

UFMT Instituto de Física

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO



Denes Martins de Moraes

— Março 2009 —

Livros Grátis

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

Milhares de livros grátis para download.

Modelo de van Hemmen com Anisotropia Aleatória de Campo Cristalino

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-graduação em Física da Universidade Federal de Mato Grosso como requisito necessário à obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: *Prof. Dr. Alberto Sebastião de Arruda, UFMT*
Co-Orientador: *Prof. Dr. José Ricardo de Sousa, UFAM*

— Março 2009 —



UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO
INSTITUTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
Av. Fernando Corrêa da Costa, s/n - Coxipó - CEP: 78060-900 - Cuiabá, MT – Brasil.
Fone- 65 615 8734/ 8937 E-mail: pgf@fisica.ufmt.br

FOLHA DE APROVAÇÃO

Título: “Modelo de van Hemmen de spin $S=3/2$ com Anisotropia de Campo Cristalino Aleatória”

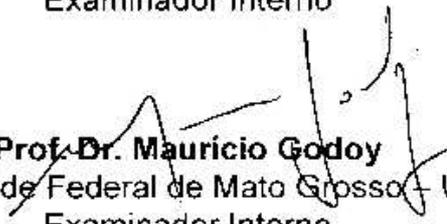
Autor: Denes Martins de Moraes

Dissertação de Mestrado defendida e aprovada em 06 de março de 2009, pela Banca Examinadora:


Prof. Dr. Alberto Sebastião de Arruda
Universidade Federal de Mato Grosso - UFMT
Orientador

Prof. Dr. Douglas Ferreira de Albuquerque
Universidade Federal de Sergipe - UFS
Examinador Externo


Prof. Dra. Erica de Mello Silva
Universidade Federal do Tocantins - UFT
Examinador Interno


Prof. Dr. Mauricio Godoy
Universidade Federal de Mato Grosso - UFMT
Examinador Interno

"O saber a gente aprende com os mestres e com os livros. A sabedoria, se aprende é com a vida e com os humildes".

Cora Coralina

*"A ciência sem a religião é parálitica. A religião sem a ciência
é cega"*

Albert Einstein

Agradecimentos

- Aos meus pais por seus ensinamentos básicos.
- À minha esposa, Elenice, pelo seu amor e seu companheirismo. Pelo apoio necessário em momentos de desânimo. Às minhas filhas, Letícia e Giovanna, por entenderem a minha ausência durante o trabalho e os estudos.
- Aos amigos da FORÇA AÉREA BRASILEIRA: Alexandre Corrêa Lima, Josée Moreira e André Jefferson Marinho dos Santos, pelo incentivo e apoio na luta de mais um sonho a ser realizado e concretizado.
- Aos amigos do Mestrado em Física que sempre se colocaram a disposição em compartilhar informações sobre os mais diversos assuntos e, com isso, aumentando a gama de conhecimento adquirido durante o curso.
- Ao meu orientador, Prof. Dr. Alberto Sebastião de Arruda, por sua amizade. Por ter acreditado e confiado em meu potencial, mesmo com tantos óbices enfrentados durante o curso. Além do agradecimento ao Prof. Arruda, quero também compartilhar o grande orgulho e satisfação por ter sido orientado por este apaixonado pela Física.
- Ao Prof. Dr. José Ricardo de Sousa por sua co-orientação, que somou esforços para que esse trabalho fosse concretizado.
- Aos professores do Instituto da Física pelo companheirismo e dedicação em compartilhar os conhecimentos.
- A Deus, pela vida.

Conteúdo

Lista de Figuras	vi
Resumo	viii
Abstract	ix
1 Introdução	1
1.1 Transição de Fase e Fenômenos Críticos	1
2 Teoria de Campo Médio de Weiss	7
2.1 Introdução	7
2.2 Modelo de Curie-Weiss	8
3 Generalização do Hamiltoniano de van Hemmen	12
3.1 Introdução	12
3.2 Hamiltoniano de van Hemmen	14
4 Diagramas de Fase do Modelo de van Hemmen	28
4.1 Introdução	28
4.2 Diagrama de Fase do caso $S = 1$	30
4.2.1 Transição de Fase: Vidro de Spin - Paramagnética . . .	31
4.2.2 Transição de Fase: Ferromagnética - Paramagnética . .	35
4.2.3 Diagrama de Fase Completo: Fases Ferromagnética, Vidro de Spin e Paramagnética	39
4.3 Diagrama de Fase: Caso $S = 3/2$	43
4.3.1 Transição de Fase : Vidro de Spin - Paramagnética para $S = 3/2$	48

5	Conclusões e Perspectivas	50
	Bibliografia	54

Lista de Figuras

1.1	A figura representa um diagrama de fase de um ferromagneto de Ising, com a magnetização média M como função de um campo magnético H e temperatura T	3
4.1	Diagrama de fase no plano T-D para o modelo de van Hemmen de spin $S = 1$. As linhas contínuas representam as transições de fase de segunda ordem e os pontos pretos representam pontos tricríticos.	33
4.2	Diagrama de fase no plano T-D para o modelo de van Hemmen de spin $S=1$. Região negativa de D	35
4.3	Diagrama de fase no plano T-D para o modelo de van Hemmen de spin $S=1$ na região positiva de D	36
4.4	Diagrama de fase no plano T-J para o modelo de van Hemmen de spin $S=1$ mostrando as linhas de segunda ordem e linhas de primeira ordem para diversos parâmetros da anisotropia D , com $p = 0.0$	38
4.5	Diagrama de fase no plano T-J para o modelo de van Hemmen de spin $S = 1$ para anisotropia $D = -0.3$ e para diversos valores de p	39
4.6	Diagrama de fase no plano T-J apresentando o caso $p = 0.7$, a tendência das linhas fundirem-se em uma única linha de segunda ordem. Fato ocorrido para $p = 1$	41
4.7	Diagrama de fase no plano $T/J - J_0/J$ para o modelo de van Hemmen de spin $S = 1$ para $p = 0$. O diagrama mostra a fase mista sendo suprimida.	43
4.8	Diagrama de fase no plano $T/J - J_0/J$ para o modelo de van Hemmen de spin $S = 1$ na região negativa de D . O diagrama mostra que a fase mista já foi suprimida.	45

- 4.9 Diagrama de fase no plano $T/J - D/J$ para o modelo de van Hemmen de spin $S = \frac{3}{2}$ mostrando as linhas de segunda ordem entre as fases paramagnéticas e vidro de spin, e primeira ordem da fase vidro de spin. . 49

Resumo

Neste trabalho, apresentamos o estudo dos diagramas de fases do modelo de van Hemmen generalizado através da extensão do spin $S = 1/2$ original para os spins $S = 1$ e $S = 3/2$. O modelo generalizado consiste de duas interações de troca de longo alcance do tipo J_0/N e $J_{ij} = J(\xi_i\eta_j + \xi_j\eta_i)/N$, onde J é constante, N é o número de partículas e ξ_i e η_j são variáveis aleatórias da interação de troca J_{ij} que estão sujeitas a uma probabilidade de $P(\xi_i)P(\eta_j)$, sendo escolhida uma distribuição bimodal. A inclusão de um termo anisotrópico de campo cristalino torna o modelo generalizado completo. Tal aleatoriedade é governada por uma distribuição de probabilidade em que uma parcela p de spins não é afetada pela anisotropia, e a outra parcela $1 - p$ de spins sofre a ação anisotrópica de íon único com magnitude D . Para o estudo do comportamento crítico das transições de fases, utilizamos a aproximação de campo médio de Curie-Weiss obtendo, assim, a energia livre e as equações de estados do modelo proposto. Os diagramas de fase foram construídos nos espaços termodinâmicos T/J versus J_0/J e T/J versus D/J .

Abstract

In this work we present the study of the generalized phase diagrams of the van Hemmen model through the extension of $S = 1/2$ original spin for $S = 1$ and $S = 3/2$ spins. The generalized model consists of two interactions of long-range exchange of type J_0/N and $J_{ij} = J(\xi_i\eta_j + \xi_j\eta_i)/N$, where J is constant, N is the particle number and ξ_i and η_j are random variables of the interaction of J_{ij} exchange that are subordinated to a distribution of probability $P(\xi_i)P(\eta_j)$, which was chosen as a bimodal distribution. The inclusion of an anisotropic term of crystalline field becomes the generalized model complete. Such random character is guided by a probability distribution where a fraction p of spins is not affected by the anisotropy, and the another fraction $1 - p$ of spins suffers anisotropic action from simple ion with magnitude D . For the study of the critical behavior of the phase transistions, we used the approach of Curie-Weiss mean field getting, in this way, the free energy and the equations of state of the considered model. The phase diagrams have been constructed in the thermodynamic spaces T/J versus J_0/J and T/J versus D/J .

Capítulo 1

Introdução

1.1 Transição de Fase e Fenômenos Críticos

A Mecânica Estatística tem sua aplicação voltada para estudos de sistemas de muitos corpos, pois sua generalidade está no fato de aliar as leis das mecânicas (quântica e clássica) com as leis da teoria de probabilidade [1, 2, 3, 4, 5]. Assim, pode ser aplicada a uma imensa gama de sistemas, tais como: sistemas magnéticos, sistemas nucleares, gás clássico, gás quântico, sistemas biológicos, econofísica, etc.

