

UFMT Instituto de Física

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO



Itacy José de Souza

— Fevereiro 2009 —

Livros Grátis

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

Milhares de livros grátis para download.

Efeitos das Aleatoriedades das Anisotropias de Campo Cristalino no Modelo de Ising de Spin Misto $S=1$ e $S=3/2$

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-graduação em Física na Universidade Federal de Mato Grosso como requisitos necessários a obtenção do título de Mestre em Física

Orientador:

Prof. Dr. Alberto Sebastião de Arruda

— Junho 2008 —

Vida: fonte de todas nossas realizações

Imaginação é mais importante que inteligência

Albert Einstein

Agradecimentos

- A Deus em primeiro lugar sobre tudo que me proporcionou e pedir a bênção a Deus para todos que fizeram parte deste trabalho para o meu sucesso;
- A minha esposa Luzia pela paciência, carinho compreensão e amor durante este trabalho de mestrado;
- As minhas filhas: Hellen , Kerolyne , Weylla pelo apoio incondicional;
- Ao meu pai (em memória), pela educação exemplar e por sua visão do saber: "Nunca é demais aprender, pois todo o conhecimento adquirido, de alguma forma, algum dia será aproveitado";
- A minha mãe, pelo seu amor e dedicação, que me ensinou através da sua vida, nunca desejar a alguém o que eu não quero para mim;
- Aos meus amigos e companheiros do mestrado pela determinação;
- Aos meus os professores da Universidade Federal de Mato Grosso, pois participaram da minha formação acadêmica, contribuindo para este momento;
- Em especial aos professores: Dr. Alberto S. de Arruda e Dr. Jorge Luiz Brito de Faria, Teldo e outros por esta oportunidade contribuindo para meu enriquecimento acadêmico, respectivamente, com sua orientação e co-orientação;
- a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior(CAPES), pelo apoio financeiro;

Conteúdo

Lista de Figuras	vi
Resumo	xi
Abstract	xiii
1 Introdução: Magnetismo	1
1.1 Introdução	1
1.2 O modelo de Ising	4
1.2.1 Solução exata do modelo de Ising em uma dimensão:	5
2 Transição de Fase e Fenômenos Críticos	10
2.1 Introdução	10
2.2 Expoentes Críticos	13
2.3 Teoria Fenomenológica de Landau	16
2.4 Aproximação de Campo Médio	23
2.4.1 Aproximação de Campo Médio de Pierre Weiss	23
2.4.2 Aproximação de Campo Médio via Princípio Variacional	28
2.4.3 Aproximação de Campo Médio via método Variacional para o Modelo de Ising	31
3 Efeitos das Aleatoriedades das Anisotropias de Campo Cristalino no Modelo de Ising de Spin Misto $S = 1$ e $S = 3/2$	35
3.1 Introdução	35
3.2 O modelo	36

3.3	Cálculos da Energia Livre via Método Variacional de Peierls-Bogoliubov	38
3.3.1	Cálculo da função de partição	39
3.3.2	Cálculo da função de partição e da energia livre do Hamiltoniano tentativa $G_o(\mathcal{H}_o)$ de cada sub-rede	40
3.4	Cálculos das médias térmicas.	42
3.5	Expansão de Landau	43
4	Resultados e Discussões	45
4.1	Introdução	45
4.2	Diagrama de Fase no Espaço D^A versus T	46
4.2.1	Diagrama de Fase: Caso Especial $p = 1$ e $q = 1$	46
4.2.2	Diagrama de Fase: Caso $p = 0$ e $q = 0$	47
4.2.3	Diagrama de Fase: Caso $p = 0$ e $q \neq 0$	49
4.2.4	Diagrama de Fase: Caso $p \leq 0.0523$ e $q \neq 0$	53
4.2.5	Diagrama de Fase: Caso $p > 0.0523$ e $q \geq 0$	56
4.3	Diagrama de Fase no espaço D^B versus T	61
4.3.1	Caso $p = 0$ e $q = 0$	61
4.3.2	Diagrama de Fase: Caso $p = 0$ e $q \neq 0$	63
4.3.3	Diagrama de Fase: Caso $p \neq 0$ e $q \neq 0$	67
5	Conclusões e Perspectivas	71
5.1	Conclusões Finais	71
5.1.1	Diagramas de fases no espaço $T \times D^A$	72
5.1.2	Diagramas de fases no espaço $T \times D^B$	74
5.2	Perspectivas Futuras	74
	Bibliografia	76

Lista de Figuras

1.1	cadeia de momentos magnéticos S_i interagindo com seus vizinhos próximo S_l e S_j no modelo de Ising.	4
1.2	cadeia linear de momentos magnéticos S_i interagindo com seus vizinhos próximo S_{i+1} e S_{i-1} no modelo de Ising.	6
2.1	dados obtidos por Guggenheim em 1945 de oito fluído diferentes.	13
2.2	Energia livre molar f versus parâmetro de ordem m para uma liga binária em duas sub-redes conforme a teoria de Landau para uma temperatura abaixo da temperatura crítica.	18
2.3	Energia livre molar f versus parâmetro de ordem m para uma liga binária em duas sub-redes conforme a teoria de Landau para uma temperatura igual que a temperatura crítica.	19
2.4	Energia livre molar f versus parâmetro de ordem m para uma liga binária em duas sub-redes conforme a teoria de Landau para uma temperatura acima da temperatura crítica.	19
2.5	Comportamento da magnetização versus temperatura para uma rede d-dimensional, onde as curvas, 1(uma dimensão), 2(duas dimensões) e 3(três dimensões).	25
3.1	Modelo de um Ferromagneto em uma 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. A energia de interação entre os primeiros vizinhos é J	37

- 4.1 Diagrama de fase de $(K_B T/z|J|$ versus $D^A/z|J|)$ para o modelo de Ising de spin misto ferromagnético com o número de coordenações z , $p = 0$ e $q = 0$. O círculo cheio representa o ponto tricrítico, a linha pontilhada representa o comportamento dos pontos tricríticos, a linha tracejada e a contínua representa as transições de primeira e segunda ordem respectivamente a letra P indica a fase desordenada paramagnética e F a fase ordenada ferromagnética. 48
- 4.2 Diagrama de fase de $(K_B T/z|J|$ versus $D^A/z|J|)$ para o modelo de Ising de spin misto ferromagnético com o número de coordenações z , $p = 0$ e $q = 0.01$. O círculo cheio representa o ponto tricrítico, a linha pontilhada representa o comportamento dos pontos tricríticos, a linha tracejada e a contínua representa as transições de primeira e segunda ordem respectivamente a letra P indica a fase desordenada paramagnética e F a fase ordenada ferromagnética. 50
- 4.3 Diagrama de fase de $(K_B T/z|J|$ versus $D^A/z|J|)$ para o modelo de Ising de spin misto ferromagnético com o número de coordenações z , $p = 0$ e $q = 0.80$. O círculo cheio representa o ponto tricrítico, a linha pontilhada representa o comportamento dos pontos tricríticos, a linha tracejada e a contínua representa as transições de primeira e segunda ordem respectivamente a letra P indica a fase desordenada paramagnética e F a fase ordenada ferromagnética. 51
- 4.4 Diagrama de fase de $(K_B T/z|J|$ versus $D^A/z|J|)$ para o modelo de Ising de spin misto ferromagnético com o número de coordenações z , $p = 0$ e $q = 1$. O círculo cheio representa o ponto tricrítico, a linha pontilhada representa o comportamento dos pontos tricríticos, a linha tracejada e a contínua representa as transições de primeira e segunda ordem respectivamente a letra P indica a fase desordenada paramagnética e F para fase ordenada ferromagnética. 52

- 4.5 Diagrama de fase de $(K_B T/z|J|$ versus $D^A/z|J|)$ para o modelo de Ising de spin misto ferromagnético com o número de coordenações z , $p = 0.01$ e $q = 0.02$. O círculo cheio representa o ponto tricrítico, a linha pontilhada representa o comportamento dos pontos tricríticos, a linha tracejada e a contínua representa as transições de primeira e segunda ordem respectivamente a letra P indica a fase desordenada paramagnética e F a fase ordenada ferromagnética. 54
- 4.6 Diagrama de fase de $(K_B T_c/z|J|$ versus $D^A/z|J|)$ para o modelo de Ising de spin misto ferromagnético com o número de coordenações z , $p = 0.0523$ e $q = 1$. O círculo cheio representa o ponto tricrítico, a linha pontilhada representa o comportamento dos pontos tricríticos, a linha tracejada e a contínua representa as transições de primeira e segunda ordem respectivamente a letra P indica a fase desordenada paramagnética e F a fase ordenada ferromagnética. 55
- 4.7 Diagrama de fase de $(K_B T/z|J|$ versus $D^A/z|J|)$ para o modelo de Ising de spin misto ferromagnético com o número de coordenações z , $p = 0.0524$ e $q = 0$. O círculo cheio representa o ponto tricrítico, a linha pontilhada representa o comportamento dos pontos tricríticos, a linha tracejada e a contínua representa as transições de primeira e segunda ordem respectivamente a letra P indica a fase desordenada paramagnética e F a fase ordenada ferromagnética. 57
- 4.8 Diagrama de fase de $(K_B T/z|J|$ versus $D^A/z|J|)$ para o modelo de Ising de spin misto ferromagnético com o número de coordenações z , $p = 0.0524$ e $q = 0.02$. A letra P indica a fase desordenada paramagnética e F a fase ordenada ferromagnética. 58
- 4.9 Diagrama de fase de $(K_B T/z|J|$ versus $D^A/z|J|)$ para o modelo de Ising de spin misto ferromagnético com o número de coordenações z , $p = 0.0524$ e $q = 0.85$. A letra P indica a fase desordenada paramagnética e F a fase ordenada ferromagnética. 59
- 4.10 Diagrama de fase de $(K_B T/z|J|$ versus $D^A/z|J|)$ para o modelo de Ising de spin misto ferromagnético com o número de coordenações z , $p = 0.0524$ e $q = 1$. A letra P indica a fase desordenada paramagnética e F a fase ordenada ferromagnética. 60

- 4.11 Diagrama de fase de $(K_B T/z|J|$ versus $D^B/z|J|)$ para o modelo de Ising de spin misto ferromagnético com o número de coordenações z , $p = 0$ e $q = 0$. O círculo cheio representa o ponto tricrítico, a linha pontilhada representa o comportamento dos pontos tricríticos, a linha tracejada e a contínua representa as transições de primeira e segunda ordem respectivamente a letra P indica a fase desordenada paramagnética e F a fase ordenada ferromagnética. 62
- 4.12 Diagrama de fase de $(K_B T/z|J|$ versus $D^B/z|J|)$ para o modelo de Ising de spin misto ferromagnético com o número de coordenações z , $p = 0.00$ e $q = 0.01$. O círculo cheio representa o ponto tricrítico, a linha pontilhada representa o comportamento dos pontos tricríticos, a linha tracejada e a contínua representa as transições de primeira e segunda ordem respectivamente a letra P indica a fase desordenada paramagnética e F a fase ordenada ferromagnética. 64
- 4.13 Diagrama de fase de $(K_B T/z|J|$ versus $D^B/z|J|)$ para o modelo de Ising de spin misto ferromagnético com o número de coordenações z , $p = 0$ e $q = 1$. A letra P indica a fase desordenada paramagnética e F a fase ordenada ferromagnética. 65
- 4.14 Diagrama de fase de $(K_B T/z|J|$ versus $D^B/z|J|)$ para o modelo de Ising de spin misto ferromagnético com o número de coordenações z , $p = 0.01$ e $q = 0.01$. O círculo cheio representa o ponto tricrítico, a linha pontilhada representa o comportamento dos pontos tricríticos, a linha tracejada e a contínua representa as transições de primeira e segunda ordem respectivamente a letra P indica a fase desordenada paramagnética e F a fase ordenada ferromagnética. 66
- 4.15 Diagrama de fase de $(K_B T/z|J|$ versus $D^B/z|J|)$ para o modelo de Ising de spin misto ferromagnético com o número de coordenações z , $p = 0.03$ e $q = 0.03$. O círculo cheio representa o ponto tricrítico, a linha pontilhada representa o comportamento dos pontos tricríticos, a linha tracejada e a contínua representa as transições de primeira e segunda ordem respectivamente a letra P indica a fase desordenada paramagnética e F a fase ordenada ferromagnética. 68

4.16 Diagrama de fase de $(K_B T/z|J|$ versus $D^B/z|J|)$ para o modelo de Ising de spin misto ferromagnético com o número de coordenações z , $p = 0.15$ e $q = 0$. A letra P indica a fase desordenada paramagnética e F a fase ordenada ferromagnética. 69

Resumo

Neste trabalho foi estudado o diagrama de fase do modelo de Ising de spins mistos $S = 1$ e $S = 3/2$. O sistema considerado é composto por duas sub-redes, uma com $N/2$ spins $S = 1$ a qual foi chamada de sub-rede A, e a outra sub-rede B com $N/2$ spins $S = 3/2$. Os spins da sub-rede A estão acoplados com os seus primeiros vizinhos na sub-rede B através da interação de troca ferromagnética ou ferrimagnética. Todos os spins de cada sub-rede estão sob ação de uma anisotropia de íon único aleatória (D_i^A para sub-rede A e D_j^B para sub-rede B) governada por uma distribuição de probabilidade. Neste modelo há competição entre as interações de troca e as anisotropias de íon único, além do efeito da temperatura. Se por um lado a interação de troca tenta ordenar os spins das duas sub-redes paralelamente ($J > 0$) ou anti-paralelamente ($J < 0$), por outro lado as anisotropias alterna em promover o ordenamento e o desordenamento, e a agitação térmica, a qual sempre desordenará o sistema com o crescimento da temperatura. Os diagramas de fases no espaço $T \times D^A$ exibem basicamente três tipos de comportamento: primeiramente na faixa de valores $0 \leq p \leq 0.0523$ exibem comportamentos tricríticos para qualquer valor de q , e o crescimento desse parâmetro levam as diferentes linhas de transição de fase se fundirem em uma única linha no limite de $q = 1$. O segundo refere-se $0.0523 < p \leq 0.0524$, o diagrama de fase é dividido em duas regiões, uma no caso de $q = 0$, o sistema começa se comporta como o modelo de Blume-Capel para valores $D^B \geq 0$, sem comportamento tricrítico, somente linha de segunda ordem. A outra região para valores de $D^B < 0$, ainda o sistema apresenta comportamento tricrítico, onde a linha de ponto tricrítico tem a mesma extensão do primeiro caso, isto é $D^A = -0.5$ à $D^A = -1.5$. O terceiro tipo de diagrama de fase trata-se do caso $p > 0.0524$ o sistema não apresenta comportamento tricrítico para qualquer valor do parâmetro q , porém o crescimento de q faz as linhas se fundirem e em $q = 1$ todas as linhas se fundem em apenas uma linha de segunda ordem. Os diagramas de fases no espaço $T \times D^B$ exibem comportamento tricrítico para valores do parâmetro $p < 0.06$ e para um certo valor crítico de q . Nessa faixa de valores de p , para um valor fixo desse parâmetro e variando o valor

de q o efeito é a transformação gradativa das linhas de primeira ordem em segunda ordem, assim para valores de q maiores do que um certo valor crítico, todas as linhas de primeira ordem transformam em linha de segunda ordem, excluindo completamente o comportamento tricrítico.

Abstract

In this work was studied the phase diagram of the model of Ising mixed spin $S = 1$ and $S = 3 / 2$. The system which was considered consists of two sub-lattice, one with $N/2$ spins $S = 1$ which was called of sub-lattice A, and another sub-lattice B with $N/2$ spins $S = 3/2$. The spins of the sub-lattice A are coupled with their next neighbors in the sub-lattice B through of the interaction of ferromagnetic exchange or ferrimagnetic. All spins of each sub-lattice are under the action of an random ion anisotropy single (D_i^A for the sub-lattice and D_j^B for sub-lattice B) governed by a distribution of probability. In this model there is competition between the exchange and interaction anisotropy of single ion, addition the effect of temperature. If on one hand the interaction of exchange attempts to order the spins of the two sub-lattice in parallel ($J > 0$) or anti parallel ($J < 0$), in addition the anisotropy alternating in to order and to disorder and thermal agitation, which always cluttering the system with the growth of temperature. The phase diagrams in space ($T \times D^A$) exhibit basically three types of behavior: first in the range of values ($0 \leq p \leq 0.0523$) exhibit tricritical behavior to any value of q , and the growth of this parameter lead to different lines of the phase transition and merges into a single line in the limit of $q = 1$. The second refers to ($0.0523 < p \leq 0.0524$), the phase diagram is divided into two regions, one in the case of $q = 0$, the system starts to behavior as the model Blume-Capel for values of ($D^B \geq 0$), without tricritical behavior, only the second line of order. The other region for values of ($D^B < 0$), yet the system exhibit tricritical behavior, where the line of tricritical point has the same extension of the first case, that is ($D^A = -0.5$ to $D^A = -1.5$) . The third type of phase diagram of this is the case ($p > 0.0524$) the system does not display tricritical behavior for any value of q , but the growth of q makes the lines are merging and in $q = 1$ all lines merges into in just a line of second order. The phase diagram in the space $T \times D^B$ exhibit tricritical behavior for parameter values $p < 0.06$ and to a certain critical value of q . In this range of values of p , for a fixed value of this parameter and varying the value of q effect is gradual transformation of the lines of the first order second order lines, so for

values of q larger than a certain critical value, all lines first order converted into second-order line, excluding the tricritical behavior completely.

Capítulo 1

Introdução: Magnetismo

1.1 Introdução

O interesse no estudo do magnetismo remonta há vários séculos antes da era cristã. Na região da Magnésia era conhecido um mineral ($FeO - FeO_3$, a *magnetita*) com propriedades de exercer uma forte atração sobre o ferro. Esse estranho fenômeno gerou diversas especulações sobre o comportamento apresentado pela magnetita. Acreditava-se, dentre outras hipóteses, que este elemento era de origem divina e que possuía almas e outras superstições. O surgimento e utilização da bússola (instrumento constituído basicamente por $FeO - FeO_3$) possibilitou as grandes navegações, entre outras coisas, a expansão do comércio e das fronteiras do mundo, bem como permitiu as primeiras constatações de que a própria Terra seria um grande ímã natural. Por sua simplicidade, a bússola foi talvez um dos mais simples instrumentos a causar fascínio entre os homens. Apesar do grande interesse devotado ao fenômeno do magnetismo, o seu desenvolvimento se deu muito lentamente. O *status* científico só foi alcançado na segunda metade do século XIX com as investigações sistemáticas das propriedades magnéticas dos materiais feita por Pierre Curie.

No início do século passado definiu-se como **ferromagneto** aqueles materiais magnéticos que exibiam magnetização espontânea (ordenamento dos dipólos magnéticos) abaixo de uma dada temperatura (conhecida por temperatura crítica ou de Curie- T_c) quando na ausência do campo magnético

aplicado e é nula para $T > T_c$ (sistema desordenado ou paramagnético). Esta temperatura era diferente para diferentes materiais .

A explicação microscópica do magnetismo começou com a teoria do campo molecular de Weiss. Ele assumiu que os materiais magnéticos eram compostos por átomos magnéticos (pequenos imãs) cada um com momento de dipolo magnético. A interação entre os dipolos magnéticos era de tal forma que cada um sofria a ação de um campo molecular devido aos dipolos vizinhos. Esta teoria descrevia a variação da magnetização espontânea com a temperatura em completa concordância com os experimentos da época.

Sabe-se hoje que o magnetismo nos materiais é oriundo de efeitos essencialmente quânticos. Assim, na década de 20, com o desenvolvimento da mecânica quântica, foi possível explicar a origem dos dipolos magnéticos atômicos, os quais eram devidos ao desemparelhamento dos spins eletrônicos nos íons magnéticos localizados nos sítios da rede. Heisenberg propôs um mecanismo para as interações dos spins eletrônicos nos materiais, hoje conhecido como interação de Heisenberg. Os spins localizados nos sítios i interagem com os spins dos sítios j através de uma energia de troca J_{ij} . $J_{ij} > 0$ favorece o alinhamento paralelo dos spins (ferromagnetismo) e para o caso $J_{ij} < 0$ o favorecimento passa a ser anti-paralelo (antiferromagnetismo).

Atualmente, o interesse no estudo do magnetismo é ainda maior, não somente pelo fascínio de suas propriedades que tem levado muitos pesquisadores a se dedicarem integralmente ao estudo dessas propriedades, mas também devido ao grande valor agregado que gira em torno do comércio de materiais magnéticos. Vários são os fatores relevantes, destacando-se o desenvolvimento tecnológico desses materiais e sua caracterização por técnicas modernas de alta precisão. Por outro lado, a formulação de modelos teóricos simples, baseados na análise microscópica destes materiais, aliadas às técnicas modernas de simulação computacional tem conduzido a resultados satisfatórios na descrição de suas propriedades físicas.

Os sistemas ferromagnéticos apresentam como principal característica a existência de uma fase magneticamente ordenada na região de baixas temperaturas. A transição de fase entre os regimes ordenado e desordenado pode ocorrer de forma contínua. Neste caso, diz-se que a transição é de segunda ordem. Quando a transição é descontínua, diz-se que a mesma é de primeira

ordem. Para a descrição teórica quantitativa de uma transição de fase faz-se necessário identificar uma quantidade, chamada de *parâmetro de ordem*, cuja média térmica anula-se em um lado da transição (quase invariavelmente no lado da alta temperatura). Não há, em geral, nenhum esquema para definir *parâmetros de ordem*. Entretanto, é comum considerar cada situação física particular. Por outro lado, é possível enumerar (ou identificar) o tipo de *parâmetro de ordem* para uma dada situação, através do conhecimento prévio de um número de exemplos de transições de fase que são familiares. A magnetização é o *parâmetro de ordem* para sistemas ferromagnéticos. Particularmente para uma transição de segunda ordem, a magnetização diminui continuamente à medida que a temperatura aumenta, anulando-se em uma temperatura crítica T_c . Próximo a esta temperatura a magnetização espontânea varia segundo uma lei de potência caracterizada pelo expoente β , da forma

$$M \sim |T - T_c|^\beta$$

para $T < T_c$. Outras grandezas termodinâmicas de um sistema magnético possuem singularidades próximas ao ponto crítico. Essas, por sua vez, são representadas por leis de potências com expoentes críticos bem definidos. Além da magnetização, outras grandezas de interesse são: o calor específico, a susceptibilidade magnética e o comprimento de correlação. Todas apresentam comportamentos característicos nas proximidades do ponto crítico expressos por relações similares àquelas da magnetização[1, 2, 3, 4, 5].

É objetivo deste capítulo apresentar, em linhas gerais, os primeiros ensaios para o estudo teórico de sistemas magnéticos. Vários são os modelos conhecidos na literatura para estudar materiais que exibem propriedades magnéticas. Essencialmente estes modelos buscam simular a estrutura microscópica essenciais desses materiais magnéticos, não tratam todos os detalhes estruturais reais. Contudo, entre os modelos conhecidos na literatura, destacam-se aqueles que são capazes de capturar a essência do que acontece quando um sistema real sofre uma transição de fase. Neste contexto, os modelos de Ising[6] e Heisenberg[7] são os mais explorados na literatura.

No presente capítulo a título de revisão, será apresentado uma solução exata do modelo de Ising em uma dimensão.

