado fluido normal - super-fluides, antiferromagnética - paramagnética etc. Assim, o fenômeno de transição de fase exerce um decisivo papel no desenvolvimento tecnológico e cultural. O metal é fundido para produzir de instrumentos médicos à armas de guerra. Uma infinidade de materiais químicos evaporam e condensam para produzirem de plásticos à produtos farmacêuticos(1).

Os fenômenos de transições de fases são mais comumente chamados de fenômenos

críticos e a cerca de cem anos atrás já havia o conhecimento de alguns aspectos desses fenômenos(4). Teorias clássicas de transição de fases, foram propostas para descrever aspectos qualitativos de vários tipos de transição de fases(5). Entretanto a partir da década de 60 foram desenvolvidas técnicas mais apropriadas de estudos na vizinhança dos pontos críticos. Grandezas como calor específico, compressibilidade e a susceptibilidade magnética, apresentam um comportamento singular na região crítica, com divergências assintóticas que foram caracterizadas pelos expoentes críticos. Os expoentes críticos exibem valores característicos de caráter universal que demonstram o comportamento crítico de grandezas termodinâmicas (como a compressibilidade de um fluido e a susceptibilidade de um ferro magneto). As teorias clássicas corroboram esse caráter universal, fornecendo um conjunto (clássico) de valores para os expoentes críticos. Por outro lado, os resultados obtidos experimentalmente e diversos resultados teóricos apontavam na direção da existência de classes de universalidade, com poucos parâmetros (como a dimensionidade dos sistemas sob consideração), com expoentes críticos distintos do conjunto de expoentes clássicos(4)

Neste capítulo, vamos introduzir uma teoria de campo médio para sistemas magnéticos, em particular a teoria molecular de Weiss, onde estudaremos o comportamento crítico, através dos cálculos dos expoentes críticos. Ainda no contexto do campo molecular estudaremos uma conexão com o modelo de Heisenberg. Introduziremos o modelo de Ising, mais rigoroso (porém simples) para o magnetismo, para esse modelo, obteremos uma solução exata em uma dimensão e discutiremos a solução exata em duas dimensões. Para finalizar o capítulo mostraremos uma aproximação de campo médio (Método Variacional de Peierls-Bogoliubov) a qual utilizaremos nesta dissertação.

Em 1907, dois anos após o aparecimento da teoria de Langevin do paramagnetismo, Pierre Weiss propôs uma teoria fenomenológica do ferromagnetismo, na qual ele assumiu que os spins interagem um com outro através de um campo molecular proporcional a magnetização média. Foi somente alguns anos mais tarde que a interação de troca de Heisenberg(8) foi proposta, a qual foi dado para o campo molecular uma interpretação em termos da interação de troca J_{ij} , entre pares de spins S_i e S_j situados nos sítios i e j na rede. Mais recentemente esta teoria de campo médio tem recebido outras interpretações.

Tem sido mostrado que se consideramos um modelo na qual cada momento magnético interagem com cada outro momento (com uma magnitude igual), então as propriedades deste modelo são idênticas àquelas da teoria de campo médio(9).

Muitos sistemas na natureza tem interações relativamente forte e de curto alcance, assim a natureza dos fenômenos cooperativos observados depende crucialmente do modo na qual estas interações propaga de uma partícula a outra. Portanto, veremos o porque a teoria de campo médio produz uma descrição inadequada dos fenômenos na região crítica.

Começaremos nossa discussão com a derivação da função de partição e das propriedades termodinâmicas de um sistema para o limite na qual os momentos magnéticos constituintes interagem tão fracamente um com outro que essas interações podem ser desprezadas.

2.2 Sistemas Magnéticos não Interagentes

A Hamiltoniana para um sistema de N momentos magnéticos não interagentes em um campo magnético externo H é dado por

$$\mathcal{H} = -g\mu_B \sum_{i=1}^N \vec{S}_i \cdot \vec{H} \quad (2.1)$$

onde o produto g é o fator de Landé, $\mu_B \equiv e\hbar/2mc$ é o magneton de Bohr.

O produto

$$\vec{S}_i \cdot \vec{H} = m_i H ; (m_i = -S, -S + 1, \dots, S - 1, S) \quad (2.2)$$

onde foi usado $-\vec{\mu} \equiv g\mu_B \vec{S}$ a relação entre o momento magnético $\vec{\mu}$ e o spin \vec{S} . A combinação de $g\mu_B$ ocorrerá muitas vezes, assim vamos introduzir uma notação:

$$\bar{\mu} = g\mu_B \quad (2.3)$$

A função de partição (Zustandsumme) é obtida pesando cada estado pelo fator de Boltzmann apropriado, e então somando sobre todos os $(2S + 1)^N$ estados do sistema

$$Z = \sum_{m_1=-S}^S \sum_{m_2=-S}^S \sum_{m_3=-S}^S \dots \sum_{m_N=-S}^S \exp(x \sum_{i=1}^N m_i) ; x \equiv \bar{\mu}H/K_B T \quad (2.4)$$

As somas na equação (2.4) são particularmente elementares para o caso de um sistema de dois níveis ($S = 1/2$), temos:

$$Z = \sum_{m_1=-S}^S \sum_{m_2=-S}^S \sum_{m_3=-S}^S \dots \sum_{m_N=-S}^S \exp[x(m_1 + m_2 + m_3 + \dots + m_N)]$$

$$Z = \sum_{m_1=-S}^S e^{xm_1} \sum_{m_2=-S}^S e^{xm_2} \sum_{m_3=-S}^S e^{xm_3} \dots \sum_{m_N=-S}^S e^{xm_N}$$

Como $m_i = -S \dots S$, neste que estamos estudando (sistemas de partículas não interagentes) todas as somas são iguais, e para o caso $S = 1/2 \rightarrow m_i = -1/2, 1/2$. Portanto, podemos reescreve-la da seguinte forma

$$Z = \prod_{i=1}^N \left[\sum_{m=-1/2}^{1/2} e^{xm} \right]$$

$$Z = \prod_{i=1}^N \left[2 \cosh\left(\frac{x}{2}\right) \right]$$

$$Z = 2^N \cosh^N\left(\frac{x}{2}\right) \quad (2.5)$$

Tendo obtido analiticamente a função de partição, todas as outras grandezas termodinâmicas também podem ser escritas em termo dela, tal como, a energia livre de Gibbs:

$$G(T, H) = -KT \ln Z, \quad Z = 2^N \cosh^N\left(\frac{x}{2}\right)$$

$$\ln Z = \ln \left[2^N \cosh^N\left(\frac{x}{2}\right) \right]$$

$$\ln Z = N \ln \left[2 \cosh\left(\frac{x}{2}\right) \right]$$

Portanto a energia livre de Gibbs é dada por:

$$G(T, H) = -NKT \ln \left[2 \cosh\left(\frac{x}{2}\right) \right]$$

$$G(T, H) = -NKT \ln \left[2 \cosh\left(\frac{\bar{\mu}H}{2K_B T}\right) \right]$$

A magnetização é dado por

$$M(T, H) = - \left(\frac{\partial G}{\partial H} \right)_T = \frac{NK_B T 2 \sinh\left(\frac{\bar{\mu}H}{2K_B T}\right)}{2 \cosh\left(\frac{\bar{\mu}H}{2K_B T}\right)} \cdot \frac{\bar{\mu}}{2K_B T}$$

$$M(T, H) = \frac{1}{2} N \bar{\mu} \tanh\left[\frac{\bar{\mu}H}{2K_B T}\right]$$

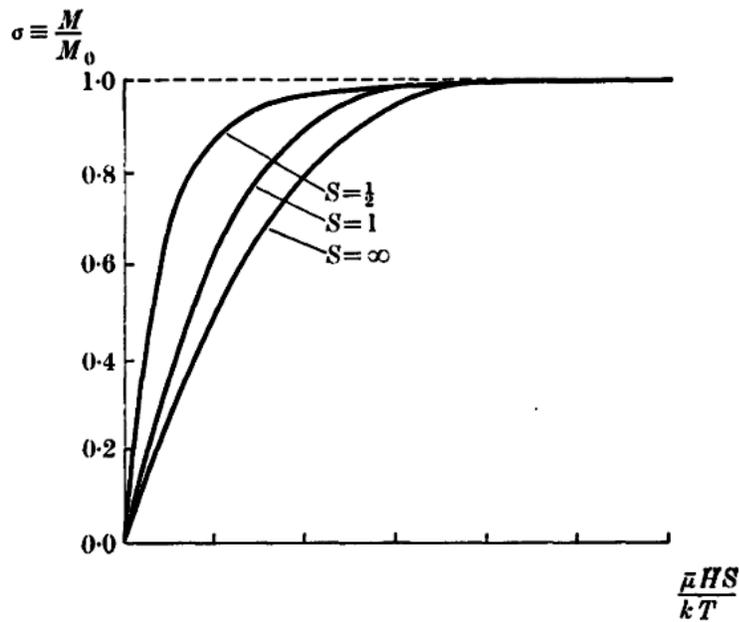


Figura 2.1: Dependência da magnetização reduzida $\sigma \equiv M/M_o \equiv M(T, H)/M(0, 0)$ sob $\bar{\mu}HS/KT$ para um sistema magnético no limite de não interação. As curvas são aquelas das funções de Brillouin $B_S(Sx)$, a qual reduz a tangente hiperbólica e a função de Langevin no limite $S = 1/2$ e $S = \infty$ respectivamente.

para o caso em que $H = 0 \rightarrow M(T, 0) = 0$, não tem magnetização espontânea.

Sendo o caso geral do spin igual a S , a soma é mais complicada

$$Z = \sum_{m_1=-S}^S e^{xm_1} \sum_{m_2=-S}^S e^{xm_2} \sum_{m_3=-S}^S e^{xm_3} \dots \sum_{m_N=-S}^S e^{xm_N}$$

A Função de partição de N partículas não interagentes pode ser escrita como:

$$Z = Z_1^N$$

onde Z_1 é a função de partição de uma partícula.

Portanto, fazendo a soma para uma partícula, temos:

$$\begin{aligned}
Z_1 &= \sum_{m_1=-S}^S e^{xm_1} = e^{-xS} + e^{x(-S+1)} + e^{x(-S+2)} + e^{x(-S+3)} + \dots + e^{x(0)} \\
&+ \dots + e^{x(S-2)} + e^{x(S-1)} + e^{xS} \\
e^x Z_1 &= [e^{x(-S+1)} + e^{x(-S+2)} + e^{x(-S+3)} + \dots + e^{x(S-2)} + e^{x(S-1)} + e^{xS} + e^{x(S+1)}] \\
Z_1 - Z_1 e^x &= (1 - e^x) Z_1 = e^{-xS} - e^{x(S+1)} \\
Z_1 &= \frac{e^{-xS} - e^{x(S+1)}}{1 - e^x} \tag{2.6}
\end{aligned}$$

multiplicando o numerador e o denominador pelo fator $-e^{-x/2}$, temos:

$$Z_1 = \frac{e^{-xS} - e^{x(S+1)}}{1 - e^x} \times \frac{-e^{-x/2}}{-e^{-x/2}}$$

Portanto, ganhamos

$$\begin{aligned}
Z_1 &= \frac{e^{x(S+1/2)} - e^{-x(S+1/2)}}{e^{x/2} - e^{-x/2}} \\
Z_1 &= \frac{\sinh[x(S + 1/2)]}{\sinh[x/2]} \tag{2.7}
\end{aligned}$$

Portanto

$$\begin{aligned}
Z &= \frac{e^{x(S+1/2)} - e^{-x(S+1/2)}}{e^{x/2} - e^{-x/2}} \\
Z &= \left(\frac{\sinh[x(S + 1/2)]}{\sinh[x/2]} \right)^N \tag{2.8}
\end{aligned}$$

Como vimos é possível obter a função de partição de forma fechada. Assim, podemos calcular as grandezas termodinâmicas a partir da função de partição, por exemplo:

$$\begin{aligned}
G(T, H) &= -K_B T \ln Z \\
G(T, H) &= -NK_B T \ln \left[\frac{\sinh[x(S + 1/2)]}{\sinh[x/2]} \right]
\end{aligned}$$

A magnetização é dado por

$$\begin{aligned}
M(T, H) &= - \left(\frac{\partial G}{\partial H} \right)_T = NK_B T \frac{\partial}{\partial H} \ln Z \\
M(T, H) &= \frac{NKT \sinh[\bar{\mu}H/2K_B T]}{\sinh[(S+1/2)\bar{\mu}H/K_B T]} \\
&\times \frac{\partial}{\partial H} \left(\frac{\sinh[(S+1/2)\bar{\mu}H/K_B T]}{\sinh[\bar{\mu}H/K_B T]} \right) \\
M(T, H) &= \left(\frac{NK_B T \sinh[\frac{\bar{\mu}H}{2K_B T}]}{\sinh[\frac{(S+1/2)\bar{\mu}H}{K_B T}]} \right) \left[\frac{\frac{(S+1/2)\bar{\mu}}{K_B T} \cosh[\frac{(S+1/2)\bar{\mu}H}{K_B T}]}{\sinh[\frac{\bar{\mu}H}{K_B T}]} \right. \\
&\quad \left. - \frac{\sinh[\frac{(S+1/2)\bar{\mu}H}{K_B T}] \cosh[\frac{\bar{\mu}H}{K_B T}] \frac{\bar{\mu}}{K_B T}}{\sinh^2[\frac{\bar{\mu}H}{2K_B T}]} \right] \\
M(T, H) &= N\bar{\mu}(S+1/2) \coth \left[(S+1/2) \frac{\bar{\mu}H}{K_B T} \right] - \frac{N\bar{\mu}}{2} \coth \left(\frac{\bar{\mu}H}{2KT} \right) \\
M(T, H) &= N\bar{\mu}(S+1/2) \coth [(S+1/2)Sx] - \frac{N\bar{\mu}S}{2S} \coth \left(\frac{Sx}{2S} \right) \\
M(T, H) &= N\bar{\mu}S \left(\frac{2S+1}{2S} \right) \coth \left(\frac{2S+1}{2S} Sx \right) - \frac{N\bar{\mu}S}{2S} \coth \left(\frac{Sx}{2S} \right) \\
M(T, H) &= N\bar{\mu}S \left(\frac{2S+1}{2S} \right) \coth \left(\frac{2S+1}{2S} y \right) - \frac{N\bar{\mu}S}{2S} \coth \left(\frac{y}{2S} \right) \\
M(T, H) &= N\bar{\mu}S B_S(y) = M_o B_S(y) \tag{2.9}
\end{aligned}$$

onde $y = Sx$, $M_o = N\bar{\mu}S$ e $B_S(y)$ é chamada de Função de Brillouin e é dado por:

$$B_S(y) = \left(\frac{2S+1}{2S} \right) \coth \left(\frac{2S+1}{2S} y \right) - \frac{1}{2S} \coth \left(\frac{y}{2S} \right) \tag{2.10}$$

A função de Brillouin relaciona a magnetização do sistema ao campo aplicado.

2.2.1 A hipótese do Campo Molecular

Para o caso do paramagneto $M = 0$ quando $H = 0$, a magnetização espontânea $M(T, 0)$ é zero. Observações experimentais mostram que para todos os materiais ferromagnéticos em alguma temperatura existe magnetização espontânea(4). A hipótese básica da teoria de campo médio é que as interações entre os spins dá origem a um campo magnético H_m em adição ao campo externo H . Se assumimos que H_m é proporcional a magnetização, $H_m = \lambda M(T, H)$, então o campo efetivo visto por spin é

$$H_{eff} = H + \lambda M(T, H) \tag{2.11}$$

O parâmetro λ é chamado de parâmetro do campo molecular. Para os cálculos de Z , basta trocar nas equações anteriores $H \rightarrow H_{eff}$.

$$M = M_o B_s [\beta \bar{\mu} S (H + \lambda M)] \quad (2.12)$$

Para $H = 0$, a magnetização espontânea é diferente de zero

$$M = M_o B_s [\beta \bar{\mu} S \lambda M] \quad (2.13)$$

$M = M_o B_s [\beta \bar{\mu} S \lambda M]$ é uma equação implícita, pois M aparece também no argumento da função de Brillouin. Vamos considerar a solução gráfica, mostrada na figura, onde foi considerado o lado esquerdo

$$Y = M$$

e do lado direito

$$Y = M_o B_s [\beta \bar{\mu} S \lambda M]$$

O lado esquerdo e o direito da eq. (13) é plotado como função de M . A solução $M = 0$ existe para todo T , porém as soluções $M \neq 0$ existem somente para T suficientemente pequeno, menor do que a inclinação inicial da função de Brillouin que é maior que 1 . Há uma solução trivial $M = 0$ para todos os T , porém existe uma solução não trivial com $M \neq 0$, devido a inclinação inicial do lado direito ser maior do que a inclinação do lado esquerdo da equação (2.13). Para estudar a inclinação inicial, vamos considerar o caso da função de Brillouin com argumento pequeno, assim realizar uma expansão em série de potência

$$B_S(y) = \left(\frac{2S+1}{2S} \right) \coth \left(\frac{2S+1}{2S} y \right) - \frac{1}{2S} \coth \left(\frac{y}{2S} \right) \quad (2.14)$$

A expansão em série de potência da cotangente é dado por:

$$\coth(x) = \frac{1}{x} + \frac{x}{3} + \dots$$

$$\begin{aligned}
B_S(y) &= \left(\frac{2S+1}{2S}\right) \coth\left(\frac{2S+1}{2S}y\right) - \frac{1}{2S} \coth\left(\frac{y}{2S}\right) \\
B_S(y) &= \frac{2S+1}{2S} \left(\frac{2S}{2S+1} \frac{1}{y} + \frac{2S+1}{2S} \frac{y}{3}\right) \\
&\quad - \frac{1}{2S} \left(\frac{2S}{y} + \frac{y}{6S}\right) + \dots \\
B_S(y) &= \frac{(S+1)y}{3S} = \frac{(S+1)\beta\bar{\mu}S\lambda M}{3S}
\end{aligned} \tag{2.15}$$

Portanto, o lado direito da equação (2.13) é reescrita como:

$$Y = M_o \frac{(S+1)\beta\bar{\mu}S\lambda M}{3S}$$

A inclinação inicial do lado direito é

$$M_o \frac{(S+1)\beta\bar{\mu}S\lambda}{3S} = N\bar{\mu}S \frac{(S+1)\beta\bar{\mu}S\lambda}{3S}$$

Portanto,

$$\frac{NS(S+1)\bar{\mu}^2\lambda}{3KT} = C \frac{\lambda}{T}$$

onde a constante C conhecida como "constante de Curie" é dado por

$$C = \frac{N\bar{\mu}^2S(S+1)}{3K}$$

Para ter solução não trivial

$$T < \lambda C$$

Portanto, a temperatura crítica é calculada tomando

$$T_c = \lambda C$$

A temperatura crítica é proporcional ao parâmetro molecular λ , assim $\lambda \rightarrow 0 \Rightarrow T_c \rightarrow 0$. Este fato não tem nenhuma surpresa desde que para $\lambda = 0$, voltamos ao sistema paramagneto, isto é, o resultado não interação, para o qual $T_c = 0$.