Na Física quase não há exemplos de sistemas de muitos corpos de partículas interagentes que permitam uma descrição microscópica completa do sistema. A mais notável consequência das interações entre muitas partículas é o aparecimento de novas fases da matéria, cujo comportamento coletivo tem vaga semelhança com o de poucas partículas. Respostas às questões sobre mudanças de estados macroscópicos provocadas pelas interações entre partículas constituem os objetivos da mecânica estatística.

Formalmente, todas as propriedades macroscópicas podem ser deduzidas da energia livre (equação fundamental) ou, mais especificamente, da função de partição. No entanto, transições de fase envolvem mudanças dramáticas nas funções respostas (susceptibilidade, calor específico). Como a função de partição canônica de um sistema finito de partículas é sempre analítica, as transições de fase somente devem ser associadas aos sistemas de número elevado de partículas, isto é, no limite termodinâmico. Portanto, o

estudo de transições de fase está associado à investigação da caracterização destas singularidades na energia livre.

Para melhor compreensão desta questão, considere um sistema clássico de spins de Ising [6] distribuídos em pontos de uma rede regular de Bravais, em equilíbrio. Por spins de Ising entende-se que seus graus de liberdade podem ser somente tomados como $S = \pm 1$. Esse sistema pode ser chamado de ferromagneto de Ising, composto microscopicamente, por momentos magnéticos individuais localizados nos pontos da rede. Por outro lado, o ordenamento dos momentos magnéticos é um processo complexo que envolve fenômenos cooperativos dos elétrons interagentes. Mas, no entanto, as propriedades termodinâmicas de diferentes sistemas ferromagnéticos macroscópicos são observadas como sendo as mesmas, tais como a dependência da temperatura do calor específico, suscetibilidade, etc. Além disso, propriedades termodinâmicas críticas de sistemas físicos completamente diferentes, tais como ferromagneto de Ising e um líquido em seu ponto de ebulição, mostram a mesma dependência da temperatura, $(T - T_c)^\beta$. Em suma, quando diferentes sistemas estão próximos do ponto crítico, estes apresentam um comportamento universal.

Considere agora um material ferromagnético e sejam realizadas algumas medidas das propriedades, como a magnetização. Considere ainda que esse material seja dividido em duas partes iguais e que estas sejam mantidas sob as mesmas condições iniciais. Ao medir novamente as propriedades, os mesmos valores são encontrados (cada pedaço possui as propriedades do sistema original). Se o processo for continuado, o comportamento original deverá ser encontrado novamente. Porém, após muitas repetições, eventualmente algo diferente deve acontecer (já que os magnetos são decompostos em elétrons e íons). O comprimento de escala, para o qual o comportamento dos pedaços começa marcadamente a se diferenciar do original, define um comprimento de correlação. Esse é o típico comprimento de escala para o qual as flutuações dos graus de liberdade microscópicos estão correlacionados.

Experimentos mostram que um ferromagneto pode mudar abruptamente seu comportamento macroscópico quando as condições externas, tais como a temperatura ou o campo magnético, são variadas. Os pontos nos quais isto acontece são chamados de pontos críticos, e eles marcam uma

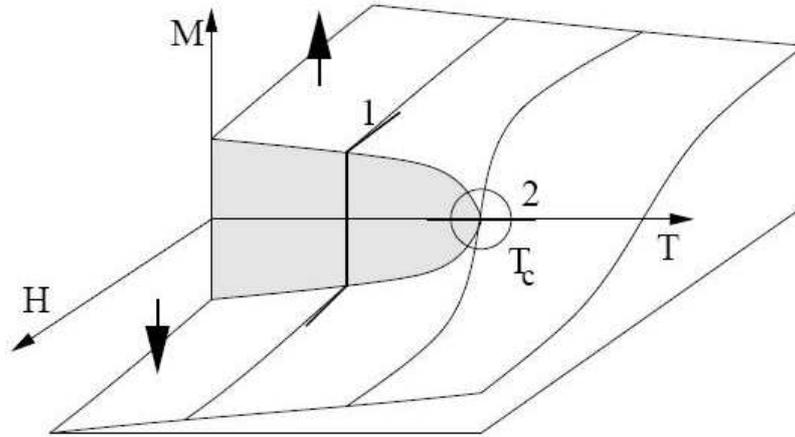


Figura 1.1: A figura representa um diagrama de fase de um ferromagneto de Ising, com a magnetização média M como função de um campo magnético H e temperatura T .

transição de fase [7] de um estado para outro. No ferromagneto, há essencialmente dois modos pelos quais a transição de fase pode ocorrer.

Na figura 1.1, seguindo a trajetória 1, pela mudança do campo magnético em uma temperatura constante $T < T_c$, a amostra sofre a transição de fase de primeira ordem de uma fase pela qual a magnetização é positiva (spins para cima) para uma fase onde a magnetização é negativa (spins para baixo). Por outro lado, mudando a temperatura em campo magnético zero e fixo, o sistema sofre uma transição de fase de segunda ordem em $T = T_c$, quando a magnetização média cresce continuamente de zero. Esta transição de fase de segunda ordem é acompanhada por uma quebra espontânea de simetria, em que o sistema opta pelo estado de spins para cima ou pelo estado de spins para baixo (o círculo marca a região na vizinhança do ponto crítico onde o comprimento de correlação é grande quando comparado com a escala microscópica do sistema).

No primeiro caso, os dois estados do mesmo lado do ponto crítico, spin para cima e spin para baixo, coexistem no ponto crítico. Essa transição de fase envolve comportamento descontínuo das propriedades termodinâmicas e é chamada transição de fase de primeira ordem (equivale ao ponto de fusão de um sólido). O comprimento de correlação em uma transição de fase de primeira ordem geralmente é finito.

No segundo caso, a transição é contínua, e o comprimento de correlação torna-se efetivamente infinito. Flutuações tornam-se correlacionadas para todas as distâncias, levando o sistema inteiro a estar em uma única fase. As duas fases nos dois lados da transição (paramagnética e ferromagnética) tornar-se-ão idênticas quando o ponto crítico for atingido. Portanto, quando o comprimento de correlação diverge, a magnetização vai suavemente a zero. Essa transição de fase é chamada transição de segunda ordem.

A divergência do comprimento de correlação na vizinhança de uma transição de fase de segunda ordem sugere que certas propriedades, nas vizinhanças do ponto crítico, podem ser acuradamente descritas dentro de uma teoria efetiva envolvendo somente as flutuações de longo alcance do sistema. Assim, é sugerida a construção de uma Hamiltoniana fenomenológica ou energia livre, limitada somente pelas simetrias fundamentais do sistema. Uma descrição deste tipo é chamada de Teoria de Ginzburg-Landau [1]. Os detalhes de como as propriedades dos materiais e os acoplamentos microscópicos do ferromagneto influenciam os parâmetros da teoria efetiva podem ser desconhecidos, mas as propriedades, bem como os comportamentos de escala, são qualitativamente definidos.

A partir destas observações, pode-se chegar a importantes conclusões. As propriedades críticas na vizinhança de uma transição de fase de segunda ordem, clássica ou quântica, estão em um número limitado de classes de universalidade, definidas não pelo detalhados parâmetros dos materiais mas pelas simetrias fundamentais dos sistemas. Quando estuda-se as propriedades críticas da transição em um ferromagneto de Ising, pode-se aprender sobre a natureza da transição líquido-gás. Similarmente, um supercondutor com seu complexo parâmetro de ordem está na mesma classe de universalidade que os ferromagnetos de dois componentes (modelo XY).

O fato de um sistema magnético ter a magnetização (parâmetro de ordem) aproximadamente de zero em T_c , com derivada infinita (comportamento singular) é um exemplo de fenômeno crítico. As funções resposta, como o calor específico a campo magnético constante, C_H , e suscetibilidade isotérmica, χ_T , tornam-se infinitas no ponto crítico.

O interesse em estudar fenômenos críticos está associado, principalmente, à busca pelo entendimento das causas que levam sistemas muito di-

ferentes a se comportarem da mesma maneira, estabelecendo uma universalidade de comportamento nas vizinhanças do ponto crítico. Mesmo para os modelos mais simples, até então, não se obteve informações completas do comportamento de sistemas na região da crítica. O comportamento singular nas proximidades do ponto crítico é caracterizado por um conjunto de expoentes críticos, os quais descrevem a não analiticidade de algumas funções termodinâmicas. O mesmo conjunto de expoentes críticos pode descrever a transição de fase de sistemas tão distintos entre si, como ferromagnetos e fluidos, que pertencem a uma mesma classe de universalidade.

O estudo do magnetismo já vem ocorrendo há alguns milhares de anos mas, apesar do grande interesse devotado a este fenômeno, o seu desenvolvimento se deu muito lentamente. O status científico desses estudos só foi alcançado na segunda metade do século XIX com as investigações sistemáticas das propriedades magnéticas dos materiais feitas por Pierre Curie.