1.2 O modelo de Ising

Os dipolos magnéticos do modelo de Ising podem apontar em apenas duas direções: para cima (*up*) e para baixo (*down*). Entretanto, sabe-se que existem materiais que necessitam de spins com maior flexibilidade de orientação. Os spins do modelo *XY* são capazes de apontar em qualquer direção dentro de um dado plano (cada spin é caracterizado por um vetor \mathbf{S} de duas componentes). Um modelo mais geral consiste de um arranjo de spins \mathbf{S} quântico m -dimensional, no caso de $m = 3$ tem-se o modelo de Heisenberg. Entretanto, neste capítulo, estuda-se precisamente o modelo de *Ising*, o qual é um caso especial do modelo de Heisenberg quando $m = 1$.

Do ponto de vista histórico, não é possível falar de magnetismo sem referência ao modelo de Ising. Proposto em 1920 por Wilhelm Lenz como tema tese de doutorando para o aluno Ernest Ising, o qual 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 de momentos magnéticos S_i interagindo com seu vizinho próximo S_j na forma

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j$$

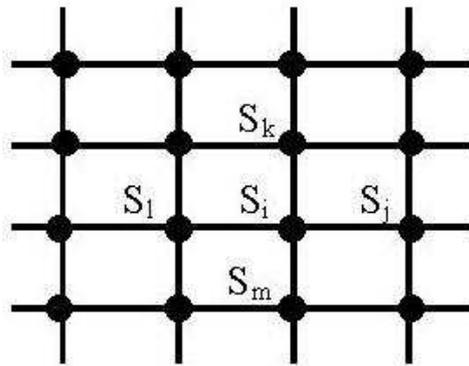


Figura 1.1: cadeia de momentos magnéticos S_i interagindo com seus vizinhos próximos S_l e S_j no modelo de Ising.

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.

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.

Neste modelo (Ising), assume-se que os spins primeiros vizinhos possuem energia de interação JS_iS_j , com spins confinados nos sítios de uma rede regular periódica cuja Hamiltoniana do sistema pode ser escrita sob a forma:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} - H \sum_{i=1}^N S_i,$$

onde H é o campo externo

1.2.1 Solução exata do modelo de Ising em uma dimensão:

O modelo de Ising é um dos poucos modelos de partículas interagentes para qual se conhece sua solução exata, sem dúvida o mais simples de todos eles, o interesse por este modelo e por diversas razões. Por um lado resulta no interessante papel no desenvolvimento histórico de sua compreensão ferromagnético e suas transição de fase contínua, em cujo processo representa um papel fundamental.

Por outro lado, o método de solução em uma dimensão representado por Ising e logo foi estendido a outra dimensão por Onsager, constitui a base de diversos métodos modernos de cálculos na física estatística de fenômenos críticos. Finalmente, hoje se sabe que este modelo de Ising é uma generalização que serve para explicar uma variedade de fenômeno não somente físico, como também de diversas outras áreas.

O modelo inicial era bem simples, seria uma cadeia linear de momentos magnéticos S_i interagindo com seu vizinho próximo S_{i+1} e S_{i-1} .



Figura 1.2: cadeia linear de momentos magnéticos S_i interagindo com seus vizinhos próximo S_{i+1} e S_{i-1} no modelo de Ising.

Começamos então com a solução em uma dimensão ($d = 1$) o Hamiltoniano de Ising pode ser escrito de uma forma:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} - H \sum_{i=1}^N S_i, \quad (1.1)$$

Onde $S_i = \pm 1$ e vamos utilizar uma condição de contorno periódico, isto é :

$$S_{i+N} = S_i$$

Assim, podemos escrever o Hamiltoniano de maneira mais simétrica, ou seja:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} - \frac{H}{2} \sum_{i=1}^N (S_i + S_{i+1}), \quad (1.2)$$

A função de partição canônica é dada por:

$$\mathcal{Z}_N = \sum_{\{s_i\}} \exp(-\beta \mathcal{H}), \quad (1.3)$$

substituindo a Eq.(1.2) na Eq.(1.3) ficaremos

$$\mathcal{Z}_N = \sum_{\{s_i\}} \exp \left[K \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} + \frac{L}{2} \sum_{i=1}^N (S_i + S_{i+1}) \right],$$

onde $K = \beta J$ e $L = \beta H$. obtemos assim uma produtória que vamos representar por:

$$\mathcal{Z}_N = \sum_{(S_1=\pm 1)} \sum_{(S_2=\pm 1)} \dots \sum_{(S_N=\pm 1)} \prod_{i=1}^N T(S_i, S_{i+1}), \quad (1.4)$$

sendo

$$T(S_i, S_{i+1}) = \exp \left[K S_i S_{i+1} + \frac{L}{2} (S_i + S_{i+1}) \right]. \quad (1.5)$$

Pode assumir quatro valores pois $S_i = \pm 1$ e $S_{i+1} = \pm 1$ independente do valor de i . Se colocarmos estes valores em forma de matriz, ficaremos

$$T = \begin{bmatrix} T(1, 1) & T(1, -1) \\ T(-1, 1) & T(-1, -1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \exp(K + L) & \exp(-K) \\ \exp(-K) & \exp(K - L) \end{bmatrix},$$

onde T é a matriz de transferência.

Podemos notar que a produtória pode ser representada como um produto de N matrizes (2×2) idênticas, por conseguinte se diagonalizarmos esta matriz, como um todo, pode ser interpretada como um traço (Tr), ou seja, a soma de todos os elementos da diagonal principal, do produto de N matrizes de transferência idênticas.

Assim podemos escrever a função de partição como:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_N &= \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_3=\pm 1} \dots \sum_{S_N=\pm 1} \left(\sum_{S_2=\pm 1} T(S_1, S_2) T(S_2, S_3) \dots T(S_N, S_1) \right) \\ \mathcal{Z}_N &= \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_4=\pm 1} \dots \sum_{S_N=\pm 1} \left(\sum_{S_3=\pm 1} T^2(S_1, S_3) T(S_3, S_4) \dots T(S_N, S_1) \right) \\ \mathcal{Z}_N &= \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_5=\pm 1} \dots \sum_{S_N=\pm 1} \left(\sum_{S_2=\pm 1} T^3(S_1, S_4) T(S_4, S_5) \dots T(S_N, S_1) \right) \\ \mathcal{Z}_N &= \sum_{S_1=\pm 1} T^N(S_1, S_1) \end{aligned} \quad (1.6)$$

$$\mathcal{Z}_N = \text{Tr}(T^N). \quad (1.7)$$

Aplicando a equação secular [$\det(T - \lambda I) = 0$], onde I é uma matriz identidade, podemos encontrar as raízes apartir de uma matriz diagonalizada D .

$$\mathcal{Z}_N = \lambda_1^N + \lambda_2^N, \quad (1.8)$$

onde λ_1 e λ_2 são os autovalores da matriz T dada por.

$$\lambda_{1,2} = \exp(K)\cosh(L) \pm \sqrt{\exp(2K)\cosh^2(L) - 2\sinh(2K)}.$$

É fácil perceber que esses autovalores são sempre positivos e que $\lambda_1 > \lambda_2$. Para obter a energia livre no limite termodinâmico é conveniente reescrever a função de partição por:

$$\mathcal{Z}_N = \lambda_1^N \left[1 + \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right)^N \right]. \quad (1.9)$$

No limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$) a energia livre por partícula.

$$g(T, H) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[-\frac{1}{\beta N} \ln \mathcal{Z}_N \right], \quad (1.10)$$

será dada por

$$g(T, H) = -\frac{1}{\beta} \ln \lambda_1, \quad (1.11)$$

substituindo o maior autovalor λ_1 , ficaremos:

$$g(T, H) = -\frac{1}{\beta} \ln [\exp(K)\cosh(L) + \sqrt{\exp(2K)\cosh^2(L) - 2\sinh(2K)}]$$

Como consideramos anteriormente que ($K = \beta J e L = \beta H$), temos

$$g(T, H) = -\frac{1}{\beta} \ln [\exp(\beta J)\cosh(\beta H) + \sqrt{\exp(2\beta J)\cosh^2(\beta H) - 2\sinh(2\beta J)}] \quad (1.12)$$

A magnetização por spin é dado por:

$$m = - \left(\frac{\partial g}{\partial H} \right)_T, \quad (1.13)$$

após algumas manipulações algébricas, ficaremos

$$m = \frac{\sinh(\beta H)}{\sqrt{\sinh^2(\beta H) + \exp(-4\beta J)}} \quad (1.14)$$

no limite $H = 0$ obtemos $m(t, 0) = 0$ para $T > 0$ e $m(0, 0) = 1$. Temos assim ordenamento apenas com $T = 0$

Este resultado foi frustrante para Ising, e certamente para o Lenz, pois o modelo não apresenta transição de uma fase ordenada para uma fase desordenada em qualquer temperatura $T > 0$. 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 erro de Ising foi na verdade ter conjecturado que em duas ou mais dimensões também não haveria transição de fase, o que sabemos que está errado, pois alguns anos mais tarde, Onsager[8] resolveu o modelo em duas dimensões, o qual representou o maior feito em física teórica. Recentemente, Z.D Zhang[9] publicou um paper com o título *Conjectures on the exact solution of three-dimensional simple orthorhombic Ising lattices*, no qual discuti uma possível solução para o modelo de Ising em três dimensões. Em síntese, foi estudado um dos mais importantes modelos empregados na explicação do comportamento magnético de diversos sistemas físicos, precisamente o modelo de Ising.

Capítulo 2

Transição de Fase e Fenômenos Críticos

2.1 Introdução

Fenômenos Críticos e Transições de Fases são responsáveis por quase todos os eventos essenciais a existência da vida na terra. Naturalmente, é muito conhecida a importância da água se apresentar nos três estados, sólidos, líquido e gasoso. Basicamente, uma transição de fase de um sistema físico é caracterizada por singularidades nas funções termodinâmicas.

Um sistema termodinâmico pode existir em um número de diferentes fases cujo comportamento macroscópico pode ser drasticamente diferente. Em geral, os sistemas tornam-se mais ordenados quando a temperatura é baixada, isto porque a interação começa a ser mais importante que a agitação térmica, e os átomos podem eles mesmos se rearranjarem em estados mais ordenados.

Mudanças de fases ocorrem abruptamente em alguma temperatura (a qual chamaremos de temperatura crítica T_c), embora evidências que ela ocorrerá pode ser encontrada na escala macroscópica quando se aproxima da temperatura crítica. Para entender as transições de fase que podem ocorrer nos sistemas termodinâmicos é necessário, como o primeiro passo, mapear o diagrama de fase do sistema. Em um ponto onde ocorre uma transição, duas ou mais fases podem coexistir em equilíbrio uma com a outra. A condição

para o equilíbrio entre as fases é obtida das condições equilíbrio (máxima entropia ou mínima energia). Da condição de equilíbrio pode ser determinado o número máximo de fases que podem coexistir e, em princípio encontrar equações para as regiões de coexistência (no caso do fluido simples, a equação de Clausius-Clapeyron).

Do ponto de vista da Mecânica Estatística, em uma transição de fase, a energia livre de Gibbs deve mudar continuamente. No entanto, transições de fases podem ser divididas em duas classes de acordo com o comportamento das derivadas da energia livre de Gibbs. Assim, transições de fase as quais são acompanhadas por uma mudança de estado de modo descontínuas, implicando descontinuidade na primeira derivada da energia livre de Gibbs em relação a temperatura, estas transições são chamadas de "Transições de Fase de Primeira Ordem". Por outro lado, transições de fase as quais são acompanhadas por uma mudança de estado de modo contínua, porém com derivadas de ordens superiores, são chamadas de transição de fase contínuas (em particular, de segunda ordem quando a segunda derivada é descontínua no ponto crítico).

Alguns dos mais familiares exemplos de transições de fase de primeira ordem acontecem nos fluídos clássicos. Portanto, as transições vapor-líquido e líquido-sólido são todas de primeira ordem. Nestas transições, através da equação de Clausius-Clapeyron, podem ser encontradas equações aproximadas para as curvas de coexistências. A transição vapor-líquido termina em um ponto crítico e esse fato possibilita comparar os comportamentos observados da região de coexistência do vapor-líquido com o comportamento previsto pelas equações de van der Waals, a primeira teoria clássica de sucesso que descreve a continuidade dos estados líquidos e gasosos da matéria, publicada pela primeira vez em 1873[3]. A teoria de van der Waals permanece atualmente como um importante instrumentos para abordagem dos sistemas fluídos.

Diferentes sistemas termodinâmicos sofrem transições de fase, assim sistemas, tais como, supercondutores e superfluidos são especialmente interessantes, do ponto de vista da mecânica Estatística, porque exibem os dois tipos de transições de fases, a de primeira ordem (descontínuas) e a contínua (caso particular a de segunda ordem), e ainda fornecem um bom teste para

a terceira lei da termodinâmica.

Na ausência de um campo magnético, a transição do estado normal para o estado supercondutor em um metal é contínua. Esta transição de fase é de natureza puramente quântica e resulta de uma condensação macroscópica de pares de elétrons em um único estado quântico (condensação de Bose-Einstein). Por outro lado, a transição superfluido em líquido de He^3 envolvem pares de átomos "dressed de He^3 os quais condensam, em uma escala macroscópica, em um único estado quântico". Em líquido de He^4 um número macroscópico de átomos "dressed de He^4 condensam no estado fundamental. A mistura de He^3 e He^4 forma uma mistura binária, a qual pode sofrer transição de fase superfluida contínua e transição de fase binária de primeira ordem. As maiorias das transições de fase têm associada com elas um ponto crítico, exceto a transição de fase líquido-sólido que até agora não foi ainda encontrado.

Existe uma temperatura bem definida acima da qual uma fase existe e, quando a temperatura é diminuída, uma nova fase aparece. Quando esta fase nova aparece, ela freqüentemente tem propriedades de simetria diferente e uma nova variável termodinâmica, o "parâmetro de ordem", aparece para caracterizar esta nova fase. Para as transições de fase de primeira ordem não é necessário ser uma conexão entre a fase simétrica, de alta temperatura, e aquela fase de baixa temperatura (não simétrica). Por outro lado, para as transições de fase contínuas, há sempre uma bem definida conexão entre as propriedades de simetria das duas fases. Ginzburg e Landau[3] desenvolveram uma teoria completamente geral de transições de fases contínuas de quebra de simetria, a qual envolvem uma expansão analítica da energia livre em termos do parâmetro de ordem.

Ponto crítico exerce um papel muito importante nas teorias de transições de fase. Quando o sistema aproxima do seu ponto crítico do lado de temperatura mais alta, ele começa a se auto-ajustar no nível microscópico. Grandes flutuações ocorrem perto do ponto crítico, sinalizando a necessidade de um novo parâmetro de ordem, o qual finalmente aparece no ponto crítico. No ponto crítico, algumas variáveis termodinâmicas podem tornar-se infinitas. Pontos críticos ocorrem em uma imensa variedade de sistemas termodinâmicos, e uma grande similaridade no comportamento de todos os sistemas

quando eles se aproximam de seus pontos críticos. Um dos melhores modos de caracterizar o comportamento de sistemas quando eles se aproximam do ponto crítico é por meio dos expoentes críticos.

2.2 Expoentes Críticos

No espaço termodinâmico, os pontos onde ocorrem as transições de fase de segunda ordem é conhecido como pontos críticos, e por outro lado, o comportamento dos sistemas termodinâmico em uma transição de fase de segunda ordem é conhecido como "Fenômeno Crítico". É interessante notar que as medidas realizadas nos sistemas termodinâmicos perto do ponto críticos não dependem dos detalhes das interações entre as partículas que constituem o sistemas, isto é, sistemas termodinâmicos diferentes, na criticalidade apresentam o mesmo comportamento. Esse fato é chamado de "Universalidade", e é uma das características marcantes dos fenômenos críticos.

A universalidade pode ser bem visualizada no famoso experimento de Guggenheim[10] em 1945, onde ele mediu o comportamento da diferença das densidades da fase líquida e da fase gasosa de oito fluídos diferentes e surpreendentemente perto do ponto críticos todos os dados se superpõem, e

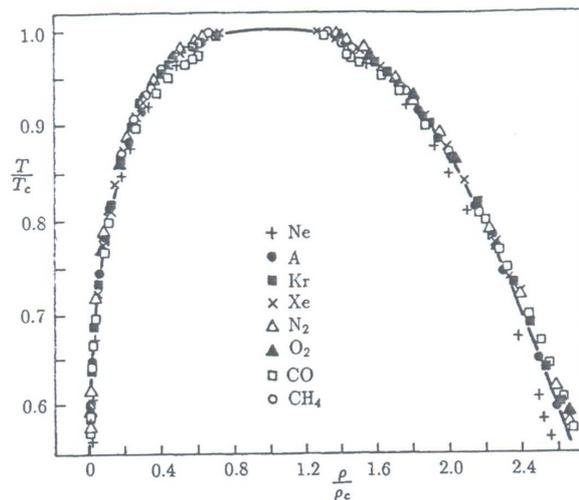


Figura 2.1: dados obtidos por Guggenheim em 1945 de oito fluído diferentes.

assim podem ser descritos por uma mesma equação

$$\rho_l - \rho_g \sim \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^\beta, \quad (2.1)$$

onde $\beta = 1/3 = 0.3333\dots$. Portanto, um bom teste da universalidade é comparar o expoente β deste experimento com os obtidos em transições de fases de diferentes sistemas, os quais possuem um parâmetro de ordem escalar. Portanto, ainda pode ser comparado com os resultados obtidos por Heller e Benedek[11] ($\beta = 0.335 \pm 0.005$) medido em um magneto com anisotropia uniaxial $M_n F_2$. Adicionalmente, comparando com o expoente calculado no modelo de Ising tridimensional obtido por estimativas numéricas ($\beta = 0.324$) ou com a solução exata $\beta = 1/3$, pois tal modelo em três dimensões ainda não tem solução exata. Estes fatos demonstram que para descrever transições de fase é mais conveniente utilizar modelos simples, pois o modelo de Ising (o mais simples) descreve os mesmos fenômenos descritos por complicadas Hamiltonianas.

Nas proximidades do ponto crítico, as grandezas termodinâmicas possuem comportamento singular, para descrever os expoentes críticos será considerado o modelo de Ising bidimensional para descrever um sistema magnético. Portanto, para T muito maior que T_c , o comportamento do sistema é ditado pela energia térmica, os quais deixam a configuração dos spins completamente aleatória, o sistema está na fase de maior simetria, ou desordenada (fase paramagnética). Quando a temperatura é diminuída, a energia de interação entre os spins tem sua importância aumentada, e conseqüentemente começa a aparecer ilhas de spins paralelamente alinhados. Então quando T_c é atingida há uma transição de fase ferromagnética no modelo de Ising bidimensional, onde o comportamento do parâmetro de ordem (magnetização) é dado por:

$$m \sim (-t)^\beta, \quad (2.2)$$

onde $\beta = 1/8$ e $t = (T - T_c)/T_c$.

A susceptibilidade molar χ possui um comportamento divergente. Os dados experimentais mostram que apenas em altas temperaturas ocorre um comportamento linear, o qual constitui a lei de Curie-Weiss. Portanto, a

susceptibilidade à campo nulo, $H = 0$, possui um comportamento divergente da forma

$$\chi \sim |t|^{-\gamma}, \quad (2.3)$$

onde $\gamma = 7/4$. Ao longo da isoterma crítica, $T = T_c$, a magnetização e o campo magnético estão ligados pela relação,

$$H \sim m^\delta, \quad (2.4)$$

onde $\delta = 15$.

Experimentalmente, também se observa que a capacidade térmica molar c_H a campo nulo possui comportamento singular. Essa grandeza pode divergir de acordo com a lei de potência,

$$c_H \sim |t|^{-\alpha}, \quad (2.5)$$

onde $\alpha = 0(\log)$.

No caso em que $\alpha < 0$, é possível que c_H não divirja, embora continue com comportamento singular. Nesse caso, para caracterizar de forma apropriada a sua singularidade com $\alpha < 0$, em que c_c é o valor finito de c_H no ponto crítico, admite-se o seguinte comportamento,

$$c_c - c_H \sim |t|^{-\alpha}, \quad (2.6)$$

classificando uma singularidade para $\alpha = 0$, a qual ela deve ser descrita na forma mais objetiva possível, pois pelo fato que ela pode ser uma divergência do tipo logarítimo,

$$c_H \sim \ln|t|. \quad (2.7)$$

Os expoentes críticos α, β, γ e δ não são independentes entre si, ao contrário estão relacionados por desigualdades, baseadas na segunda lei da termodinâmicas':

Relação de Rushbrooke,

$$\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2, \quad (2.8)$$

Relação de Griffiths,

$$\alpha + \beta(\delta + 1) \geq 2. \quad (2.9)$$

Relação de Widom,

$$\gamma \geq \beta(\delta - 1). \quad (2.10)$$

Relação de Buckingham,

$$d \left[\frac{\delta - 1}{\delta + 1} \right] \geq d - \eta, \quad (2.11)$$

onde d representa a dimensionalidade do sistema.

Relação de Fisher,

$$(2 - \eta)\nu \geq \gamma, \quad (2.12)$$

Relação de Josephson,

$$d\nu \geq 2 - \alpha. \quad (2.13)$$

Estas relações de desigualdades indica que o conhecimento de dois expoentes estima-se todos os demais expoentes. Com o desenvolvimento do grupo de renormalização Kenneth Wilson[12] em 1974, observou-se que estas desigualdades são realmente igualdades, onde a hipótese de Widom tem sido o ponto de partida que posteriormente justificada por Kadanoff usando grupo de renormalização no espaço real.

2.3 Teoria Fenomenológica de Landau

O estudo dos fenômenos críticos é muito dificultoso, basicamente devido a física envolvida ser muito sutil. A total compreensão dessa física se dá em diversos estágios, e está relacionada com a teoria do Grupo de Renormalização, proposta no começo da década de 70 por Kenneth Wilson[12], pela qual foi agraciado com o prêmio de 1982.

Neste trabalho, os objetivos são mais modestos, e para tanto uma simples análise termodinâmica proposta por Landau será suficiente para atingir

os objetivos, os quais consiste em estudar diagramas de fase do modelo de Ising de spins mistos. A teoria de Landau fornece os mesmos expoentes críticos da teoria de campo médio, porém tem a vantagem de ser baseada em poucas hipóteses gerais da termodinâmica, e ainda não envolve os detalhes microscópicos dos sistemas. Este fato constitui uma vantagem, pois permite ser usada, sem significativas modificações, para análise do comportamento crítico de sistemas microscopicamente diferentes. Portanto, a teoria de Landau explica algumas sutilezas das propriedades da universalidade, porém esse comportamento universal previsto por ela é errada. Basta lembrar que a teoria de campo médio fornece que, perto de T_c , o parâmetro de ordem vai a zero com uma lei de potência

$$m \sim (t)^\beta$$

onde $\beta = 1/2$. Este valor de β está em desacordo com os experimentos, os quais medem $\beta = 1/3 \sim 0.33333$, e com valores obtidos por método mais sofisticadas, as fornecem $\beta = 0.324$. Nesta seção será feita uma análise de um ferromagneto uniaxial com objetivos de introduzir a essência da Teoria de Landau.

A teoria de Landau considera algumas simples hipóteses sobre a forma do potencial termodinâmico $G(T, m)$. O potencial deve ser interpretado como um potencial canônico condicional para o sistema de magnetização fixa na ausência de um campo magnético aplicado. O potencial canônico é definido levando em consideração que a probabilidade de encontrar o sistema com magnetização m é proporcional a $e^{f(m)}$. Assim é simétrico em relação a m na ausência de campo magnético. Portanto, a teoria de Landau assume que, para pequenos valores de m , pode-se expandir o potencial canônico em uma série de potência em relação a m :

$$f(T, m) = f_o(T) - Va(T)m^2 - Vb(T)m^4 - \dots \quad (2.14)$$

O parâmetro V é incluído no segundo e terceiro termo simplesmente para tornar "a" e "b" independentes do tamanho do sistema. Os sinais menos sugerem que os termos correspondentes são negativos, porém eles garantem que o ponto estacionário em $m = 0$ seja um máximo quando "a" e "b" são positivos.