2.2.2 Expoentes Críticos para a Teoria de Campo Médio

Vamos iniciar considerando o caso $S = 1/2$, de modo que a equação de estado, na teoria de campo médio, segundo Stanley(4) é dada por:

$$M = M_o \tanh \left[\frac{1}{2} \beta \bar{\mu} (H + \lambda M) \right] \tag{2.16}$$

Introduzindo as variáveis reduzidas

$$\sigma = \frac{M}{M_o} = \frac{M(T, H)}{M(0,)} \rightarrow M = \sigma M_o \quad e \quad \tilde{T} = \frac{T}{T_c} \rightarrow T = T_c \tilde{T}$$

Substituindo na equação (2.16)

$$\sigma = \tanh \left[\frac{1}{2} \frac{\bar{\mu} H}{K_B T} + \frac{1}{2} \frac{\bar{\mu} \lambda \sigma M_o}{K_B T} \right] \quad (2.17)$$

onde $M_o = NS\bar{\mu}$. Observe que:

$$\frac{1}{2} \frac{\bar{\mu} \lambda \sigma M_o}{K T} = \frac{\bar{\mu} T_c M_o \sigma}{2 \tilde{T} T_c C} = \frac{\bar{\mu} N S \bar{\mu} \sigma 3 K}{2 \tilde{T} N \bar{\mu}^2 S (S + 1)} = \frac{3}{2} \frac{\sigma}{\tilde{T} (S + 1)} = \frac{3}{2} \frac{\sigma}{\tilde{T} (1/2 + 1)} = \frac{\sigma}{\tilde{T}}$$

Portanto, substituindo na equação (2.17)

$$\sigma = \tanh \left[\frac{1}{2} \frac{\bar{\mu} H}{K T} + \frac{\sigma}{\tilde{T}} \right] \quad (2.18)$$

Usando a relação

$$\tanh(x + y) = \frac{\tanh x + \tanh y}{1 + \tanh x \tanh y}$$

reescrevemos a equação de estado em uma forma mais conveniente, de maneira que o cálculo dos expoentes críticos tornam mais simples.

$$\sigma = \frac{\tanh\left[\frac{1}{2} \frac{\bar{\mu} H}{K T}\right] + \tanh\left[\frac{\sigma}{\tilde{T}}\right]}{1 + \tanh\left[\frac{1}{2} \frac{\bar{\mu} H}{K T}\right] \tanh\left[\frac{\sigma}{\tilde{T}}\right]} \quad (2.19)$$

Fazendo

$$h = \tanh\left[\frac{1}{2} \frac{\bar{\mu} H}{K T}\right]$$

temos que:

$$\begin{aligned} \sigma + \sigma \tanh\left[\frac{1}{2} \frac{\bar{\mu} H}{K T}\right] \tanh\left[\frac{\sigma}{\tilde{T}}\right] &= \tanh\left[\frac{1}{2} \frac{\bar{\mu} H}{K T}\right] + \tanh\left[\frac{\sigma}{\tilde{T}}\right] \\ \tanh\left[\frac{1}{2} \frac{\bar{\mu} H}{K T}\right] \left(1 - \sigma \tanh\left[\frac{\sigma}{\tilde{T}}\right]\right) &= \sigma - \tanh\left[\frac{\sigma}{\tilde{T}}\right] \\ h &= \frac{\sigma - \tanh\left[\frac{\sigma}{\tilde{T}}\right]}{1 - \sigma \tanh\left[\frac{\sigma}{\tilde{T}}\right]} \end{aligned} \quad (2.20)$$

Perto do ponto crítico ($H = 0$, $M = 0$, $T = T_c$), os argumentos de todas as funções tangente hiperbólicas, na equação (2.20) são pequenos, e podemos expandir

$$\tanh x = x - \frac{1}{3} x^3 + \frac{2}{15} x^5 + \dots$$

Portanto:

$$\begin{aligned}
h &= \frac{\sigma - \tanh\left[\frac{\sigma}{\tilde{T}}\right]}{1 - \sigma \tanh\left[\frac{\sigma}{\tilde{T}}\right]} \\
h &= \frac{\sigma - \frac{\sigma}{\tilde{T}} + \frac{1}{3}\left(\frac{\sigma}{\tilde{T}}\right)^3 - \frac{2}{15}\left(\frac{\sigma}{\tilde{T}}\right)^5}{1 - \sigma \left[\frac{\sigma}{\tilde{T}} - \frac{1}{3}\left(\frac{\sigma}{\tilde{T}}\right)^3 + \frac{2}{15}\left(\frac{\sigma}{\tilde{T}}\right)^5 \right]} \\
h &= \sigma \left[1 - \frac{1}{\tilde{T}} + \frac{1}{3\tilde{T}} \left(\frac{\sigma}{\tilde{T}}\right)^2 - \frac{2}{15\tilde{T}} \left(\frac{\sigma}{\tilde{T}}\right)^4 \right] \left[1 + \sigma^2 \left[\frac{1}{\tilde{T}} - \frac{1}{3\tilde{T}} \left(\frac{\sigma}{\tilde{T}}\right)^2 + \frac{2}{15\tilde{T}} \left(\frac{\sigma}{\tilde{T}}\right)^4 \right] \right]
\end{aligned}$$

Portanto, obtemos

$$h = \sigma \left(1 - \frac{1}{\tilde{T}} \right) + \sigma^3 \left[\frac{1}{3\tilde{T}^3} + \left(1 - \frac{1}{\tilde{T}} \right) \frac{1}{\tilde{T}} \right] + 0(\sigma^5) \quad (2.21)$$

A maioria dos expoentes críticos para $S = 1/2$ são obtidos da (2.21).

2.2.3 O Expoente β da Magnetização

Da equação

$$h = \frac{\sigma - \tanh\left[\frac{\sigma}{\tilde{T}}\right]}{1 - \sigma \tanh\left[\frac{\sigma}{\tilde{T}}\right]} \quad ; \quad p/ \tilde{T} = \frac{T}{T_c}$$

Vê-se imediatamente que em campo zero, $h = 0$, e para $T \lesssim T_c$ a equação (2.21) torna-se

$$\begin{aligned}
0 &= \sigma \left(1 - \frac{1}{\tilde{T}} \right) + \sigma^3 \left[\frac{1}{3\tilde{T}^3} + \left(1 - \frac{1}{\tilde{T}} \right) \frac{1}{\tilde{T}} \right] + 0(\sigma^5) \\
\sigma^2 &= \frac{\frac{T_c}{T} - 1}{\frac{T_c^3}{3T^3} + \frac{T_c}{T} \left(1 - \frac{T_c}{T} \right)} \\
\sigma^2 &= \frac{\frac{T_c}{T} - 1}{\frac{T_c^3}{3T^3}} = \left(\frac{T_c}{T} - 1 \right) \frac{3T^3}{T_c^3} \\
\sigma^2 &= \frac{3T^2}{T_c^2} - \frac{3T^3}{T_c^3} = 3 \frac{T^2}{T_c^2} \left(1 - \frac{T}{T_c} \right) \\
\sigma^2 &= 3 \left(\frac{T}{T_c} \right)^3 \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right) \quad (2.22)
\end{aligned}$$

Portanto, o quadrado da magnetização espontânea desaparece linearmente com $(T_c - T)$, de modo que $\beta = 1/2$,

$$\sigma^2 \sim (T_c - T) \rightarrow \sigma \sim (T_c - T)^{1/2} \quad , \quad \text{onde } \sigma \sim (T_c - T)^\beta \quad , \quad \beta = 1/2$$

justamente como na teoria de van der Waals de um sistema fluido. Também, se verifica que o coeficiente $\mathcal{B} = \sqrt{3}$, ao contrário da teoria de van der Waals que prediz $\mathcal{B} = 2$.

2.2.4 Expoente da Isoterma Crítica δ

Para obter a curvatura da isoterma $M - H$ na temperatura crítica, faz-se $\tilde{T} = 1$ na eq. (2.21) e considera-se ambos H e M a serem pequenos

$$\begin{aligned} h &= \sigma \left(1 - \frac{1}{\tilde{T}}\right) + \sigma^3 \left[\frac{1}{3\tilde{T}^3} + \left(1 - \frac{1}{\tilde{T}}\right) \frac{1}{\tilde{T}}\right] + 0(\sigma^5) \\ \tanh\left(\frac{\tilde{\mu}H}{2KT}\right) &\simeq \sigma(1 - 1) + \sigma^3 \left[\frac{1}{3} + (1 - 1) \frac{1}{1}\right] + 0(\sigma^5) \\ \frac{1}{2}\beta_c \tilde{\mu}H + 0(H^3) &\simeq \frac{\sigma^3}{3} + 0(\sigma^5) \end{aligned}$$

Portanto,

$$H \simeq \frac{2}{3} \frac{1}{\beta_c \tilde{\mu}} \sigma^3 \quad (2.23)$$

a qual implica em $\delta = 3$, justamente como na teoria de van der Waals. No entanto, os coeficientes novamente são diferentes, aqui obtém-se $\mathcal{D} = 2/3$, e na de van der Waals $\mathcal{D} = 9/16$.

2.2.5 Expoente do Calor Específico α e α'

Para $S = 1/2$, um cálculo direto leva a expressão

$$A(T, M) = NK_B T \left[-\ln 2 + \frac{1}{2} \ln(1 - \sigma^2) + \frac{1}{2} \sigma \ln \left(\frac{1 + \sigma}{1 - \sigma} \right) - \frac{\sigma^2}{2\tilde{T}} \right] \quad (2.24)$$

Da eq. (2.24) e da eq.

$$C_M = -T \left(\frac{\partial^2 A}{\partial T^2} \right)_M = 0 \quad \text{para todo } T. \quad (2.25)$$

Podemos encontrar

$$C_H = -T \left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2} \right)_H \quad \text{ou} \quad (C_H - C_M) \chi_T = T \alpha_H^2$$

Portanto,

$$C_H = T \chi_T \left\{ \left(\frac{\partial M}{\partial T} \right)_H \right\}^2 \quad \text{ou} \quad C_H - C_M = T \chi_T \alpha_H^2.$$

Todos os três cálculos leva a mesma expressão para $H = 0$, $C_H = 0$ para $T > T_c$, entretanto para $T \leq T_c$

$$C_H = \frac{3}{2} NK_B \left[1 - 0 \frac{(T_c - T)}{T_c} \right] + \dots$$

Portanto, o limite da inclinação de C_H versus T permanece finito quando $T \rightarrow T_C$ e temos que $\alpha'_S = \alpha = 0$. Adicionalmente, vê-se que $C_H \rightarrow \frac{3}{2}NK$ quando $T \rightarrow T_c^-$ de modo que há um salto descontínuo no calor específico de magnitude $\Delta C_H = \frac{3}{2}NK$ para $S = \frac{1}{2}$.

2.2.6 Susceptibilidade - Expoente γ e γ'

Começamos observando que a susceptibilidade isotérmica $\chi_T = \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_T$ satisfaça a relação:

$$\chi_T = \left(\frac{\partial M}{\partial \sigma}\right)_T \left(\frac{\partial \sigma}{\partial h}\right)_T \left(\frac{\partial h}{\partial H}\right)_T$$

Por outro lado, $h = \tanh\left(\frac{\tilde{\mu}H}{2KT}\right) \simeq \frac{\tilde{\mu}H}{2KT}$ o que implica que $\frac{\partial h}{\partial H} = \frac{1}{2}\beta\tilde{\mu}$ e $M = \sigma M_o$, assim $\frac{\partial M}{\partial \sigma} = M_o = NS\tilde{\mu} = \frac{1}{2}N\tilde{\mu}$. Portanto

$$\chi_T = \frac{1}{2}N\tilde{\mu}\frac{1}{2}\beta\tilde{\mu} \left(\frac{\partial \sigma}{\partial h}\right)_T = \frac{1}{4}N\beta\tilde{\mu}^2 \left(\frac{\partial \sigma}{\partial h}\right)_T = \frac{C}{T} \left(\frac{\partial \sigma}{\partial h}\right)_T$$

onde

$$C = \frac{N\tilde{\mu}^2 S(S+1)}{3K} ; \text{ para } S = \frac{1}{2} \rightarrow C = \frac{N\tilde{\mu}^2}{4K}.$$

reduzida $\tilde{T} \equiv T/T_c$. Note que embora haja um simples salto descontínuo para todos os valores S (isto é, $\alpha = \alpha' = 0$), a magnitude da descontinuidade depende fracamente de S . Note também que o comportamento para o limite clássico ($S = \infty$) é somente levemente diferente dos resultados de S finito na região crítica, porém é qualitativamente diferente em baixa temperaturas. Portanto, diferenciando os dois lados de (2.21) em relação a h , obtém-se, para $T \simeq T_c$

$$\begin{aligned} h &= \sigma \left(1 - \frac{1}{\tilde{T}}\right) + \sigma^3 \left[\frac{1}{3\tilde{T}^3} + \left(1 - \frac{1}{\tilde{T}}\right) \frac{1}{\tilde{T}}\right] + 0(\sigma^5) \\ 1 &= \left(\frac{\partial \sigma}{\partial h}\right)_T \left(1 - \frac{1}{\tilde{T}}\right) + 3\sigma^2 \left(\frac{\partial \sigma}{\partial h}\right)_T [\dots] + 0(\sigma^4) \\ 1 &= \left(\frac{\partial \sigma}{\partial h}\right)_T \left[1 - \frac{1}{\tilde{T}} + 3\sigma^2 \left(\frac{1}{3\tilde{T}^3} + \left(1 - \frac{1}{\tilde{T}}\right) \frac{1}{\tilde{T}}\right)\right] + 0(\sigma^4) \end{aligned}$$

Lembrando que

$$\chi_T = \frac{C}{T} \left(\frac{\partial \sigma}{\partial h}\right)_T \rightarrow \frac{T}{C}\chi_T = \left(\frac{\partial \sigma}{\partial h}\right)_T$$

Portanto,

$$\begin{aligned}
1 &= \frac{T}{C} \chi_T \left\{ 1 - \frac{1}{\tilde{T}} + 3\sigma^2 \left(\frac{1}{3\tilde{T}^3} + \left(1 - \frac{1}{\tilde{T}} \right) \frac{1}{\tilde{T}} \right) \right\} + 0(\sigma^4) \\
\chi_T &= \frac{C}{T} \left[\frac{\epsilon}{\tilde{T}} + \frac{\sigma^2}{\tilde{T}^3} + 0(\sigma^4) \right]^{-1}
\end{aligned} \tag{2.26}$$

Agora para $T > T_c$, $\sigma = 0$ quando $H = 0$, e portanto a equação (2.26) reduz a

$$\begin{aligned}
\chi_T &= \frac{C}{T} \left[\frac{T_c(T - T_c)}{\tilde{T}T_c} + \right]^{-1} = \frac{C}{T - T_c} \\
\chi_T &= \frac{C}{T - T_c}
\end{aligned}$$

Portanto, $\gamma = 1$ e o coeficiente $\mathcal{C} = 1$.