No começo do século XIX, definiu-se como ferromagnetos aqueles materiais magnéticos que exibiam magnetização espontânea (ordenamento dos dipólos magnéticos na ausência de campo externo) abaixo de uma dada temperatura, conhecida por temperatura crítica. Esta temperatura é distinta para diferentes materiais, e foi denominada como temperatura de Curie (T_c).

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, cada um possuindo um 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 descreveu a variação da magnetização espontânea com a temperatura em completa concordância com os experimentos da época.

Atualmente é conhecido que o magnetismo nos materiais é originado de fenômenos puramente quânticos. Portanto, no começo do século XX, por volta dos anos 20, com o desenvolvimento da mecânica quântica, foi possível explicar a origem dos dipolos magnéticos atômicos e o fato de que o desemparelhamento dos spins eletrônicos nos íons magnéticos localizados nos sítios da rede dão origem aos dipolos magnéticos. Heisenberg [8] propôs um mecanismo para explicar as interações dos spins eletrônicos nos materiais, conhecido como interação de Heisenberg. Segundo este, os spins localizados

nos sítios i interagem com os spins dos sítios j através de uma energia de troca J_{ij} . O caso em que $J_{ij} > 0$ favorece o alinhamento paralelo dos spins (ferromagnetismo), enquanto que $J_{ij} < 0$ o favorece o alinhamento anti-paralelo destes (anti-ferromagnetismo).

Neste trabalho, interessa-se estudar os diagramas de fase. Especificamente, o sistema de vidro de spin gerado pelo modelo de van Hemmen [9] generalizado para $S = 1$ e $S = 3/2$, com anisotropia uniaxial aleatória de íon único governada por uma função de distribuição de probabilidade. O objetivo principal aqui é estudar o diagrama de fase do modelo.

No capítulo 2 será descrita a aproximação de campo médio de Curie-Weiss, que será utilizada no capítulo 3 para obter as equações que descreverão o diagrama de fases do modelo de van Hemmen com a presença de anisotropia de íon único aleatória. No capítulo 4 serão apresentados e discutidos os diagramas de fase do modelo de van Hemmen. Finalmente, no quinto capítulo serão apresentadas as conclusões e as perspectivas futuras para este trabalho.

Capítulo 2

Teoria de Campo Médio de Weiss

2.1 Introdução

Neste trabalho, interessa-se em estudar o diagrama de fase do modelo de van Hemmen [9]. Na mecânica estatística, a completa informação a respeito de um sistema termodinâmico encontra-se na obtenção da função de partição e, conseqüentemente, dos potenciais termodinâmicos.

Atualmente diversos modelos microscópicos (modelo de Ising, Heisenberg, XY, Hubbard) têm sido usados para descrever propriedades magnéticas de diversos sistemas. Até então é conhecida solução exata somente em uma dimensão [6] e em duas dimensões [10], e recentemente foi conjecturado uma solução do modelo Ising em três dimensões [11]. Portanto, é necessário conceber algum tipo de aproximação para descrever sistemas termodinâmicos. Na década de 60 foi incrementada a mais poderosa ferramenta para descrever propriedades críticas, a chamada Teoria do Grupo de Renormalização, desenvolvida por Wilson [12], que foi agraciado com o Prêmio Nobel de Física em 1982. No restante deste capítulo será desenvolvida a aproximação de campo médio de Pierre Weiss, que será utilizada no próximo capítulo para descrever o modelo de van Hemmen.

Pierre Weiss [13] foi o primeiro a conjecturar que cada momento magnético num material magnético está sujeito a um campo proporcional à magnetização total da amostra (campo molecular). Mais tarde, Heisenberg [8] confirmou a origem microscópica do campo molecular de Weiss. A teoria

de Weiss é baseada em resultados experimentais; logo, necessitava de um refinamento. Tanto que surgiram novas aproximações, como Bethe e Peierls [14, 15], sempre na busca por uma teoria que melhor descrevesse os resultados experimentais. O foco da teoria de Weiss é demonstrar que cada spin de uma rede sofre influência de um campo proporcional à magnetização. A magnetização é uma média de todos os momentos de dipolo e, descartando as flutuações espaciais, tem-se uma aproximação, surgindo assim a teoria de campo médio capaz de fornecer respostas sobre o comportamento crítico dos sistemas magnéticos do tipo Ising.

Não se pode falar em magnetismo sem fazer referência ao modelo de Ising [6], que recebeu de seu orientador de doutorado Wilhelm Lenz um modelo microscópico de ferromagnetismo, o qual utilizava momentos magnéticos S_i localizados nos pontos da rede e que interagem com seus vizinhos mais próximos, S_{i+1} e S_{i-1} . Ising resolveu o exercício e, para sua surpresa e de seu orientador, o modelo não apresentou transição de fase em qualquer temperatura T diferente de zero. Por conseguinte, julgaram que também não haveria transições em duas ou mais dimensões, o que mais tarde foi comprovado que estava errado.

2.2 Modelo de Curie-Weiss

No modelo de Curie-Weiss, ao invés de utilizar aproximações em uma rede de Bravais, é introduzida uma modificação no termo de interação do modelo de Ising, provocando mudança no próprio modelo físico a fim de simplificá-lo e obter um resultado exato. O modelo de Ising é a referência, e será aplicado para o modelo de Curie-Weiss para aferir a aplicabilidade do modelo.

A Hamiltoniana do modelo de Ising, em presença de campo magnético, é dada por,

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i. \quad (2.1)$$

O próximo passo é introduzir uma modificação na Hamiltoniana de Ising para simplificar o modelo e torná-lo exato. Assim, pode-se observar se o modelo de Curie-Weiss é eficaz. A modificação consiste em considerar que cada spin interage com todos os spins da rede (interação de longo

alcance) com uma magnitude proporcional a $1/N$, de tal modo que permita a existência do limite termodinâmico. O primeiro termo do modelo de Ising pode ser reescrito da seguinte forma

$$\sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j = \frac{1}{2} \left[\left(\sum_i \sigma_i \right)^2 - \sum_i \sigma_i^2 \right]. \quad (2.2)$$

Portanto, o modelo de Curie-Weiss é escrito como

$$\mathcal{H}_{CW} = -\frac{J}{2N} \left[\left(\sum_i \sigma_i \right)^2 - \sum_i \sigma_i^2 \right] - H \sum_i \sigma_i. \quad (2.3)$$

A função de partição é definida por

$$Z_{CW} = Tr \exp [-\beta \mathcal{H}_{CW}]. \quad (2.4)$$

Portanto, a função de partição do modelo de Curie-Weiss é dada por

$$Z_{CW} = Tr \exp \left\{ \frac{\beta J}{2N} \left(\sum_i \sigma_i \right)^2 - \frac{\beta J}{2N} \sum_i \sigma_i^2 + \beta H \sum_i \sigma_i \right\}. \quad (2.5)$$

Com o intuito de facilitar a soma sobre as variáveis da equação acima, faz-se uso da identidade gaussiana, ou seja,

$$\exp(\lambda a^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-\frac{x^2}{2} + ax\sqrt{2\lambda} \right) dx. \quad (2.6)$$

Reescreve-se e organiza-se a função de partição (2.5), encontrando

$$\begin{aligned} Z_{CW} &= Tr \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-\frac{x^2}{2} + \sqrt{\frac{2\beta J}{2N}} \sum_i \sigma_i x \right) dx \right. \\ &\quad \times \left. \exp \left[\frac{\beta J}{2N} \sum_i \sigma_i^2 \right] \exp \left[\beta H \sum_i \sigma_i \right] \right\}, \\ Z_{CW} &= Tr \left(\frac{N}{2\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp \left\{ -\frac{Nx^2}{2} + \sum_i \left(x\sqrt{\beta J} + \beta H \right) \sigma_i \right. \\ &\quad \left. + \sum_i \left(\frac{\beta J}{2N} \right) \sigma_i^2 \right\}. \end{aligned} \quad (2.7)$$

A seguinte relação é válida para variáveis de spin inteiras e semi-inteiras.

$$\begin{aligned} Tr_{\{\sigma\}} \exp \left[\sum_i (K\sigma_i + L\sigma_i^2) \right] &= \prod_i Tr_{\{\sigma\}} \exp \left(K\sigma_i + L\sigma_i^2 \right) \\ &= \prod_i Tr_{\{\sigma\}} \left[\exp(K\sigma_i) \exp(L\sigma_i^2) \right] \\ &= \prod_i \sum_{\sigma_i} \left[\exp(L\sigma_i^2) \cosh(|\sigma_i| K) \right]. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Aplica-se na função de partição (2.7) a equação (2.8),

$$Z_{CW} = \left(\frac{N}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp \left\{ -\frac{Nx^2}{2} + \ln \sum_i \exp \left[\sigma_i^2 \frac{\beta J}{2N} \right] \cosh \left[|\sigma_i| \left(x\sqrt{\beta J} + \beta H \right) \right] \right\}. \quad (2.9)$$