Aqui o interesse é o de analisar a termodinâmicas da transição de fase, assim perto de T_c as funções termodinâmicas são não analíticas, porém considera-se que $f(T, m)$ como uma função analítica em m , pois $f(T)$ é a parte não analítica. Na teoria de Landau, a temperatura crítica é interpretada como um ponto onde $a(T)$ muda de sinal, isto é, $a(T) > 0$ para $T > T_c$ e $a(T) < 0$ para $T < T_c$, ao mesmo tempo $b(T)$ deve permanecer positivo, senão o máximo de $f(T, m)$ iria ocorrer em $m = \pm\infty$. Perto de T_c é adequado tratar $a(T)$ como uma função linear com um zero em $T = T_c$ e tratar $b(T)$ como uma constante. Portanto, assume-se que

$$\begin{aligned} a(T) &= at \\ b(T) &= b \end{aligned} \quad (2.15)$$

onde "a" e "b" são constantes e $t = (T - T_c)/T_c$.

Esboçando o gráfico $f(T, m)$ em relação a m , na região $T < T_c$, o máximo de $f(T, m)$ descreve o estado de equilíbrio, o qual ocorre em dois pontos simétricos não zeros. Nessa região o sistema exibe uma magnetização mesmo na ausência de qualquer campo magnético externo, como mostra a figura abaixo.

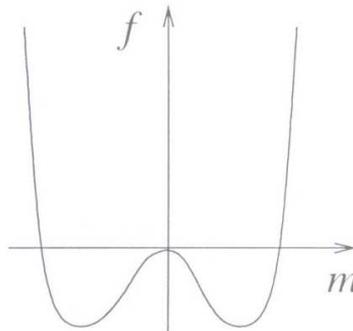


Figura 2.2: Energia livre molar f versus parâmetro de ordem m para uma liga binária em duas sub-redes conforme a teoria de Landau para uma temperatura abaixo da temperatura crítica.

Em $T = T_c$, o máximo é em $m = 0$, porém a distribuição da energia é achatada, conforme figura abaixo.

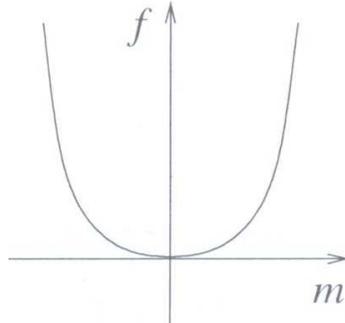


Figura 2.3: Energia livre molar f versus parâmetro de ordem m para uma liga binária em duas sub-redes conforme a teoria de Landau para uma temperatura igual que a temperatura crítica.

Acima da temperatura crítica ($T > T_c$) o máximo é ainda em $m = 0$ veja na figura abaixo.

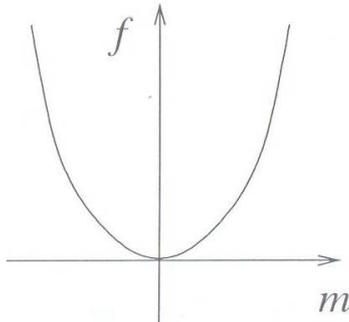


Figura 2.4: Energia livre molar f versus parâmetro de ordem m para uma liga binária em duas sub-redes conforme a teoria de Landau para uma temperatura acima da temperatura crítica.

Isso pode ser facilmente mostrado, considerando as equações 2.14 e 2.15, isto é,

$$\begin{aligned}
 f &= f_o - V a t m^2 - V b m^4 \\
 0 &= \frac{\partial f}{\partial m} = -2 V a t m - 4 V b m^3 \\
 0 &= a t m + 2 b m^3,
 \end{aligned} \tag{2.16}$$

cujas soluções encontradas são:

$$\begin{aligned} m &= 0 \\ m &= \pm \left(\frac{a}{2b}\right)^{1/2} (-t)^{1/2}. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Quando $T > T_c$ a solução $m = 0$ descreve um máximo de $f(T, m)$ e as soluções não zero são imaginárias e portanto fisicamente irrelevantes. Para $T < T_c$ a solução $m = 0$ descreve um máximo local de $f(T, m)$ e agora as soluções não zero são reais e descrevem os possíveis valores de equilíbrios da magnetização. Claramente, a teoria de Landau mostra que o expoente crítico β da magnetização é $\beta = 1/2$.

Para demonstrar a facilidade da teoria de Landau serão calculados os demais expoentes críticos. Começando com o expoente α do calor específico, então é necessário transformar o potencial em uma função somente da temperatura. Isto é feito trocando a variável independente m em $f(T, m)$ pelo seu valor de equilíbrio. Portanto, para T próximo da temperatura crítica do lado de baixo de T_c , tem-se que

$$\begin{aligned} f(T) &= f_o(T) - Vatm^2(T) - Vbm^4(T) \\ f(T) &= f_o(T) + V \left(\frac{a^2}{4bT_c} (T - T_c)^2 \right). \end{aligned} \quad (2.18)$$

A energia interna como função da temperatura de T é escrita como:

$$U = -\frac{\partial f}{\partial \beta} = -\frac{\partial f}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial \beta}$$

obtendo

$$U = K_B T^2 \left[\frac{\partial f_o}{\partial T} + \frac{Va^2 T - T_c}{2b T_c^2} \right]. \quad (2.19)$$

Portanto, o calor específico para $T < T_c$ é calculado por:

$$C = -\frac{\partial U}{\partial T},$$

derivando encontramos

$$C = K_B \frac{\partial}{\partial T} \left[T^2 \frac{\partial f_o}{\partial T} \right] + V \left[\frac{k_B a^2 T^2}{2b T_c^2} + \frac{K_B a^2 T (T - T_c)}{b T_c} \right]. \quad (2.20)$$

No limite de $T \rightarrow T_c$ o calor específico será dado por

$$C = K_B \frac{\partial}{\partial T} \left[T^2 \frac{\partial f_o}{\partial T} \right]_{T_c} + V \frac{k_B a^2}{2b}. \quad (2.21)$$

Acima de T_c , a magnetização é nula, então nessa região o calor específico é dado pelo primeiro termo da Eq.(2.21), isto é,

$$C = K_B \frac{\partial}{\partial T} \left[T^2 \frac{\partial f_o}{\partial T} \right]_{T_c}. \quad (2.22)$$

Assim, esses fatos mostram que na teoria de Landau não há singularidade do calor específico, porém há uma descontinuidade finita em $C(T)$ em T_c de magnitude dada por

$$\Delta C = C_{T < T_c} - C_{T > T_c} = V \frac{k_B a^2}{2b}. \quad (2.23)$$

Para ficar de acordo com a Eq.(2.5), a qual define o expoente α do calor específico, teremos $\alpha = 0$.

O cálculo da susceptibilidade magnética exige a presença de um campo magnético externo, portanto, se tal campo está presente a energia de uma dada configuração A do sistema é mudada de $E(A)$ para $E(A) - H \sum \mu_i$. Portanto,

$$\begin{aligned} f(T, m) &= \ln \left[\sum_A \delta(\sum \mu_i - mV) \exp(-\beta(A)) \right] \\ f(T, m) &= \ln \left[\exp(\beta H m v) \sum_A \delta(\sum \mu_i - mV) \exp(-\beta E(A)) \right] \\ f(T, m) &= \beta H m v + \ln \left[\sum_A \delta(\sum \mu_i - mV) \exp(-\beta E(A)) \right] \\ f(T, m) &= G(T, m)_{H=0} + \beta H m v. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Substituindo $G(T, m)_{H=0}$ na equação acima, tem-se:

$$f(T, m) = f_o(T) + \beta H m v - V a m^2 - V b m^4. \quad (2.25)$$

Assumindo que H é pequeno, positivo e que $T < T_c$, neste caso plotando $f(T, m)$ como uma função de m , agora terá um duplo máximo assimétrico.

O único estado de equilíbrio será dado pelo maior máximo em m positivo. Portanto,

$$\frac{\partial f}{\partial m} = \beta H - 2atm - 4bm^3 = 0. \quad (2.26)$$

O ponto $H = 0$ e $t = 0$ é um ponto singular para as funções termodinâmicas, e portanto deve-se ter muito cuidado para tomar limites e derivadas.

Para calcular o expoente da susceptibilidade γ , é necessário olhar separadamente no limite de $(\partial m/\partial H)_{H=0}$ quando $t \rightarrow 0$ do lado de baixo e do lado de cima de T_c . Inicialmente olhando pelo lado de baixo ($t < 0$), nota-se que a equação (2.26) é uma equação para $m(t, H)$, assim derivando em relação H , tem-se

$$\begin{aligned} \beta - 2at \frac{\partial m}{\partial H} - 12bm^2 \frac{\partial m}{\partial H} &= 0 \\ \beta - 2at\chi_m - 12bm^2(t, 0)\chi_m &= 0. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Substituindo $m^2(t, 0)$ na Eq.(2.27) encontra-se que

$$\chi_m = \frac{\beta_c}{4a}(-t)^{-1}, \quad (2.28)$$

onde $\beta_c = 1/K_B T_c$.

Considerando os valores positivos de t , a magnetização é proporcional a H quando $H \rightarrow 0$, e portanto o termo cúbico na (2.26) pode ser desprezada. A susceptibilidade magnética é então dada por:

$$\chi_m = \frac{\partial m}{\partial H} = \frac{\beta}{2a}(-t)^{-1}, \quad (2.29)$$

comparando estes resultado com a equação (2.3) mostra que a Teoria de Landau prever que $\gamma = 1$.

Cálculos dos expoentes críticos efetuados pelas aproximações de campo médio estão de acordo com os da Teoria de Landau. As aproximações de campo médio desprezam os efeitos das correlações, assim não há nenhuma supresa que suas previsões não estão de acordo com os experimentos e com os cálculos realizados através de aproximações mais sofisticadas.

Recapitulando, a teoria de Landau permite determinar a topologia dos diagramas de fase nas vizinhanças dos pontos críticos e multicríticos. Ela é

ainda capaz de fornecer resultados qualitativos, mas sua grande importância reside na simplicidade da obtenção dos diagramas de fase. Para transições de fases contínuas, a teoria de Landau foi proposta na década de 30, e ela baseava na introdução do conceito de parâmetro de ordem e no estabelecimento de uma expansão da energia livre em termos dos invariantes dessa grandeza, isto é, que a energia livre é uma função analítica nas vizinhanças da criticalidade.

2.4 Aproximação de Campo Médio

O estudo do comportamento crítico dos sistemas termodinâmicos, os quais podem ser descritos microscopicamente por um Hamiltoniano (modelo), exige a posse de uma solução exata de tal modelo. No modelo de Ising só há soluções exatas aceitas em uma e em duas dimensões. Recentemente, Z.D Zhang[9] publicou um paper com o título *Conjectures on the exact solution of three-dimensional simple orthorhombic Ising lattices*, no qual discuti uma possível solução para o modelo de Ising em três dimensões.

Devido a importância de estudar as propriedades dos sistemas termodinâmicos em três dimensões, e na ausência e ou dificuldades matemáticas das soluções exatas, é necessário desenvolver métodos para obtenção de soluções aproximadas, as quais podem ser comparadas com os resultados exatos em uma e em duas dimensões.

2.4.1 Aproximação de Campo Médio de Pierre Weiss

Pierre-Weiss introduziu um método aproximado para a solução do modelo de Ising em dimensões arbitrárias, o qual constitui a base de uma teoria fenomenológica do ferromagnetismo, conhecida como teoria do campo molecular. A origem do campo molecular foi explicada no contexto da mecânica quântica por Heisenberg[7].

Aqui será considerado o Hamiltoniano de Ising em d dimensões o qual pode ser escrito como:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - H \sum_{i=1}^N S_i. \quad (2.30)$$

Nesta teoria, cada spin sofre a ação de um campo local gerado por todos os outros spins vizinhos, além de um campo magnético externo aplicado. O campo local pode ser escrito da seguinte forma:

$$h_i = J \sum_j S_j + H, \quad (2.31)$$

onde a soma significa uma soma nos sítios j , os quais são primeiros vizinhos do sítio i . Estas quantidades constituem um conjunto de variáveis aleatórias que dependem da configuração particular dos spins, as quais podem escrever como

$$h_i = \langle h_i \rangle + \Delta h_i \Rightarrow \Delta h_i = h_i - \langle h_i \rangle, \quad (2.32)$$

onde Δh_i são as flutuações de h_i em torno do seu valor médio, o qual tem a forma

$$\langle h_i \rangle = J \sum_{\langle ij \rangle} \langle S_j \rangle + H. \quad (2.33)$$

Para uma rede com invariança translacional a quantidade $\langle S_j \rangle$ é independente do sítio j , e portanto $\langle S_j \rangle = m$, ou seja,

$$m = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i \rangle \quad (2.34)$$

é a magnetização média por spin. A aproximação do campo médio consiste em desprezar as flutuações de Δh_i . Do ponto de vista desta aproximação, cada spin encontra-se na presença de um campo efetivo uniforme gerado pelos spins restantes da rede dado por

$$H_{ef} = Jzm + H, \quad (2.35)$$

onde z é o número de primeiros vizinhos, conhecido como número de coordenação. Este número depende da rede de Bravais e da sua dimensão, assim para uma rede simples linear $z = 2$ em uma dimensão, $z = 4$ em duas dimensões (rede quadrada), e $z = 6$ em três dimensões.

A função de partição de um conjunto de spin na presença de um campo uniforme H pode escrever-se como:

$$\mathcal{Z} = \mathcal{Z}_1^N, \quad (2.36)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_1 &= \sum_{S=\pm 1} \exp(-\beta\mathcal{H}_S) \\ \mathcal{Z}_1 &= \exp(-\beta H_{ef}) + \exp(\beta H_{ef}) \\ \mathcal{Z}_1 &= 2\cosh(\beta H_{ef}), \end{aligned} \quad (2.37)$$

a qual é a função de partição de um spin.

A magnetização média $m = \langle S_i \rangle$ resulta é escrita como:

$$m = \langle S_i \rangle = \frac{\sum_{S_i=\pm 1} S_i \exp(-\beta\mathcal{H}_S)}{\sum_{S_i=\pm 1} \exp(-\beta\mathcal{H}_S)}$$

teremos

$$m = \langle S_i \rangle = \tanh(\beta\mathcal{H}_S). \quad (2.38)$$

$$m = \tanh[\beta(Jzm + H)]. \quad (2.39)$$

Esta é a equação de estado, e exceto pela presença do número de coordenação é idêntica a equação de Curie-Weiss.

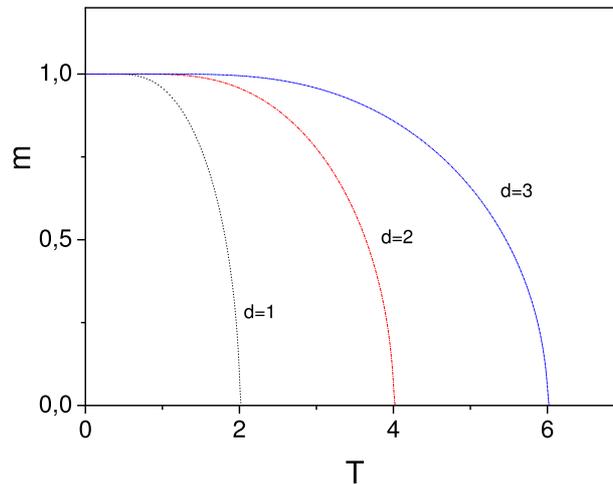


Figura 2.5: Comportamento da magnetização versus temperatura para uma rede d-dimensional, onde as curvas, 1(uma dimensão), 2(duas dimensões) e 3(três dimensões).

O sistema apresenta magnetização finita na ausência do campo externo, portanto, explica a transição ferromagnética-paramagnética. Esta é uma

equação transcendental, a qual foi resolvida numericamente para $H = 0$ a fim de obter o resultado da figura 2.1, e obter temperatura crítica ($T_c = 2$ unidimensional, $T_c = 4$ bidimensional e $T_c = 6$ no caso tridimensional). Para calcular a temperatura crítica ($H = 0$) explicitamente basta expandir a equação de estado até primeira ordem com $\beta J \equiv 1/T$

$$m = \tanh[\beta(Jzm)] = \tanh\left(\frac{zm}{T}\right) \approx \frac{zm}{T},$$

no limite $m \rightarrow 0$ obtemos

$$\begin{aligned} m &= \frac{zm}{T} \\ 1 &= \frac{z}{T} \\ T_c &= z, \end{aligned} \tag{2.40}$$

onde se obtém que $T_c = z$, isto é, a temperatura crítica é igual ao número de coordenação da rede, como mostra a figura 2.1. Esta solução para o modelo de Ising é aproximada e quantitativamente incorreta, porém para o modelo de Curie-Weiss é uma solução exata.

Nesta aproximação, o cálculo dos expoentes críticos é possível, lembrando que os expoentes críticos são definidos a partir do comportamento assintótico, perto do ponto crítico, das grandezas termodinâmicas a eles associadas. Portanto, para $T < T_c$, temos:

$$\begin{aligned} m &\approx (-t)^\beta \\ \chi_o &\approx |t|^{-\gamma}, \end{aligned} \tag{2.41}$$

onde $t \equiv (T - T_c)/T_c$. Próximo do ponto crítico a magnetização tende a zero ($m \ll 1$), assim invertendo a equação $m = \tanh(\beta Jzm)$ e desenvolvendo em série de potência em torno de $m = 0$, teremos:

$$\frac{\beta}{\beta_c} = \tanh^{-1}m = m + \frac{1}{3}m^3 + \frac{1}{5}m^5 + \dots$$

$$\frac{T_c}{T}m = m + \frac{1}{3}m^3 \tag{2.42}$$

$$m = \sqrt{3}(-t)^{1/2} \tag{2.43}$$

$$m(T, H = 0) \approx \sqrt{3}(-t)^{1/2}. \quad (2.44)$$

O expoente crítico para o parâmetro de ordem resulta $\beta = 1/2$. Em forma semelhante pode obter $\gamma = 1$. Estes valores diferem principalmente nas medidas observadas experimentalmente para a maioria dos sistemas. A teoria de campo médio prediz uma transição de fase em qualquer dimensão com expoentes críticos que não dependem da mesma. Está incorreto que os expoentes exatos dependem da dimensão, e sabemos que em uma dimensão o sistema nem se quer apresenta transição de fase. Não obstante, a solução obtida descreve de maneira qualitativamente correto o fenômeno em dimensões maiores.

Agora será analisada a continuação da energia livre, tem-se que:

$$f(T, H) = -\frac{1}{\beta N} \ln \mathcal{Z} = -\frac{1}{\beta} \ln \mathcal{Z}_1,$$

ou seja

$$f(T, H) = -\frac{1}{\beta} \ln [2 \cosh(\beta J q m + \beta H)]. \quad (2.45)$$

A campo nulo $H = 0$, então tem-se que:

$$f(T, 0) = -\frac{1}{\beta} \ln 2 \quad \text{para } T > T_c,$$

e

$$f(T, 0) = -\frac{1}{\beta} \ln \left[2 \cosh \left(\frac{\beta}{\beta_c} m_o \right) \right] \quad \text{para } T \leq T_c$$

Em uma análise mais detalhada esta solução nos mostra que esta energia livre para $T < T_c$, a função f é uma função convexa de T , violando portanto o critério da estabilidade termodinâmico. E que através de um método variacional se obtém a equação de Curie-Weiss e uma expressão correta para a energia livre.

Em síntese, as condições da hipótese do campo molecular equivale desprezar as flutuações do parâmetro de ordem (neste caso, a magnetização), o que é incorreto. As flutuações são desprezíveis quando existe uma alta conectividade entre os spins. Assim, para modelos com interações entre primeiro vizinhos é esperado que os resultados previstos pela teoria de campo médio

aproximam dos resultados exatos quanto maior for a dimensão espacial da rede. Por exemplo, os expoentes críticos previstos pela teoria de campo médio, para o modelo de Ising, são exatos na dimensão $d \geq 4$. A dimensão mínima para a qual as previsões da teoria de campo médio são considerados exatos é conhecida como "dimensão crítica superior".

2.4.2 Aproximação de Campo Médio via Princípio Variacional

Inicialmente seja considerado S uma variável aleatória, e seja também $P(S) \geq 0$ ser sua distribuição de probabilidade. Portanto, o cálculo do valor médio de qualquer função $f(S)$ da variável aleatória é dada por:

$$\langle f(S) \rangle = \sum_S P(S) f(S), \quad (2.46)$$

onde a soma é feita sobre todos os valores da variável S . A desigualdade de Jensen[13] indica que

$$\langle \exp(f(S)) \rangle \geq \exp(\langle f(S) \rangle). \quad (2.47)$$

O próximo passo é considerar um Hamiltoniano clássico (por exemplo, o modelo de Ising), o qual é função de um conjunto de variáveis S discreta ou contínua. Seja também $\rho(S)$ uma densidade de probabilidade arbitrária, isto é, $\rho(S)$ é uma função das variáveis S , a qual deve satisfazer

$$\text{Tr} \rho = 1,$$

e que

$$\rho(S) \geq 0.$$

Da mecânica Estatística tem-se que a função de partição canônica é escrita como:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \exp(-\beta F) \\ \mathcal{Z} &= \text{Tr} \exp(-\beta \mathcal{H}(S)) \\ \mathcal{Z} &= \text{Tr} \rho \exp(-\beta \mathcal{H}(S) - \ln \rho) \\ \mathcal{Z} &= \langle \exp(-\beta \mathcal{H}(S) - \ln \rho) \rangle_\rho, \end{aligned} \quad (2.48)$$

onde $\langle - - \rangle_\rho$ indica que a média foi tomada com a distribuição de probabilidade $\rho(S)$ e F representa a energia livre associada com a Hamiltoniana \mathcal{H} .

Aplicando a desigualdade de Jensen se obtém

$$\exp(-\beta F) \geq \exp(-\beta \langle \mathcal{H}(S) \rangle - \langle \ln \rho \rangle). \quad (2.49)$$

Tomando o logaritmo dos dois lados da expressão anterior, tem-se:

$$\begin{aligned} \ln[\exp(-\beta F)] &\geq \ln[\exp(-\beta \langle \mathcal{H}(S) \rangle - \langle \ln \rho \rangle)] \\ -\beta F &\geq -\beta \langle \mathcal{H}(S) \rangle - \langle \ln \rho \rangle \end{aligned} \quad (2.50)$$

portanto,

$$\begin{aligned} F &\leq F_\rho = \langle \mathcal{H}(S) \rangle_\rho + K_B T \langle \ln \rho \rangle_\rho \\ F &\leq F_\rho = \text{Tr} \rho \mathcal{H} + K_B T [\text{Tr}(\rho \ln \rho)], \end{aligned} \quad (2.51)$$

onde F_ρ representa uma energia livre aproximada associada a distribuição de probabilidade $\rho(S)$.

Este resultado, ou seja, a desigualdade é válida para qualquer distribuição de probabilidade, e apesar de se ter considerado um Hamiltoniano clássico, pode-se mostrar que é válida também para Hamiltoniano quântico (Modelo de Ising em Campo Transverso, modelo de Heisenberg, etc), porém neste caso ρ é um operador.

A expressão (2.21) é geral, porém para um caso particular, onde é exigido que a energia livre aproximada F_ρ seja mínima e sujeita a um único vínculo $\text{Tr} \rho = 1$, é fácil mostrar que

$$\rho = \frac{\exp(-\beta \mathcal{H})}{\mathcal{Z}}, \quad (2.52)$$

e que $F_\rho = F$.