No entanto para $T < T_c$, devemos substituir $\sigma^2 \simeq -3\epsilon$ de (2.27), isto é,

$$\begin{aligned}
\sigma^2 &= -3\epsilon \left(\frac{T}{T_c} \right)^2 \\
\chi_T &= \frac{C}{T} \left[\frac{\epsilon}{\tilde{T}} - 3\epsilon \left(\frac{T}{T_c} \right)^2 \frac{T_c^3}{T^3} \right]^{-1} = \frac{C}{T} \left[\frac{\epsilon}{T} - \frac{3\epsilon}{T} \right]^{-1} = \frac{C}{T} \left(-\frac{2\epsilon}{T} \right)^{-1} \\
\chi_T &= \frac{1}{2} \frac{C}{T} (-\epsilon)^{-1}
\end{aligned} \tag{2.27}$$

relação a temperatura para o limite da não interação (perfeito paramagneto) e para a teoria de campo médio. Somente o comportamento para $T > T_c$ é mostrado (vê a fig.4 do capítulo anterior). Portanto, diferenciando os dois lados de (2.21) em Portanto, encontramos $\gamma' = 1$, porém o coeficiente \mathcal{C}' é somente metade, tanto a baixo de T_c como acima de T_c ($\mathcal{C}' = 1/2$).

2.2.7 Os Expoentes Δ_l e Δ'_l

Os expoentes gap são definidos em termos de sucessivas derivadas em relação ao campo magnético do potencial de Gibbs. Portanto, por exemplo, temos:

$$\begin{aligned}
\Delta'_1 &= 2 - \alpha' - \beta = \frac{3}{2} \\
\Delta'_2 &= 2 - \gamma' + \beta = \frac{3}{2} \\
\Delta_2 &= \frac{1}{2} (\gamma + 2 - \alpha) = \frac{3}{2}
\end{aligned}$$

Para obter Δ'_3 , necessitamos diferenciar o potencial de Gibbs três vezes, ou equivalentemente, necessitamos encontrar a derivada da suscetibilidade em relação ao campo, calculado em $H = 0$.

$$\begin{aligned}\chi_T &= \frac{C}{T} \left[\frac{\epsilon}{\tilde{T}} + \frac{\sigma^2}{\tilde{T}^3} + 0(\sigma^4) \right]^{-1} \\ \left(\frac{\partial \chi_T}{\partial h} \right)_T &= \frac{C}{T} \left[\frac{\epsilon}{\tilde{T}} + \frac{\sigma^2}{\tilde{T}^3} + 0(\sigma^4) \right]^{-2} 2 \frac{\sigma}{\tilde{T}^3} \frac{\partial \sigma}{\partial h} \\ \left(\frac{\partial \chi_T}{\partial h} \right)_T &= \frac{C}{T} \left[(\epsilon + \sigma^2)^{-2} (2\sigma \frac{\partial \sigma}{\partial h} |_T + 0(\sigma^3)) \right].\end{aligned}\quad (2.28)$$

Para $T > T_c$, $H = 0$ implica que $\sigma = 0$. Portanto, o lado direito de (2.28) reduz a zero, como já tínhamos suspeitado porque a derivada de ordem impar da energia livre é zero para $T > T_c$.

Para $T < T_c$,

$$\left(\frac{\partial \sigma}{\partial h} \right) = \frac{T}{C} \chi_T \simeq \frac{1}{2} (-\epsilon)^{-1}$$

da equação (2.27) e $\sigma \simeq 3^{1/2} (-\epsilon)^{1/2}$ da eq. (2.22). Portanto,

$$-G^{(3)} = \left(\frac{\partial \chi_T}{\partial H} \right)_T \alpha$$

. Portanto

$$\begin{aligned}\chi_T &= \frac{C}{T} \left[\frac{\epsilon}{\tilde{T}} + \frac{\sigma^2}{\tilde{T}^3} + 0(\sigma^4) \right]^{-1} \\ \left(\frac{\partial \chi_T}{\partial h} \right)_T &= \frac{C}{T} \left[(\epsilon + \sigma^2)^{-2} (2\sigma \frac{\partial \sigma}{\partial h} |_T + 0(\sigma^3)) \right] \\ \frac{\partial \chi_T}{\partial H} &= \frac{\partial \chi}{\partial h} \frac{\partial h}{\partial H} = \frac{C}{T} \left[(\epsilon + \sigma^2)^{-2} (2\sigma \frac{\partial \sigma}{\partial h} |_T + 0(\sigma^3)) \right] \frac{\partial h}{\partial H} \\ \frac{\partial \chi_T}{\partial H} &= \beta \bar{\mu} \frac{C}{T} (\epsilon + \sigma^2)^{-2} (-3\epsilon)^{1/2} (-\epsilon)^{-1} \\ \frac{\partial \chi_T}{\partial H} &= \beta \bar{\mu} \frac{C}{T} (\epsilon - 3\epsilon)^{-2} (-3\epsilon)^{1/2} (-\epsilon)^{-1}\end{aligned}\quad (2.29)$$

Assim,

$$-G^{(3)} \sim (-\epsilon)^{-5/2}\quad (2.30)$$

e desde que

$$-G^{(2)} = \chi_T \sim (-\epsilon)^{-1}.$$

Usando

$$\frac{\partial^l G}{\partial H^l} = G^{(l)} \sim \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{-\Delta'_l} G^{(l-1)}$$

Portanto,

$$\begin{aligned} G^{(3)} &\sim (-\epsilon)^{-\Delta'_3} G^{(2)} \\ (-\epsilon)^{-5/2} &\sim (-\epsilon)^{-\Delta'_3} (-\epsilon)^{-1} \\ (-\epsilon)^{-5/2+1} &\sim (-\epsilon)^{-\Delta'_3} \\ (-\epsilon)^{-3/2} &\sim (-\epsilon)^{-\Delta'_3} \end{aligned} \tag{2.31}$$

temos que $\Delta'_3 = 3/2$.

2.3 O Modelo de Ising

Não é possível falarmos de magnetismo sem referência ao modelo de Ising. Proposto em 1920 por Wilhelm Lenz ao seu aluno de doutorado Ernest Ising, tinha como objetivo estudar um dos fenômenos mais importantes em matéria condensada, o ferromagnetismo de momentos localizados. O modelo inicial era bem simples, uma cadeia linear de momentos magnéticos S_i interagindo com seus vizinhos S_{i+1} e S_{i-1} na forma $-JS_i(S_{i+1} + S_{i-1})$, onde J é interação de troca. Para $J > 0$ o alinhamento paralelo dos momentos é favorecido, o que compete com a desordem imposta pela temperatura. Dessa competição era esperada uma temperatura crítica abaixo (acima) da qual haveria (não haveria) ordenamento de toda cadeia.

Para desapontamento de Ising, e certamente do seu orientador, esse modelo não apresenta transição para uma fase ordenada em qualquer temperatura T diferente de zero. Entende-se esse desapontamento já que a melhor teoria de magnetismo da época, a teoria do campo molecular de Pierre Weiss, previa transição de fase em temperatura não nula independente da dimensão do sistema. Hoje, com argumentos até relativamente simples, sabemos que em uma dimensão a cadeia de spins é instável em qualquer temperatura não nula, ordenando-se apenas em $T = 0$. O resultado obtido por Ising, que é correto, não deve ser visto como fracasso. O pecado de Ising foi na verdade ter conjecturado que em duas ou mais dimensões também não haveria transição de fase, o que sabemos, está

errado, como também veremos neste trabalho ao desenvolvermos o Modelo de Ising para uma rede bidimensional.

Além de ferromagnetismo, o modelo de Ising também pode descrever outros sistemas físicos, como o gás de rede e a liga binária. Em 1952 Yang e Lee usaram o termo gás de rede para descrever um modelo em que M átomos ocupam aleatoriamente os $N > M$ sítios de uma rede. A cada par de sítios vizinhos ocupados dá-se uma energia $E = E_0$; se num par vizinho faltar pelo menos um átomo tem-se $E = 0$. A interação tem a mesma forma anterior, $-JS_i(S_{i+1} + S_{i-1})$, mas S_i pode ter os valores 0 (ausência de átomo) ou 1 (presença de átomo). Hidrogênio adsorvido em uma superfície de ferro é o sistema protótipo. Já a liga binária consiste em dois tipos de átomos ocupando aleatoriamente os sítios de uma rede. Dependendo se os vizinhos são do mesmo tipo (mesmo átomo) ou não, atribui-se energia diferente ao par. Neste caso, $S_i = 1$ representa um tipo de átomo enquanto $S_i = -1$ representa o outro tipo. O sistema protótipo é a liga cobre-zinco.

2.3.1 Solução Exata do Modelo de Ising em Uma Dimensão em Campo Magnético Nulo

Provavelmente a solução mais simples para sistemas de interação de muitos corpos é modelo de Ising em uma dimensão (ou cadeia linear) na ausência de um campo externo. O problema da cadeia linear de Ising tem um interesse histórico. O modelo foi primeiro colocado por Wilhelm Lenz para seu estudante Ising, no começo da década de 20, várias anos antes do advento da mecânica Quântica, e portanto antes do modelo de Heisenberg. Naquele tempo o melhor modelo de magnetismo era a teoria fenomenológica do campo molecular de Pierre Weiss (1907). A expectativa de Lenz e Ising era de que o sistema de Ising poderia prover um modelo específico de interação interpartículas que exibiria uma transição de fase magnética. Ising obteve sucesso na solução do modelo somente em uma dimensão. Ele ficou extremamente desapontado quando a solução falhou na exibição uma transição de fase em temperatura finita. Seu desapontamento não foi nenhuma surpresa, no contexto histórico, pois a teoria de campo médio de Weiss previa transição de fase independentemente da dimensionalidade da rede, e portanto a cadeia era prevista a sofrer

uma transição de fase em temperatura diferente de zero (T_c). Frequentemente, é dito que a cadeia de Ising realmente sofre transição de fase em uma temperatura crítica $T = 0$, desde que o sistema suporta ordenamento de longo-alcance no zero absoluto.

Consideremos uma cadeia ou rede linear com N sítios.

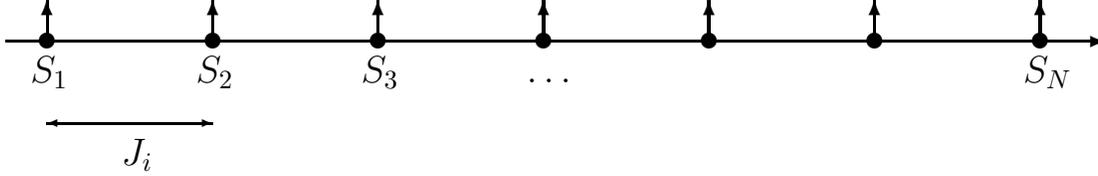


Figura 2.2: Rede linear com N sítios com energia de interação J_i e spin S . O índice i indica que a energia pode ter várias magnitudes.

2.3.2 Solução Exata do Modelo de Ising em uma Dimensão em um campo Magnético

Soluções exatas do modelo de Ising são possíveis em 1 e 2 dimensões e são utilizadas para calcular os valores exatos dos expoentes críticos de duas classes de universalidades.

Em uma dimensão, a Hamiltoniana de Ising torna-se:

$$\mathcal{H} = - \sum_{i=1}^N J_{i,i+1} S_i S_{i+1} - H \sum_{i=1}^N S_i \quad (2.32)$$

a qual corresponde a N spins em uma linha.

Vamos impor a condição de contorno periódica nos spins de modo que $S_{N+1} = S_1$.

Portanto, a topologia do espaço dos spins é aquele de um círculo.

Impondo mais simplificações, vamos considerar que todos spins são equivalentes $J_{i,i+1} \equiv J$. Portanto

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} - H \sum_{i=1}^N S_i \quad (2.33)$$

Para tornar a Hamiltoniana mais simétrica, vamos reescreve-la

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} - \frac{1}{2} H \sum_{i=1}^N [S_i + S_{i+1}] \quad (2.34)$$

Resolver um modelo significa calcular a função de partição, a qual é dada por:

$$Z_N(T, H) = \sum_{\{S\}} e^{-\beta \mathcal{H}} = \sum_{\{S_1=1\}}^1 \sum_{\{S_2=1\}}^1 \sum_{\{S_3=1\}}^1 \dots \sum_{\{S_N=1\}}^1 \exp \left[\beta \left(J \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} + \frac{1}{2} H \sum_{i=1}^N (S_i + S_{i+1}) \right) \right] \quad (2.35)$$

Para executar a soma sobre spins, vamos definir uma matriz T com elementos de matriz dado por:

$$\begin{aligned} \langle S|T|S' \rangle &= e^{\beta[JSS' + H(S+S')/2]} \\ \langle 1|T|1 \rangle &= e^{\beta[J+H]} \\ \langle -1|T| - 1 \rangle &= e^{\beta[J-H]} \\ \langle 1|T| - 1 \rangle &= e^{-\beta J} \\ \langle -1|T| 1 \rangle &= e^{-\beta J} \end{aligned} \quad (2.36)$$

A matriz T é chamada de matriz de transferência. Portanto a matriz T é uma matriz 2×2 dada por:

$$T = \begin{pmatrix} e^{\beta[J+H]} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta[J-H]} \end{pmatrix} \quad (2.37)$$

Voltando a função de Partição

$$\begin{aligned} Z_N(N, T, H) &= \sum_{\{S\}} e^{-\beta \mathcal{H}} = \sum_{\{S_1=1\}}^1 \dots \sum_{\{S_N=1\}}^1 \exp \left[\beta [JS_1 S_2 + \frac{1}{2} H(S_1 + S_2)] \right] \\ &\times \exp \left[\beta [JS_2 S_3 + \frac{1}{2} H(S_2 + S_3)] \right] \\ &\times \exp \left[\beta [JS_3 S_4 + \frac{1}{2} H(S_3 + S_4)] \right] \\ &\times \exp \left[\beta [JS_4 S_5 + \frac{1}{2} H(S_4 + S_5)] \right] \dots \\ &\times \exp \left[\beta [JS_{N-1} S_N + \frac{1}{2} H(S_{N-1} + S_N)] \right] \\ &\times \exp \left[\beta [JS_N S_1 + \frac{1}{2} H(S_N + S_1)] \right] \end{aligned}$$

Portanto, podemos escrever em termos da matriz de transferência

$$\begin{aligned}
Z_N(N, T, H) &= \sum_{\{S_1=1\}}^1 \dots \sum_{\{S_N=1\}}^1 \langle S_1|T|S_2\rangle \langle S_2|T|S_3\rangle \langle S_3|T|S_4\rangle \dots \langle S_N|T|S_1\rangle \\
Z_N(N, T, H) &= \sum_{\{S_1=1\}}^1 \langle S_1|T\hat{T}T\hat{T}T\hat{T}\dots\hat{T}|S_1\rangle \\
Z_N(N, T, H) &= \sum_{\{S_1=1\}}^1 \langle S_1|T^N|S_1\rangle
\end{aligned}$$

onde usamos a relação de clausura

$$\sum_{S_i=-1}^1 |S_i\rangle \langle S_i| = \hat{1}$$

o qual é um operador unitário. Portanto,

$$Z_N(N, T, H) = \sum_{\{S_1=1\}}^1 \langle S_1|T^N|S_1\rangle = Tr(T^N)$$

Um modo simples de calcular o traço é diagonalizar a matriz T através da equação

$$Det(T - \lambda I) = 0$$

Portanto

$$0 = det \begin{pmatrix} e^{\beta[J+H]} - \lambda & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta[J-H]} - \lambda \end{pmatrix} \quad (2.38)$$

a qual resulta em:

$$\begin{aligned}
0 &= (e^{\beta[J+H]} - \lambda)(e^{\beta[J-H]} - \lambda) - e^{-\beta J} e^{-\beta J} \\
0 &= \lambda^2 + e^{2K} - \lambda (e^{K+h} + e^{K-h}) - e^{-2K} \\
0 &= \lambda^2 - \lambda (e^{K+h} + e^{K-h}) + 2 \sinh 2K \\
\lambda &= (e^{K+h} + e^{K-h}) / 2 \pm \left[(e^{K+h} + e^{K-h})^2 / - 8 \sinh 2K \right]^{1/2} / 2 \\
\lambda &= \frac{1}{2} (e^{K+h} + e^{K-h}) \pm \left[(e^{K+h} + e^{K-h})^2 - 8 \sinh 2K \right]^{1/2} / 2 \\
\lambda_1 &= e^K \cosh h + [e^{2K} \cosh^2 h - 2 \sinh 2K]^{1/2} \\
\lambda_2 &= e^K \cosh h - [e^{2K} \cosh^2 h - 2 \sinh 2K]^{1/2}
\end{aligned}$$

Usando a propriedade do traço $Tr(T^N) = \lambda_1^N + \lambda_2^N$ onde λ_1 e λ_2 são os autovalores de T. Portanto,

$$\begin{aligned} Z_N(N, T, H) &= \lambda_1^N + \lambda_2^N \\ Z_N(N, T, H) &= \lambda_1^N \left(1 + \frac{\lambda_2^N}{\lambda_1^N} \right) \end{aligned} \quad (2.39)$$

Estamos interessados no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$ e como $\lambda_1 > \lambda_2$, neste limite, o segundo termo é desprezível comparando com o primeiro, assim

$$Z_N(N, T, H) = \left(e^K \cosh h + [e^{2K} \cosh^2 h - 2 \sinh 2K]^{1/2} \right)^N \quad (2.40)$$