Para resolver a integral, utiliza-se o método de ponto de sela, que toma a região de máximo da função

$$\int_{-\infty}^{\infty} ce^{bf(x)} dx \approx c \max_{-\infty < x < \infty} e^{bf(x)}. \quad (2.10)$$

Usando a equação (2.10) em (2.9), tem-se

$$Z_{CW} = \left(\frac{N}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \max_{-\infty < x < \infty} \exp \left\{ -\frac{Nx^2}{2} + \ln \sum_i \exp \left[\sigma_i^2 \frac{\beta J}{2N} \right] \cosh \left[|\sigma_i| \left(x\sqrt{\beta J} + \beta H \right) \right] \right\}. \quad (2.11)$$

Calculando $\frac{1}{N} \ln Z_{CW}$, obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \ln Z_{CW} &= \frac{1}{2N} \ln \left(\frac{N}{2\pi} \right) + \max_{-\infty < x < \infty} \left\{ -\frac{x^2}{2} \right. \\ &\quad \left. + \ln \left[\sum_i \exp \left(\sigma_i^2 \left(\frac{\beta J}{2N} \right) \right) \cosh \left[|\sigma_i| \left(x\sqrt{\beta J} + \beta H \right) \right] \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

No limite termodinâmico chega-se a

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \frac{1}{2N} \ln \left(\frac{N}{2\pi} \right) \right\} \rightarrow 0$$

e

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{\beta J}{2N} \right) \rightarrow 0.$$

Portanto,

$$\frac{1}{N} \ln Z_{CW} = -\frac{x^2}{2} + \ln \left[\sum_i \cosh \left[|\sigma_i| \left(x\sqrt{\beta J} + \beta H \right) \right] \right]. \quad (2.13)$$

Agora pode-se escrever a energia livre do modelo $\beta f = -\frac{1}{N} \ln Z_{CW}$, ou seja,

$$\beta f = \frac{x^2}{2} - \ln \left[\sum_i \cosh \left[|\sigma_i| \left(x\sqrt{\beta J} + \beta H \right) \right] \right]. \quad (2.14)$$

A magnetização é dada por

$$m = -\frac{\partial f}{\partial H} = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial(\beta f)}{\partial H}.$$

Portanto,

$$m = \frac{\sum_i \sinh \left[|\sigma_i| \left(x\sqrt{\beta J} + \beta H \right) \right]}{\sum_i \cosh \left[|\sigma_i| \left(x\sqrt{\beta J} + \beta H \right) \right]}. \quad (2.15)$$

E finalmente tem-se a magnetização propriamente dita do modelo. Porém, faz-se necessário obter a variável x , oriunda de

$$m = \tanh \left[|\sigma_i| \left(x\sqrt{\beta J} + \beta H \right) \right]. \quad (2.16)$$

Para determinar a variável x , usa-se a condição de equilíbrio termodinâmico, onde a energia livre é a mínima e, por fim, reescreve-se a magnetização $x = m\sqrt{\beta J}$. Assim,

$$m = \tanh \left[\beta J m + \beta H \right]. \quad (2.17)$$

E é constatado que o resultado encontrado é o esperado.

Capítulo 3

Generalização do Hamiltoniano de van Hemmen

3.1 Introdução

Vidro de spin é um sistema magnético desordenado definido abaixo de uma certa temperatura conhecida como temperatura de congelamento (T_f). Para temperaturas abaixo de (T_f) há um congelamento aleatório dos momentos magnéticos, sem uma ordem de longo alcance. Estudos sobre vidros de spin têm sido desenvolvidos tanto teoricamente como experimentalmente. Cannella e Mydosh [16] foram os primeiros a realizar medidas da susceptibilidade magnética em ligas metálicas diluídas ($CuMn$ e $AuFe$). Eles observaram que a susceptibilidade apresentava um pico acentuado a uma dada temperatura (T_f), demonstrando assim haver uma suposta transição de fase, denominada vidro de spin. Esse termo foi sugerido por Bryan Coles que comparou o desordenamento magnético apresentado, no presente modelo, com a estrutura dos vidros ordinários. Experimentalmente, observou-se que o vidro de spin têm propriedades peculiares que o caracterizam, destacando-se

1. Congelamento dos momentos magnéticos abaixo de T_f , mantendo assim uma desordem fixa dos momentos magnéticos,
2. Ausência de ordem magnética periódica de longo alcance quando $T < T_f$. As magnetizações espontâneas locais são não nulas, ou seja, $m_i \neq 0$

$\sigma_i > \neq 0$. Entretanto, a média global das magnetizações será nula,

3. A remanência magnética decai lentamente com o tempo para temperaturas $T < T_f$.

Mediante a caracterização experimental do vidro de spin (*VS*), temos que apresentar um sistema que venha a ter as características citadas acima. O composto AuFe é o detentor dessas propriedades, onde temos o Au como hospedeiro e o Fe como a impureza, sendo esse último o responsável pela polarização dos elétrons no hospedeiro, que pode ser positiva ou negativa. Ao adicionarmos uma outra impureza ao sistema, esta irá sentir o campo magnético gerado pela polarização dos elétrons na formação da liga metálica, e esse campo atuará nas impurezas fazendo-as alinharem-se com o campo. O Fe, como a primeira impureza a ser diluída no hospedeiro, se deu de forma aleatória e gerou polarizações tanto negativas como positivas no sistema. Ao inserir uma nova impureza, essa última irá interagir com o sistema, gerando interações que, sendo positivas, irão influenciar ao alinhamento paralelo dos momentos magnéticos da última impureza (ferromagnético). Entretanto, quando essas interações forem negativas favorecerão ao alinhamento anti-paralelo dos momentos magnéticos (antiferromagnético).

As interações de troca indireta propõem a interação de RKKY (Ruderman, Kittel, Kasuya e Yosida) e decaem rapidamente com a distância entre os spins. Sabendo-se que as interações entre impurezas variam em magnitude e sinal, temos as duas componentes essenciais para o vidro de spin: a frustração e a desordem. A desordem surge da posição aleatória dos momentos magnéticos na rede, e a frustração da interação RKKY. A frustração é a incapacidade de permanecer em um único estado de energia fundamental devido a um conflito entre as interações, de modo que todas não podem ser obedecidas simultaneamente.

Nos estudos teóricos sobre vidros de spins, os pioneiros foram Edwards e Anderson [17] (EA). Eles propuseram que, ao invés da aleatoriedade nas posições, as interações de troca são desordenadas com os spins posicionados nos sítios de uma rede invariante. Por se tratar de uma transição de fase, era necessário um parâmetro que a caracterizasse. Assim, EA implementaram um parâmetro de ordem para medir se os spins permaneciam congelados.

Este é o parâmetro introduzido e definido por EA

$$q_{EA} = \frac{1}{N} \left[\sum_i \langle S_i \rangle^2 \right], \quad (3.1)$$

em que $\langle \dots \rangle$ representa as médias térmicas e $[\dots]$ as médias sobre a desordem do sistema. Os autores desse modelo encontraram dificuldade em calcular médias logarítmicas da função de partição, o elo de ligação com a termodinâmica. Mais tarde, Sherrington e Kirkpatrick [18] tornaram a teoria de Edwards e Anderson solúvel, propondo um modelo de campo médio com interações de alcance infinito e variáveis de spins de Ising através do método das réplicas. A idéia é formar o logaritmo da função de partição Z associada a n cópias do sistema original, conforme a expressão

$$\ln Z = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \left(Z^n - 1 \right). \quad (3.2)$$

Entretanto, a solução era instável para temperaturas baixas, tanto na fase ferromagnética como nas fases de vidro de spin. Tal fragilidade foi averiguada por Almeida e Thouless [19]; por isso a linha que separa as áreas de estabilidade e instabilidade é conhecida como a linha de Almeida e Thouless. A solução desse óbice foi apresentada por Parisi [20], com a implementação de uma quebra da simetria das réplicas, permitindo descrever a fase VS do modelo de Sherrington e Kirkpatrick.

Com o mesmo objetivo, van Hemmen propôs um modelo contendo frustração e desordem [9], com alcance infinito e solução exata para o problema. Esse modelo será desenvolvido e aplicado neste trabalho. Na próxima seção apresentar-se-á a Hamiltoniana de van Hemmen e suas componentes, e esta será desenvolvida com intuito de generalizar as equações da energia livre, da magnetização e dos parâmetros.

3.2 Hamiltoniano de van Hemmen

O modelo de van Hemmen é descrito pela seguinte Hamiltoniana

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{J_0}{N} \sigma_i \sigma_j - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i, \quad (3.3)$$

onde $\langle i, j \rangle$ representa a soma sobre todos pares i e j com $i \neq j$; J_0 é uma interação ferromagnética; $\sigma_i = \pm 1$; H é o campo externo, e J_{ij} é uma interação aleatória. O termo $J_{ij} = \frac{J}{N} (\varepsilon_i \eta_j + \varepsilon_j \eta_i)$ corresponde à interação aleatória entre os spins.