Em síntese, a desigualdade corresponde ao princípio da mínima energia livre. Este fato é importante porque permite a implementação de aproximações variacionais para a energia livre, propondo formas aproximadas para a distribuição de probabilidade que mais se aproxima da distribuição de Boltzmann. Para uma forma funcional, dada para ρ , será aquela que minimiza a energia livre F_ρ .

No caso particular em que \mathcal{H}_o seja um Hamiltoniano tentativa, isto é, um Hamiltoniano para o qual sabe-se calcular exatamente sua função de partição

$$\mathcal{Z}_o = \sum_{\{s\}} \exp(-\beta\mathcal{H}_i). \quad (2.53)$$

Se por hipótese

$$\rho = \frac{\exp(-\beta\mathcal{H}_o)}{\mathcal{Z}_o}, \quad (2.54)$$

obtem-se

$$\begin{aligned} F \leq F_\rho &= \text{Tr} \rho \mathcal{H} + K_B T [\text{Tr}(\rho \ln \rho)] \\ F \leq F_\rho &= \text{Tr} \frac{\exp(-\beta\mathcal{H}_o)}{\mathcal{Z}_o} \mathcal{H} + K_B T \left[\text{Tr} \left(\frac{\exp(-\beta\mathcal{H}_o)}{\mathcal{Z}_o} \ln \frac{\exp(-\beta\mathcal{H}_o)}{\mathcal{Z}_o} \right) \right] \\ F \leq F_\rho &= \text{Tr} \frac{\exp(-\beta\mathcal{H}_o)}{\mathcal{Z}_o} \mathcal{H} + K_B T \left[\text{Tr} \left(\frac{\exp(-\beta\mathcal{H}_o)}{\mathcal{Z}_o} (-\beta\mathcal{H}_o - \ln \mathcal{Z}_o) \right) \right] \\ F \leq F_\rho &= \text{Tr} \frac{\exp(-\beta\mathcal{H}_o)}{\mathcal{Z}_o} \mathcal{H} - \text{Tr} \frac{\exp(-\beta\mathcal{H}_o)}{\mathcal{Z}_o} \mathcal{H}_o - \\ &\quad K_B T \left[\text{Tr} \left(\frac{\exp(-\beta\mathcal{H}_o)}{\mathcal{Z}_o} \ln \mathcal{Z}_o \right) \right] \\ F \leq F_\rho &= \text{Tr} \frac{\exp(-\beta\mathcal{H}_o)}{\mathcal{Z}_o} [\mathcal{H} - \mathcal{H}_o] - K_B T \left[\text{Tr} \left(\frac{\exp(-\beta\mathcal{H}_o)}{\mathcal{Z}_o} \ln \mathcal{Z}_o \right) \right] \\ F \leq F_\rho &= \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_o \rangle_o - K_B T \langle \ln \mathcal{Z}_o \rangle_o. \end{aligned} \quad (2.55)$$

Dividindo por N dos dois lados tem-se a energia livre por partícula

$$f \leq f_\rho = f_o + \frac{1}{N} \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_o \rangle_o, \quad (2.56)$$

a qual é conhecida como desigualdade de "Peierls-Bogoliubov".

Em síntese, a aproximação de campo médio é obtida do fato de usar uma densidade de probabilidade que é um produto de densidades de probabilidade independentes para cada partícula. Por exemplo, se ρ_j for a densidade de probabilidade considerada, ela dependerá unicamente dos graus de liberdade associados a partícula j , portanto

$$\rho = \prod_{j=1}^N \rho_j, \quad (2.57)$$

Neste caso, a energia livre variacional de campo médio é dada por:

$$F_\rho = Tr\rho\mathcal{H} + K_B T \sum_j Tr\rho_j \ln\rho_j. \quad (2.58)$$

Há a necessidade de parametrizar as distribuições ρ_j , e pelos menos existem duas maneiras diferentes de realiza-la. Assim, escolhendo ρ da forma:

$$\rho = \frac{\exp(-\beta\mathcal{H}_o)}{\mathcal{Z}_o},$$

onde

$$\mathcal{H}_o = \sum_{j=1} H_j,$$

deste modo, pode-se tomar o Hamiltoniano de uma partícula em termos de campos efetivos e utiliza-los (os campos efetivos) como parâmetros variacionais ou a serem determinados.

Uma maneira alternativa para parametrizar a distribuição ρ_j está associada ao conhecimento do parâmetro de ordem ψ_j . Isso permite minimizar diretamente

$$F_\rho = Tr\rho\mathcal{H} + K_B T \sum_j Tr\rho_j \ln\rho_j.$$

sujeito aos vínculos:

$$\begin{aligned} Tr\rho_j &= 1 \\ Tr[\rho_j\psi_j] &= \langle\psi_j\rangle. \end{aligned}$$

A vantagem desta alternativa é devido ao fato que simplesmente os parâmetros variacionais são os parâmetros de ordem $\langle\psi_j\rangle$.

2.4.3 Aproximação de Campo Médio via método Variacional para o Modelo de Ising

Nesta seção, o interesse é utilizar o modelo de Ising para enfatizar o método variacional, calculando a energia livre e a equação de estado do modelo, as quais devem ser comparadas com as do modelo de Pierre Weiss. O modelo de Ising na presença de um campo magnético externo é escrito como:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - H \sum_{i=1} S_i$$

onde está considerando que os spins estão distribuídos em pontos de uma rede hipercúbica e estão acoplados através da interação J entre os primeiros vizinhos, a primeira soma é sobre os pares primeiros vizinhos. Também é considerado um campo magnético aplicado na direção do eixo fácil em todos os pontos da rede.

Seja considerado N spins independentes, onde cada spin sofre a ação de um campo efetivo gerado por todos os outros spins, dessa forma o hamiltoniano do sistema é dado por:

$$\mathcal{H}_o = \sum_i (-\eta S_i), \quad (2.59)$$

onde η representa o campo efetivo variacional ou simplesmente o parâmetro variacional. Seguindo os preceitos da Mecânica Estatística, a qual diz que todas as grandezas termodinâmicas são escritas a partir da função de partição, será mostrado os cálculos da função de partição. Neste caso, sistema não interagente, a função de partição será igual ao produto da função de partição de um spin, isto é:

$$\mathcal{Z}_o = \mathcal{Z}_1^N. \quad (2.60)$$

Por outro lado, \mathcal{Z}_1 é dado por:

$$\mathcal{Z}_1 = \sum_{S_i=\pm 1} \exp(-\beta \mathcal{H}_1), \quad (2.61)$$

Realizando a soma das configurações, tem-se

$$\mathcal{Z}_1 = \exp(-\beta \eta) + \exp(\beta \eta),$$

resultando em

$$\mathcal{Z}_1 = 2 \cosh(\beta \eta)$$

Portanto, a função de partição é dada por:

$$\mathcal{Z}_o = [2 \cosh(\beta \eta)]^N. \quad (2.62)$$

O valor médio $\langle S_1 \rangle_o \equiv m$ (magnetização por spin) é dado por:

$$m_i = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln \mathcal{Z}_1}{\partial \eta}, \quad (2.63)$$

resultando na equação de estado em termo do parâmetro variacional

$$m = \tanh(\beta\eta). \quad (2.64)$$

A energia livre por partícula será dada por,

$$f_o = -K_B T \ln[2 \cosh(\beta\eta)]. \quad (2.65)$$

Em seguida, o cálculo da média é apresentado abaixo e lembrando que em uma rede hipercúbica com N spins é possível contar $Nz/2$ pares de primeiros vizinhos, dessa forma tem-se;

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_o \rangle_o &= \left\langle -J \sum_{\langle i,j \rangle}^{\frac{Nz}{2}} S_i S_j - H \sum_{i=1}^N S_i - \left(-\eta \sum_{i=1}^N S_i \right) \right\rangle_o \\ \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_o \rangle_o &= -J \sum_{i,j}^{\frac{Nz}{2}} \langle S_i S_j \rangle - H \sum_{i=1}^N \langle S_i \rangle + \eta \sum_{i=1}^N \langle S_i \rangle_o, \end{aligned} \quad (2.66)$$

tendo em vista que Hamiltoniana tentativa representa um sistema de N spins independentes, então é considerado que

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

isto é, a média do produto é igual ao produto da média

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_o \rangle_o &= -\frac{Nz}{2} J \langle S_i \rangle_o \langle S_j \rangle_o - NH \langle S_i \rangle_o + N\eta \langle S_i \rangle_o \\ \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_o \rangle_o &= -\frac{Nz}{2} J m^2 - Nm(H - \eta). \end{aligned}$$

A energia variacional é escrita como:

$$\begin{aligned} f &= f_o + \frac{1}{N} \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_o \rangle_o \\ f &= -K_B T \ln[2 \cosh(\beta\eta)] - \frac{1}{2} J z m^2 - m(H - \eta). \end{aligned} \quad (2.67)$$

A minimização da energia livre (variacional) em relação a η determina o parâmetro variacional, ou seja

$$\eta = J z m + H. \quad (2.68)$$

Conhecendo o parâmetro variacional fica determinada a energia livre, ou seja

$$f = -K_B T \ln[2 \cosh(\beta(Jzm + H))] + \frac{1}{2} Jzm^2, \quad (2.69)$$

e a equação de estado

$$m = \tanh[\beta(Jzm + H)]. \quad (2.70)$$

Na aproximação de campo médio via princípio variacional a equação de estado é a mesma, porém a energia livre satisfaz todos os critérios de estabilidade termodinâmica em qualquer temperatura.

Capítulo 3

Efeitos das Aleatoriedades das Anisotropias de Campo Cristalino no Modelo de Ising de Spin Misto $S = 1$ e $S = 3/2$

3.1 Introdução

O estudo das propriedades críticas de sistemas magnéticos tem aumentado nas últimas décadas. Este estudo tem sido realizado sobre os principais modelos de magnetismo localizado, em particular, os modelos de Ising e Heisenberg.

O modelo de Ising, sem dúvida, é o modelo que tem suas propriedades críticas e magnéticas mais estudado nos últimos quarenta anos entre todos os outros modelos, porém ainda nos dias atuais tem sido o mais utilizado [14, 15, 16, 17, 18, 19]. Todo este sucesso alcançado é devido sua grande simplicidade, pois no caso mais simples (spin $1/2$) suas variáveis de spins assumem somente os valores ± 1 , associando os estados para cima e para baixo, desta forma, qualquer sistema (físico, biológico, financeiro, social, etc) pode ser modelado microscopicamente pelo modelo de Ising.

Adicionalmente, efeitos magnéticos mais complexos como, campos cristalinos, efeito túnel quântico e algumas distribuições de desordens (nas lig-

ações entre os spins, posicional, etc). Desta forma, o modelo de Ising tem descrito vários sistemas, tais como, fluídos em uma e em duas dimensões, ligas ternárias[20], misturas de ${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$ [21, 22, 23] e mais uma quantidade imensa de sistemas físicos, apresentando diferentes transições de fase, com um rico diagrama de fase.

Para estudar as principais características das transições de fase, o esquema que tem sido utilizado consiste em propor o modelo, representando o sistema ferromagnético, com diversas interações, as quais, incluem campo magnético transversal, interação de campo cristalino, distribuições de diferentes tipos de desordens aleatórias e campos magnéticos aleatórios.

Por outro lado, materiais com estrutura cristalina estável, em temperatura ambiente, que apresentam momentos magnéticos espontâneos são de grande interesse para as pesquisas científicas, não somente do ponto de vista acadêmico, porém também devido suas potencialidades para aplicações tecnológicas, tais como, em gravações magnéticas e em outros aparatos tecnológicos[24].

Particularmente, a ordem ferrimagnética tem uma importância fundamental em alguns desses materiais, e a síntese de novos materiais ferrimagnéticos é uma frente ativa em ciências dos materiais.

Um material ferrimagneto é modelado como sendo composto por dois diferentes tipos de átomos, cada um com um tipo de spin. Desta forma, estes diferentes spins são distribuídos em um cristal composto por duas sub-redes interpenetrantes. Assim, cada spin interage antiferromagneticamente com seus primeiros vizinhos, e devido as diferentes magnitude dos spins, este materiais apresentam magnetização espontânea em baixas temperaturas.

3.2 O modelo

Vamos considerar um sistema magnético composto por duas sub-redes interpenetrantes A e B. Cada ponto dessas sub-rede é ocupado por átomos magnéticos com spins $S = 1$ (na sub-rede A) e $S = 3/2$ (na sub-rede B). Cada par de primeiros vizinhos (cada spins em uma diferente sub-rede) acoplam magneticamente através da interação de troca, e em cada ponto das diferentes sub-redes há uma anisotropia uniaxial aleatória de campo cristalino. Um campo magnético externo é aplicado em todos os pontos da rede na direção

do eixo fácil. Portanto, a Hamiltoniana que descreve o sistema é dado por:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^A S_j^B - \sum_{i \in A} D_i^A (S_i^A)^2 - \sum_{j \in B} D_j^B (S_j^B)^2 \\ & - H \sum_{i \in A} S_i^A - H \sum_{j \in B} S_j^B \end{aligned} \quad (3.1)$$

onde primeiro termo da equação representa a interação entre os pares de

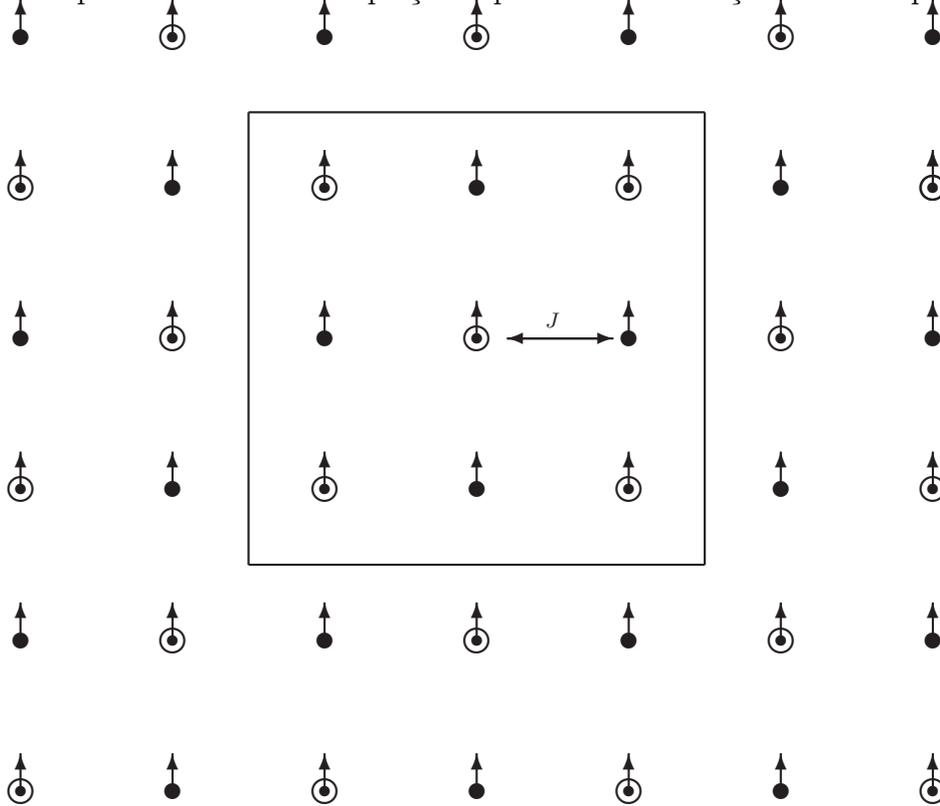


Figura 3.1: Modelo de um Ferromagneto em uma rede bidimensional dividida em duas sub-redes interpenetrantes equivalentes A (circulo cheio preto) e B(circulo vazio), onde os primeiros vizinhos estão localizados em sub-rede diferentes. A energia de interação entre os primeiros vizinhos é J .

spins primeiros vizinhos cada um localizados nas diferentes sub-redes A e B. A magnitude dessa interação é dada por J , neste caso vamos considerar $J > 0$. A soma é realizada sobre todos os pares de primeiros vizinhos da rede. O segundo termo da Hamiltoniana representa a anisotropia aleatória de campo cristalino em todos os pontos da sub-rede A, a soma é realizada sobre os $N/2$

os spins S^A da sub-rede A, os quais assumem os valores $(\pm 1, 0)$. A anisotropia aleatória que é governada por uma função de probabilidade $P(D_i)$. O terceiro termo da equação indica a anisotropia aleatória de campo cristalino em todos os pontos da sub-rede B, também a soma é realizada sobre os $N/2$ os spins S^B da sub-rede B, os quais assumem os valores $(\pm 1/2, \pm 3/2)$. Também esta anisotropia aleatória é governada por uma função de probabilidade $P(D_j)$. Finalmente, o quarto e o quinto termos representam a energia de Zeman sobre todos os spins das sub-redes A e B.

As funções de distribuições de probabilidades associadas as variáveis aleatórias são dadas pela distribuição bimodal:

$$P(D_i^A) = p\delta(D_i) + (1 - p)\delta(D_i - D_A) \quad (3.2)$$

$$P(D_j^B) = q\delta(D_j) + (1 - q)\delta(D_j - D_B) \quad (3.3)$$

Onde p e q estão no intervalo entre (0 a 1), correspondente o peso na distribuição para ter uma anisotropia e $(1 - p)$ e $(1 - q)$ ter anisotropia $D_A(D_B)$ onde que o termo $p\delta(D_i)$ e $q\delta(D_j)$ indicam que uma fração p e q de spins na sub-rede A e B, estão livres da ação da anisotropia cristalina de íon único. No caso limite $p = 1$ e $q = 1$ indica que todos os spins das sub-redes não sofrem ação da anisotropias aleatória de campo cristalino. Por outro lado, o termo $(1 - p)\delta(D_i - D^A)$ e $(1 - q)\delta(D_j - D^B)$, indica que uma fração $(1 - p)$ e $(1 - q)$ de spins estão sob a ação da anisotropia aleatória de intensidade D^A e D^B nas sub-redes A e B, os quais são responsáveis por uma transição de fase dentro da fase ferromagnética. No caso limite $p = 0$ e $q = 0$ indica que todos os spins das sub-redes sofrem ação da anisotropias de campo cristalino com magnitude constante D^A e D^B .

3.3 Cálculos da Energia Livre via Método Variacional de Peierls-Bogoliubov

Neste trabalho o interesse é estudar as propriedades críticas e as propriedades termodinâmicas do sistema de spins misto de Ising com anisotropias aleatórias de campo cristalino. Como já é conhecido, para levar ao fim estes

objetivos é necessário seguir uma das duas abordagens. A primeira abordagem é calcular exatamente a energia livre através da solução exata do modelo considerado. Esta tarefa é considerada muito árdua, pois pouquíssimos modelos têm soluções exatas, exceto o modelo de Ising em uma[6] e duas dimensões[8]. A outra opção é obter a energia livre através de alguma aproximação, onde a de campo médio é útil para ter uma primeira visão do comportamento crítico do sistema.

Portanto, vamos utilizar a segunda abordagem com a escolha da aproximação de campo médio via princípio variacional baseado na desigualdade de Peierls-Bogoliubov. Assim, seguindo este esquema da aproximação de campo médio, a energia livre de Gibbs é obtida da desigualdade

$$G(\mathcal{H}) \leq G_o(\mathcal{H}_o) + \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_o(\eta) \rangle_o = \Phi(\eta) \quad (3.4)$$

onde $G_o(\mathcal{H}_o)$

$$G_o(\mathcal{H}_o) = G_o(\mathcal{H}_o)_A + G_o(\mathcal{H}_o)_B \quad (3.5)$$

Nas duas expressões (3.4) e (3.5) a grandeza $G(\mathcal{H})$ representa a energia livre associada com Hamiltoniano \mathcal{H} do modelo que se quer tratar, e $G_o(\mathcal{H}_o)$ é a energia livre do Hamiltoniano tentativa $\mathcal{H}_o(\eta)$ das sub-redes A e B , os quais dependem dos parâmetros variacionais η_A e η_B , e o qual pode ser resolvido exatamente. A média térmica $\langle \dots \rangle_o$ deve ser tomada sobre uma distribuição canônica associada ao Hamiltoniano \mathcal{H}_o .

3.3.1 Cálculo da função de partição

A Hamiltoniana tentativa a qual inclui cluster de um spins é dado por

$$\mathcal{H}_o = - \sum_{i \in A} [D_i^A (S_i^A)^2 + \eta_A S_i^A] - \sum_{j \in B} [D_j^B (S_j^B)^2 + \eta_B S_j^B], \quad (3.6)$$

onde η_A e η_B são dois parâmetros variacionais relativo aos dois diferentes tipos de spins e que respectivamente pertencem a sub-rede A e B . Portanto, a Hamiltoniana tentativa é dividida em duas partes, cada uma relativo a uma sub-rede, assim para a sub-rede A,teremos:

$$\mathcal{H}_{oA} = - \left[\sum_{i \in A} D_i^A (S_i^A)^2 + \sum_{i \in A} \eta_A S_i^A \right], \quad (3.7)$$

e para a sub-rede B

$$\mathcal{H}_{oB} = - \left[\sum_{j \in B} D_j^B (S_j^B)^2 + \sum_{j \in B} \eta_B S_j^B \right] \quad (3.8)$$

Com intuito de condensar a notação, escreveremos a diferença entre as Hamiltonianas como sendo,

$$\langle \Delta \mathcal{H} \rangle_o = \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_o \rangle_o. \quad (3.9)$$

A função de partição da Hamiltoniana tentativa é:

$$\mathcal{Z}_o = \sum_{\{S_i=0,\pm 1\}} \sum_{\{S_j=\pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}\}} \exp(-\beta \mathcal{H}_o). \quad (3.10)$$

A média térmica escrita em função da Hamiltoniana tentativa é definida por:

$$\langle A \rangle_o = \frac{1}{\mathcal{Z}_o} \sum_{\{S_i\}} \sum_{\{S_j\}} A \exp(-\beta \mathcal{H}_o). \quad (3.11)$$

3.3.2 Cálculo da função de partição e da energia livre do Hamiltoniano tentativa $G_o(\mathcal{H}_o)$ de cada sub-rede

Substituindo a Eq.(3.7) na Eq.(3.10), e fazendo que S_i^A que assumam os respectivos valores $(-1, 0, 1)$, teremos a função de partição da sub-rede A, para o sítio único i é dada por:.

$$\mathcal{Z}'_{oA} = 2 \exp(\beta D_i^A) \cosh(\beta \eta_A) + 1. \quad (3.12)$$

Substituindo a Eq.(3.8) na Eq.(3.10), e fazendo que S_j^B que assumam os respectivos valores $(-3/2, -1/2, 1/2, 3/2)$, teremos a função de partição da sub-rede B para o sítio único j dado por.

$$\mathcal{Z}'_{oB} = 2 \exp\left(\frac{9}{4} \beta D_j^B\right) \cosh\left(\frac{3}{2} \beta \eta_B\right) + 2 \exp\left(\frac{1}{4} \beta D_j^B\right) \cosh\left(\frac{1}{2} \beta \eta_B\right). \quad (3.13)$$

Como escolhemos duas sub-redes interpenetrantes com $N/2$ spins cada, e o Hamiltoniano livre de um spin, a função de partição total será dada por.

$$\mathcal{Z}_o = [\mathcal{Z}'_o]^{\frac{N}{2}}. \quad (3.14)$$

sendo

$$\mathcal{Z}_{oA} = \left[1 + 2\exp(\beta D_i^A) \cosh(\beta \eta_A) \right]^{\frac{N}{2}}, \quad (3.15)$$

e

$$\mathcal{Z}_{oB} = \left[2\exp\left(\frac{9}{4}\beta D_j^B\right) \cosh\left(\frac{3}{2}\beta \eta_B\right) + 2\exp\left(\frac{1}{4}\beta D_j^B\right) \cosh\left(\frac{1}{2}\beta \eta_B\right) \right]^{\frac{N}{2}} \quad (3.16)$$

Pela conexão com a termodinâmica, a energia livre do Hamiltoniano tentativa é dada pela função.

$$G_o(\mathcal{H}_o) = -\frac{1}{\beta} \ln \mathcal{Z}_o \equiv G_o(\mathcal{H}_o)_A + G_o(\mathcal{H}_o)_B, \quad (3.17)$$

sendo

$$G_o(\mathcal{H}_o)_A = -\frac{N}{2\beta} \ln \left[1 + 2\exp(\beta D_i^A) \cosh(\beta \eta_A) \right], \quad (3.18)$$

e

$$\begin{aligned} G_o(\mathcal{H}_o)_B &= -\frac{N}{2\beta} \ln \left[2\exp\left(\frac{9}{4}\beta D_j^B\right) \cosh\left(\frac{3}{2}\beta \eta_B\right) \right. \\ &\quad \left. + 2\exp\left(\frac{1}{4}\beta D_j^B\right) \cosh\left(\frac{1}{2}\beta \eta_B\right) \right]. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Substituindo a Eq.(3.1) e a Eq.(3.6), tomando a média ficaremos

$$\begin{aligned} \langle \Delta \mathcal{H} \rangle_o &= -\frac{N}{2} J z \langle S_i^A \rangle_o \langle S_j^B \rangle_o + \frac{N}{2} \eta_A \langle S_i^A \rangle_o + \frac{N}{2} \eta_B \langle S_j^B \rangle_o \\ &\quad - \frac{N}{2} H \langle S_i^A \rangle_o - \frac{N}{2} H \langle S_j^B \rangle_o, \end{aligned} \quad (3.20)$$

onde z é o número de primeiros vizinhos.