Para o caso $H = 0$, a função de partição reduz ao caso obtido anteriormente

$$\begin{aligned} Z_N(N, T, 0) &= \left(e^K \cosh 0 + [e^{2K} \cosh^2 0 - 2 \sinh 2K]^{1/2} \right)^N \\ Z_N(N, T, 0) &= \left(e^K + [e^{2K} - 2 \sinh 2K]^{1/2} \right)^N \\ Z_N(N, T, 0) &= \left(e^K + [e^{2K} - e^{2K} + e^{-2K}]^{1/2} \right)^N \\ Z_N(N, T, 0) &= \left(e^K + [e^{-2K}]^{1/2} \right)^N = (e^K + e^{-K})^N \\ Z_N(N, T, 0) &= 2^N \cosh^N K \end{aligned}$$

Tendo obtido analiticamente a função de partição, todas as outras grandezas termodinâmicas também podem ser escritas em termo dela, tal como, a energia livre de Gibbs:

$$\begin{aligned} G(N, T, H) &= -KT \ln Z \\ G(N, T, H) &= -KT \ln \left(e^K \cosh h + [e^{2K} \cosh^2 h - 2 \sinh 2K]^{1/2} \right)^N \end{aligned}$$

Portanto a energia livre de Gibbs é dada por:

$$\begin{aligned}
G(N, T, H) &= -NK_B T \ln \left(e^K \cosh h + [e^{2K} \cosh^2 h - 2 \sinh 2K]^{1/2} \right) \\
G(N, T, H) &= -NK_B T \ln \left(e^K \cosh h + e^K [\cosh^2 h - 2e^{-2K} \sinh 2K]^{1/2} \right) \\
G(N, T, H) &= -NK_B T \ln e^K \left(\cosh h + [\cosh^2 h - e^{-2K}(e^{2K} - e^{-2K})]^{1/2} \right) \\
G(N, T, H) &= -NK_B T \ln e^K \left(\cosh h + [\cosh^2 h - 1 + e^{-4K}]^{1/2} \right) \\
G(N, T, H) &= -NK_B T \ln e^K \left(\cosh h + [(\cosh^2 h - 1) + e^{-4K}]^{1/2} \right) \\
G(N, T, H) &= -NK_B T \ln e^K \left(\cosh h + [\sinh^2 h + e^{-4K}]^{1/2} \right) \\
G(N, T, H) &= -NK_B T K - \ln \left(\cosh h + [\sinh^2 h + e^{-4K}]^{1/2} \right) \\
G(N, T, H) &= -NK_B T \frac{J}{K_B T} - NK_B T \ln \left(\cosh h + [\sinh^2 h + e^{-4K}]^{1/2} \right) \\
G(N, T, H) &= -NJ - NK_B T \ln \left(\cosh \beta H + [\sinh^2 \beta H + e^{-4K}]^{1/2} \right)
\end{aligned}$$

A magnetização é dado por

$$\begin{aligned}
m &= \frac{M(T, H)}{N} = - \left(\frac{\partial G}{\partial H} \right)_T = \frac{\sinh \beta H + \frac{\sinh \beta H \cosh \beta H}{\sqrt{\sinh^2 \beta H + e^{-4K}}}}{\cosh \beta H + [\sinh^2 \beta H + e^{-4K}]^{1/2}} \\
m(T, H) &= \frac{\sinh \beta H + \frac{\sinh \beta H \cosh \beta H}{\sqrt{\sinh^2 \beta H + e^{-4K}}}}{\cosh \beta H + \sqrt{\sinh^2 \beta H + e^{-4K}}}
\end{aligned}$$

para o caso em que $H = 0 \rightarrow M(T, 0) = 0$, o modelo de Ising em uma dimensão não tem magnetização espontânea em temperatura diferente de zero, portanto não há nenhum ponto crítico não trivial.

Vamos verificar o comportamento da magnetização para campo magnético muito pequeno

$$\begin{aligned}
m &= \frac{\sinh \beta H + \frac{\sinh \beta H \cosh \beta H}{\sqrt{\sinh^2 \beta H + e^{-4K}}}}{\cosh \beta H + \sqrt{\sinh^2 \beta H + e^{-4K}}} \\
m &= \frac{\beta H + \frac{\beta H \cdot 1}{\sqrt{(\beta H)^2 + e^{-4K}}}}{1 + \sqrt{(\beta H)^2 + e^{-4K}}} = \frac{\beta H + \frac{\beta H \cdot 1}{\sqrt{0 + e^{-4K}}}}{1 + \sqrt{0 + e^{-4K}}} \\
m &= \frac{\beta H + \beta H e^{2K}}{1 + e^{-2K}} = \frac{\beta H [1 + e^{2K}]}{1 + e^{-2K}} = \frac{\beta H [1 + e^{2K}]}{e^{-2K} (1 + e^{2K})} \\
M(T, H) &= N \beta H e^{2\beta J}
\end{aligned}$$

A magnetização tem um comportamento linear com o campo magnético, quando este é

muito pequeno. Assim, a suscetibilidade para campo nulo é dada por

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} = N\beta e^{2\beta J} = \frac{N}{K_B T} e^{2J/K_B T}$$

2.3.3 Solução Exata do Modelo de Ising em Duas Dimensões em um campo Magnético Nulo

O modelo de Ising unidimensional é relativamente um problema simples para ser resolvido, porém para resolver em duas dimensões é altamente não trivial. Foi somente o genial espírito matemático puro de Lars Onsager(13) que foi capaz de encontrar uma solução analítica para o modelo Ising em duas dimensões. Este então dá um exato conjunto de expoente crítico para a classe de universalidade $d=2$, $n=1$. O modelo de Ising tridimensional permanece não resolvido.

Portanto, Onsager mostrou que a magnetização, é dada por:

$$m = \left\{1 - [\sinh(2\beta J)]^{-4}\right\}^{1/8} \quad (2.41)$$

para $T < T_c$ e 0 para $T > T_c$, indicando a presença de uma transição de fase ordem-desordem em campo zero. A condição para a determinação da temperatura crítica na qual esta transição ocorre torna a ser

$$m = \left\{1 - [\sinh(2\beta J)]^{-4}\right\}^{1/8}$$

$$0 = \left\{1 - [\sinh(2\beta J)]^{-4}\right\}$$

$$1 = 2 \tanh(2\beta J)$$

$$K_B T_c \approx 2.269185$$

Os expoentes críticos foram computados da solução de Onsager:

$$\alpha = 0(\textit{divergencia logaritmica})$$

$$\beta = \frac{1}{8}$$

$$\gamma = \frac{7}{4}$$

$$\delta = 15$$

A importância da solução exata em duas dimensões é imensa, pois a partir dela, podemos testar diversas aproximações, as quais, levaram a um grande avanço na física de muitos corpos.

2.3.4 Solução Aproximada do modelo de Ising em 3 dimensões

O modelo de Ising pode ser escrito como:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \cdot S_j - h \sum S_i \quad (2.42)$$

S_i e S_j são as variáveis de spin e a primeira soma se estende sobre os pares de vizinhos mais próximos, J é a energia de interação ou acoplamento de troca, h é o campo externo aplicado ao sistema. Quando $J > 0$ e $h = 0$ ocorre fenômeno do ferromagnetismo pois os spins tendem a se alinhar no mesmo sentido. Quando temos $T = 0$ tem-se a magnetização espontânea, com todos os spins apontando na mesma direção. Porém, quando $T \neq 0$ magnetização espontânea diminui até atingir o valor zero em uma temperatura chamada de crítica.

Resolvemos o modelo de Ising em uma dimensão calculando a função de partição canônica:

$$Z = \sum_{S_i} \exp(-\beta\mathcal{H}) \quad (2.43)$$

A partir de Z , obtemos a energia livre de Gibbs do sistema, da qual pode ser derivada todas as propriedades termodinâmicas:

$$G = K_B \cdot T \cdot \ln Z \quad (2.44)$$

O Modelo de Ising em uma dimensão, não apresenta transição de fase desordenada para uma fase ordenada em qualquer $T \neq 0$. Para o modelo de três dimensões, temos técnicas de aproximação, tal como, a aproximação de campo médio em várias versões (Pierre Curie-Weiss, Bethe-Peierls, Peierls-Bogoliubov, etc) e simulação de Monte Carlo.

2.3.5 Desigualdade de Bogoliubov

Definimos o operador:

$$V = H - H_o$$

onde H é o operador hamiltoniano que se quer estudar, e H_o é o hamiltoniano tentativa, isto é, o qual conhecemos a solução exata, este deve ser o mais próximo possível de \mathcal{H} . Por exemplo, no caso do modelo de Ising a Hamiltoniana tentativa pode ser escolhida a ser um Hamiltoniano de um sistema de partícula não interagentes.

A função de partição e a média térmica são definidas, em relação ao hamiltoniano tentativa, da seguinte forma:

$$Z_o = \sum_S \exp[-\beta H_o] \quad , \quad \langle A \rangle_o = \frac{1}{Z_o} \sum_S A \exp[-\beta H_o], \quad (2.45)$$

podendo ser reescrita como:

$$Z_o \langle A \rangle_o = \sum_S A \exp[-\beta H_o]. \quad (2.46)$$

por outro lado, a função de partição para o sistema H é dado por:

$$Z = \sum_S \exp[-\beta H] \quad (2.47)$$

onde podemos observar que:

$$Z = \sum_S \exp[-\beta H] = \sum_S \exp[-\beta V] \exp[-\beta H_o] = Z_o \langle \exp[-\beta v] \rangle_o \quad (2.48)$$

como β é muito pequeno, expandimos usando a relação matemática:

$$e^x \geq 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \dots \quad (2.49)$$

sabendo que:

$$\overline{(x^2)} > (\bar{x})^2$$

escrevemos,

$$\langle \exp(-\beta V) \rangle_o = \langle 1 - \beta V + \frac{\beta^2 V^2}{2!} + \dots \rangle_o$$

$$\langle \exp(-\beta V) \rangle_0 = 1 - \beta \langle V \rangle + \frac{\beta^2 \langle V^2 \rangle}{2!} + \dots \simeq 1 - \beta \langle V \rangle = \exp(-\beta \langle V \rangle)$$

assim teremos,

$$\langle \exp(-\beta V) \rangle_0 \geq \exp(-\beta \langle V \rangle_0).$$

Por outro lado, vimos que:

$$Z = Z_0 \langle \exp(-\beta V) \rangle,$$

assim teremos:

$$Z \geq Z_0 \langle \exp(-\beta V) \rangle$$

aplicando o logaritmo e multiplicando ambos os lados por $-K_B T$, temos que:

$$[\ln Z \geq \ln Z_0 - \beta \langle V \rangle] (-K_B T) =$$

$$-K_B T \ln Z \leq -K_B T \ln Z_0 + K_B T \beta \langle V \rangle \quad (2.50)$$

da definição da energia livre de Gibbs, temos:

$$G \leq G_0 + \langle H - H_0 \rangle \equiv \Psi \quad (2.51)$$

Que é a desigualdade de Bogoliubov. O lado direito fornece a energia livre de campo médio. Quanto H_0 mais se aproximar de H , melhor será a aproximação.

2.3.6 Aproximação de Campo Médio Para o Modelo de Ising

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \cdot S_j - h \sum_{i=1}^N S_i \quad (2.52)$$

Utilizaremos para o hamiltoniano tentativa H_0 , uma soma de spins não interagentes, em que H_1 é o hamiltoniano para um spin. Assim,

$$H_o = \sum H_1 \quad (2.53)$$

$$H_1 = -\eta S_1 \quad (2.54)$$

onde η é o parâmetro variacional.

Sendo:

$$Z_o = Z_1^N \quad (2.55)$$

onde N é o número total de spins.

Sabendo que a função de partição é dada por:

$$Z = \sum_{s_i} \exp(-\beta H) \quad (2.56)$$

assim,

$$Z_1 = \sum_{s_i=\pm 1} \exp(-\beta H_1) \quad (2.57)$$

ou

$$Z_1 = \sum_{s_i=\pm 1} \exp(\beta \eta S_1) = \exp(\beta \eta) + \exp(-\beta \eta) = 2 \cosh(\beta \eta) \quad (2.58)$$

A função cosseno hiperbólica é positiva para qualquer número real, ou, $\cosh(\beta \eta) = \cosh(-\beta \eta)$

$$m = \frac{1}{\beta} \frac{(\partial \ln Z_1)}{\partial \eta} = \tanh(\beta \eta) \quad (2.59)$$

Reescrevemos a equação, considerando que numa rede hipercúbica de N spins, temos $(Nq/2)$ pares de spins mais próximos, dessa forma:

$$\langle H - H_o \rangle_o = -J \sum \langle i, j \rangle \langle S_i S_j \rangle - (h - \eta) \langle S_i \rangle \quad (2.60)$$

e considerando que $\langle S_i S_j \rangle$ resultará na correlação de pares, que para campo médio não resultará em variação significativa, sabendo que $\langle S_i \rangle_o = m$, teremos:

$$\langle S_i S_j \rangle = \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle = m^2$$

resultará em:

$$\langle H - H_o \rangle_o = -J \frac{Nq}{2} m^2 - Nm(h - \eta), \quad (2.61)$$

Substituindo no lado direito da desigualdade de bogoliubov, teremos:

$$\Psi = G_o - J \frac{Nq}{2} m^2 - Nm(h - \eta), \quad (2.62)$$

onde

$$G_o = -K_B.T.\ln Z_o = -N.K_B.T.\ln[2\cosh(\beta\eta)] \quad (2.63)$$

Que dá a energia livre aproximada, propiciando assim a determinação de todas as propriedades termodinâmicas. Para eliminar o vínculo interno, minimizamos Ψ em relação a η ou seja, impondo que $(\partial\Psi/\partial\eta) = 0$, dessa forma:

$$-Nm - NqJm(\partial m/\partial\eta) - (h - \eta).N.(\partial m/\partial\eta) + Nm = 0$$

ou seja,

$$\eta = J.q.m + h$$

que é uma equação auto-consistente para determinar m , se o campo externo h for nulo. Perto da transição a magnetização m é muito pequena, pois $h = 0$, $T \leq T_c$, como $\eta = Jqm$ temos que $\eta \approx 0$, de maneira que podemos expandir a equação em uma série de Taylor, e assim:

$$m = \beta\eta - \frac{1}{3}(\beta\eta)^3$$

ou,

$$m = \beta Jqm - \frac{1}{3}(\beta Jqm)^3$$

de forma que teremos:

$$m = \left[\frac{3(\beta Jq - 1)}{(\beta Jq)^3} \right]^{1/2} \quad (2.64)$$

onde $1/2$ é o expoente crítico da magnetização. Quando $m = 0$, obtemos a temperatura crítica T_c , e $\beta_c Jq = 1$, chamando $\beta J = K$, temos:

$$K_c = 1/q \quad (2.65)$$

2.3.7 Expansão de Landau

A teoria de Landau permite a determinação da topologia dos diagramas de fase. Um aspecto muito importante da teoria de Landau está relacionado às simetrias do sistema as quais se revelam nas simetrias da energia livre. (16) Em determinados sistemas magnéticos, a equivalência das subredes implica que a energia livre seja invariante pela permutação das magnetizações das subredes ou, equivalente, invariante pela troca de sinal do parâmetro de ordem η .

De acordo com a teoria de Landau, postulamos para a energia livre molar $g(T, H, \eta)$, pode ser escrita da seguinte forma:

$$g = a_0 + a_2\eta^2 + a_4\eta^4 + a_6\eta^6, \quad (2.66)$$

sendo essa uma função par em η devido à simetria $g(T, H, \eta) = g(T, H, -\eta)$. Os parâmetros a_i são funções lineares de T e H, sendo a_6 estritamente positivo. O parâmetro de ordem η corresponde aos mínimos absolutos do polinômio anterior. O número de fases em coexistência é igual ao número de mínimos absolutos de g . Para determinar as condições para existência de um certo número de mínimos, é conveniente escrever a energia livre da forma:

$$g = g_0 + a_6\psi(\eta) \quad (2.67)$$

em que g_0 é o valor do mínimo absoluto e $\psi(\eta)$ é um polinômio de sexto grau em η . Sendo que, os mínimos de g se tornam as raízes duplas de $\psi(\eta)$.

Como ψ é um polinômio de sexto grau, podemos então ter no máximo a coexistência de três fases. Inicialmente deve-se determinar as condições de coexistência de três fases. Para isso é necessário que:

$$\psi = \eta^2(\eta - \eta_0)^2(\eta + \eta_0)^2 = \eta^2(\eta^2 + \eta_0^2)^2 \quad (2.68)$$

sendo que:

$$\frac{a_4}{a_6} = -2\eta_0^2 \text{ e } \frac{a_2}{a_6} = \eta_0^4, \quad (2.69)$$

ou:

$$a_2 = \frac{a_4^2}{4.a_6} \text{ e } a_4 < 0$$

uma linha crítica (duas fases idênticas) é descrita por um polinômio ψ que possui uma raiz quádrupla, isto é, $\psi = \eta^4(\eta^4 + a^2)$, de que concluímos que:

$$a_2 = 0 \text{ e } a_4 > 0 \quad (2.71)$$

O ponto tricrítico (três fases idênticas) corresponde a uma raiz sêxtupla, de modo que $\psi = \eta^6$, de que se conclui que $a_4 = a_2 = 0$.