A generalização do modelo de van Hemmen original é obtida acrescentando-se um termo de anisotropia de íon único, sendo que os spins passarão a ter valores $S > 1/2$. Portanto, tem-se a seguinte Hamiltoniana

$$\mathcal{H} = -\frac{J_0}{N} \sum_{\langle i, j \rangle} S_i S_j - \sum_{\langle i, j \rangle} J_{ij} S_i S_j - H \sum_i S_i - D \sum_i S_i^2, \quad (3.4)$$

Em que J_0 representa o acoplamento ferro-magnético direto; D é a anisotropia (cuja introdução é responsável pelo aumento do número de fases possíveis, por ocasião da obtenção das fases do estado fundamental) e S_i são variáveis de spin inteiro ou semi-inteiro.

Esta Hamiltoniana já foi estudada por Sousa e colaboradores [21, 22], e também por Salinas e colaboradores [23]. Assim, para ampliar a generalização, será acrescentada a aleatoriedade na anisotropia de íon único. Portanto, a nova Hamiltoniana de van Hemmen é dada por

$$\mathcal{H} = -\frac{J_0}{N} \sum_{\langle i, j \rangle} S_i S_j - \sum_{\langle i, j \rangle} J_{ij} S_i S_j - H \sum_i S_i - \sum_i D_i S_i^2, \quad (3.5)$$

onde

$$P(\varepsilon_i, \eta_i) = P(\varepsilon_i) \times P(\eta_i),$$

e a anisotropia de íon único é aleatória e governada por uma distribuição de probabilidade com duas funções deltas

$$P(D_i) = p\delta(D_i) + (1-p)\delta(D_i - D).$$

Esta função indica que uma parcela p de spins fica fora da ação da anisotropia, e que a parcela $1-p$ de spins fica sob ação da anisotropia de íon único, com magnitude D .

A função de partição da Hamiltoniana é dada por

$$Z_N = Tr \exp [-\beta \mathcal{H}]. \quad (3.6)$$

Substituindo a Hamiltoniana (3.5) na equação anterior, tem-se

$$Z_N = Tr \exp \left[\beta \frac{J_0}{N} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + \beta \frac{J}{N} \sum_{\langle i,j \rangle} (\xi_i \eta_j + \xi_j \eta_i) S_i S_j + \beta H \sum_i S_i + \beta \sum_i D_i S_i^2 \right]. \quad (3.7)$$

Tomando $\beta J_0 = K_0$, $\beta J = K$ e aplicando as identidades

$$\sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j = \frac{1}{2} \left[\left(\sum_i S_i \right)^2 - \sum_i S_i^2 \right]. \quad (3.8)$$

$$\begin{aligned} \sum_{\langle i,j \rangle} (\xi_i \eta_j + \xi_j \eta_i) S_i S_j &= \frac{1}{2} \left[\left(\sum_i (\xi_i + \eta_i) S_i \right)^2 - \left(\sum_i \xi_i S_i \right)^2 \right. \\ &\quad \left. - \left(\sum_i \eta_i S_i \right)^2 - 2 \sum_i \xi_i \eta_i S_i^2 \right], \end{aligned} \quad (3.9)$$

a função partição pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} Z_N &= Tr \exp \left\{ \frac{K_0}{2N} \left[\left(\sum_i S_i \right)^2 - \sum_i S_i^2 \right] + \frac{K}{2N} \left[\left(\sum_i (\xi_i + \eta_i) S_i \right)^2 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \left(\sum_i \xi_i S_i \right)^2 - \left(\sum_i \eta_i S_i \right)^2 - 2 \sum_i \xi_i \eta_i S_i^2 \right] + \beta H \sum_i S_i \right. \\ &\quad \left. + \beta \sum_i D_i S_i^2 \right\}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Lembrando que $\exp[x + y + z] = \exp(x) \exp(y) \exp(z)$, reescreve-se a função partição como

$$\begin{aligned} Z_N &= Tr \left\{ \exp \left[\frac{K_0}{2N} \left(\sum_i S_i \right)^2 \right] \exp \left[- \frac{K_0}{2N} \sum_i S_i^2 \right] \exp \left[\frac{K}{2N} \left(\sum_i (\xi_i + \eta_i) S_i \right)^2 \right] \right. \\ &\quad \exp \left[- \frac{K}{2N} \left(\sum_i \xi_i S_i \right)^2 \right] \exp \left[- \frac{K}{2N} \left(\sum_i \eta_i S_i \right)^2 \right] \exp \left[- \frac{K}{N} \sum_i \xi_i \eta_i S_i^2 \right] \\ &\quad \left. \exp \left[\beta H \sum_i S_i \right] \exp \left[\beta \sum_i D_i S_i^2 \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Agora, recordando a identidade Gaussiana

$$\exp(\lambda a^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(- \frac{x^2}{2} + ax\sqrt{2\lambda} \right) dx. \quad (3.12)$$

Utilizando a identidade Gaussiana, a função partição é reescrita como

$$\begin{aligned}
Z_N = & Tr \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-\frac{x^2}{2} + \sqrt{\frac{2K_0}{2N}} \sum_i S_i x \right) dx \right. \\
& \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-\frac{y^2}{2} + \sqrt{\frac{2K}{2N}} \sum_i (\xi_i + \eta_i) S_i y \right) dy \\
& \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-\frac{z^2}{2} + \sqrt{-\frac{2K}{2N}} \sum_i \xi_i S_i z \right) dz \\
& \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-\frac{t^2}{2} + \sqrt{-\frac{2K}{2N}} \sum_i \eta_i S_i t \right) dt \\
& \exp \left[-\frac{K_0}{2N} \sum_i S_i^2 \right] \exp \left[-\frac{K}{N} \sum_i \xi_i \eta_i S_i^2 \right] \\
& \left. \exp \left[\beta H \sum_i S_i \right] \exp \left[\beta \sum_i D_i S_i^2 \right] \right\}.
\end{aligned}$$

Reorganizando e simplificando a função Z_N , tem-se

$$\begin{aligned}
Z_N = & Tr \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{1}{2}(x^2 + y^2 + z^2 + t^2) \right. \\
& + \sum_i \left(\sqrt{\frac{K_0}{N}} x + \sqrt{\frac{K}{N}} \left[(\xi_i + \eta_i)y + (\xi_i z + \eta_i t)j \right] + \beta H \right) S_i \\
& \left. + \sum_i \left[-\frac{K_0}{2N} - \frac{K}{N} \xi_i \eta_i + \beta D_i \right] S_i^2 \right\} dx dy dz dt. \quad (3.13)
\end{aligned}$$

Através de uma mudança de variáveis, sendo $x_1 = x$, $x_2 = y$, $x_3 = z$ e $x_4 = t$, tem-se que

$$\begin{aligned}
x_i &= \sqrt{N} x'_i, \\
dx_i &= \sqrt{N} dx'_i.
\end{aligned}$$

Pela substituição dessas novas variáveis na função de partição, ela ficará livre do fator \sqrt{N} , e então

$$\begin{aligned}
Z_N = & Tr \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{N}{2}(x'^2 + y'^2 + z'^2 + t'^2) \right. \\
& + \sum_i \left(\sqrt{K_0} x' + \sqrt{K} \left[(\xi_i + \eta_i)y' + (\xi_i z' + \eta_i t')j \right] + \beta H \right) S_i \\
& \left. + \sum_i \left[-\frac{K_0}{2N} - \frac{K}{N} \xi_i \eta_i + \beta D_i \right] S_i^2 \right\} \sqrt{N} dx' \sqrt{N} dy' \sqrt{N} dz' \sqrt{N} dt',
\end{aligned}$$

obtendo-se

$$\begin{aligned}
Z_N &= \text{Tr} \left(\frac{N}{2\pi} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{N}{2}(x^2 + y^2 + z^2 + t^2) \right. \\
&\quad + \sum_i \left(\sqrt{K_0}x + \sqrt{K} \left[(\xi_i + \eta_i)y + (\xi_i z + \eta_i t)j \right] + \beta H \right) S_i \\
&\quad \left. + \sum_i \left[-\frac{K_0}{2N} - \frac{K}{N} \xi_i \eta_i + \beta D_i \right] S_i^2 \right\} dx dy dz dt. \quad (3.14)
\end{aligned}$$

Utilizando as propriedades do traço

$$\begin{aligned}
\text{Tr}_{\{S\}} \exp \left[\sum_i (K S_i + L S_i^2) \right] &= \prod_i \text{Tr}_{\{S\}} \exp \left(K S_i + L S_i^2 \right) \\
&= \prod_i \text{Tr}_{\{S\}} \left[\exp (K S_i) \exp (L S_i^2) \right],
\end{aligned}$$

sendo $S_i = |m_s|$, onde $S_i = -S, -S+1, \dots, S, \dots, S-1, S$, tem-se

$$\text{Tr}_{\{S\}} \exp \left[\sum_i (K S_i + L S_i^2) \right] = \prod_i \text{Tr}_{\{S\}} \left(\exp (L m_s^2) \cosh (|m_s| K) \right).$$

Como o traço é sobre as variáveis de spin S , então

$$\text{Tr}_{\{S\}} \exp \left[\sum_i (K S_i + L S_i^2) \right] = \prod_i \sum_{m_s} \left(\exp (L m_s^2) \cosh (|m_s| K) \right).$$