Definindo o funcional energia livre como $\phi(\eta_A, \eta_B) \equiv G_o(\mathcal{H}_o)/N$ e as magnetizações por spins nas sub-redes A $m_A = \langle \langle S_i^A \rangle \rangle_o$ e B $m_B = \langle \langle S_j^B \rangle \rangle_o$ então substituindo a Eq.(3.17) e Eq.(3.20) na Eq.(3.4) ficamos,

$$\begin{aligned} \phi(\eta_A, \eta_B) &= -\frac{1}{2\beta} \ln \left[1 + 2\exp(\beta D_i^A) \cosh(\beta \eta_A) \right] \\ &\quad - \frac{1}{2\beta} \ln \left[2\exp\left(\frac{9}{4}\beta D_j^B\right) \cosh\left(\frac{3}{2}\beta \eta_B\right) \right. \\ &\quad \left. + 2\exp\left(\frac{1}{4}\beta D_j^B\right) \cosh\left(\frac{1}{2}\beta \eta_B\right) \right] \\ &\quad - \frac{1}{2} J z m_a m_b + \frac{1}{2} \eta_A m_a \\ &\quad + \frac{1}{2} \eta_B m_b - \frac{1}{2} H m_a - \frac{1}{2} H m_b \end{aligned} \quad (3.21)$$

3.4 Cálculos das médias térmicas.

As médias térmicas $m_a = \langle S_i^A \rangle_o$ e $m_b = \langle S_j^B \rangle_o$ são calculadas em função da Hamiltoniano tentativa, Eq.(3.11), que será dividido em duas partes, cada uma relativo a uma sub-rede, para sub-rede A :

$$m_a = \langle S_i^A \rangle_o = \frac{2\exp(\beta D_i^A) \sinh(\beta \eta_A)}{2\exp(\beta D_i^A) \cosh(\beta \eta_A) + 1}, \quad (3.22)$$

e sub-rede B

$$m_b = \langle S_j^B \rangle_o = \frac{3\sinh\left(\frac{3}{2}\beta\eta_B\right) + \exp(-2\beta D_j^B) \sinh\left(\frac{1}{2}\beta\eta_B\right)}{2\cosh\left(\frac{3}{2}\beta\eta_B\right) + 2\exp(-2\beta D_j^B) \cosh\left(\frac{1}{2}\beta\eta_B\right)}. \quad (3.23)$$

Minimizando $\phi(\eta_A, \eta_B)$ com relação ao parâmetro variacional η_A .

$$\frac{\partial \phi}{\partial \eta_A} = 0.$$

$$\eta_A = Jzm_b + H, \quad (3.24)$$

e com relação ao parâmetro variacional η_B .

$$\frac{\partial \phi}{\partial \eta_B} = 0.$$

$$\eta_B = Jzm_a + H. \quad (3.25)$$

Substituindo a Eq.(3.24) e a Eq.(3.25), na Eq.(3.21),obtemos:

$$\begin{aligned} \phi = & -\frac{1}{2\beta} \ln \left[1 + 2\exp(\beta D_i^A) \cosh(\beta(Jzm_b + H)) \right] \\ & -\frac{1}{2\beta} \ln \left[2\exp\left(\frac{9}{4}\beta D_j^B\right) \cosh\left(\frac{3}{2}\beta(Jzm_a + H)\right) \right. \\ & \left. + 2\exp\left(\frac{1}{4}\beta D_j^B\right) \cosh\left(\frac{1}{2}\beta(Jzm_a + H)\right) \right] \\ & + \frac{1}{2} Jzm_a m_b. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Finalmente, tomando a média configuracional sobre as variáveis aleatórias D_i^A e D_j^B segundo as distribuições de probabilidades Eq.(3.2) e Eq.(3.3) encontraremos

$$\begin{aligned} \phi(m_A, m_B) = \langle \phi \rangle_o = & \frac{1}{2} J z m_a m_b - \frac{1}{2\beta} \ln \left[2 \cosh \left(\frac{3}{2} \beta (J z m_a + H) \right) + \right. \\ & \left. 2 \cosh \left(\frac{1}{2} \beta (J z m_a + H) \right) \right] q - \\ & \frac{1}{2\beta} \ln [1 + 2 \cosh(\beta (J z m_b + H))] p - \\ & \frac{1}{2\beta} \ln [1 + 2 \exp(\beta D^A) \cosh(\beta (J z m_b + H))] (1 - p) - \\ & \frac{1}{2\beta} \ln \left[2 \exp \left(\frac{9}{4} \beta D^B \right) \cosh \left(\frac{3}{2} \beta (J z m_a + H) \right) + \right. \\ & \left. 2 \exp \left(\frac{1}{4} \beta D^B \right) \cosh \left(\frac{1}{2} \beta (J z m_a + H) \right) \right] (1 - q). \end{aligned} \quad (3.27)$$

teremos:

$$\begin{aligned} m_a = & \left[\frac{2 \exp(\beta D^A) \sinh(\beta (J z m_b + H))}{1 + 2 \exp(\beta D^A) \cosh(\beta (J z m_b + H))} \right] (1 - p) + \\ & \left[\frac{2 \sinh(\beta (J z m_b + H))}{1 + 2 \cosh(\beta (J z m_b + H))} \right] p. \end{aligned} \quad (3.28)$$

e

$$\begin{aligned} m_b = & \left[\frac{3 \sinh \left(\frac{3}{2} \beta (J z m_a + H) \right) + \exp(-2\beta D^B) \sinh \left(\frac{1}{2} \beta (J z m_a + H) \right)}{2 \cosh \left(\frac{3}{2} \beta (J z m_a + H) \right) + 2 \exp(-2\beta D^B) \cosh \left(\frac{1}{2} \beta (J z m_a + H) \right)} \right] (1 - q) + \\ & \left[\frac{3 \sinh \left(\frac{3}{2} \beta (J z m_a + H) \right) + \sinh \left(\frac{1}{2} \beta (J z m_a + H) \right)}{2 \cosh \left(\frac{3}{2} \beta (J z m_a + H) \right) + 2 \cosh \left(\frac{1}{2} \beta (J z m_a + H) \right)} \right] q. \end{aligned} \quad (3.29)$$

3.5 Expansão de Landau

Substituindo a Eq.(3.29) na Eq.(3.27), deixaremos a energia livre em função apenas da magnetização m_a . Por serem muito pequena a magnetização m_a e m_b , expandimos a Eq.(3.29) e Eq.(3.27), obtém-se a expansão de "Landau", antes de expandirmos faremos $H = 0$ na equação.

$$\phi = A_o + A_2 m_a^2 + A_4 m_a^4 + A_6 m_a^6 \quad (3.30)$$

Onde que os coeficientes da expansão A_0, A_2, A_4, A_6 , são definidos por:

$$A_0 = -\frac{1}{2\beta} \ln[(1+x_a)(x_b+y_b)]$$

$$A_2 = \frac{1}{2\beta} \left[tb_1 - \frac{(tb_1)^2 x_a}{2(1+x_a)} - \frac{t^2(9x_a+y_b)}{8(x_a+y_b)} \right]$$

$$A_4 = \frac{1}{2\beta} \left[tb_2 - \frac{t^2 b_1 b_2 x_a}{1+x_a} - \frac{(tb_1)^4 x_a (1-2x_a)}{24(1+x_a)^2} + \frac{t^4(81x_b - 14x_b y_b + y_b^2)}{192(x_b+y_b)^2} \right]$$

$$A_6 = \frac{1}{2\beta} \left[tb_3 - \frac{t^2 x_a (b_2^2 + 2b_1 b_3)}{2(1+x_a)} - \frac{t^4 b_1^3 b_2 x_a (1-2x_a)}{6(1+x_a)^2} - \frac{(tb_1)^6 x_a (1-13x_a+16x_a^2)}{720(1+x_a)^3} - \frac{t^6(729x_b^3 - 221x_b y_b + 11x_b y_b^2 + y_b^3)}{2880(x_b+y_b)^3} \right]$$

Com:

$$t = \beta J z \quad ; \quad x_a = 2 \exp(\beta D^A); \quad x_b = 2 \exp\left(\frac{9}{4} \beta D^B\right)$$

$$y_b = 2 \exp\left(\frac{1}{4} \beta D^B\right) \quad ; \quad z_b = \exp(-2\beta D^B)$$

$$b_1 = \frac{t(9+z_b)}{4(1+z_b)} \quad ; \quad b_2 = -\frac{t^3(81-14z_b+z_b^2)}{48(1+z_b)^2}$$

$$b_3 = \frac{t^5(729-221z_b+11z_b^2+z_b^3)}{480(1+z_b)^3}$$

Devido a simetria do sistema os termos ímpares, na expansão de Landau, são nulos de acordo com sua teoria fenomenológica para os sistemas magnéticos.

Capítulo 4

Resultados e Discussões

4.1 Introdução

As equações obtidas (energia livre e as magnetizações das sub-redes) exibem as propriedades da teoria de campo médio. Para cada par de (m_A, m_B) obtém-se um conjunto de soluções, e aquelas que representam as fases estáveis são as soluções que minimizam a energia livre. Portanto, para realizar uma análise detalhada do diagrama de fase é necessário executar um minucioso cálculo numérico.

Por outro lado, algumas características do diagrama de fase podem ser obtidos analiticamente. Assim, perto de uma transição de fase de segunda ordem de um estado ordenado, com $m_A \neq 0$ e $m_B \neq 0$, para um estado desordenado $m_A = 0$ e $m_B = 0$, as magnetizações m_A e m_B são muito pequenas, de maneira que justifica uma expansão de Landau nas Eqs.(3.27) e (3.29), isto é:

$$\phi = \phi_o + A_2 m_A^2 + A_4 m_A^4 + A_6 m_A^6 + \dots$$

Desta forma, pode-se descrever alguns aspectos do diagrama de fase através dos coeficientes da expansão de Landau. O diagrama de fase do modelo é determinado da seguinte forma:

- i - linha de transição de fase de segunda ordem ocorre quando $A_2 = 0$ e $A_4 > 0$;
- ii - pontos tricríticos ocorrem quando $A_2 = 0$ e $A_4 = 0$ e com $A_6 > 0$.

iii - linha de transição de fase de primeira ordem é determinadas analisando o comportamento da energia livre para as soluções da eq.(3.22) e da eq.(3.23) para cada par de (m_A, m_B) .

A análise da paridade dos coeficientes A_2 , A_4 e A_6 em função de J mostra que esses coeficientes são funções pares, isso leva a conclusão de que o comportamento crítico do modelo é o mesmo tanto para sistemas ferromagnéticos ($J > 0$) como para sistemas ferrimagnéticos ($J < 0$). Porém, no caso de sistema ferrimagnético os sinais das magnetizações das sub-redes (m_A e m_B) são diferentes, originando uma temperatura de compensação menor do que a temperatura crítica (T_c). Na temperatura de compensação a magnetização total

$$M = \frac{1}{2}[m_A + m_B]$$

vai a zero ($M = 0$), porém as m_A e m_B são diferentes de zero ($m_A \neq 0$ e $m_B \neq 0$).

4.2 Diagrama de Fase no Espaço D^A versus T

Será construído diversos diagramas de fase nos espaços $K_B T/z|J|$ versus $D^A/z|J|$ e $K_B T/z|J|$ versus $D^B/z|J|$. Nos diagramas de fase as linhas tracejadas e as contínuas são utilizadas para representar as transições de fase de primeira e segunda ordem respectivamente, e linhas pontilhadas para representar linhas de pontos tricríticos. Círculos cheios serão usados para representar pontos tricríticos, os quais separam linhas de segunda ordem e linhas de primeira ordem, a letra P indica fase desordenada paramagnética e F a fase ordenada ferromagnética.

4.2.1 Diagrama de Fase: Caso Especial $p = 1$ e $q = 1$

Neste trabalho foi derivado, como um caso especial, todos os resultados correspondente ao trabalho de Abubring et al[25]. Inicialmente calculando a temperatura crítica do sistema de spins mistos $S^A(\pm 1, 0)$ e $S^B(\pm 3/2, \pm 1/2)$, no limite da anisotropia nula obtendo $K_B T_c/Jz \equiv 0.9129$, de acordo com a

tabela abaixo.

$K_B T_c / J$	2.7386	3.6515	5.4772
z	3	4	6

4.2.2 Diagrama de Fase: Caso $p = 0$ e $q = 0$

Este caso corresponde ao modelo de Ising de spins mistos ($Spin - 1$ e $Spin - 3/2$) com diferentes anisotropias de íon único, e foi detalhadamente estudado por Abubrig et al[25], e constitui um caso especial deste trabalho. Aqui os resultados são comparáveis aos encontrados por Bobák[26] no contexto da teoria de campo efetivo com correlações. Portanto, será exibido vários diagramas para compreensão do comportamento termodinâmico do sistema.

Na figura (4.1) é mostrado o diagrama de fase com $p = 0$ e $q = 0$ no plano $K_B T / z |J|$ versus $D^A / z |J|$ e com diversos valores fixos de D^B . Lembrando do fato que a anisotropia de campo cristalino $D > 0$ favorece os estados $\pm 3/2$, então neste diagrama percebe-se que quando $D^B \rightarrow +\infty$, a sub-rede de spin-3/2 comporta-se como um sistema de dois níveis ($\pm 3/2$), e nesta região do diagrama de fase ($D^B > 1.75$), as coordenadas dos pontos tricríticos convergem para ($D^A / Jz = d^A = -1.3950$, $K_B T_c / Jz = t = 0.6708$). Por outro lado, na região onde $D^B \rightarrow -\infty$, os estados $S_j^B = \pm 3/2$ são suprimidos e o sistema torna-se equivalente a um modelo de Ising de spins mistos ($Spin - 1$ e $Spin - 1/2$). O diagrama de fase nesta região ($D^B < -1$) tem os pontos tricríticos convergindo para a coordenada localizado em ($D^A / Jz = d^A = -0.4650$, $K_B T_c / Jz = t = -0.2236$). Na região intermediária ($-1 \leq D^B \leq 1.75$), as coordenadas dos pontos tricríticos deslocam de ($d^A = -1.3950$, $t = 0.6708$) para ($d^A = -0.4650$, $t = 0.2236$) obtendo assim uma linha de pontos tricríticos. No caso especial, onde as anisotropias são iguais $D^B = D^A = D$, a localização do ponto tricrítico é listado na tabela abaixo, os quais podem ser novamente comparados com os obtidos por Bobák[26]:

$(D^A / z J)$	-1.4797	1.9730	-2.9594
$K_B T_c / J$	0.8705	1.1606	1.7410
z	3	4	6

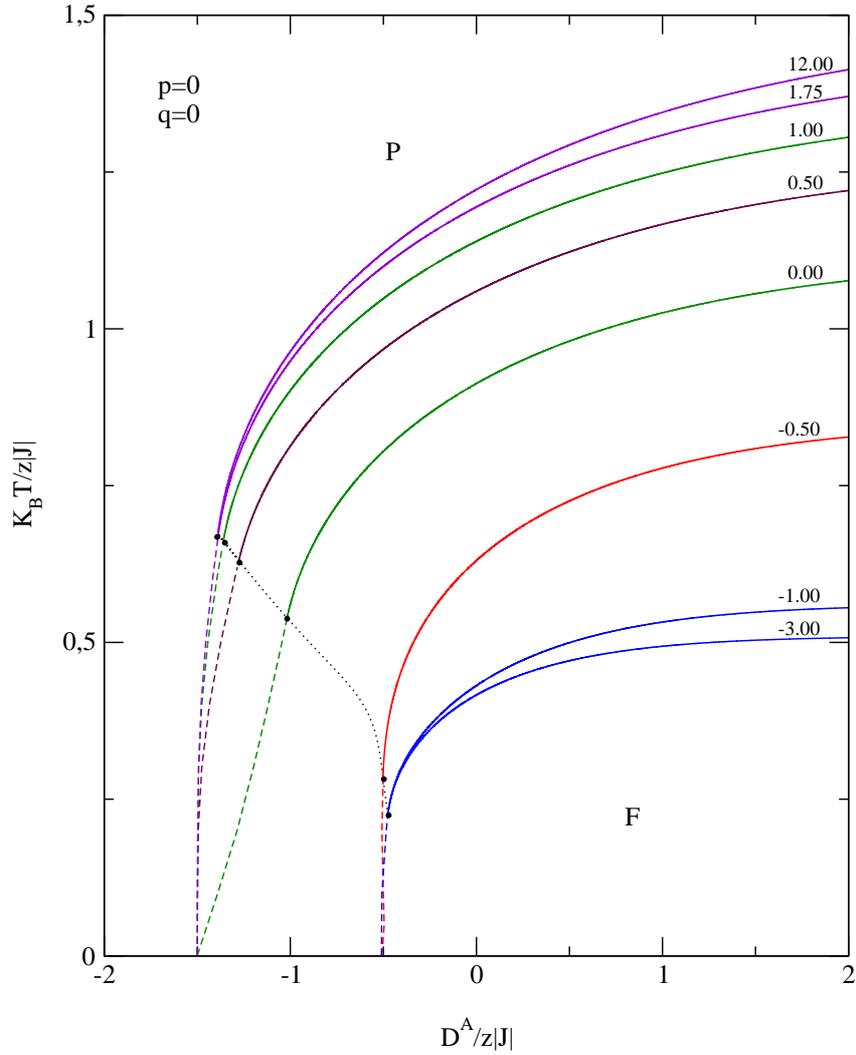


Figura 4.1: Diagrama de fase de $(K_B T/z|J|)$ versus $(D^A/z|J|)$ para o modelo de Ising de spin misto ferromagnético com o número de coordenações z , $p = 0$ e $q = 0$. O círculo cheio representa o ponto tricrítico, a linha pontilhada representa o comportamento dos pontos tricríticos, a linha tracejada e a contínua representa as transições de primeira e segunda ordem respectivamente a letra P indica a fase desordenada paramagnética e F a fase ordenada ferromagnética.

4.2.3 Diagrama de Fase: Caso $p = 0$ e $q \neq 0$

Vamos agora fixar o valor da probabilidade $p = 0$ indicando que todos os spins da sub-rede A estão sujeitos à ação de um campo cristalino de magnitude constante D^A . Por outro lado, a probabilidade q varia de zero a um, indicando que uma parcela q de spins $S = 3/2$ estão livre da ação do campo cristalino de magnitude D^B . Observa-se que apesar da magnitude D^B ser constante, o que realmente importa é que a quantidade de spins sob ação desse campo cristalino é que de fato varia. Por exemplo, no caso de $q = 0.10$ significa que dez por cento (10%) dos spins $S = 3/2$ estão fora da ação do campo cristalino D^B , lembrando que a sub-rede B contém $N/2$ spins.

As figuras (4.2 a 4.4) exibem o comportamento do diagrama de fase para $p = 0$ e q variando até o valor $q = 1$. A medida que a probabilidade q cresce, percebe-se um deslocamento das coordenadas dos pontos tricríticos, independentemente das magnitudes de D^B que é fixa. Os comportamentos ($D^A \rightarrow \infty$) de dois estados ($S = \pm 3/2$) e ($D^A \rightarrow -\infty$) de spin mistos ($S = 1$ e $S = 1/2$) migram para o comportamento de um modelo de spin mistos ($S = 1$ e $S = 3/2$) com uma anisotropia constante D^A agindo na sub-rede de spin $S^A = 1$ e com os spins da sub-rede de spin $S^B = 3/2$ livre da ação dessa anisotropia, conseqüentemente, eliminando a linha de pontos tricríticos. Esse fato indica que a quantidade de spins $S = 3/2$ sob ação da anisotropia é fundamental para a manutenção da linha de pontos tricríticos, assim muitos spins $3/2$ sob ação da anisotropia positiva é decisivo para levar o sistema de spins misto se comportar com um sistema de dois níveis $S = \pm 3/2$. Do mesmo modo, quando muito spins $3/2$ sob ação da anisotropia negativa, a qual favorece os estados $S = \pm 1/2$, assim o comportamento é de sistema de spins misto $S = 1$ e $S = 1/2$.

A figura (4.4) mostra que todas as linhas de segunda e de primeira ordem, cada uma com um D^B específico, se fundem em uma única linha de segunda e de primeira ordem. Do mesmo modo, todos os pontos tricríticos (linha de pontos tricríticos) se condensam em apenas um ponto. As linhas de segunda e de primeira ordem separam as fases paramagnética (região acima da curva) e a fase ferromagnética ou ferrimagnética (região abaixo das curvas). O comportamento tricrítico do sistema é mantido.