Para determinar a magnetização $m = -\partial g/\partial H$, vamos supor que os coeficientes a_i dependam linearmente de T e H. Dessa forma até ordem quadrática em η obtemos $m = c_0 - c_2\eta^2$, em que c_0 e c_2 são constantes. A variável $\xi = m_p - m_a$ esta relacionada com η_0 por $\xi = c_2\eta_0^2$. Mas, de acordo com: $\frac{a_4}{a_6} = -2\eta_0^2$ e $\frac{a_2}{a_6} = \eta_0^4$, η_0 se comporta como:

$$\eta_0 \sim |a_4|^{1/2} \quad (2.72)$$

o que resulta:

$$\xi_0 \sim |a_4| \quad (2.73)$$

ou seja ξ se aproxima linearmente do ponto tricrítico, o que justifica o resultado:

$$\xi \sim |T - T_t| \quad (2.74)$$

onde T_t , a temperatura do temperatura do ponto tricrítico. Sendo ξ a variável que dá o comprimento das linhas de coexistência.(16)

Capítulo 3

Modelo Ising de Spins Mistos com Interação Aleatória de Campo Cristalino via Método Variacional de Peierls-Bogoliubov

3.1 Introdução

Materiais ferrimagnéticos tem sido objeto de grande interesse devido a sua importância nas aplicações tecnológicas em gravações magneto-ópticas de alta densidade. Também há um grande interesse do ponto de vista puramente acadêmico, pois o modelo que descreve um ferrimagneto está entre os mais simples que apresenta comportamento tricrítico. Este modelo é o modelo de Ising de spins mistos ($\sigma = \pm\frac{1}{2}$ e $S = \pm 1, 0$).

Independente de sua relevância para a descrição de materiais ferrimagnéticos, o modelo de spin-misto é interessante do ponto de vista teórico, pois este modelo é conveniente para estudos dos efeitos da não-homogeneidade no diagrama de fase, e no comportamento multicrítico dos sistemas magnéticos. Até então, alguns poucos resultados exatos(18) e algumas aproximações(19; 21; 22; 23; 18; 9) fornecem uma boa ilustração do diagrama de fase do modelo de Ising de spins mistos na presença de campo cristalino. No

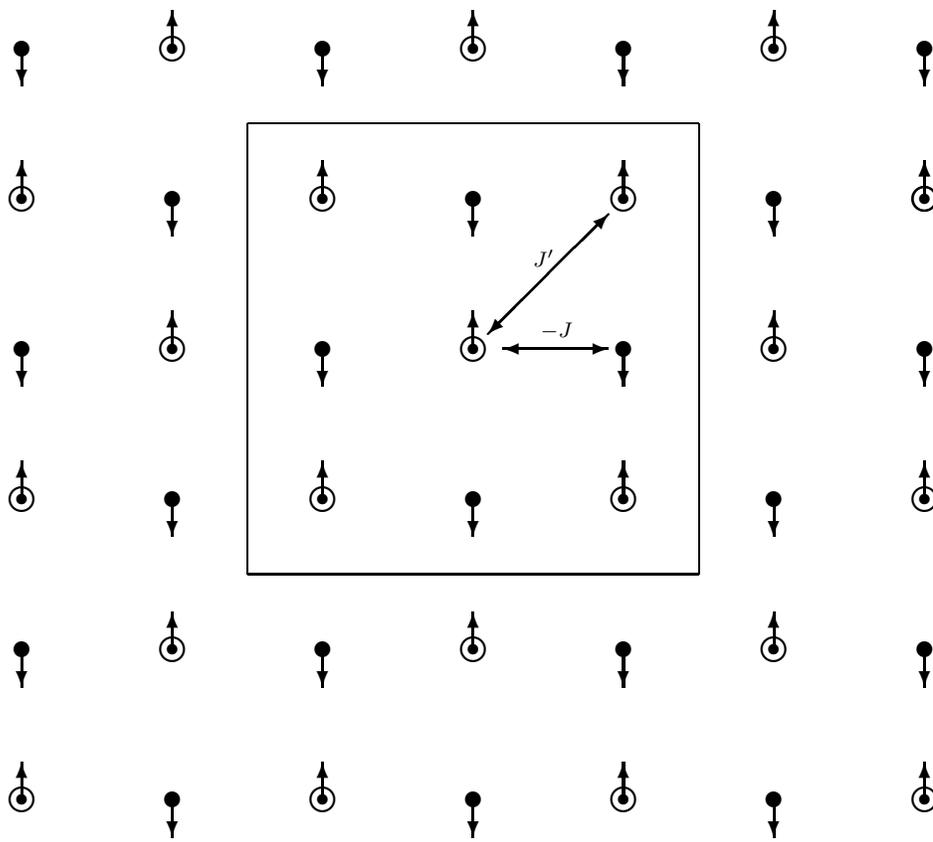


Figura 3.1: Modelo de um Ferrimagneto em uma rede bidimensional dividida duas sub-redes interpenetrantes equivalentes A (circulo cheio preto) e B (circulo vazio), onde os primeiros vizinhos estão localizados em sub-rede diferentes, e os segundos vizinhos estão na mesma sub-rede. A energia de interação entre os primeiros vizinhos é $-J$ e a interação entre os segundos vizinhos é J' .

modelo Ising de spins mistos, os spins $\sigma = \pm\frac{1}{2}$ e $S = \pm 1, 0$ estão distribuídos nos sítios de duas sub-redes inter-penetrantes (A, B). Os spins $\sigma = \pm\frac{1}{2}$ estão localizados nos sítios da sub-rede A e os spins $S = \pm 1, 0$ na sub-rede B. A interação entre os spins de primeiros vizinhos ($\sigma_A e S_B$) pode ser ferromagnética ou antiferromagnética. As interações entre os spins de uma mesma sub-rede (segundos vizinhos $\sigma_i e \sigma_j$, $S_i e S_j$) podem ser incluídas, e este fato tem demonstrado ser útil para estudar outros aspectos do do modelo de spins mistos e do ferrimagnetismo. O modelo de Ising de spins mistos com anisotropia de íon único constante (D), onde no caso de $D > 0$, o campo cristalino favorece o estado $S_j = 0$, a competição entre o termo de anisotropia e o termo de troca ferromagnética induz o aparecimento de um ponto tricrítico. Este modelo tem sido estudado através de vários métodos

aproximados, tais como, teorias de campo efetivo com correlações(19; 20; 22; 21; 23), grupo de renormalização(24), aproximação de Bethe-Peierls(25) e simulação de Monte Carlo(26). Todos esses métodos apresentam uma temperatura crítica diferente quando o campo cristalino é zero. Nesta dissertação, o interesse é o de estudar o diagrama de fase do modelo de Ising de spins mistos com anisotropia aleatória de campo cristalino. Será considerado como uma primeira aproximação, apenas as interações entre pares de spins primeiros vizinhos, os quais são conectados pela interação de troca ferromagnética $J > 0$. A anisotropia de íon único está distribuída aleatoriamente nos sítios da sub-rede B.

O estudo deste modelo com anisotropia aleatória tem sido feito por Salinas e colaboradores(6) utilizando campo médio na versão de Curie-Weiss e Bethe-Peierls. Neste estudo estamos recorrendo a uma aproximação de campo médio baseada no princípio variacional de Peierls-Bogoliubov e da expansão de Landau para sistema no equilíbrio, onde a energia livre deve ser expandida em termos dos invariantes do parâmetro de ordem. Através desses estudos investigamos o aparecimento de um pontos tricríticos, no diagrama de fases temperatura T contra interação de campo cristalino D .

3.2 O modelo e a aproximação de campo médio

O modelo pode ser descrito pelo seguinte Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_j \sigma_i + \sum_j D_j S_j^2 - H \left(\sum_j S_j + \sum_i \sigma_i \right), \quad (3.1)$$

onde J é a constante de acoplamento, D_j é a interação aleatória de campo cristalino e H é o campo externo. A variável de spin S_i têm os valores ± 1 ou 0 e $\sigma_j = \pm 1/2$. Para $D_j > 0$, o campo cristalino favorece os estados $S_i = 0$, a competição entre a anisotropia e o acoplamento ferromagnético leva ao aparecimento de um ponto tricrítico.

Para analisar os efeitos da desordem, consideramos uma distribuição binária de probabilidade associada a variáveis aleatórias dada por:

$$P(D_j) = p\delta(D_j) + (1 - p)\delta(D_j - D), \quad (3.2)$$

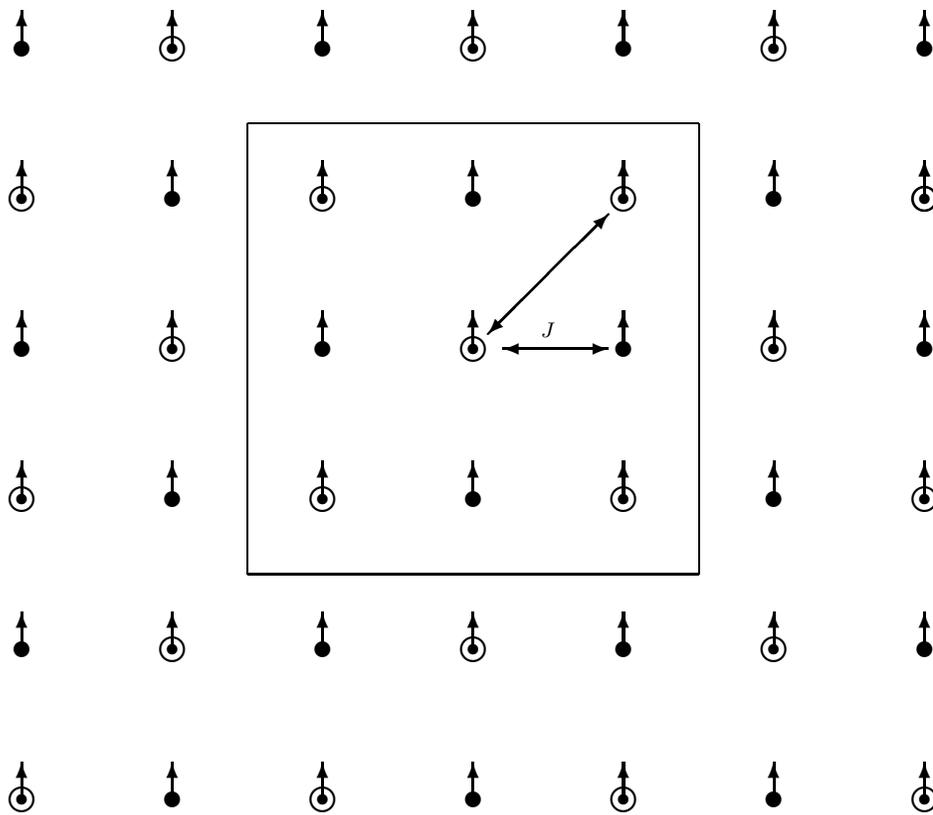


Figura 3.2: Rede bidimensional dividida em duas sub-redes interpenetrantes equivalentes a A (circulo cheio preto) e B(circulo vazio), onde os primeiros vizinhos estão localizados em sub-rede diferentes, e os segundos vizinhos estão na mesma sub-rede. A energia de interação entre os primeiros vizinhos é J

onde o primeiro termo $p\delta(D_j)$ indica que uma fração p de spins na sub-rede B estão livres da ação da anisotropia cristalina de íon único. Da mesma forma, o segundo termo $(1 - p)\delta(D_j - D)$ indica que uma fração $(1 - p)$ de spins estão sob a ação da anisotropia de intensidade D , a qual pode ser responsável por uma transição de fase dentro da fase ferromagnética.

Para estudar transições de fases temos duas opções. A primeira é resolver os modelos exatamente, obtendo temperatura crítica, expoentes críticos e as propriedades termodinâmicas, porém soluções exatas de modelos que representam sistemas físicos, em geral não existem. Somente os modelos mais simples possuem soluções exatas, em uma e duas dimensões, tal como o modelo de Ising(10). A solução em uma dimensão rendeu a Ernest Ising uma tese de doutoramento, muita fama (o modelo de Ising é o mais

usado e o mais conhecido) e uma frustração, pois o seu modelo, em uma dimensão, não explica a magnetização espontânea nos ferromagnéticos para o qual foi proposto. Por outro lado, a solução em duas dimensões obtida por Lars Onsager(13) representa um dos mais importante resultado da física teórica. A segunda opção para estudar transições de fases é utilizar as diversas aproximações, tais como, diversas teorias de campo médio, grupo de renormalização, expansão em série, etc.

Portanto, neste trabalho, vamos utilizar a aproximação de campo médio via princípio variacional baseado na desigualdade de Bogoliubov. Assim, seguindo o esquema da aproximação de campo médio via um princípio variacional que esta baseado na desigualdade de Peierls-Bogoliubov, temos a desigualdade

$$G(\mathcal{H}) \leq G_0(\mathcal{H}_0) + \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 = \Phi , \quad (3.3)$$

onde $G(\mathcal{H})$ e $G_0(\mathcal{H}_0)$ são energias livre associadas a dois sistemas definidos pelos Hamiltonianos \mathcal{H} (a Hamiltoniana do sistema) e \mathcal{H}_0 (a Hamiltoniana tentativa) respectivamente. A média térmica deve ser tomada em relação a uma distribuição canônica associada ao Hamiltoniano \mathcal{H}_0 . Escolhemos o Hamiltoniano tentativa

$$\mathcal{H}_0 = \sum_i D_i S_i^2 - \eta \sum_i S_i - \gamma \sum_j \sigma_j , \quad (3.4)$$

onde η e γ são dois parâmetros variacionais arbitrários. A função de partição de (3.4) fica da seguinte forma

$$Z_0 = \{ [1 + 2 \exp(-\beta D_i) \cosh(\beta \eta)]^{N/2} [2 \cosh(\beta \gamma / 2)]^{N/2} \} . \quad (3.5)$$

Portanto, a energia livre é dada por

$$G_0(\mathcal{H}_0) = -\frac{N}{2\beta} \ln \{ [1 + 2 \exp(-\beta D_i) \cosh(\beta \eta)] [2 \cosh(\beta \gamma / 2)] \} , \quad (3.6)$$

e

$$\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle = -JdN \langle S_i \sigma_j \rangle_0 - H \frac{N}{2} (\langle S_i \rangle_0 + \langle \sigma_j \rangle_0) + \eta \frac{N}{2} \langle S_i \rangle_0 + \gamma \frac{N}{2} \langle \sigma_j \rangle_0 , \quad (3.7)$$

com as seguintes médias térmicas para as variáveis de spin

$$\langle S_i \rangle_0 = \frac{2 \exp(-\beta D_i) \sinh(\beta \eta)}{1 + 2 \exp(-\beta D_i) \cosh(\beta \eta)} , \quad (3.8)$$

$$\langle \sigma_j \rangle_0 = \frac{1}{2} \tanh(\beta\gamma/2) , \quad (3.9)$$

$$\langle S_i \sigma_j \rangle_0 = \langle S_i \rangle_0 \langle \sigma_j \rangle_0 = \left[\frac{2 \exp(-\beta D_i) \sinh(\beta\eta)}{1 + 2 \exp(-\beta D_i) \cosh(\beta\eta)} \right] \frac{1}{2} \tanh(\beta\gamma/2) . \quad (3.10)$$

Temos então a energia livre por partícula

$$\begin{aligned} \Phi(T, D_i, H, N; \eta, \gamma) = & -\frac{N}{2\beta} \ln\{[1 + 2 \exp(-\beta D_i) \cosh(\beta\eta)][2 \cosh(\beta\gamma/2)]\} \\ & -Jd \left(\frac{2 \exp(-\beta D_i) \sinh(\beta\eta)}{1 + 2 \exp(-\beta D_i) \cosh(\beta\eta)} \right) \tanh(\beta\gamma/2) \\ & -\frac{H}{2} \left[\left(\frac{2 \exp(-\beta D_i) \sinh(\beta\eta)}{1 + 2 \exp(-\beta D_i) \cosh(\beta\eta)} \right) + \frac{1}{2} \tanh(\beta\gamma/2) \right] \\ & +\frac{\eta}{2} \left(\frac{2 \exp(-\beta D_i) \sinh(\beta\eta)}{1 + 2 \exp(-\beta D_i) \cosh(\beta\eta)} \right) + \frac{\gamma}{4} \tanh(\beta\gamma/2) . \end{aligned} \quad (3.11)$$

A expressão (3.11) representa apenas um limite superior para a energia livre do sistema. Portanto, minimizando (3.11) em relação aos parâmetros variacionais η e γ , encontramos a energia livre por partícula na aproximação de campo médio

$$g_{CM} = \frac{1}{N} \min_{\eta, \gamma} \Phi(T, D_i, H, N; \eta, \gamma) , \quad (3.12)$$

que corresponde ao menor limite superior proporcionado pela desigualdade de Bogoliubov. Os parâmetros variacionais η e γ dependem de m_1 e m_2 respectivamente (sendo que m_1 e m_2 são as magnetizações das sub-redes), por meio das seguintes equações

$$\eta = zJm_1 + H , \quad (3.13)$$

$$\gamma = zJm_2 + H , \quad (3.14)$$

onde $z = 2d$, logo podemos obter a seguinte expressão para a energia livre por partícula

$$\begin{aligned} g_{CM} = & Jdm_1m_2 - \frac{1}{2\beta} \ln\{[1 + 2 \exp(-\beta D_i) \cosh(\beta z Jm_1 + \beta H)] \\ & \times [2 \cosh(\frac{1}{2}\beta z Jm_2 + \frac{1}{2}\beta H)]\} . \end{aligned} \quad (3.15)$$