Voltando à função partição e utilizando as definições das funções hiperbólicas e as propriedades do traço, Z_N pode ser reescrita da seguinte forma

$$\begin{aligned}
Z_N &= \left(\frac{N}{2\pi} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{N}{2}(x^2 + y^2 + z^2 + t^2) \right. \\
&\quad \exp \left[\prod_i \sum_{m_s} \exp \left[m_s^2 \left(-\frac{K_0}{2N} - \frac{K}{N} \xi_i \eta_i + \beta D_i \right) \right] \right. \\
&\quad \left. \left. \cosh \left\{ |m_s| \left[\sqrt{K_0}x + \sqrt{K} \left((\xi_i + \eta_i)y \right. \right. \right. \right. \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \left. \left. \left. + (\xi_i z + \eta_i t)j \right) + \beta H \right] \right\} \right] \right\} dx dy dz dt,
\end{aligned}$$

resultando em

$$Z_N = \left(\frac{N}{2\pi} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ \frac{N}{2}(x^2 + y^2 + z^2 + t^2) \right.$$

$$\begin{aligned} & \exp \left(\sum_i \ln \left\{ \sum_{m_s} \exp \left[m_s^2 \left(-\frac{K_0}{2N} - \frac{K}{N} \xi_i \eta_i + \beta D_i \right) \right] \right. \right. \\ & \cosh \left[|m_s| \left(\sqrt{K_0} x + \sqrt{K} \left[(\xi_i + \eta_i) y \right. \right. \right. \\ & \left. \left. \left. + (\xi_i z + \eta_i t) j \right] + \beta H \right) \right] \left. \right\} \right) dx dy dz dt. \end{aligned}$$

As variáveis ξ_i e η_i podem ser tratadas como contínuas ou discretas, dependendo da distribuição de probabilidades adotada no estudo. Logo, a média configuracional pode ser escrita como

$$\sum_i (\dots) \rightarrow N \int_{-\infty}^{\infty} P(\xi, \eta) (\dots) d\xi d\eta. \quad (3.15)$$

Como o sistema considerado é um sistema de muitos corpos, o limite das variáveis pode ser limitado a N . Portanto, Z_N pode ser redefinida como

$$\begin{aligned} Z_N &= \left(\frac{N}{2\pi} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{N}{2} (x^2 + y^2 + z^2 + t^2) \right. \\ &+ N \int_{-\infty}^{\infty} P(\xi, \eta) \ln \left\{ \sum_{m_s} \exp \left[m_s^2 \left(-\frac{K_0}{2N} - \frac{K}{N} \xi \eta + \beta D_i \right) \right] \right. \\ &\cosh \left[|m_s| \left\{ \sqrt{K_0} x + \sqrt{K} \left((\xi + \eta) y + (\xi z + \eta t) j \right) \right. \right. \\ &\left. \left. \left. + \beta H \right\} \right] \left. \right\} dx dy dz dt d\xi d\eta. \end{aligned}$$

Para resolver a integral da equação acima será utilizado o método do ponto de sela, do qual tem-se a relação

$$\int_{-\infty}^{\infty} c \exp [bf(y)] dy \approx c \max_{-\infty < y < \infty} \{ \exp [bf(y)] \}. \quad (3.16)$$

Logo, tem-se

$$\begin{aligned} Z_N &= \left(\frac{N}{2\pi} \right)^2 \max_{-\infty < y < \infty} \left\{ \exp -\frac{N}{2} (x^2 + y^2 + z^2 + t^2) \right. \\ &+ N \left\langle \ln \left\{ \sum_{m_s} \exp \left[m_s^2 \left(-\frac{K_0}{2N} - \frac{K}{N} \xi \eta + \beta D_i \right) \right] \right. \right. \\ &\cosh \left[|m_s| \left\{ \sqrt{K_0} x + \sqrt{K} \left((\xi + \eta) y + (\xi z + \eta t) j \right) \right. \right. \\ &\left. \left. \left. + \beta H \right\} \right] \right\} \right\rangle_d, \end{aligned} \quad (3.17)$$

onde $\langle \dots \rangle_d = \int_{-\infty}^{\infty} P(\xi, \eta) d\xi d\eta$ podemos chamar de grau de desordem.

Aplicando $\frac{1}{N} \ln Z_N$, obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \ln Z_N &= \frac{2}{N} \ln \left(\frac{N}{2\pi} \right) + \max_{-\infty < y < \infty} \left\{ -\frac{1}{2}(x^2 + y^2 + z^2 + t^2) \right. \\ &\quad + \left\langle \ln \left\{ \sum_{m_s} \exp \left[m_s^2 \left(-\frac{K_0}{2N} - \frac{K}{N} \xi \eta + \beta D_i \right) \right] \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \cosh \left[|m_s| \left\{ \sqrt{K_0} x + \sqrt{K} \left[(\xi + \eta) y + (\xi z + \eta t) j \right] \right. \right. \right. \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left. \left. \left. + \beta H \right] \right] \right] \right] \right\} \right\rangle_d \left. \right\}. \end{aligned}$$

Tomando agora o limite termodinâmico, ve-se que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \frac{2}{N} \ln \left(\frac{N}{2\pi} \right) \right\} \rightarrow 0,$$

e

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left(-\frac{K_0}{2N} - \frac{K}{N} \xi \eta + \beta D_i \right) \rightarrow \beta D_i.$$

Portanto,

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \ln Z_N &= -\frac{1}{2}(x^2 + y^2 + z^2 + t^2) + \left\langle \ln \left\{ \sum_{m_s} \exp \left(\beta m_s^2 D_i \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \cosh \left[|m_s| \left\{ \sqrt{K_0} x + \sqrt{K} \left[(\xi + \eta) y + (\xi z + \eta t) j \right] \right. \right. \right. \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left. \left. \left. + \beta H \right] \right] \right] \right] \right\} \right\rangle_d. \end{aligned}$$

A energia livre do spin é dada por

$$\beta f = -\frac{1}{N} \ln Z_N.$$

Tomando o logaritmo de Z_N , o resultado é a energia livre por spin

$$\begin{aligned} \beta f &= \frac{1}{2}(x^2 + y^2 + z^2 + t^2) - \left\langle \ln \left\{ \sum_{m_s} \exp \left(\beta m_s^2 D_i \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \cosh \left[|m_s| \left\{ \sqrt{K_0} x + \sqrt{K} \left[(\xi + \eta) y + (\xi z + \eta t) j \right] \right. \right. \right. \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left. \left. \left. + \beta H \right] \right] \right] \right] \right\} \right\rangle_d. \end{aligned} \tag{3.18}$$

A magnetização é obtida da energia livre através de

$$m = -\frac{\partial f}{\partial H} = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial \beta f}{\partial H},$$

resulta em

$$m = \left\langle \frac{\sum_{m_S} \exp\left(\beta m_S^2 D_i\right) |m_s| \sinh(w)}{\sum_{m_S} \exp\left(\beta m_S^2 D_i\right) \cosh(w)} \right\rangle_d,$$

onde $w = |m_s| \left\{ \sqrt{K_0}x + \sqrt{K} \left[(\xi + \eta)y + (\xi z + \eta t)j \right] + \beta H \right\}$.

Segundo o trabalho original do modelo de van Hemmen [9], os parâmetros de ordem da fase de vidro de spin são dados por

$$q_1 = \frac{1}{N} \sum_i \xi_i \langle S_i \rangle$$

e

$$q_2 = \frac{1}{N} \sum_i \eta_i \langle S_i \rangle$$

Pode-se obter também a magnetização de um spin da seguinte forma

$$m = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i \rangle .$$

Sendo assim, conclui-se que

$$m = \left\langle \frac{\sum_{m_S} \exp\left(\beta m_S^2 D_i\right) |m_s| \sinh(w)}{\sum_{m_S} \exp\left(\beta m_S^2 D_i\right) \cosh(w)} \right\rangle_d,$$

e que, portanto

$$q_1 = \left\langle \xi \frac{\sum_{m_S} \exp\left(\beta m_S^2 D_i\right) |m_s| \sinh(w)}{\sum_{m_S} \exp\left(\beta m_S^2 D_i\right) \cosh(w)} \right\rangle_d,$$

e

$$q_2 = \left\langle \eta \frac{\sum_{m_S} \exp\left(\beta m_S^2 D_i\right) |m_s| \sinh(w)}{\sum_{m_S} \exp\left(\beta m_S^2 D_i\right) \cosh(w)} \right\rangle_d.$$

Ao determinar as relações das variáveis x , y , z e t na condição de equilíbrio termodinâmico, quando a energia livre é mínima, encontra-se os seguintes valores para as variáveis:

$$\begin{aligned} x &= m\sqrt{K_0}, \\ y &= (q_1 + q_2)\sqrt{K}, \\ z &= jq_1\sqrt{K}, \\ t &= jq_2\sqrt{K}. \end{aligned}$$