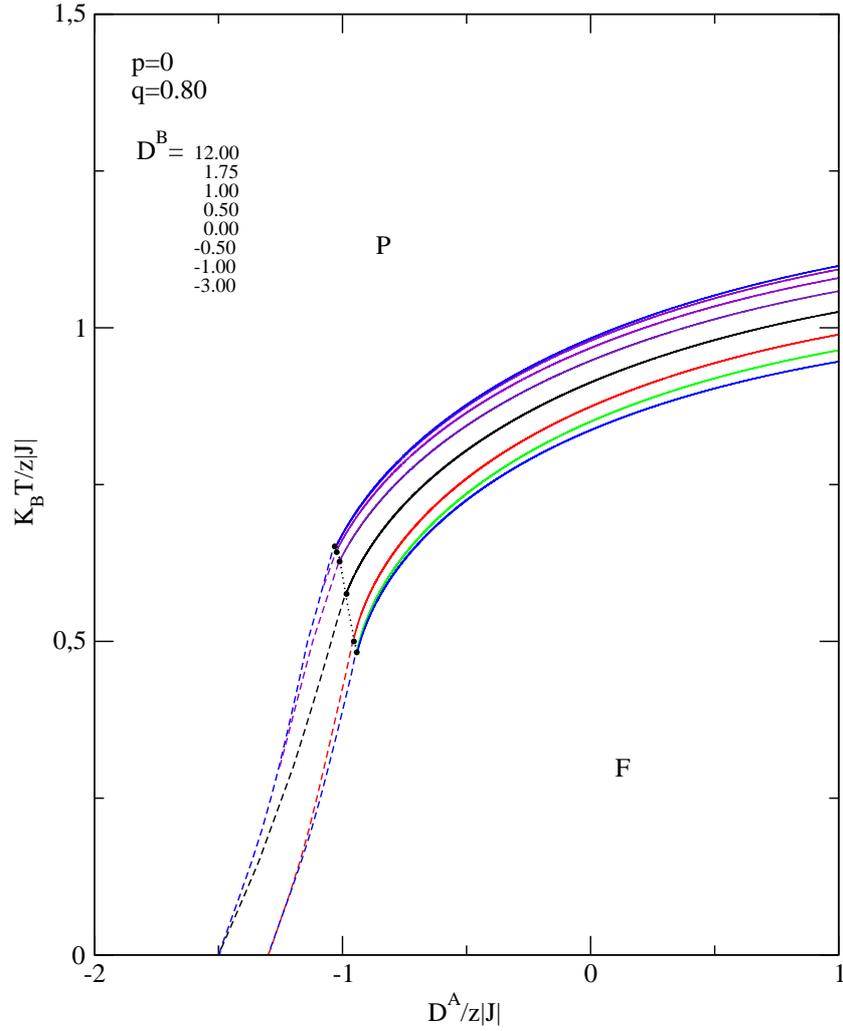


Figura 4.3: Diagrama de fase de $(K_B T / z |J|)$ versus $(D^A / z |J|)$ para o modelo de Ising de spin misto ferromagnético com o número de coordenações z , $p = 0$ e $q = 0.80$. O círculo cheio representa o ponto tricrítico, a linha pontilhada representa o comportamento dos pontos tricríticos, a linha tracejada e a contínua representa as transições de primeira e segunda ordem respectivamente a letra P indica a fase desordenada paramagnética e F a fase ordenada ferromagnética.

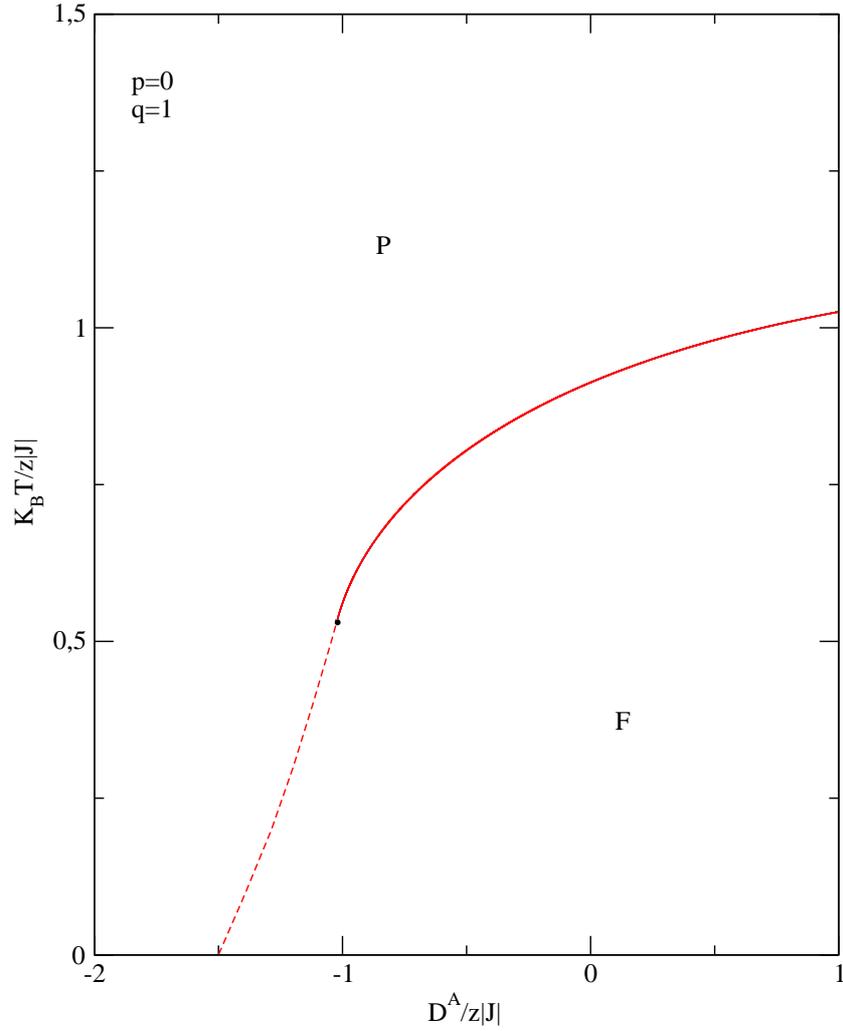


Figura 4.4: Diagrama de fase de $(K_B T / z |J|)$ versus $(D^A / z |J|)$ para o modelo de Ising de spin misto ferromagnético com o número de coordenações z , $p = 0$ e $q = 1$. O círculo cheio representa o ponto tricrítico, a linha pontilhada representa o comportamento dos pontos tricríticos, a linha tracejada e a contínua representa as transições de primeira e segunda ordem respectivamente a letra P indica a fase desordenada paramagnética e F para fase ordenada ferromagnética.

4.2.4 Diagrama de Fase: Caso $p \leq 0.0523$ e $q \neq 0$

Vamos agora examinar a probabilidade p variar (de zero à um) significa que parcelas p dos spins da sub-rede A são deixados livres da ação do campo cristalino D^A . Idem para o parâmetro q . Dessa forma, nas duas sub-redes há uma quantidade de spins fora da ação das anisotropias dos campos cristalinos. Tomando um valor qualquer dentro dessa região, por exemplo, $p = 0.20$ e variando o parâmetro q de zero a um, o diagrama de fase terá a mesma característica apresentado no caso anterior, isto é, o diagrama de fase mostra que o sistema migra de um comportamento de dois estados $S = \pm 3/2$ quando $D^B \rightarrow \infty$, e do comportamento de spins misto $S = 1$ e $S = 1/2$ no caso de $D^B \rightarrow -\infty$. Quando $q = 1$ voltamos a ter o comportamento de modelo de Ising de spins mistos $S = 1$ e $S = 3/2$ com uma anisotropia constante D^A atuando em uma parcela (80%) dos spins $S = 1$.

Qualquer outro caso com $p \leq 0.0523$ e variando o parâmetro q de zero a um, o diagrama de fase terá a mesma característica apresentado no caso anterior, mudando somente as coordenadas do ponto tricrítico final quando $q = 1$, em síntese, qualitativamente o diagrama de fase é o mesmo.

A figura (4.5) teremos um diagrama de fase para $p = 0.01$ e $q = 0.02$ e o mesmo exibindo o mesmo comportamento qualitativo do caso $p = 0$ e $q = 0.01$ descrito na figura (4.2) anteriormente, isto é, apresenta os comportamentos do modelo de dois estado $S = \pm 3/2$ ($D \rightarrow \infty$) e do modelo de spins misto $S = 1$ e $S = 1/2$ ($D \rightarrow -\infty$).

Por outro lado, a figura (4.6) com $p = 0.0523$ e $q = 1$ mostra que no caso em que 5,23% dos spins da sub-rede A estão fora da ação da anisotropia D^A , e todos spins da subrede B estão livres da ação de qualquer anisotropia de íon único, o comportamento do sistema é aquele de spins mistos de Ising $S = 1$ e $S = 3/2$ com uma anisotropia constante D^A . O comportamento tricrítico ainda é mantido.

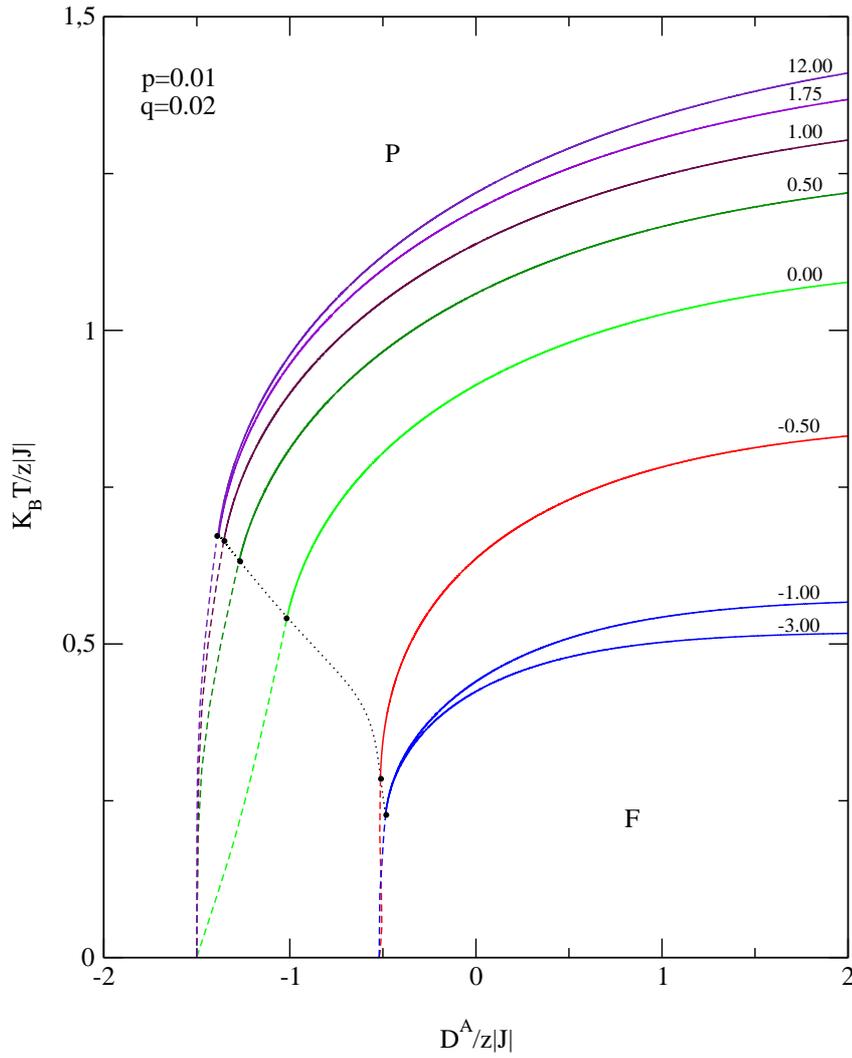


Figura 4.5: Diagrama de fase de $(K_B T/z|J|$ versus $D^A/z|J|$) para o modelo de Ising de spin misto ferromagnético com o número de coordenações z , $p = 0.01$ e $q = 0.02$. O círculo cheio representa o ponto tricrítico, a linha pontilhada representa o comportamento dos pontos tricríticos, a linha tracejada e a contínua representa as transições de primeira e segunda ordem respectivamente a letra P indica a fase desordenada paramagnética e F a fase ordenada ferromagnética.

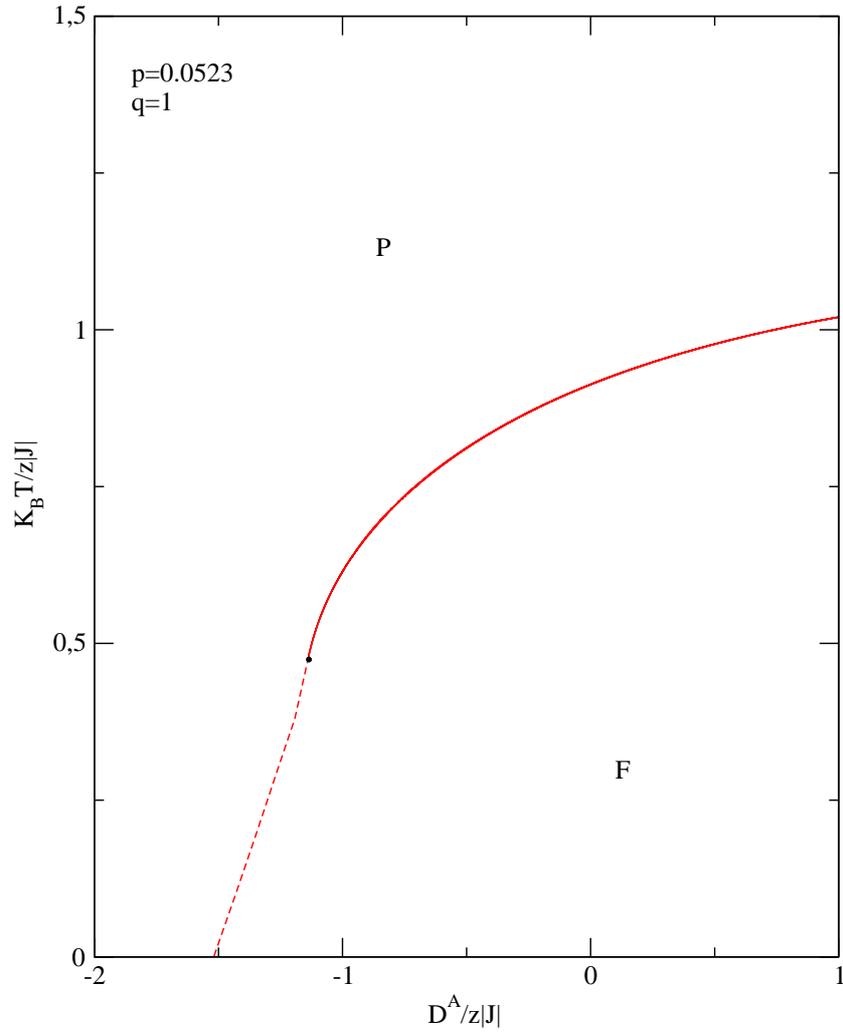


Figura 4.6: Diagrama de fase de $(K_B T_c / z |J|)$ versus $(D^A / z |J|)$ para o modelo de Ising de spin misto ferromagnético com o número de coordenações z , $p = 0.0523$ e $q = 1$. O círculo cheio representa o ponto tricrítico, a linha pontilhada representa o comportamento dos pontos tricríticos, a linha tracejada e a contínua representa as transições de primeira e segunda ordem respectivamente a letra P indica a fase desordenada paramagnética e F a fase ordenada ferromagnética.

4.2.5 Diagrama de Fase: Caso $p > 0.0523$ e $q \geq 0$

Vamos agora analisar o caso para $p > 0.0523$ e $q \geq 0$ a topologia do diagrama de fase é drasticamente mudado. Para valores de $q > 0.10$ o comportamento tricrítico desaparece, isto o diagrama de fase apresenta somente linhas de segunda ordem refletindo assim um comportamento do modelo de Blume-Capel (spin $S > 1/2$).

Na figura (4.7) apresenta $p = 0.0524$, mais da metade dos spins da sub-rede A estão fora da ação da anisotropia D^A , e $q = 0$, todos os spins da sub-rede B estão sob ação da anisotropia D^B . O diagrama mostra que qualquer valor positivo de D^B é suficiente para eliminar o comportamento tricrítico, isto é, as linhas de primeira ordem dão lugar a linha de segunda ordem, suprimindo os pontos tricríticos. Nesta configuração todos os spins da sub-rede B estão sujeitos a uma anisotropia constante de magnitude D^B , a qual quando ($D^B > 0$) favorece os estados $\pm 3/2$ levando o sistema como um todo apresentar o comportamento do modelo de Blume-Capel, o qual não apresenta comportamento tricrítico. No caso de anisotropia $D^B < 0$, os estados $S = \pm 3/2$ são suprimidos, e o comportamento de spins mistos $S = 1$ e $S = 1/2$ é dominante, e o comportamento tricrítico é mantido, isto é, valores negativos de D^B levam a transição de fase de primeira ordem e pontos tricríticos. Assim, uma fração de spins $S = 1$ sob ação da anisotropia já é suficiente para o sistema apresentar comportamento tricrítico.

Na figura (4.8) mostra que com o parâmetro $p = 0.0524$ e $q = 0.02$ o comportamento tricrítico desaparece para qualquer valor de D^B positivo ou negativo. Na sub-rede A menos da metade dos spins não sofrem ação do campo cristalino, e os demais spins estão sob ação desse campo cristalino, e assim tem os estados $S \pm 1$ favorecidos, reforçando assim o comportamento do modelo de Blume-Capel.

Por outro lado, a variação de q leva a mesma conclusão anteriores, isto é, todas as linhas (diversos valores fixos de D^B) são suprimidos resultando no caso puro ($D^B = 0$) para $q = 1$. Para quaisquer outros valores de $p > 0.0523$ e variando q , o sistema exhibe o comportamento descrito acima, e são mostrados nas figuras (4.9 e 4.10).

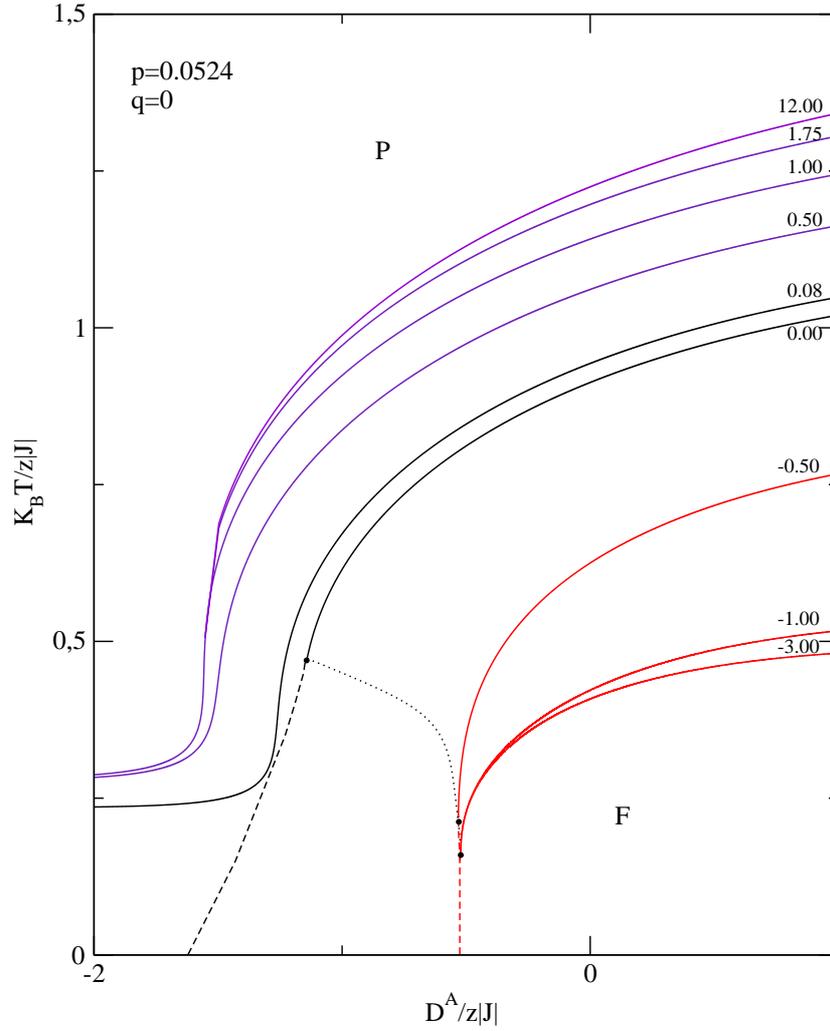


Figura 4.7: Diagrama de fase de $(K_B T / z |J|$ versus $D^A / z |J|$) para o modelo de Ising de spin misto ferromagnético com o número de coordenações z , $p = 0.0524$ e $q = 0$. O círculo cheio representa o ponto tricrítico, a linha pontilhada representa o comportamento dos pontos tricríticos, a linha tracejada e a contínua representa as transições de primeira e segunda ordem respectivamente a letra P indica a fase desordenada paramagnética e F a fase ordenada ferromagnética.

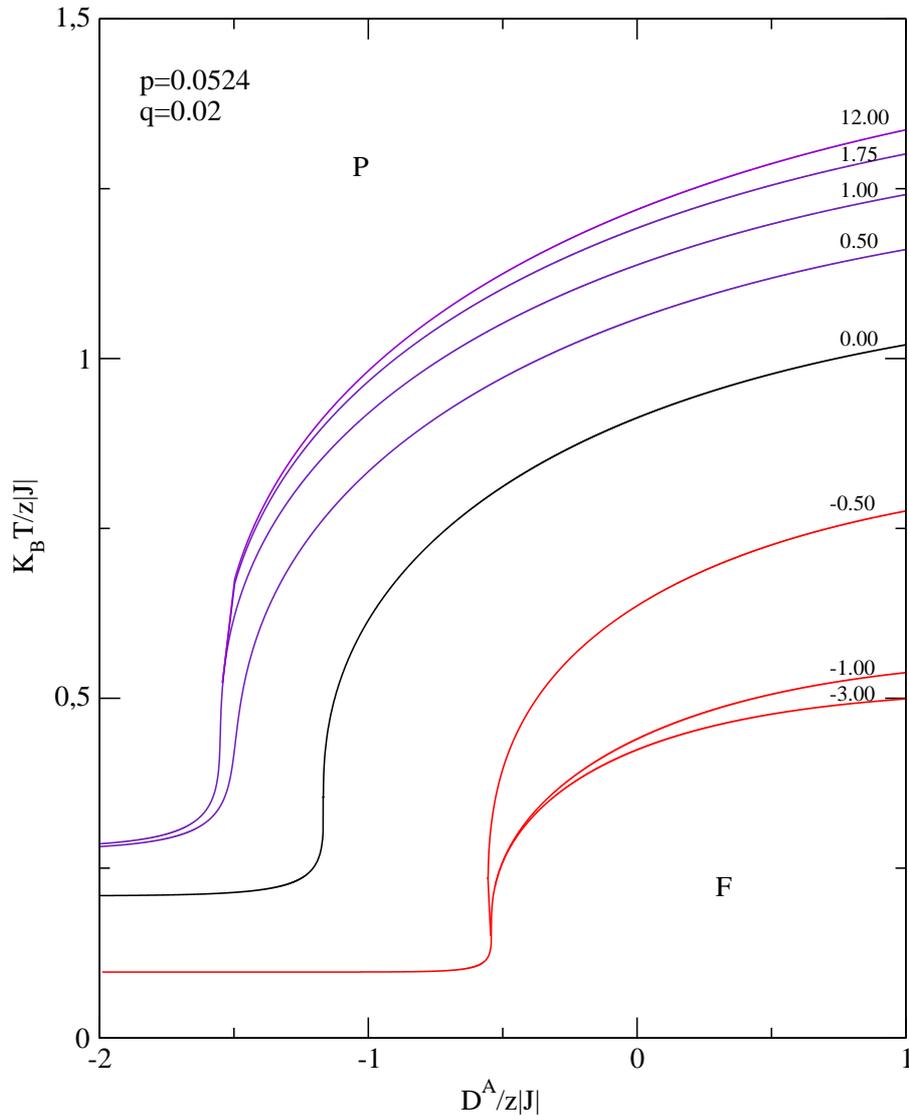


Figura 4.8: Diagrama de fase de $(K_B T/z|J|$ versus $D^A/z|J|$) para o modelo de Ising de spin misto ferromagnético com o número de coordenações z , $p = 0.0524$ e $q = 0.02$. A letra P indica a fase desordenada paramagnética e F a fase ordenada ferromagnética.