3.3 Expansão de Landau

Antes de fazer a expansão de Landau em (3.15), vamos primeiro fazer $H = 0$,

$$g_{CM} = Jdm_1m_2 - \frac{1}{2\beta} \ln\{[1 + 2 \exp(-\beta D) \cosh(\beta z Jm_1)][2 \cosh(\beta z Jm_2)]\} \quad (3.16)$$

Agora fazendo a média sobre a desordem, temos:

$$\begin{aligned}
g &= \int P(D_j) g_{CM} dD_j \\
g &= \int [p\delta(D_j) + (1-p)\delta(D_j - D)] [Jdm_1m_2 \\
&\quad - \frac{1}{2\beta} \ln\{[1 + 2 \exp(-\beta D) \cosh(\beta z J m_1)][2 \cosh(\beta z J m_2)]\}] dD_j,
\end{aligned}$$

resultando em

$$\begin{aligned}
g &= Jdm_1m_2 - \frac{1}{2\beta} p \ln\{[1 + 2 \cosh(\beta z J m_1)][2 \cosh(\beta z J m_2)]\} \\
&\quad - \frac{1}{2\beta} (1-p) \ln\{[1 + 2 \exp(\beta D) \cosh(\beta z J m_1)][2 \cosh(\beta z J m_2)]\}, \quad (3.17)
\end{aligned}$$

Minimizando (3.17) com relação a m_1 e m_2 , temos as magnetizações de sub-rede

$$m_1 = \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta J z m_2\right), \quad (3.18)$$

$$m_2 = \frac{\exp(-\beta D) \sinh(\beta J z m_1)}{1 + \exp(-\beta D) \cosh(\beta J z m_1)}, \quad (3.19)$$

Agora vamos substituir (3.18) ou (3.19) em (3.17), a fim de obtermos uma energia livre em função de apenas um único parâmetro de ordem, tal que

$$\begin{aligned}
g &= \frac{1}{2} J z \tanh(kz m_2) m_2 - \frac{1}{2\beta} p \ln(2(1 + 2 \cosh(kz \tanh(kz m_2))) \cosh(kz m_2)) \\
&\quad - \frac{1}{2\beta} (1-p) \ln[2(1 + 2e^D \cosh(kz \tanh(kz m_2)) \cosh(kz m_2))] \quad (3.20)
\end{aligned}$$

Como a energia livre é uma função analítica nas vizinhanças da criticalidade(9), então podemos fazer uma expansão de Landau a campo nulo ($H = 0$)

$$g(T, D, H = 0; m) = a_0(T, D) + a_2(T, D)m^2 + a_4(T, D)m^4 + a_6(T, D)m^6 + \dots, \quad (3.21)$$

onde os coeficientes a_n da expansão, os quais dependem da temperatura T e do campo cristalino D , são dados por

$$\begin{aligned}
a_2 &= \frac{J z^2 k}{8} - \frac{p \left(\frac{1}{4} k^4 z^4 + \frac{3}{2} k^2 z^2\right)}{24\beta} \\
&\quad - \frac{1}{8} \frac{(1-p) \left(\frac{1}{4} e^{(-\beta D)} k^4 z^4 + \frac{1}{2} (1 + 2 e^{(-\beta D)}) k^2 z^2\right)}{\beta (1 + 2 e^{(-\beta D)})} \quad (3.22)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_4 = & -\frac{J z^4 k^3}{96} + \frac{1}{256} \frac{(1-p) \left(\frac{1}{4} e^{-\beta D} k^4 z^4 + \frac{1}{2} (1+2e^{-\beta D}) k^2 z^2 \right) e^{-\beta D} k^4 z^4}{\beta (1+2e^{-\beta D})^2} \\
& + \frac{p \left(\frac{1}{4} k^4 z^4 + \frac{3}{2} k^2 z^2 \right) k^4 z^4}{2304 \beta} + \frac{p \left(\frac{1}{4} k^4 z^4 + \frac{3}{2} k^2 z^2 \right) k^2 z^2}{384 \beta} \\
& + \frac{1}{128} \frac{(1-p) \left(\frac{1}{4} e^{-\beta D} k^4 z^4 + \frac{1}{2} (1+2e^{-\beta D}) k^2 z^2 \right) k^2 z^2}{\beta (1+2e^{-\beta D})} \\
& - \frac{1}{96} \frac{(1-p) \left(\frac{1}{8} (1+2e^{-\beta D}) k^4 z^4 - \frac{1}{8} e^{-\beta D} k^6 z^6 + \frac{1}{64} e^{-\beta D} k^8 z^8 \right)}{\beta (1+2e^{-\beta D})} \\
& - \frac{p \left(-\frac{1}{8} k^6 z^6 + \frac{1}{64} k^8 z^8 + \frac{3}{8} k^4 z^4 \right)}{288 \beta} \tag{3.23}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_6 = & -\frac{5p \left(\frac{1}{4} k^4 z^4 + \frac{3}{2} k^2 z^2 \right) k^4 z^4}{27648 \beta} + \frac{1}{73728} \frac{(1-p) e^{-\beta D} k^8 z^8}{\beta (1+2e^{-\beta D})^2} \\
& - \frac{7}{9216} \frac{(1-p) e^{-\beta D} k^6 z^6}{\beta (1+2e^{-\beta D})^2} + \frac{J z^6 k^5}{960} \\
& + \frac{1}{2304} \frac{(1-p) \left(\frac{1}{8} (1+2e^{-\beta D}) k^4 z^4 - \frac{1}{8} e^{-\beta D} k^6 z^6 + \frac{1}{64} e^{-\beta D} k^8 z^8 \right) e^{-\beta D} k^4 z^4}{\beta (1+2e^{-\beta D})^2} \\
& - \frac{p \left(\frac{1}{4} k^4 z^4 + \frac{3}{2} k^2 z^2 \right) k^8 z^8}{221184 \beta} - \frac{7p \left(\frac{1}{4} k^4 z^4 + \frac{3}{2} k^2 z^2 \right) k^6 z^6}{82944 \beta} \\
& + \frac{p \left(-\frac{1}{8} k^6 z^6 + \frac{1}{64} k^8 z^8 + \frac{3}{8} k^4 z^4 \right) k^4 z^4}{20736 \beta} - \frac{1}{6144} \frac{(1-p) e^{-2\beta D} k^8 z^8}{\beta (1+2e^{-\beta D})^3} \\
& - \frac{1}{2880} \frac{(1-p) \left[\frac{31}{64} e^{-\beta D} k^8 z^8 + \frac{1}{32} (1+2e^{-\beta D}) k^6 z^6 \right]}{\beta (1+2e^{-\beta D})} \\
& - (1-p) \left[\frac{\frac{25}{256} e^{-\beta D} k^{10} z^{10} + \frac{1}{1024} e^{-\beta D} k^{12} z^{12}}{\beta (1+2e^{-\beta D})} \right] \\
& + \frac{1}{1152} \frac{(1-p) \left[\frac{1}{8} (1+2e^{-\beta D}) k^4 z^4 - \frac{1}{8} e^{-\beta D} k^6 z^6 + \frac{1}{64} e^{-\beta D} k^8 z^8 \right] k^2 z^2}{\beta (1+2e^{-\beta D})} \\
& + \frac{p \left(-\frac{1}{8} k^6 z^6 + \frac{1}{64} k^8 z^8 + \frac{3}{8} k^4 z^4 \right) k^2 z^2}{3456 \beta} - \frac{5}{9216} \frac{(1-p) k^4 z^4}{\beta (1+2e^{-\beta D})} \\
& - \frac{p \left(\frac{31}{64} k^8 z^8 + \frac{3}{32} k^6 z^6 + \frac{1}{1024} k^{12} z^{12} - \frac{25}{256} k^{10} z^{10} \right)}{8640 \beta} \tag{3.24}
\end{aligned}$$

Como sabemos da teoria fenomenológica de Landau para sistemas magnéticos todos os termos ímpares da expansão são nulos devido à simetria do sistema.

3.4 Cálculo das Susceptibilidades

A susceptibilidade magnética representa a resposta do sistema a uma variação no campo magnético, por isso, é conhecida como a função resposta do sistema. Portanto, para o nosso caso de spins mistos, temos duas magnetizações de sub-redes:

$$m_1 = \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta J z m_2 + H\right),$$

$$m_2 = \frac{\exp(-\beta D) \sinh(\beta J z m_1 + H)}{1 + \exp(-\beta D) \cosh(\beta J z m_1 + H)},$$

onde suas derivadas primeiras em relação ao campo magnético, fornecem as susceptibilidades, χ_1 e χ_2 :

$$\chi_1 = \left(\frac{\partial m_1}{\partial H}\right)_{H=0}. \quad (3.25)$$

$$\chi_2 = \left(\frac{\partial m_2}{\partial H}\right)_{H=0}.$$

Assim, obtemos:

$$\chi_1 = \frac{a}{T} \chi_2 + 1$$

$$\chi_2 = b \chi_1 + c.$$

onde a , b e c são dados pelas seguintes expressões:

$$a = \frac{1}{2} \operatorname{sech}^2\left(\frac{2m_2}{T}\right)$$

$$b = \frac{8 e^{-D/J} \cosh\left(\frac{4m_1}{T}\right)}{T [1 + 2 e^{-D/J} \cosh\left(\frac{4m_1}{T}\right)]} - \frac{16 e^{-2D/J} \sinh^2\left(\frac{4m_1}{T}\right)}{T [1 + 2 e^{-D/J} \cosh\left(\frac{4m_1}{T}\right)]^2}$$

$$c = \frac{2 e^{-D/J} \cosh\left(\frac{4m_1}{T}\right)}{1 + 2 e^{-D/J} \cosh\left(\frac{4m_1}{T}\right)} - \frac{4 e^{-2D/J} \sinh^2\left(\frac{4m_1}{T}\right)}{[1 + 2 e^{-D/J} \cosh\left(\frac{4m_1}{T}\right)]^2}$$

Resolvendo o sistema de equação, ganhamos uma expressão para χ_1 e χ_2 em função da temperatura e da anisotropia de campo cristalino, isto é:

$$\chi_1 = \frac{a}{4} \left[\frac{4(b+c)}{T-ab} + 1 \right]$$

$$\chi_2 = \frac{T}{T-ab} [b+c].$$

Capítulo 4

Resultados e Conclusões

4.1 Introdução

Neste capítulo discutiremos o diagrama de fase e as propriedades termodinâmicas obtidos do Modelo Ising de Spins Mistos com Interação Aleatória de Campo Cristalino via Método Variacional de Peierls-Bogoliubov. Para este modelo consideramos a Hamiltoniana:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_j \sigma_i + \sum_j D_j S_j^2 - H \left(\sum_j S_j + \sum_i \sigma_i \right),$$

onde J é a constante de acoplamento, D_j é a interação aleatória de campo cristalino e H é o campo externo. A variável de spin S_i têm os valores ± 1 ou 0 e $\sigma_j = \pm 1/2$. Para analisar os efeitos da desordem, consideramos uma distribuição binária de probabilidade associada a variáveis aleatórias dada por:

$$P(D_j) = p\delta(D_j) + (1-p)\delta(D_j - D),$$

onde o primeiro termo $p\delta(D_j)$ indica que uma fração p de spins na sub-rede B estão livres da ação da anisotropia cristalina de íon único. Da mesma forma, o segundo termo $(1-p)\delta(D_j - D)$ indica que uma fração $(1-p)$ de spins estão sob a ação da anisotropia de intensidade D .

Através dos cálculos de campo médio baseado no princípio variacional de Peierls-

Bogoliubov obtemos a energia livre, dada por:

$$g = \frac{1}{2} J z \tanh(kz m_2) m_2 - \frac{1}{2\beta} p \ln(2(1 + 2 \cosh(kz \tanh(kz m_2)))) \cosh(kz m_2) \\ - \frac{1}{2\beta} (1 - p) \ln[2(1 + 2e^D \cosh(kz \tanh(kz m_2)) \cosh(kz m_2))]$$

Para estudar a transição de fase utilizamos a expansão de Landau para a energia livre, onde obtemos os seguintes coeficientes pares:

$$a_6 = -\frac{5p(\frac{1}{4}k^4 z^4 + \frac{3}{2}k^2 z^2)k^4 z^4}{27648\beta} + \frac{1}{73728} \frac{(1-p)e^{-\beta D} k^8 z^8}{\beta(1+2e^{-\beta D})^2} \\ - \frac{7}{9216} \frac{(1-p)e^{-\beta D} k^6 z^6}{\beta(1+2e^{-\beta D})^2} + \frac{J z^6 k^5}{960} \\ + \frac{1}{2304} \frac{(1-p)(\frac{1}{8}(1+2e^{-\beta D})k^4 z^4 - \frac{1}{8}e^{-\beta D} k^6 z^6 + \frac{1}{64}e^{-\beta D} k^8 z^8) e^{-\beta D} k^4 z^4}{\beta(1+2e^{-\beta D})^2} \\ - \frac{p(\frac{1}{4}k^4 z^4 + \frac{3}{2}k^2 z^2)k^8 z^8}{221184\beta} - \frac{7p(\frac{1}{4}k^4 z^4 + \frac{3}{2}k^2 z^2)k^6 z^6}{82944\beta} \\ + \frac{p(-\frac{1}{8}k^6 z^6 + \frac{1}{64}k^8 z^8 + \frac{3}{8}k^4 z^4)k^4 z^4}{20736\beta} - \frac{1}{6144} \frac{(1-p)e^{-2\beta D} k^8 z^8}{\beta(1+2e^{-\beta D})^3} \\ - \frac{1}{2880} \frac{(1-p)(\frac{31}{64}e^{-\beta D} k^8 z^8 + \frac{1}{32}(1+2e^{-\beta D})k^6 z^6 - \frac{25}{256}e^{-\beta D} k^{10} z^{10} + \frac{1}{1024}e^{-\beta D} k^{12} z^{12})}{\beta(1+2e^{-\beta D})} \\ + \frac{1}{1152} \frac{(1-p)[\frac{1}{8}(1+2e^{-\beta D})k^4 z^4 - \frac{1}{8}e^{-\beta D} k^6 z^6 + \frac{1}{64}e^{-\beta D} k^8 z^8]k^2 z^2}{\beta(1+2e^{-\beta D})} \\ + \frac{p(-\frac{1}{8}k^6 z^6 + \frac{1}{64}k^8 z^8 + \frac{3}{8}k^4 z^4)k^2 z^2}{3456\beta} - \frac{5}{9216} \frac{(1-p)k^4 z^4}{\beta(1+2e^{-\beta D})} \\ - \frac{p(\frac{31}{64}k^8 z^8 + \frac{3}{32}k^6 z^6 + \frac{1}{1024}k^{12} z^{12} - \frac{25}{256}k^{10} z^{10})}{8640\beta} \quad (4.1)$$

$$a_4 = -\frac{J z^4 k^3}{96} + \frac{1}{256} \frac{(1-p)(\frac{1}{4}e^{-\beta D} k^4 z^4 + \frac{1}{2}(1+2e^{-\beta D})k^2 z^2) e^{-\beta D} k^4 z^4}{\beta(1+2e^{-\beta D})^2} \\ + \frac{p(\frac{1}{4}k^4 z^4 + \frac{3}{2}k^2 z^2)k^4 z^4}{2304\beta} + \frac{p(\frac{1}{4}k^4 z^4 + \frac{3}{2}k^2 z^2)k^2 z^2}{384\beta} \\ + \frac{1}{128} \frac{(1-p)(\frac{1}{4}e^{-\beta D} k^4 z^4 + \frac{1}{2}(1+2e^{-\beta D})k^2 z^2)k^2 z^2}{\beta(1+2e^{-\beta D})} \\ - \frac{1}{96} \frac{(1-p)(\frac{1}{8}(1+2e^{-\beta D})k^4 z^4 - \frac{1}{8}e^{-\beta D} k^6 z^6 + \frac{1}{64}e^{-\beta D} k^8 z^8)}{\beta(1+2e^{-\beta D})} \\ - \frac{p(-\frac{1}{8}k^6 z^6 + \frac{1}{64}k^8 z^8 + \frac{3}{8}k^4 z^4)}{288\beta} \quad (4.2)$$

$$\begin{aligned}
a_2 &= \frac{J z^2 k}{8} - \frac{p \left(\frac{1}{4} k^4 z^4 + \frac{3}{2} k^2 z^2 \right)}{24 \beta} \\
&- \frac{1}{8} \frac{(1-p) \left(\frac{1}{4} e^{(-\beta D)} k^4 z^4 + \frac{1}{2} (1 + 2 e^{(-\beta D)}) k^2 z^2 \right)}{\beta (1 + 2 e^{(-\beta D)})}
\end{aligned} \tag{4.3}$$

4.2 Diagrama de Fase

Nesta seção vamos estudar o diagrama de fase (linha de segunda ordem, linha de primeira ordem, pontos tricríticos e pontos crítico terminal), os quais são obtidos da solução numérica dos coeficientes ($a_2(T, D, p)$, $a_4(T, D, p)$ e $a_6(T, D, p)$) da expansão de Landau, dadas pelas equações (4.3), (4.2) e (4.1) respectivamente.