Substituindo os valores desses parâmetros na equação (3.18) da energia livre, é possível reescrever somente em função dos parâmetros da Hamiltoniana, obtendo-se

$$\begin{aligned} \beta f &= \frac{1}{2} \left[K_0 m^2 + K(q_1 + q_2)^2 - Kq_1^2 - Kq_2^2 \right] \\ &\quad - \left\langle \ln \left\{ \sum_{m_s} \exp(\beta m_s^2 D_i) \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m \right. \right. \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left. \left. + K(\xi q_1 + \eta q_2) + \beta H \right\} \right] \right\} \right\rangle_d. \end{aligned}$$

Do trabalho original de van Hemmen [9] a energia livre será mínima também quando $q_1 = q_2 = q$. Logo

$$\begin{aligned} \beta f &= \frac{1}{2} \left[K_0 m^2 + 2Kq^2 \right] - \left\langle \ln \left\{ \sum_{m_s} \exp(\beta m_s^2 D_i) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + Kq(\xi + \eta) + \beta H \right\} \right] \right\} \right\rangle_d. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Da mesma forma, reescrevendo a magnetização, tem-se

$$m = \left\langle \frac{\sum_{m_s} \exp(\beta m_s^2 D_i) |m_s| \sinh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + K(\xi + \eta)q + \beta H \right\} \right]}{\sum_{m_s} \exp(\beta m_s^2 D_i) \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + K(\xi + \eta)q + \beta H \right\} \right]} \right\rangle_d. \quad (3.20)$$

Como $q_1 = q_2 = q$, então $q = \frac{q_1 + q_2}{2}$, o parâmetro de ordem da fase de vidro pode ser reescrito assim

$$q = \left\langle \frac{\xi + \eta}{2} \frac{\sum_{m_S} \exp(\beta m_S^2 D_i) |m_s| \sinh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + K(\xi + \eta)q + \beta H \right\} \right]}{\sum_{m_S} \exp(\beta m_S^2 D_i) \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + K(\xi + \eta)q + \beta H \right\} \right]} \right\rangle_d. \quad (3.21)$$

Lembrando que

$$P(\xi, \eta) = \left\{ \frac{1}{2} [\delta(\xi - 1) + \delta(\xi + 1)] \right\} \left\{ \frac{1}{2} [\delta(\eta - 1) + \delta(\eta + 1)] \right\},$$

onde a um valor sobre essas variáveis aleatórias é dada por

$$\begin{aligned} \langle \cdots \rangle_d &= \int_{-\infty}^{\infty} P(\xi, \eta) (\cdots) d\xi d\eta \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{1}{2} [\delta(\xi - 1) + \delta(\xi + 1)] \right\} \left\{ \frac{1}{2} [\delta(\eta - 1) + \delta(\eta + 1)] \right\} (\cdots) d\xi d\eta \\ &= \frac{1}{4} \left\{ \int (1, 1) (\cdots) d\xi d\eta + \int (1, -1) (\cdots) d\xi d\eta \right. \\ &\quad \left. + \int (-1, 1) (\cdots) d\xi d\eta + \int (-1, -1) (\cdots) d\xi d\eta \right\}. \end{aligned}$$

Fazendo a média da energia livre sobre a desordem, obtém-se

$$\begin{aligned} \beta f &= \frac{1}{2} [K_0 m^2 + 2Kq^2] \\ &\quad - \frac{1}{4} \left\{ \ln \left\{ \sum_{m_S} \exp(\beta m_S^2 D_i) \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + Kq + \beta H \right\} \right] \right\} \right\} \\ &\quad + \ln \left\{ \sum_{m_S} \exp(\beta m_S^2 D_i) \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + \beta H \right\} \right] \right\} \\ &\quad + \ln \left\{ \sum_{m_S} \exp(\beta m_S^2 D_i) \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + \beta H \right\} \right] \right\} \\ &\quad + \ln \left\{ \sum_{m_S} \exp(\beta m_S^2 D_i) \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m - Kq + \beta H \right\} \right] \right\} \left. \right\}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \beta f &= \frac{1}{2} [K_0 m^2 + 2Kq^2] \\ &\quad - \frac{1}{4} \left\{ \ln \left\{ \sum_{m_S} \exp(\beta m_S^2 D_i) \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + Kq + \beta H \right\} \right] \right\} \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + 2 \ln \left\{ \sum_{m_S} \exp \left(\beta m_S^2 D_i \right) \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + \beta H \right\} \right] \right\} \\
& + \ln \left\{ \sum_{m_S} \exp \left(\beta m_S^2 D_i \right) \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m - Kq + \beta H \right\} \right] \right\}.
\end{aligned} \tag{3.22}$$

Calculando a média sobre a desordem da magnetização, tem-se

$$\begin{aligned}
m & = \frac{1}{4} \left\{ \frac{\sum_{m_S} \exp \left(\beta m_S^2 D_i \right) |m_s| \sinh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + Kq + \beta H \right\} \right]}{\sum_{m_S} \exp \left(\beta m_S^2 D_i \right) \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + Kq + \beta H \right\} \right]} \right. \\
& + \frac{\sum_{m_S} \exp \left(\beta m_S^2 D_i \right) |m_s| \sinh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + \beta H \right\} \right]}{\sum_{m_S} \exp \left(\beta m_S^2 D_i \right) \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + \beta H \right\} \right]} \\
& + \frac{\sum_{m_S} \exp \left(\beta m_S^2 D_i \right) |m_s| \sinh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + \beta H \right\} \right]}{\sum_{m_S} \exp \left(\beta m_S^2 D_i \right) \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + \beta H \right\} \right]} \\
& + \left. \frac{\sum_{m_S} \exp \left(\beta m_S^2 D_i \right) |m_s| \sinh \left[|m_s| \left\{ K_0 m - Kq + \beta H \right\} \right]}{\sum_{m_S} \exp \left(\beta m_S^2 D_i \right) \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m - Kq + \beta H \right\} \right]} \right\}.
\end{aligned} \tag{3.23}$$

Simplificando as expressões, obtém-se

$$\begin{aligned}
m & = \frac{1}{4} \left\{ \frac{\sum_{m_S} \exp \left(\beta m_S^2 D_i \right) |m_s| \sinh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + Kq + \beta H \right\} \right]}{\sum_{m_S} \exp \left(\beta m_S^2 D_i \right) \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + Kq + \beta H \right\} \right]} \right. \\
& + 2 \frac{\sum_{m_S} \exp \left(\beta m_S^2 D_i \right) |m_s| \sinh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + \beta H \right\} \right]}{\sum_{m_S} \exp \left(\beta m_S^2 D_i \right) \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + \beta H \right\} \right]} \\
& + \left. \frac{\sum_{m_S} \exp \left(\beta m_S^2 D_i \right) |m_s| \sinh \left[|m_s| \left\{ K_0 m - Kq + \beta H \right\} \right]}{\sum_{m_S} \exp \left(\beta m_S^2 D_i \right) \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m - Kq + \beta H \right\} \right]} \right\}.
\end{aligned} \tag{3.24}$$

Fazendo a mesma média sobre a desordem para os parâmetros, tem-se

$$q = \frac{1}{4} \left\{ \frac{\sum_{m_s} \exp(\beta m_s^2 D_i) |m_s| \sinh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + Kq + \beta H \right\} \right]}{\sum_{m_s} \exp(\beta m_s^2 D_i) \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + Kq + \beta H \right\} \right]} - \frac{\sum_{m_s} \exp(\beta m_s^2 D_i) |m_s| \sinh \left[|m_s| \left\{ K_0 m - Kq + \beta H \right\} \right]}{\sum_{m_s} \exp(\beta m_s^2 D_i) \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m - Kq + \beta H \right\} \right]} \right\}. \quad (3.25)$$

A função de distribuição que governa a anisotropia de íon único aleatória é dada por

$$P(D_i) = p\delta(D_i) + (1-p)\delta(D_i - D).$$

Finalmente, fazendo a média sobre a desordem da anisotropia de íon único na energia livre resulta em

$$\begin{aligned} \beta f &= p \times \left\{ \frac{1}{2} [K_0 m^2 + 2Kq^2] - \frac{1}{4} \left\{ \ln \left[\sum_{m_s} \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + 2Kq + \beta H \right\} \right] \right] \right. \right. \\ &+ 2 \ln \left[\sum_{m_s} \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + \beta H \right\} \right] \right] \\ &+ \left. \left. \ln \left[\sum_{m_s} \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m - 2Kq + \beta H \right\} \right] \right] \right\} \right\} \\ &+ (1-p) \left\{ \frac{1}{2} [K_0 m^2 + 2Kq^2] \right. \\ &- \frac{1}{4} \left\{ \ln \left[\sum_{m_s} \exp(m_s^2 \beta D) \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + 2Kq + \beta H \right\} \right] \right] \right. \\ &+ 2 \ln \left[\sum_{m_s} \exp(m_s^2 \beta D) \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + \beta H \right\} \right] \right] \\ &+ \left. \left. \ln \left[\sum_{m_s} \exp(m_s^2 \beta D) \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m - 2Kq + \beta H \right\} \right] \right] \right\} \right\}. \quad (3.26) \end{aligned}$$