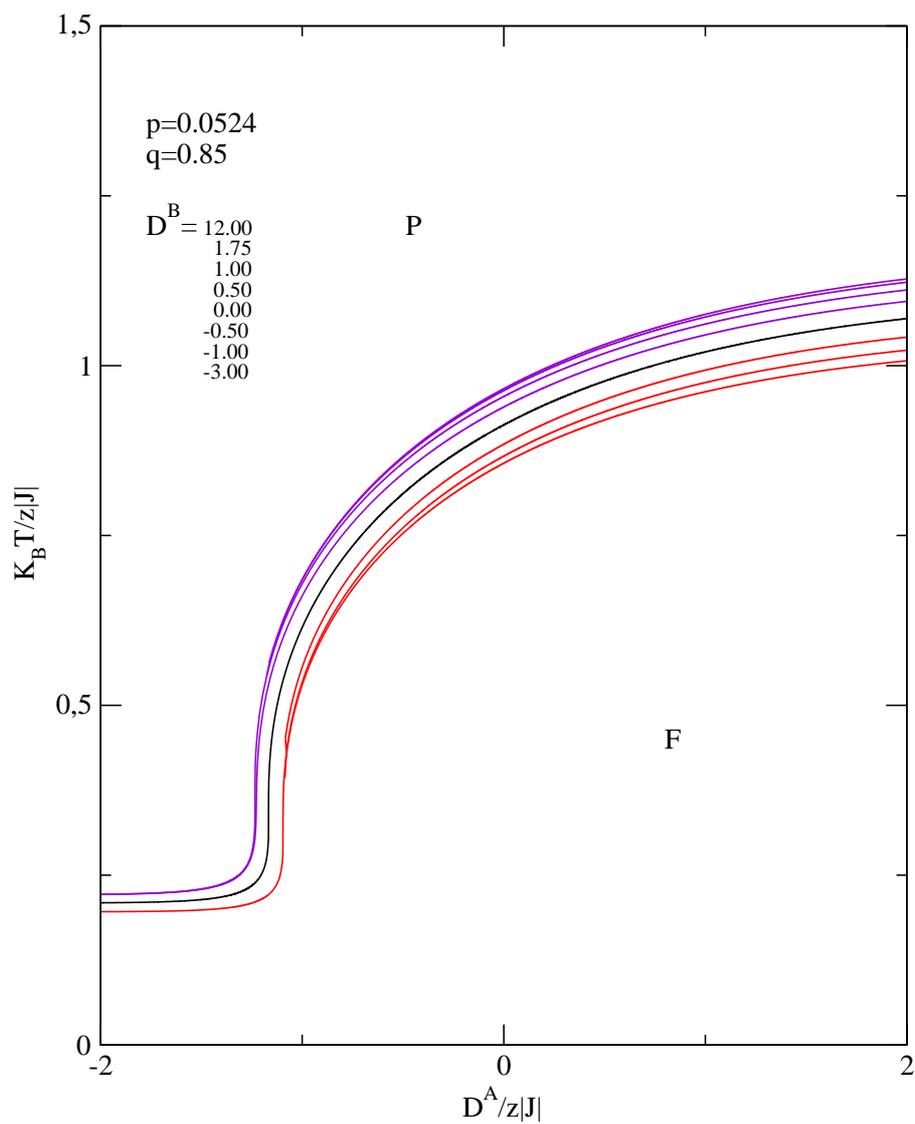


Figura 4.9: Diagrama de fase de $(K_B T/z|J|$ versus $D^A/z|J|$) para o modelo de Ising de spin misto ferromagnético com o número de coordenações z , $p = 0.0524$ e $q = 0.85$. A letra P indica a fase desordenada paramagnética e F a fase ordenada ferromagnética.

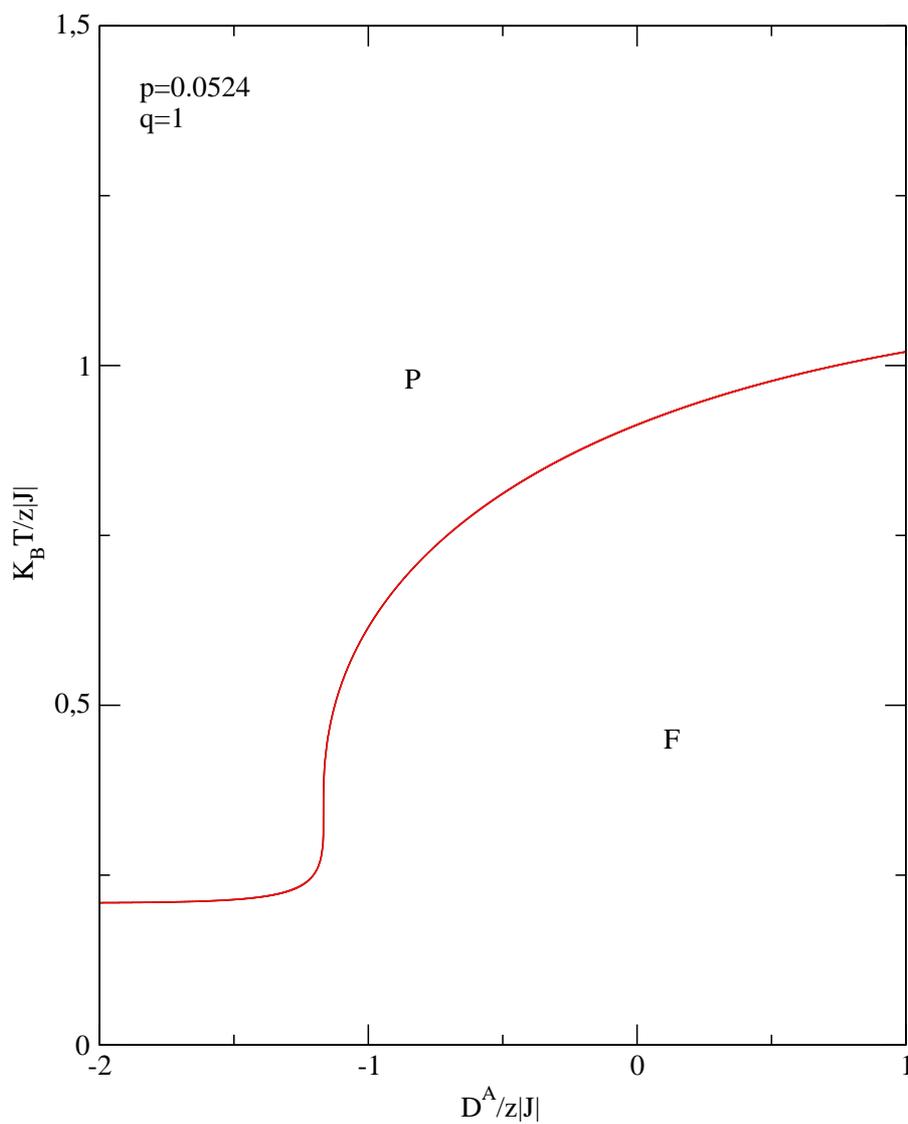


Figura 4.10: Diagrama de fase de $(K_B T / z |J|)$ versus $(D^A / z |J|)$ para o modelo de Ising de spin misto ferromagnético com o número de coordenações z , $p = 0.0524$ e $q = 1$. A letra P indica a fase desordenada paramagnética e F a fase ordenada ferromagnética.

4.3 Diagrama de Fase no espaço D^B versus T

4.3.1 Caso $p = 0$ e $q = 0$

Na figura (4.11) é mostrado o diagrama de fase no plano (D^B, T) para diferentes valores de D^A . Para $D^A/z|J| > -0.465$ o diagrama de fase é topologicamente equivalente aquele do modelo de Blume-Capel de *spin* $-3/2$, o qual não apresenta nenhum ponto tricrítico[27]. No caso quando $D^A/z|J| \leq -0.465$, um novo tipo de diagrama de fase é encontrado com transição de fase de primeira ordem em baixas temperaturas e uma transição de segunda ordem em altas temperaturas, separadas por pontos tricríticos. Quando $D^A/z|J|$ é baixada de -0.465 , uma região ferromagnética (ou ferrimagnética) torna-se larga e simultaneamente, o ponto tricrítico desloca-se diretamente para menores valores negativos de $D^B/z|J|$ e em altas temperaturas, isto é, uma linha de pontos tricríticos atravessa toda região, de altas à baixas temperaturas ou de valores positivos de $D^B/z|J|$ a valores grandes negativos. Aqui, não está indicado no diagrama de fase, mas a fase ordenada se divide em duas através de uma transição de fase de primeira ordem. A primeira fase ordenada consiste de spins misto $S = 1$ e $S = 3/2$ e a segunda $S = 1/2$ e $S = 1$. Em $D^A/z|J| = -0.5$ as duas fases se tornam somente uma $S = 1$ e $S = 3/2$. Para $-1.395 < D^A/z|J| \leq -0.5$ a fase ordenada Ferromagnética (ou Ferrimagnética) e a fase paramagnética são separadas por ambas transições de primeira em baixa temperatura e de segunda ordem em altas temperaturas. No entanto, em $D^A/z|J| \simeq -1.395$ a transição de segunda ordem desaparece e portanto para $-1.5 < D^A/z|J| \leq -1.395$, a transição paramagnética-ferromagnética é somente de primeira ordem. Em resumo, este caso $p = 0.00$ e $q = 0.00$ no plano D^B versus T forneceu um rico diagrama de fase. Nestas condições a sub-rede A tem $N/2$ spins $S = 1$ os quais todos estão sujeitos a ação da anisotropia D^A , e na sub-rede B possui $N/2$ spins $S = 3/2$, sujeitos a ação da anisotropia D^B . Na sub-rede A , a anisotropia positiva $D > 0$ favorece os estados $S = \pm 1$ e negativo ($D < 0$) o estado $S = 0$ e na sub-rede B , $D > 0$ favorece os estados $S = \pm 3/2$ e ($D < 0$) favorece os estados $S = \pm 1/2$. Portanto, para $D^B \pm \infty$ os comportamentos de dois estados ($S = \pm 3/2$) e misto ($S = 1/2$ e $S = 1$) são favorecidos.

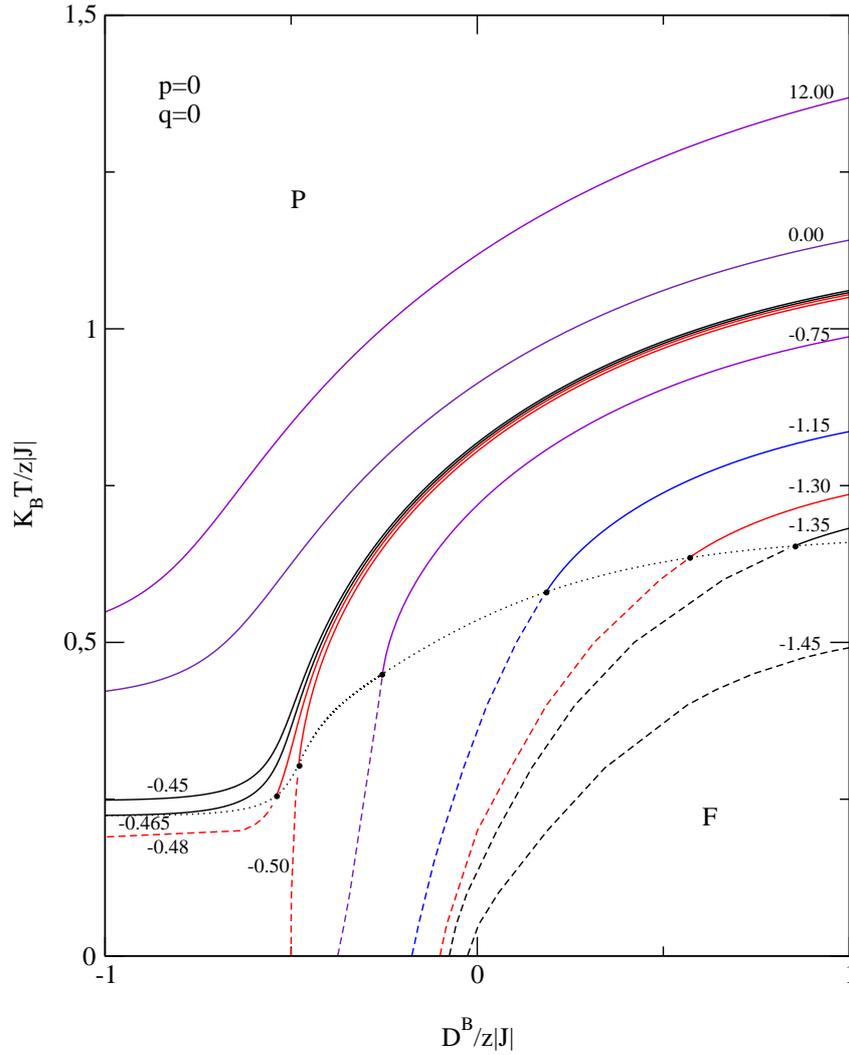


Figura 4.11: Diagrama de fase de $(K_B T / |zJ|$ versus $D^B / |zJ|$) para o modelo de Ising de spin misto ferromagnético com o número de coordenações z , $p = 0$ e $q = 0$. O círculo cheio representa o ponto tricrítico, a linha pontilhada representa o comportamento dos pontos tricríticos, a linha tracejada e a contínua representa as transições de primeira e segunda ordem respectivamente a letra P indica a fase desordenada paramagnética e F a fase ordenada ferromagnética.

4.3.2 Diagrama de Fase: Caso $p = 0$ e $q \neq 0$

Este caso $p = 0$ e $q \neq 0$ no plano D^B versus T forneceu um diagrama de fase bastante rico. Na sub-rede A os spins $S = 1$, os quais todos estão sujeitos a ação da anisotropia D^A , cuja ação se positiva $D^A > 0$ favorece os estados $S = \pm 1$ e negativo ($D^A < 0$) o estado $S = 0$. Assim, quando D^A cresce para o lado positivo, os spins desta sub-rede deverão preferencialmente ocuparem os estados $S = \pm 1$, comportamento de dois estados, e se por outro lado, crescer do lado negativo, os spins ocuparão preferencialmente o estado $S = 0$. Para valores intermediários, tanto positivos como negativos, os spins estarão aleatoriamente ocupando os estados $S = \pm 1$ e $S = 0$.

Adicionalmente, na sub-rede B os spins $S = 3/2$, os quais todos estão sujeitos a ação da anisotropia D^B , cuja ação se positiva $D^B > 0$ favorece os estados $S = \pm 3/2$ e negativo ($D^B < 0$) o estado $S = 1/2$. Assim, quando D^B cresce para o lado positivo, os spins desta sub-rede deverão preferencialmente ocuparem os estados $S = \pm 3/2$, comportamento de dois estados, tipo Blume-Capel, e se por outro lado, crescer do lado negativo, os spins ocuparão preferencialmente o estado $S = \pm 1/2$. Para valores intermediários, tanto positivos como negativos, os spins estarão aleatoriamente ocupando os estados $S = \pm 3/2$ e $S = \pm 1/2$.

Portanto, temos que combinar estes dois ingredientes. Assim, para valores positivos de D^A , o sistema deverá apresentar como um sistema de dois estados, os quais podem ser $S = \pm 3/2$ ou se normalizar $S = \pm 1$, mesmo em região negativa de D^B , o diagrama de fase mostrado na figura (4.12) mostra somente linhas de segunda ordem. A medida que D^A assume valores negativo, o comportamento tricrítico aparece, e o diagrama de fase mostra linha de segunda ordem em altas temperaturas e de primeira ordem em baixas temperaturas. Este diagrama de fase é qualitativamente semelhante ao da figura (4.11).

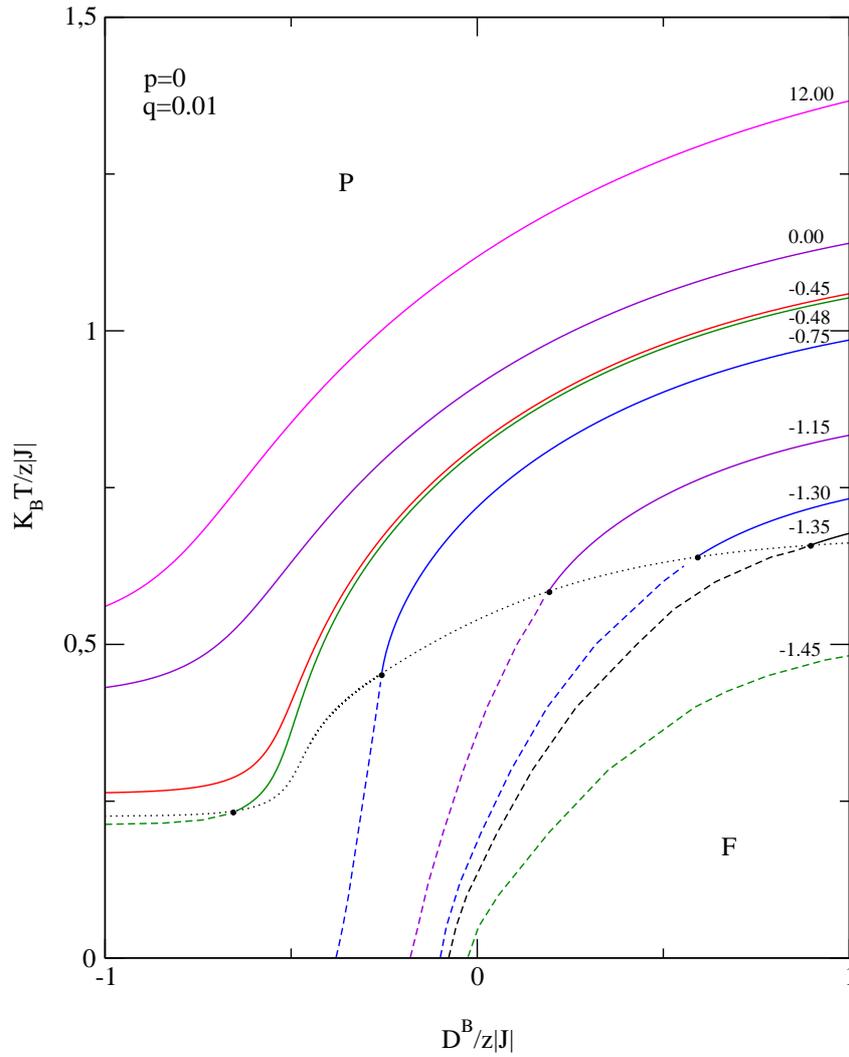


Figura 4.12: Diagrama de fase de $(K_B T / z|J|)$ versus $D^B / z|J|$ para o modelo de Ising de spin misto ferromagnético com o número de coordenações z , $p = 0.00$ e $q = 0.01$. O círculo cheio representa o ponto tricrítico, a linha pontilhada representa o comportamento dos pontos tricríticos, a linha tracejada e a contínua representa as transições de primeira e segunda ordem respectivamente a letra P indica a fase desordenada paramagnética e F a fase ordenada ferromagnética.

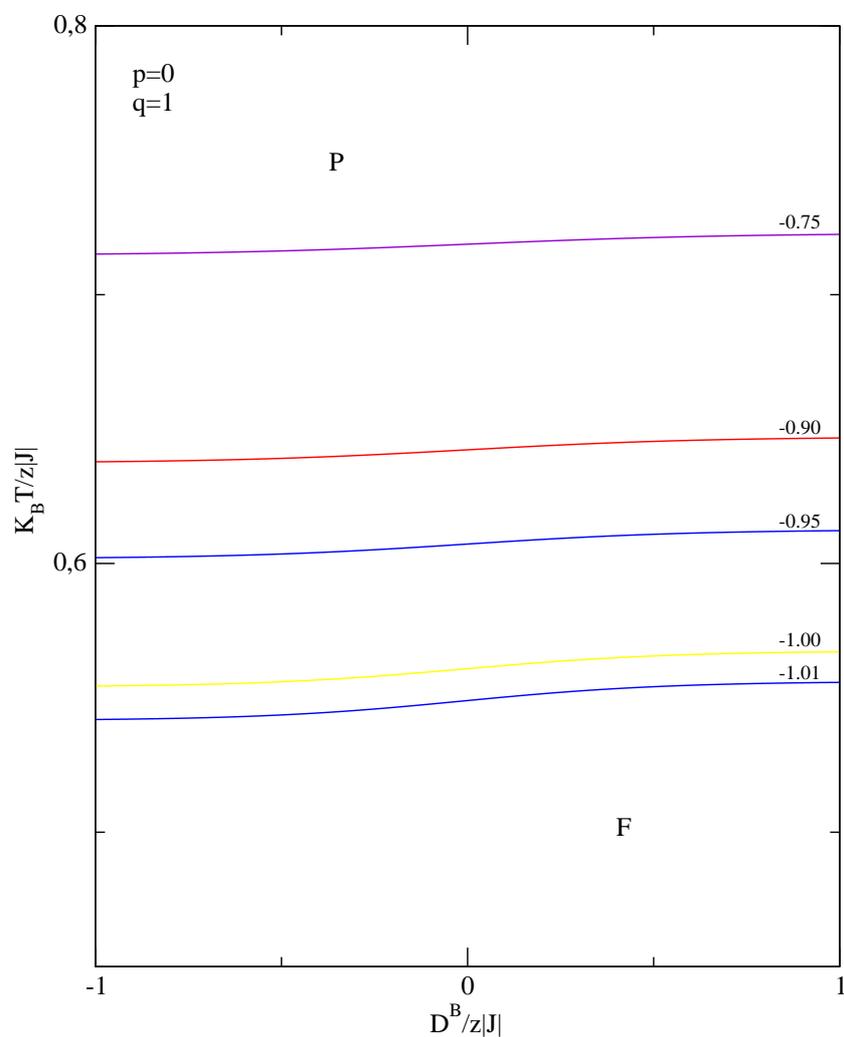


Figura 4.13: Diagrama de fase de $(K_B T / z |J|)$ versus $(D^B / z |J|)$ para o modelo de Ising de spin misto ferromagnético com o número de coordenações z , $p = 0$ e $q = 1$. A letra P indica a fase desordenada paramagnética e F a fase ordenada ferromagnética.