4.2.1 Diagrama de Fase para o caso $p = 0$

A solução analítica do segundo termo (4.3) da expansão de Landau $a_2 = 0$ nos fornece a seguinte expressão para o caso $p = 0$:

$$D = T \ln \left[8 \left(\frac{1 - \frac{T^2}{4}}{T^2} \right) \right]. \tag{4.4}$$

A solução numérica da equação (4.4), com $a_4 > 0$ (a estabilidade termodinâmica da linha crítica depende do sinal de a_4), fornece a linha de transição de fase de segunda ordem.

Para o caso $D = 0$, valor que encontramos para a temperatura crítica é $T_c = \frac{2}{3}\sqrt{6}$. Por outro lado, a localização do ponto tricrítico é dada pela solução simultânea das equações $a_2 = a_4 = 0$, e com $a_6 > 0$, esta condição fornece a estabilidade do ponto tricrítico. Os valores encontrados para a localização do ponto tricrítico são os seguintes: $T_t = 0,8945$ e $D_t = 1,8598$.

Na figura 4.1 apresentamos o diagrama de fases (no plano $k_B T/J$ contra D/J) para o caso $p = 0$.

A curva da figura 4.1 separa duas fases, a fase ordenada (ferromagnética) na região abaixo da curva, e a fase desordenada (paramagnética) região acima da curva. No caso $p = 0$, todos os spins da sub-rede B estão sujeitos a ação do campo cristalino com magnitude

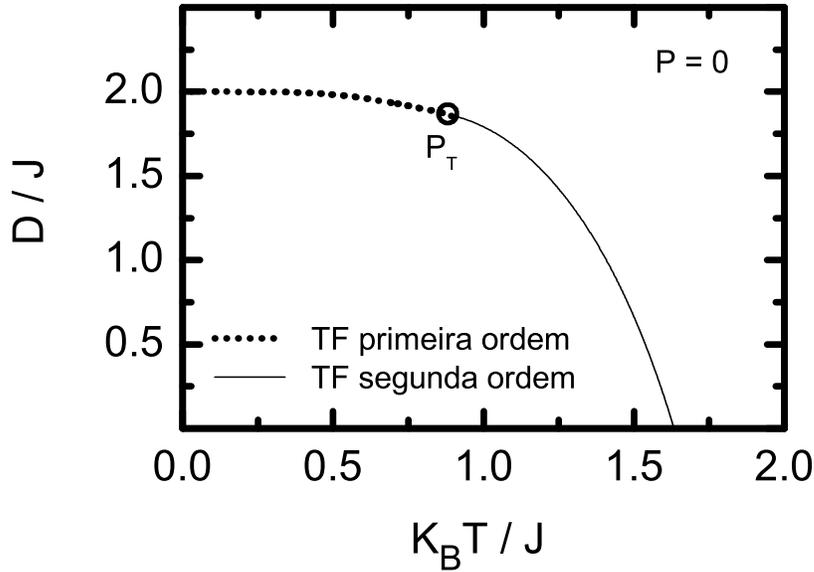


Figura 4.1: Dependência da anisotropia em relação a temperatura para o caso puro, $p = 0$. A linha cheia representa a linha de transição de fase de segunda ordem, e a linha pontilhada representa a linha de primeira ordem. O ponto escuro (P_T) representa o ponto tricrítico.

D. O campo cristalino com $D > 0$ favorece ao estado $S = 0$. Portanto, neste caso temos a seguinte situação:

- Todos os pares primeiros vizinhos estão acoplados ferromagneticamente através da interação de troca $J > 0$, o qual em $T = 0$ faz todos os spins se alinharem paralelamente, apesar do campo cristalino na sub-rede B tender desorganizar o sistema, porém o sistema apresenta com magnetização máxima.
- Na região de baixas temperaturas a anisotropia de campo cristalino é grande. A competição entre a interação de troca atuando em todos os pares de primeiros vizinhos e o campo cristalino (anisotropia de íon único), atuando somente nos spins S da sub-rede B, leva a uma transição de fase de primeira ordem, onde duas fases coexistem (a fase ordenada e a desordenada) com a mesma energia livre.

- Na região de altas temperaturas a anisotropia de campo cristalino é pequena, a competição entre a interação de troca e a temperatura é mais importante, e desta forma a agitação térmica leva a uma transição de fase contínua. Assim, o ponto que separa a linha de primeira ordem da linha de segunda ordem é dado pelo ponto tricrítico ($D_t = 1.8598$, $T_t = 0,8945$).

Em resumo, neste caso $p = 0$ (caso puro), observamos que há linhas de transições de primeira e segunda ordem separadas por um ponto tricrítico, P_t . Observa-se que há uma fase ordenada (ferromagnética) e uma fase desordenada (paramagnética), sendo que ambas são separadas pelas linhas de transições. Para altas temperaturas, encontramos a temperatura crítica em $D = 0$, $T_c = 1.63299$. Sendo o ponto tricrítico dado por $T_t = 0,8945$ e $D_t = 1,8598$.

4.2.2 Diagrama de Fase para o caso $0 < p < 0.1$

Neste caso, a figura (4.2) mostra que para altas temperaturas, o sistema apresenta o mesmo comportamento do caso em que $p = 0$. A linha cheia separa duas fases, a fase ordenada (ferromagnética), na região abaixo da curva e a fase desordenada (paramagnética), acima da curva, terminando em um ponto tricrítico ($D_t = 2,01012$, $T_t = 0,8091$). A partir do ponto tricrítico, com diminuição da temperatura (aumento da importância da interação de troca J) e do aumento da anisotropia de campo cristalino (aumenta a importância).

Devido a estas competições ordem (J) e desordem (D, T) e com a mudanças nas importâncias de cada termo na hamiltoniana, a transição de fase de segunda ordem dá lugar a uma transição de primeira ordem da fase ordenada para a fase desordenada. Aqui temos uma quantidade p de spins fora da influência da anisotropia de campo cristalino e outra $1 - p$ tendendo ao estado $S = 0$. A transição de fase de primeira ordem termina em um ponto tricrítico estável ($T_t = 2.01089$, $D_t = 0.3895$), como mostra a figura (4.2).

Para temperaturas mais baixas, a anisotropia de campo cristalino aumenta em magnitude e em importância levando o sistema a uma transição de fase dentro da fase ordenada, a qual chamaremos de fase ordenada ferro I e fase ordenada ferro II. Como mostra o diagrama (4.2), abaixo da linha pontilhada temos a fase ferromagnética I (ferro I), a fase

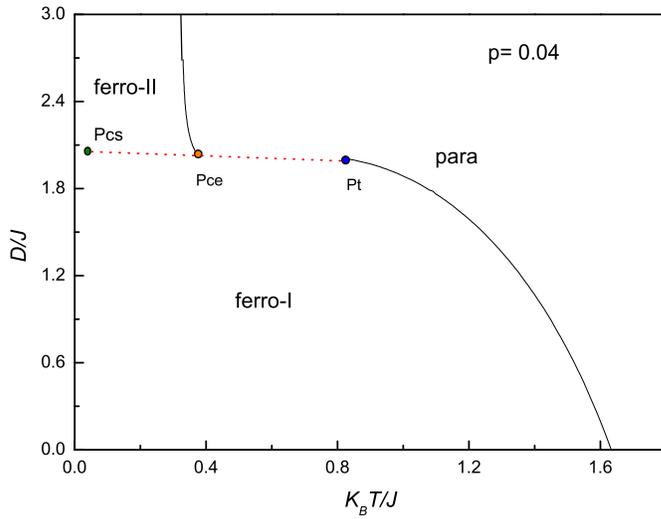


Figura 4.2: Dependência da anisotropia em relação a temperatura para $p=0.04$. A linha cheia representa a transição de fase de segunda ordem, a linha pontilhada representa linha de primeira ordem. Os pontos (P_t) representa ponto tricrítico estável, (P_{ce}) é o ponto crítico final e (P_{cs}) é o ponto crítico simples.

de alta densidade. Nesta fase, devido a anisotropia de campo cristalino ser um pouco menor do que na fase ferro II, temos mais spins S com momento magnético maior que zero, e também há uma quantidade maior (de um à nove por cento) de spins S fora da influência da anisotropia cristalina. Por outro lado, acima da linha, com D maior, o sistema tem uma maior quantidade de spins S com momento magnético zero, pois sabemos que a anisotropia D favorece o estado $S = 0$, portanto temos uma fase ferromagnética de baixa densidade. Esta transição termina próximo de $T = 0$, em um ponto crítico simples, como mostrado no diagrama (4.2).

Na fase ferro II, acima da linha pontilhada, com um D fixo, um aumento da temperatura faz o sistema sofrer uma transição de fase de segunda ordem, da fase ferro II para a fase paramagnética. Este comportamento permanece para valores grande de D .

Em síntese, neste extensão de valores de p , isto é, para $0 < p < 0.1$, o sistema apresenta comportamento tricrítico, e um rico diagrama de fase, como mostrado na figura

(4.2). O diagrama de fase apresenta transição de segunda ordem (ferro-para) na região de alta temperatura e baixa anisotropia. O crescimento da anisotropia faz aparecer o comportamento tricrítico. Linha de segunda ordem da lugar a linha de primeira ordem, os quais são separadas por pontos tricríticos. Na região de baixa temperatura e aumento de D a linha de primeira ordem separa duas regiões ferromagneticamente ordenadas (ferro I-ferro II). Esta transição persiste até a temperatura próxima de zero. A fase ferro II se desordena com o aumenta da temperatura através de uma transição de segunda ordem.

4.2.3 Diagrama de Fase para o caso $0.1 \leq p < 1$

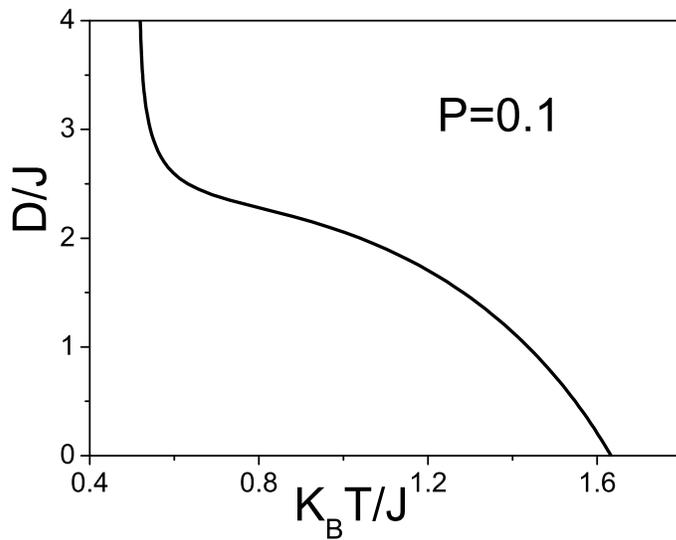


Figura 4.3: Dependência da anisotropia em relação a temperatura para $p=0.1$. A linha cheia representa a transição de fase de segunda ordem.

Valores de p na extensão $0.1 \leq p < 1$, indica que um número grande de spins S ficam fora da ação da anisotropia de campo cristalino D . De dez à noventa e nove por cento dos spins ficam somente sobre a influência da interação de J e da temperatura. Assim, o comportamento tricrítico desaparece, como mostrado na figura (4.3). Portanto, o diagrama de fase mostra somente transição de fase de segunda entre entre as fases ordenada (abaixo da curva) e a desordenada (acima da curva). Aqui, devido um grande

número de spins S não sofrer a ação da anisotropia de campo cristalino, a dinâmica da transição de fase é governada pela competição da interação de troca J e da temperatura T . Portanto, a transição é sempre de segunda ordem, mesmo na região de baixa temperatura e de D grande.

4.3 Propriedades Termodinâmicas

Nesta seção vamos exibir os nossos resultados referentes ao comportamento da magnetização versus a variação da temperatura, e principalmente em relação as mudanças nos valores da anisotropia de campo cristalino.

Diversos materiais magnéticos (F_e, C_o, etc) apresentam-se magnetizados (magnetização espontânea) em temperaturas maiores do que a temperatura ambiente, indicando que as suas temperaturas críticas são maiores do que a ambiente. Na realidade, nesses materiais, a magnetização espontânea está distribuída em diversos domínios orientados aleatoriamente ao longo do volume do material, de maneira que a magnetização resultante é zero. A aplicação de um campo magnético rompe tais domínios, fazendo aparecer uma magnetização na direção do campo aplicado, a qual cresce até atingir a saturação. Ao desligar o campo magnético, a magnetização não volta ao zero inicial, permanecendo magnetizado, e esta magnetização resmanescente que é a famosa magnetização espontânea dos materiais ferromagnéticos. Se esse processo for realizado em temperatura maiores do que zero, a magnetização espontânea cresce com a diminuição da temperatura, atingindo o seu valor máximo em $T = 0$. Por outro lado, o crescimento da temperatura leva a decréscimo da magnetização, a qual atinge o valor zero na temperatura crítica. Dessa forma, esses materiais tornam-se paramagnéticos acima dessa temperatura crítica.

4.3.1 Comportamento Termodinâmico da Magnetização na região de Transição de Fase de Segunda Ordem

A figura (4.4) exibe o comportamento da magnetização em função da temperatura e da anisotropia de campo cristalino. Nesta região ($p = 0$ e $D = 0$), a transição de fase é de

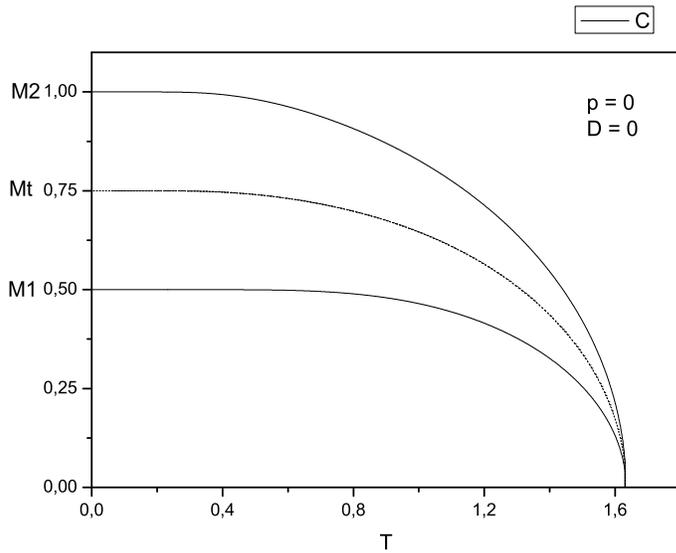


Figura 4.4: Dependência da magnetização das sub-redes M_1 , M_2 e a magnetização total M_t em relação a temperatura para o caso puro, $p = 0$ e $D = 0$.

segunda ordem, e este comportamento está explícito nas curvas das magnetizações, as quais vão a zero continuamente. Nesta região todos os spins das duas sub-redes estão somente sob a ação da interação magnética de troca $J > 0$, desta forma em $T = 0$ todos spins encontram-se alinhados paralelamente, exibindo assim uma magnetização máxima.

Por outro lado, quando a temperatura cresce, aparece uma competição entre J e T . A temperatura faz aumentar a agitação térmica do sólido magnético, a qual dificulta o alinhamento paralelo entre os spins, diminuindo assim o valor da magnetização. Para região de altas temperaturas, a agitação térmica é mais importante do que a energia de troca, fato este que leva a magnetização ir a zero em um certo valor crítico da temperatura (T_c).

Portanto, somente com a competição entre estes dois parâmetros J e T , a transição de fase é de segunda ordem, levando o sistema da fase ferromagnética para a fase paramagnética de forma contínua. A figura (4.5) mostra o comportamento da magnetização versus a temperatura para um valor fixo da anisotropia de campo cristalino $D = 0.01$. Essa magnitude de campo cristalino não é suficiente para mudar o caráter da transição

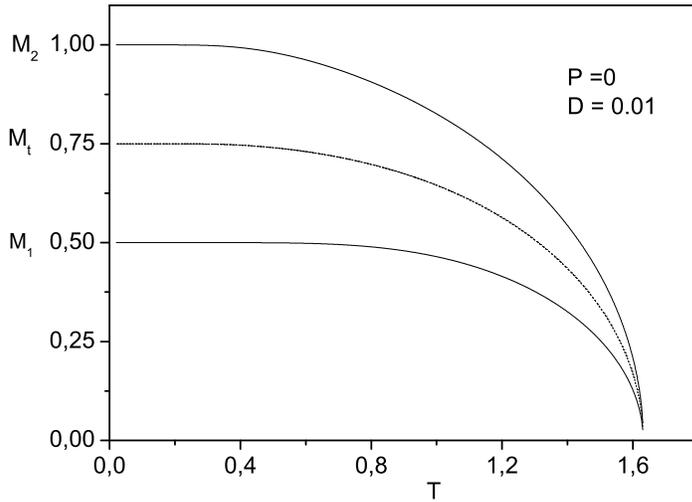


Figura 4.5: Dependência da magnetização das sub-redes M_1 , M_2 e a magnetização total M_t em relação a temperatura para o caso puro $p = 0$ e $D = 0.01$.

de fase de segunda ordem para a de primeira ordem. Portanto, nessa região ($p = 0$, $D = 0.01$), a transição de fase é ainda de segunda ordem como mostra a curva da magnetização que vai a zero continuamente. O único efeito produzido pelo pequeno campo cristalino é o de diminuir a temperatura crítica (T_c). Este efeito é esperado, pois agora ($p = 0$, $D = 0.01$), temos todos spins da sub-rede B sob ação de uma pequena anisotropia cristalina, a qual é um ingrediente novo na competição ordem-desordem. A anisotropia de campo cristalino atua para destruir a ordem, portanto neste caso de uma pequena magnitude, seu efeito é o de somente diminuir a temperatura crítica.

Este comportamento do campo cristalino em diminuir a temperatura crítica é realçada na figura (4.6), onde um valor maior da anisotropia mostra claramente uma diminuição na temperatura crítica.

Novamente, com $p = 0$ e $D = 0.5$, todos os spins na sub-rede B estão sujeito a ação da anisotropia. Apesar do grande aumento na anisotropia, esta magnitude ainda é insuficiente para mudar o caráter da transição de fase de segunda para primeira ordem. Portanto, o único efeito mostrado foi mudar a magnitude da temperatura crítica, a qual mudou de $T_c = 1.632$ para $T_c = 1.5299$.

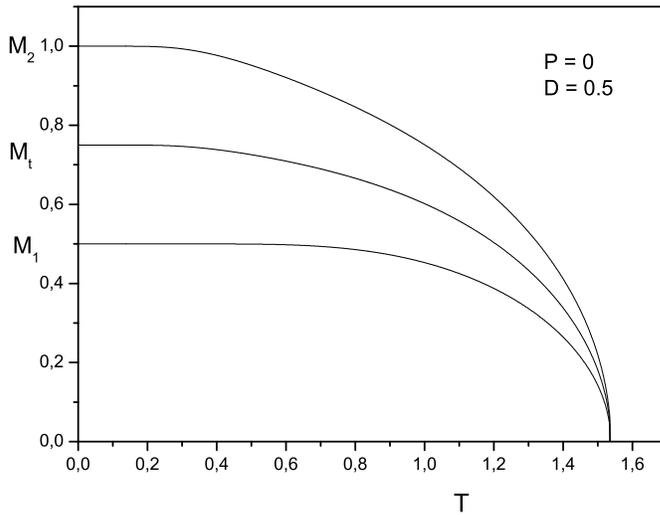


Figura 4.6: Dependência da magnetização das sub-redes M_1 , M_2 e a magnetização total M_t em relação a temperatura para o caso puro, $p = 0$ e $D = 0.5$.

4.3.2 Comportamento Termodinâmico da Magnetização na região de Transição de Fase de Primeira Ordem

A figura (4.7) mostra o comportamento da magnetização versus temperatura, com o parâmetro fixo da anisotropia de campo cristalino ($p = 0$ e $D = 1.9$). Nesta região a transição é primeira ordem, a qual pode ser confirmada pelo comportamento da magnetização (m_1 , m_2 , e $m = (m_1 + m_2)/2$), que é muito diferente dos casos apresentados nas figuras (4.4), (4.5) e (4.6) na região de transição de fase de segunda ordem.

Nesta região ($p = 0$ e $D = 1.9$) o valor da anisotropia de campo cristalino é muito grande. Como sabemos, no caso $p = 0$, todos os spins da sub-rede B estão sujeitos a ação da anisotropia de campo cristalino, assim como $D > 0$ favorece o estado $S = 0$, o comportamento de m_2 é diferente de m_1 , caindo para zero muito mais rápido do que m_1 . Dessa forma, o comportamento não é monotonicamente decrescente, indicando que de fato esta é uma região de transição de fase de primeira ordem.

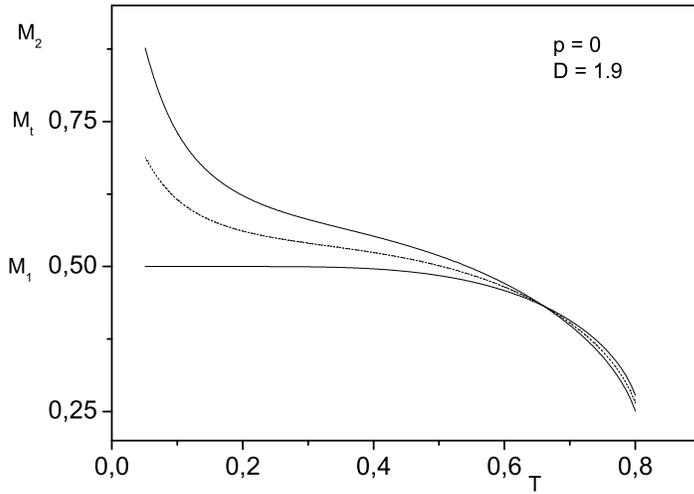


Figura 4.7: Dependência das magnetizações das sub-redes M_1 , M_2 e a magnetização total M_t em relação a temperatura para o caso puro, $p = 0$ e $D = 1.9$.

4.3.3 Susceptibilidade Magnética

A susceptibilidade magnética é definida por $\chi = \partial m / \partial h$. Em materiais paramagnéticos (sem interações entre os momentos magnéticos), a susceptibilidade a campo zero varia inversamente com a temperatura (lei de Curie), válida para todas as temperaturas. Por outro lado, em materiais ferromagnéticos, ela é observada a divergir quando a temperatura chega em T_c , seguindo uma lei de potência $\chi(T) \sim (T - T_c)^{-\gamma}$, onde γ está tipicamente entre os valores 1.3 e 1.4.

Neste trabalho, calculamos a susceptibilidade magnética em função da temperatura e da anisotropia de campo cristalino. Na figura (4.8) exibimos a susceptibilidade versus a temperatura para $p = 0$ e $D = 0$. Tomando a região de altas temperaturas (fase paramagnética), o diagrama indica que a susceptibilidade cresce com o inverso da temperatura, isto é, a medida que caminhamos na direção de menores valores da temperatura a susceptibilidade cresce. Ao se aproximar da temperatura crítica esta grandeza experimenta uma divergência, indicando que há uma transição de fase. Desta forma, a susceptibilidade magnética pode ser considerada como uma assinatura da transição de fase, pois em T_c ela apresenta uma forte divergência. Na região abaixo de T_c , a susce-

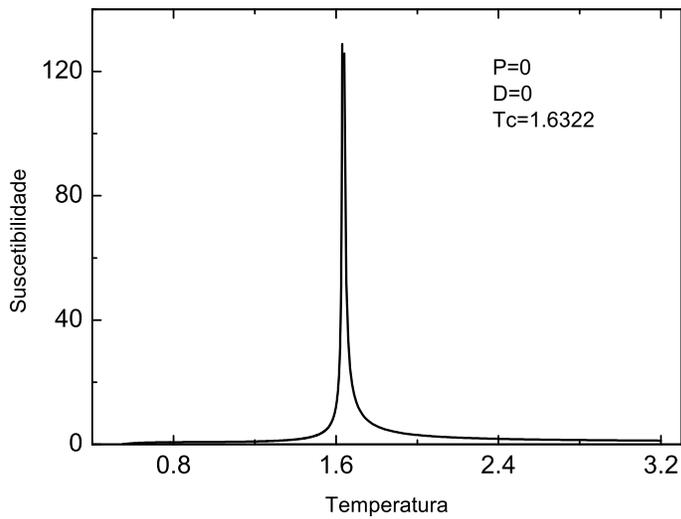


Figura 4.8: Dependência Suscetibilidade em relação a temperatura para o caso puro, $p = 0$ e indicando uma temperatura crítica de $T_c = 1.6322$.

ptibilidade cresce com a temperatura, e em T_c apresenta a mesma divergência. A figura (4.8) mostra a divergência na temperatura $T_c = 1.6322$.

Por outro lado, a figura (4.9) mostra a susceptibilidade na região de $p = 0$ e $D = 0.5$, onde o comportamento versus a temperatura é o mesmo apresentado na figura (4.8). Neste caso, há um realce na observação de que a anisotropia de campo cristalino, nessa região (região de transição de fase de segunda ordem), somente faz a temperatura crítica diminuir, como é mostrado na figura, onde $T_c = 1.5299$.

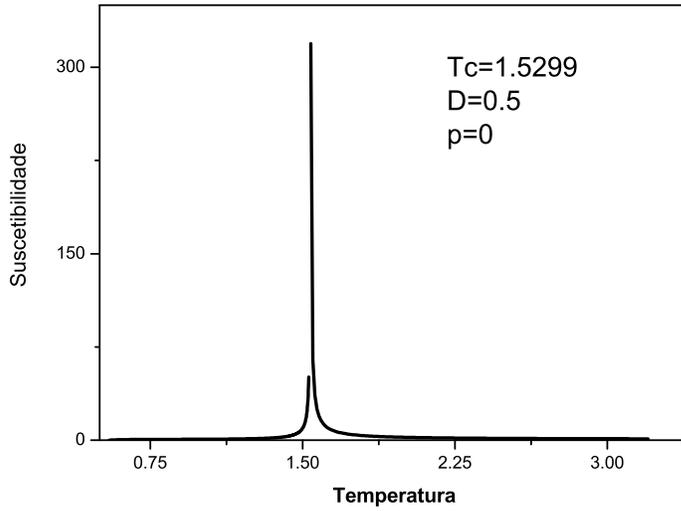


Figura 4.9: Dependência Suscetibilidade em relação a temperatura para o caso puro, $p = 0$ e indicando uma temperatura crítica de $T_c = 1.5299$.

4.4 Conclusões

Nesta dissertação estudamos o diagrama de fase, e propriedades termodinâmicas do modelo de Ising de spins mistos $\sigma = \pm 1/2$ e $S = \pm 1, 0$ com anisotropia aleatória de campo cristalino. Utilizamos a aproximação de campo médio de Pierls-Bugoliubov para calcular a energia livre, as magnetizações de sub-rede e susceptibilidade magnética. Por outro lado, para estudar o diagrama de fase realizamos a expansão de Landau da energia livre.

As nossas principais conclusões podem ser resumidas da seguinte forma:

- O diagrama de fase do sistema no campo D versus T apresenta linha de transição de fase de segunda ordem e de primeira ordem numa região de $0 \leq p < 0.1$, para valores grande de D . Esses dois regime de transição de fase são separados por pontos tricríticos. Portanto, o sistema apresenta comportamento tricrítico.
- O diagrama de fase do sistema no campo D versus T apresenta uma linha de primeira ordem, separando duas fases ordenadas, uma de baixa densidade e a outra de alta densidade. Este comportamento persiste no intervalo de $0.01 \leq p \leq 0.04$.
- Na região de baixas temperaturas e da anisotropia muito grande o sistema apresenta-se na fase ordenada de baixa densidade (Fe II). Nesta fase um aumento na temperatura leva

a uma transição de fase de segunda ordem da fase ferro II para a fase paramagnética.

- Na região de $0.1 \leq p < 1$, o diagrama de fase apresenta somente liha de segunda ordem.
- O comportamento das magnetizações de sub-redes refletem o comportamento da transição de fase de primeira ordem e de segunda ordem. Na região da transição de fase de segunda ordem a magnetizações das sub-redes vão a zero continuamente, refletindo o caráter da transição. Por outro lado, na região de transição de fase de primeira ordem o comportamento da magnetização é muito diferente. A magnetização da segunda sub-rede cai mais rápido do que da outra sub-rede. Este fato é devido que os spins da sub-rede B estão exposto a ação da anisotropia de campo cristalino, a qual favorece o estado $S = 0$.
- A susceptibilidade magnética também realça o papel da anisotropia de campo cristalino, pois determina a temperatura crítica ao sofrer uma singularidade nesse ponto. Ela indicou que um aumento na magnitude da anisotropia de campo cristalino a temperatura crítica diminui.

4.5 Perspectivas

Muitos esforços têm sido feitos para estudar as propriedades magnéticas de sistemas de spins mistos. A razão destes interesses é vem do fato que os modelos de Ising de spins mistos descrevem os materiais ferrimagnetos, os quais têm grande importância para as aplicações tecnológicas. Experimentalmente, importantes avanços foram alcançados na síntese de ferrimagnetos em duas e três dimensões, tais como os organometálicos ferrimagnetos em duas dimensões, apparatus construídos de misturas de metais [$P(Phenyl)_4$], [$MnCr(oxalate)_3$](29; 30; 31; 32). Do ponto de vista teórico, as propriedades desses sistemas tem sido extensivamente estudados por uma variedade de métodos (aproximação de campo médio, grupo de renormalização, e simulação de Monte Carlo).

Portanto, como proposta de trabalhos futuros, temos as seguintes idéias:

- Estudar as propriedades magnéticas do modelo de Ising de Spins mistos com spins $S \geq 3/2$ com anisotropia aleatória de campo cristalino utilizando diversas aproximações de campo médio.
- Estudar as propriedades magnéticas do modelo de Ising de Spins mistos com spins

$S = \pm 1, 0$ e $\sigma = \pm 1/2$ com anisotropia aleatória de campo cristalino via simulação computacional.

- Estudar as propriedades magnéticas do modelo de Ising de Spins mistos com spins $S = \pm 1, 0$ e $\sigma = \pm 1/2$ com anisotropia aleatória de campo cristalino adicionando um campo magnético aleatório.

- Todas essas propostas podem ser realizadas também mudando o sinal da interação de troca.

Referências Bibliográficas

- [1] Francis Weston, Física 3. (Rio de Janeiro), (Livros Técnicos e Científicos,1983).
- [2] B. D. Cullit,Introduction to Magnetic Materials (University of Notre Dame, 1972).
- [3] L. Néel, Ann. Physique. 10, 18 (1932).
- [4] H. E. Stanley, Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena (Oxford University Press, New York, 1971).
- [5] S. R. Salinas, *Introdução a Física Estatística*, (EDUSP, São Paulo, 1997).
- [6] A. P. Vieira, J.X. de Carvalho and S. R. Salinas, Phys. Rev. B **63**, 184415 (2001).
- [7] A. P. Vieira, Efeitos de desordem ou aperiodicidade sobre o comportamento de sistemas magnéticos,Tese de Doutorado, Instituto de Física, USP, S. Paulo (2002).
- [8] W. Heisenberg, Z. Phys. 49, 619 (1928).
- [9] Kerson Huang, Statistical Mechanics (Wiley International Edition, 1963).
- [10] E. Ising, Z. Physik 31, 253 (1925).
- [11] Barry M. McCoy e Tai Tsun Wu, The Two- Dimensional Ising Model (Harvard University Press, 1973).
- [12] R.K. Pathria, Statistical Mechanics, International Series in Natural Philosophy (Pergamon Press 1988), v. 45.
- [13] L. Onsager, Phys. Rev. 65, 117 (1944).

- [14] H. Falk, *Am. J. Phys.* **38**, 858 (1970).
- [15] L. L. Gonçalves, *Phys. Scr.* **32**, 248 (1985).
- [16] Mário José de Oliveira, *Termodinâmica*, São Paulo, Editora Livraria da Física (2005).
- [17] T. Iwashita and N. Uryu, *J. Phys. Soc. Jpn.* **53**, 721 (1984).
- [18] N. R. da Silva and S. R. Salinas, *Phys. Rev. B* **44**, 852 (1991).
- [19] J. W. Tucker, *J. Magn. Mater.* **195**, 733 (1999).
- [20] H. F. Verona De Resende, F. C. Sa Barreto, and J. A. Plascak, *Physica* **149A**, 606 (1988).
- [21] A. Bobák and M. Jurcisin, *Physica A* **240**, 647 (1997).
- [22] T. Kaneyoshi, *Physica A* **153**, 556 (1988).
- [23] T. Kaneyoshi, *J. Phys. Soc. Jpn.* **56**, 2675 (1987).
- [24] S. G. A. Quadros and S. R. Salinas, *Physica A* **206**, 479 (1994).
- [25] G.M. Zhang and C.Z. Yang, *Phys. Rev. B* **48**, 9452 (1993).
- [26] G. M. Buendia and M. A. Novotny, *J. Phys.: Condens. Matter* **9**, 5951(1997).
- [27] S. G. A. Quadros and S. R. Salinas, *Physica A* **206**, 479 (1994).
- [28] T. Kaneyoshi and J. C. Chen - *J. M. M. M.*, 201 (1991).
- [29] H. Tamaki, Z.J. Zhong, N. Matsumoto, S. Kida, M. Koikawa, N. Achiwa, Y. Hashimoto, H. Okawa, *J. Am. Chem. Soc.* **114** (1992) 6974; H. Okawa, N. Matsumoto, H. Tamaki, S. Kida, M. Ohba, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **233** (1993) 257.
- [30] G. Du, J. Joo, A.J. Epstein, J.S. Miller, *J. Appl. Phys.* **73** (1993) 6566.
- [31] C. Mathonière, C.J. Nuttall, S.G. Carling, P. Day, *Inorg. Chem.* **35** (1996) 1201.
- [32] M. Sugimoto, N. Hiratsuka, *Jpn. J. Appl. Phys.* **21** (1982) 197.

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](#)