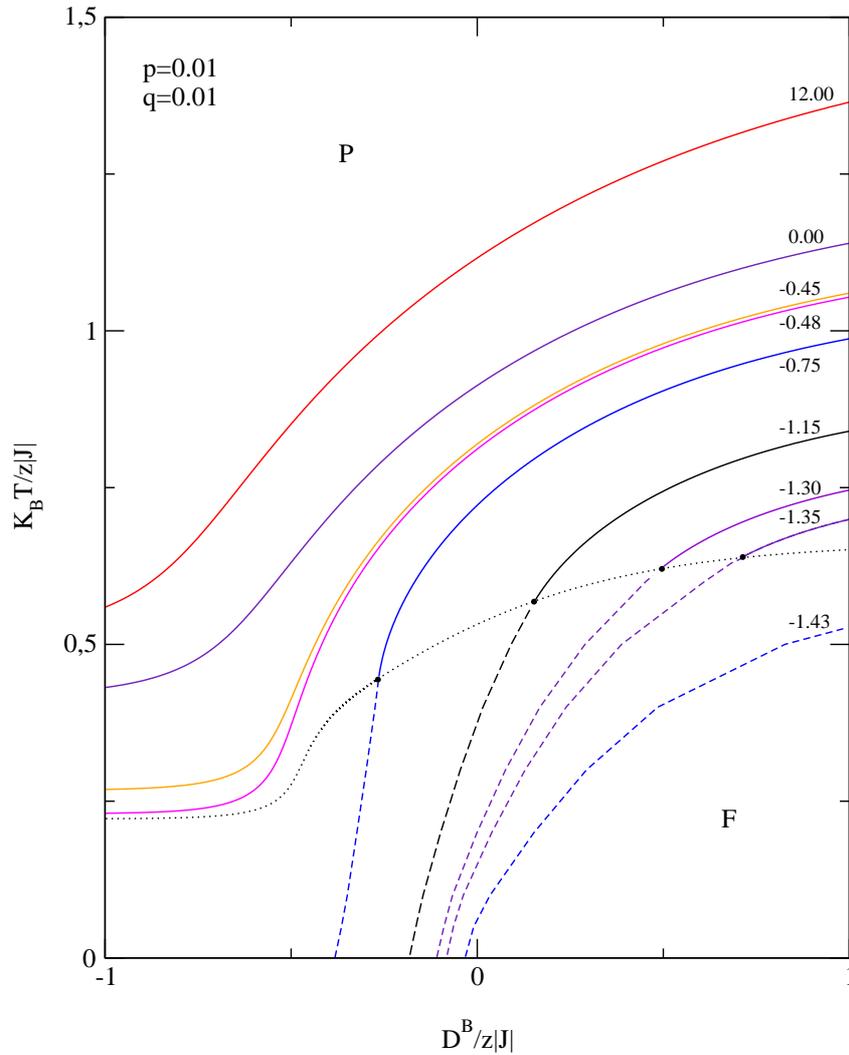


Figura 4.14: Diagrama de fase de $(K_B T / z |J|$ versus $D^B / z |J|$) para o modelo de Ising de spin misto ferromagnético com o número de coordenações z , $p = 0.01$ e $q = 0.01$. O círculo cheio representa o ponto tricrítico, a linha pontilhada representa o comportamento dos pontos tricríticos, a linha tracejada e a contínua representa as transições de primeira e segunda ordem respectivamente a letra P indica a fase desordenada paramagnética e F a fase ordenada ferromagnética.

A medida que fixando o valor da probabilidade $p = 0$ e variando o valor da probabilidade ($q = 0 \rightarrow 1$), significa que na sub-rede B parcelas crescentes dos spins estão livre da ação da anisotropia. Percebe-se uma mudança de posições das coordenadas ($K_B T/z|J|$ e $D^B/z|J|$) dos pontos tricríticos. A linha de ponto tricríticos desloca de forma que aos poucos as transições de primeira ordem vão desaparecendo. Quando $q > 0.8$ todas as linhas de primeira ordem desaparecem, dando lugar a somente transição de fase de segunda ordem, como mostrada na figura (4.13). Quando $q = 1$ teremos vários linha de segunda ordem paralelas ao eixo D^B , os quais correspondem a pontos na curva do diagrama de fase da figura (4.4).

4.3.3 Diagrama de Fase: Caso $p \neq 0$ e $q \neq 0$

Neste caso tem-se uma fração de spins $S = 1$ fora da ação de D^A e uma fração de spins $S = 3/2$ também livres da ação de D^B . No caso limite $p = q = 1$, o modelo migra para o modelo puro de spins misto $S = 3/2$ e $S = 1$ com temperatura crítica listado na tabela 1 (no final deste capítulo). Então o crescimento de p e q resulta no desaparecimento do comportamento tricrítico, isto é, a transição de fase é somente de segunda ordem, portanto não há pontos tricríticos.

No diagrama de fase, mostrado na figura (4.14), mostra o caso $p = 0.01$ e $q = 0.01$. Este diagrama de fase é semelhante aos exibidos anteriormente com $p = 0$ e $q = 0$. Aqui o diagrama apresenta os comportamentos de dois estados para $D^A \rightarrow \infty$, comportamento de spins misto $D^A \rightarrow -\infty$, e comportamento intermediário com transição de fase de segunda ordem em altas temperaturas e de primeira ordem em baixas temperaturas com pontos tricríticos separando as duas curvas de segunda e de primeira ordem. O diagrama apresenta uma linha de pontos tricríticos que atravessa as regiões de $D^B > 0$ à $D^B < 0$.

O crescimento lento de p e q , até um valor crítico, provoca pequenas mudanças no diagrama de fase, o que correspondem ao desaparecimento de algumas linhas de primeira ordem, aos pequenos deslocamentos dos pontos tricríticos. Esse comportamento é mostrado no diagrama de fase da figura (4.15), o qual exhibe uma região na qual apresenta somente linhas de segunda

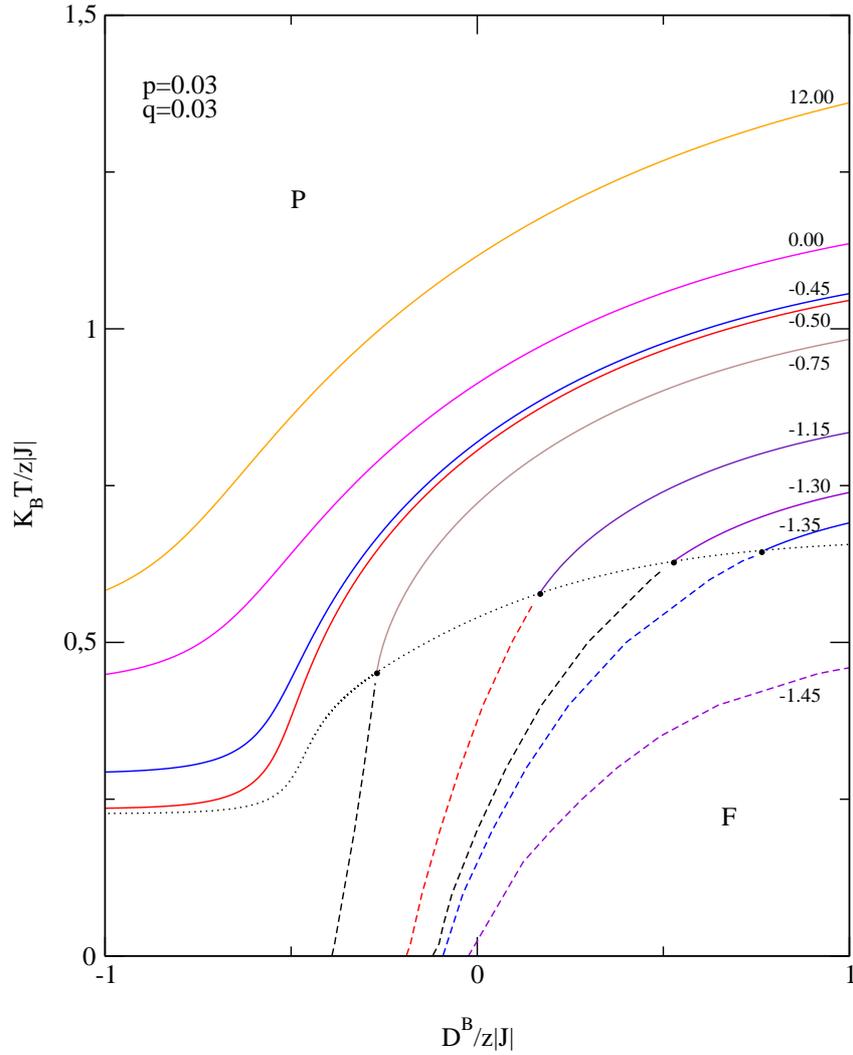


Figura 4.15: Diagrama de fase de $(K_B T/z|J|$ versus $D^B/z|J|$) para o modelo de Ising de spin misto ferromagnético com o número de coordenações z , $p = 0.03$ e $q = 0.03$. O círculo cheio representa o ponto tricrítico, a linha pontilhada representa o comportamento dos pontos tricríticos, a linha tracejada e a contínua representa as transições de primeira e segunda ordem respectivamente a letra P indica a fase desordenada paramagnética e F a fase ordenada ferromagnética.

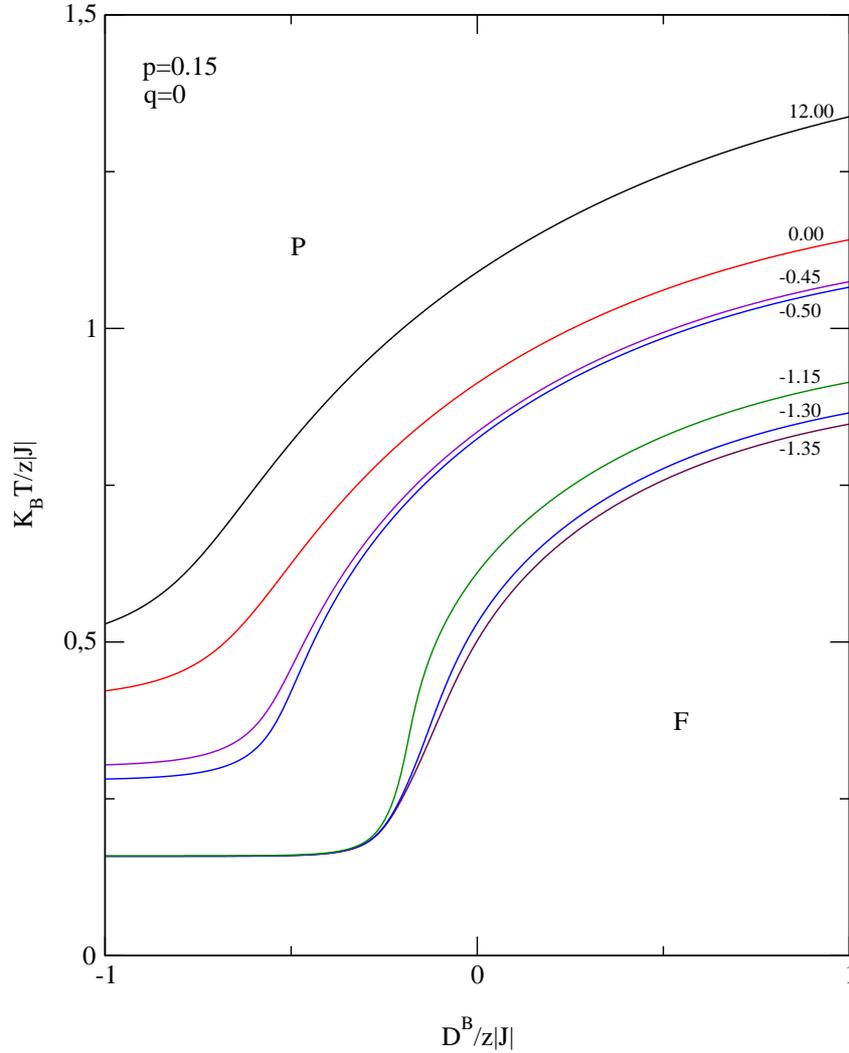


Figura 4.16: Diagrama de fase de $(K_B T / z |J|)$ versus $(D^B / z |J|)$ para o modelo de Ising de spin misto ferromagnético com o número de coordenações z , $p = 0.15$ e $q = 0$. A letra P indica a fase desordenada paramagnética e F a fase ordenada ferromagnética.

ordem quando os valores de $D^A > -0.75$ e somente linhas de primeira ordem para $D^A < -1.4$. No intervalo entre esses valores $-0.75 > D^A > -1.4$, o diagrama apresenta um comportamento tricrítico, com linhas de segunda ordem na região de altas temperaturas e linhas de primeira ordem na região de baixa temperatura, sendo que esses dois regimes de transições de fases são separados por pontos tricríticos.

Na figura (4.16) é exibido o diagrama de fase para valores de p e q maiores

do que o valor crítico, o qual exibe uma transição de fase somente de segunda ordem entre as fase paramagnética (desordenada) e a fase ferromagnético ou ferrimagnética (fase ordenada). Neste região do espaço termodinâmico não há comportamento tricrítico

Para sintetizar esta seção a tabela 1 abaixo mostra neste espaço T versus D^B os valores de p e q (críticos) acima dos quais o modelo apresenta somente transição de segunda ordem, isto é, o comportamento tricrítico é suprimido.

p	q	Tipo de transição
0.00	$q \geq 0.810$	2 ^a ordem
0.01	$q \geq 0.740$	2 ^a ordem
0.02	$q \geq 0.700$	2 ^a ordem
0.03	$q \geq 0.650$	2 ^a ordem
0.04	$q \geq 0.600$	2 ^a ordem
0.05	$q \geq 0.560$	2 ^a ordem
0.06	$q \geq 0.000$	2 ^a ordem

Capítulo 5

Conclusões e Perspectivas

5.1 Conclusões Finais

Neste trabalho foi estudado o diagrama de fase do modelo de Ising de spins mistos $S = 1$ e $S = 3/2$. O sistema considerado é composto por duas sub-redes, uma com $N/2$ spins $S = 1$ a qual foi chamada de sub-rede A, e a outra sub-rede B com $N/2$ spins $S = 3/2$.

Os spins da sub-rede A estão acoplados com os seus primeiros vizinhos na sub-rede B através da interação de troca ferromagnética ou ferrimagnética. Todos os spins de cada sub-rede estão sob ação de uma anisotropia de íon único aleatória (D_i^A para sub-rede A e D_j^B para sub-rede B) governada por uma distribuição de probabilidade.

Portanto, neste modelo há competição entre as interações de troca e as anisotropias de íon único, além do efeito da temperatura. Se por um lado a interação de troca tenta ordenar os spins das duas sub-redes paralelamente ($J > 0$) ou anti-paralelamente ($J < 0$), por outro lado as anisotropias alterna em promover o ordenamento e o desordenamento, e a agitação térmica, a qual sempre desordenará o sistema com o crescimento da temperatura.

Os diagramas de fases do capítulo 4 descrevem as transições de fases em dois diferentes espaços termodinâmicos, um $T \times D^A$ e outro $T \times D^B$. Portanto, neste cenário as principais conclusões serão sintetizadas abaixo.

5.1.1 Diagramas de fases no espaço $T \times D^A$

Os diagramas de fases no espaço $T \times D^A$ exibem basicamente três tipos de comportamento:

1 - $0.00 \leq p \leq 0.0523$: Nesta extensão de valores de p e para valores de q variando de zero a um, os diagramas de fases exibem comportamento tricrítico, isto é, linhas de segunda ordem separadas das linhas de primeira ordem por pontos tricríticos. Aqui, para q pequeno e valores fixos grandes de D^B , as linhas de segunda ordem começam na região de altas temperaturas com $D^A > 0$. O crescimento de $|D^A|$, do lado negativo, faz baixar a temperatura crítica, e a linha de segunda ordem termina em um ponto tricrítico, e em seguida começa uma transição de fase de primeira ordem, esta linha termina na temperatura zero e em $D^A = -1.5$.

Para valores negativos de D^B , a linha de segunda começa em temperaturas intermediárias com $D^A > 0$. Da mesma forma, o crescimento de $|D^A|$, do lado negativo, faz baixar a temperatura crítica, e a linha de segunda ordem termina em um ponto tricrítico, começando a de primeira ordem, a qual termina na temperatura zero e em $D^A = -0.5$. Portanto, há um linha de pontos de críticos que estende no eixo D^A entre os valores $D^A = -0.5$ à $D^A = -1.5$.

O aumento do parâmetro q desloca as coordenadas dos pontos tricríticos, basicamente aproximam os extremos da linha de pontos tricríticos, o extremo $D^A = -0.5$ cresce para o lado negativo, aproximando de $D^A = -1.5$. A linha de pontos tricrítico desloca para a região de temperaturas maiores, fazendo desaparecer algumas linhas da região de temperaturas mais baixas. No limite de $q = 1$, todas as linhas se fundem em uma única, onde a lado da segunda ordem é na região de temperatura maiores e a de primeira na região de baixa temperatura, terminando em $T = 0$ e $D^A = -1.5$.

Do ponto de vista microscópico percebe-se que para q pequeno, e quando ($D^B \rightarrow \infty$) tende a levar o sistema, como um todo, a ter comportamento de dois estado ($S = \pm 3/2$), assim a temperatura crítica vai a zero em $D^A = -1.5$. Por outro lado, ($D^B \rightarrow -\infty$) favorece ao estado $S = \pm 1/2$ e o sistema como um todo tem comportamento de spin mistos ($S = 1$ e $S = 1/2$) com

temperatura indo à zero em $D^A = -0.5$.

Finalmente, o aumento do parâmetro q faz o sistema migrar do comportamento de spin mistos ($S = 1$ e $S = 1/2$) para o comportamento de um modelo de spin mistos ($S = 1$ e $S = 3/2$) com uma anisotropia constante D^A agindo na sub-rede de spin $S^A = 1$ e com os spins da sub-rede de spin $S^B = 3/2$ livre da ação dessa anisotropia, consequentemente eliminando a linha de pontos tricríticos.

Esse fato indica que a quantidade de spins $S = 3/2$ sob ação da anisotropia é fundamental para a manutenção da linha de pontos tricríticos, assim muitos spins $3/2$ sob ação da anisotropia positiva é decisivo para levar o sistema de spins misto se comportar com um sistema de dois níveis $S = \pm 3/2$. Do mesmo modo, quando muito spins $3/2$ sob ação da anisotropia negativa, o comportamento é de sistema de spins misto $S = 1$ e $S = 1/2$.

2 - $0.0523 < p \leq 0.0524$: Nesta região do espaço termodinâmico uma pequena parcela (um pouco mais de cinco por cento) dos spins da sub-rede A estão livres da ação de D^A . O diagrama de fase é dividido em duas regiões, uma no caso de $q = 0.00$, o sistema começa se comporta como o modelo de Blume-Capel para valores $D^B \geq 0$, sem comportamento tricrítico, somente linha de segunda ordem. A outra região para valores de $D^B < 0$, ainda o sistemas apresenta comportamento tricrítico, onde a linha de ponto tricrítico tem a mesma extensão do primeiro caso, isto é $D^A = -0.5$ à $D^A = -1.5$.

O crescimento do parâmetro q tende levar o sistema como um todo a ser comportar como o modelo de Blume-Capel, o diagrama de fase não apresenta comportamento tricrítico, a transição de fase entre as fases ordenada e desordenada é somente de segunda ordem. Assim, para valores de $q \geq 0.02$ o sistema apresenta somente linhas de segunda ordem, porém o crescimento desse parâmetro faz as linhas se fundirem e em $q = 1.00$ todas as linhas se fundem em apenas uma linha de segunda ordem.

3 - $p > 0.0524$: Nesta região do espaço termodinâmico o sistema não apresenta comportamento tricrítico para qualquer valor do parâmetro q , porém o crescimento de q faz as linhas se fundirem e em $q = 1$ todas as linhas se fundem em apenas uma linha de segunda ordem.

5.1.2 Diagramas de fases no espaço $T \times D^B$

Os diagramas de fases no espaço $T \times D^B$ exibem comportamento tricrítico para valores do parâmetro $p < 0.06$ e para um certo valor crítico de q . Nessa faixa de valores de p , para um valor fixo desse parâmetro e variando o valor de q o efeito é a transformação gradativa das linhas de primeira ordem em segunda ordem, assim para valores de q maiores do que um certo valor crítico, todas as linhas de primeira ordem transformam em linha de segunda ordem, excluindo completamente o comportamento tricrítico. A tabela no final do capítulo anterior dá um visã clara do comportamento crítico nesse espaço.

5.2 Perspectivas Futuras

Nesta dissertação foi estudado, usando a teoria de campo médio via desigualdade de Pierls-Bogoliubov, os efeitos de campos cristalinos aleatórios nos diagramas de fase de um sistema magnético de spins misto $S = 1$ e $S = 3/2$. O estudo revelou interessantes efeitos da anisotropia no diagrama de fase do modelo.

O tema estudado é extenso, e somente no contexto do diagrama de fase ainda há vários detalhes a serem explorados, por exemplo, a transição de fase dentro da fase ordenada entre a fase de spins misto $S = 1$ e $S = 1/2$ e a fase de spins misto $S = 1$ e $S = 3/2$.

Devido as equação oriundas da expansão de Landau serem funções pares em relação a J , a interação de troca produz os mesmos efeitos se $J > 0$ (caso ferromagnético) ou $J < 0$ (caso ferrimagnético), proporcionando estudar propriedades de sistemas ferromagnéticos e ferrimagnéticos. Neste trabalho foi explorado somente os aspectos ferromagnéticos, assim fica em aberto o estudo de todos os aspectos das propriedades dos ferrimagnetos.

No contexto do modelo estudado, nesta dissertação, ficou em aberto o estudo das propriedades termodinâmicas, tais como, magnetização, calor específico, tanto do sistema ferromagnético como do ferrimagneto.

Finalmente, é uma boa sugestão retomar o estudo desse modelo utilizando uma aproximação mais sofisticada, tipo campo médio de Beth-Pierls, e ainda mais interessante dentro da simulação computacional de monte carlo.

Atualmente, há um grande interesse em estudar transições de fase quântica, assim o modelo de spin misto de Ising, o qual é clássico, pode transformar-se em um modelo quântico pela introdução de uma anisotropia de campo cristalino transversal, possibilitando um tema para novos estudos no futuro.

Bibliografia

- [1] L. E. Reichl, "A Modern Course in Statistical Physics". University of Texas. Press, Austin, (1980).
- [2] H. E. Stanley, Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena (Oxford University Press, New York, 1971).
- [3] S. R. Salinas, *Introdução a Física Estatística*, (EDUSP, São Paulo, 1997).
- [4] R.K. Pathria, Statistical Mechanics, International Series in Natural Philosophy (Pergamon Press 1988), v. 45.
- [5] Kerson Huang, Statistical Mechanics, (Wiley International Edition).
- [6] E. Ising, Z. Physik 31, (1925) 253 .
- [7] W. Heisenberg, Z. Phys. 49, (1928) 619.
- [8] L. Onsager, Phys. Rev. 65, (1944) 117.
- [9] Philosophical Magazine 87, No. 34, (2007) 5309.
- [10] E. A. Guggenheim, J. Chem. Phys. 13, (1945) 253.
- [11] P. Heller and G. B. Benedek, Phys. Rev. Lett. 8, (1962) 428 .
- [12] K. Wilson and J. B.Kogut, (1974) Phys. Rep. 12C 77.
- [13] Lima, Elon L., Análise Real, vol. 1. IMPA, (1995).
- [14] A. Aharony, Phys. Rev. B 18 (1978) 3318.
- [15] C.Z. Yang, Z.Y. Li, Phys. Status Solidi B 146 (1988) 223.

-
- [16] S.L. Yang e C.Z. Yang, *J.Magn. Magn. Mater.* 205 (1999) 357.
- [17] G.M. Buendia e E. Machado, *Phys. Rev. B* 61 (2000) 14686.
- [18] M. Barati e A. Ramazani, *Phys. Rev. B* 62 (2000) 12130.
- [19] L.L. Denga, S.L. Yan *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 251 (2002) 138-147.
- [20] R.A. Tahir-Kheli, *Phys. Rev.* 169 (1968) 517.
- [21] M. Blume, V.J. Emery e R.B. Griffiths, *Phys. Rev. A* 4 (1971) 1071.
- [22] A. Maritan, M. Cieplak, M.R. Swift, F. Toigo e J.R. Banavar, *Phys. Rev. Lett.* 69 (1992) 221.
- [23] C. Buzano, A. Maritan e A. Pelizzola, *J. Phys.: Condens. Matter* 6 (1994) 327.
- [24] Gatteschi D, Kahn O, Miller J S e Palacio F (ed) 1991 *Magnetic Molecular Materials (NATO ASI Series)* (Dordrecht: Kluwer Academic).
- [25] O.F. Abubrig, D. Horváth, A. Bobák e M. Jascur, *Physica A* 296(2001) 437-450.
- [26] A. Bobák, *Physica A* 258(1998) 140.
- [27] J.A. Plascak, J.G. Moreira e F.C. Sá Barreto, *Phys. Lett. A* 173 (1993) 360.

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](#)