A média sobre a desordem da magnetização, é portanto

$$m = \frac{1}{4} \left\{ p \left[\frac{\sum_{m_s} |m_s| \sinh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + 2Kq + \beta H \right\} \right]}{\sum_{m_s} \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + 2Kq + \beta H \right\} \right]} \right] \right\}$$

$$\begin{aligned}
& + 2 \frac{\sum_{m_s} |m_s| \sinh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + \beta H \right\} \right]}{\sum_{m_s} \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + \beta H \right\} \right]} \\
& + \frac{\sum_{m_s} |m_s| \sinh \left[|m_s| \left\{ K_0 m - 2Kq + \beta H \right\} \right]}{\sum_{m_s} \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m - 2Kq + \beta H \right\} \right]} \Bigg] \\
& + (1-p) \left[\frac{\sum_{m_s} \exp(m_s^2 \beta D) |m_s| \sinh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + 2Kq + \beta H \right\} \right]}{\sum_{m_s} \exp(m_s^2 \beta D) \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + 2Kq + \beta H \right\} \right]} \right. \\
& + 2 \frac{\sum_{m_s} \exp(m_s^2 \beta D) |m_s| \sinh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + \beta H \right\} \right]}{\sum_{m_s} \exp(m_s^2 \beta D) \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + \beta H \right\} \right]} \\
& \left. + \frac{\sum_{m_s} \exp(m_s^2 \beta D) |m_s| \sinh \left[|m_s| \left\{ K_0 m - 2Kq + \beta H \right\} \right]}{\sum_{m_s} \exp(m_s^2 \beta D) \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m - 2Kq + \beta H \right\} \right]} \right] \Bigg\}.
\end{aligned} \tag{3.27}$$

Finalmente, a média sobre a desordem nos parâmetros de ordem da fase de vidro é

$$\begin{aligned}
q & = \frac{1}{4} \left\{ p \left[\frac{\sum_{m_s} |m_s| \sinh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + 2Kq + \beta H \right\} \right]}{\sum_{m_s} \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + 2Kq + \beta H \right\} \right]} \right. \right. \\
& - \left. \frac{\sum_{m_s} |m_s| \sinh \left[|m_s| \left\{ K_0 m - 2Kq + \beta H \right\} \right]}{\sum_{m_s} \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m - 2Kq + \beta H \right\} \right]} \right] \\
& + (1-p) \left[\frac{\sum_{m_s} \exp(m_s^2 \beta D) |m_s| \sinh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + 2Kq + \beta H \right\} \right]}{\sum_{m_s} \exp(m_s^2 \beta D) \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + 2Kq + \beta H \right\} \right]} \right. \\
& - \left. \frac{\sum_{m_s} \exp(m_s^2 \beta D) |m_s| \sinh \left[|m_s| \left\{ K_0 m - 2Kq + \beta H \right\} \right]}{\sum_{m_s} \exp(m_s^2 \beta D) \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m - 2Kq + \beta H \right\} \right]} \right] \Bigg\}.
\end{aligned} \tag{3.28}$$

Assim, obtém-se as três equações genéricas com anisotropia aleatória apli-

cada, para o modelo de van Hemmen.

Capítulo 4

Diagramas de Fase do Modelo de van Hemmen

4.1 Introdução

Neste capítulo serão discutidos os diagramas de fase obtidos do modelo de van Hemmen com interação aleatória de campo cristalino via teoria de campo médio de Curie-Weiss. Para este modelo, foi considerada a Hamiltoniana

$$\mathcal{H} = -\frac{J_0}{N} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i S_j - H \sum_i S_i - \sum_i D_i S_i^2, \quad (4.1)$$

em que J_0 é o termo de acoplamento ferro-magnético responsável pelo aparecimento da fase mista, gerando magnetização diferente de zero e o parâmetro de ordem de vidro de spin, também diferente de zero, D_i é a anisotropia responsável pelo aumento do número de fases possíveis, e $S_i > 1/2$ são variáveis de spin inteiro ou semi-inteiro.

Para analisar os efeitos da desordem foi considerado uma distribuição binária de probabilidade associada às variáveis aleatórias, dada por

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

em que o primeiro termo, $p\delta(D_j)$, indica que uma fração p de spins no cristal está livre da ação da anisotropia cristalina de íon único. Da mesma forma, o segundo termo, $(1-p)\delta(D_j - D)$, indica que uma fração $(1-p)$ de spins está

sob a ação da anisotropia de intensidade D (o crescimento do parâmetro p diminui a ação do campo cristalino).

Nesta dissertação foram utilizados os cálculos de campo médio baseados na teoria de Curie-Weiss, tendo sido obtidos a energia livre, a magnetização e o parâmetro de ordem do vidro de spin, respectivamente

$$\begin{aligned}
\beta f &= p \times \left\{ \frac{1}{2} [K_0 m^2 + 2Kq^2] \right. \\
&\quad - \frac{1}{4} \left\{ \ln \left[\sum_{m_s} \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + 2Kq + \beta H \right\} \right] \right] \right. \\
&\quad + 2 \ln \left[\sum_{m_s} \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + \beta H \right\} \right] \right] \\
&\quad + \left. \left. \ln \left[\sum_{m_s} \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m - 2Kq + \beta H \right\} \right] \right] \right\} \right\} \\
&\quad + (1-p) \left\{ \frac{1}{2} [K_0 m^2 + 2Kq^2] \right. \\
&\quad - \frac{1}{4} \left\{ \ln \left[\sum_{m_s} \exp(m_s^2 \beta D) \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + 2Kq + \beta H \right\} \right] \right] \right. \\
&\quad + 2 \ln \left[\sum_{m_s} \exp(m_s^2 \beta D) \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + \beta H \right\} \right] \right] \\
&\quad + \left. \left. \ln \left[\sum_{m_s} \exp(m_s^2 \beta D) \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m - 2Kq + \beta H \right\} \right] \right] \right\} \right\}, \quad (4.2)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
m &= \frac{1}{4} \left\{ p \left[\frac{\sum_{m_s} |m_s| \sinh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + 2Kq + \beta H \right\} \right]}{\sum_{m_s} \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + 2Kq + \beta H \right\} \right]} \right. \right. \\
&\quad + 2 \frac{\sum_{m_s} |m_s| \sinh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + \beta H \right\} \right]}{\sum_{m_s} \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + \beta H \right\} \right]} \\
&\quad + \left. \left. \frac{\sum_{m_s} |m_s| \sinh \left[|m_s| \left\{ K_0 m - 2Kq + \beta H \right\} \right]}{\sum_{m_s} \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m - 2Kq + \beta H \right\} \right]} \right] \right. \\
&\quad + (1-p) \left[\frac{\sum_{m_s} \exp(m_s^2 \beta D) |m_s| \sinh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + 2Kq + \beta H \right\} \right]}{\sum_{m_s} \exp(m_s^2 \beta D) \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + 2Kq + \beta H \right\} \right]} \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + 2 \frac{\sum_{m_s} \exp(m_s^2 \beta D) |m_s| \sinh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + \beta H \right\} \right]}{\sum_{m_s} \exp(m_s^2 \beta D) \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + \beta H \right\} \right]} \\
& + \frac{\sum_{m_s} \exp(m_s^2 \beta D) |m_s| \sinh \left[|m_s| \left\{ K_0 m - 2Kq + \beta H \right\} \right]}{\sum_{m_s} \exp(m_s^2 \beta D) \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m - 2Kq + \beta H \right\} \right]} \left. \right\}, \quad (4.3)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
q & = \frac{1}{4} \left\{ p \left[\frac{\sum_{m_s} |m_s| \sinh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + 2Kq + \beta H \right\} \right]}{\sum_{m_s} \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + 2Kq + \beta H \right\} \right]} \right. \right. \\
& - \left. \left. \frac{\sum_{m_s} |m_s| \sinh \left[|m_s| \left\{ K_0 m - 2Kq + \beta H \right\} \right]}{\sum_{m_s} \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m - 2Kq + \beta H \right\} \right]} \right] \right. \\
& + (1-p) \left[\frac{\sum_{m_s} \exp(m_s^2 \beta D) |m_s| \sinh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + 2Kq + \beta H \right\} \right]}{\sum_{m_s} \exp(m_s^2 \beta D) \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m + 2Kq + \beta H \right\} \right]} \right. \\
& - \left. \left. \frac{\sum_{m_s} \exp(m_s^2 \beta D) |m_s| \sinh \left[|m_s| \left\{ K_0 m - 2Kq + \beta H \right\} \right]}{\sum_{m_s} \exp(m_s^2 \beta D) \cosh \left[|m_s| \left\{ K_0 m - 2Kq + \beta H \right\} \right]} \right] \right\}. \quad (4.4)
\end{aligned}$$

O diagrama de fase do modelo de van Hemmen será obtido pela análise numérica detalhada das três equações (energia livre, magnetização e o parâmetro q), e isto constitui uma tarefa bastante complicada, uma vez que as equações são transcendentais, e, portanto têm soluções quase inacessíveis. Por outro lado, algumas poucas características dos diagramas de fase podem ser obtidas analiticamente. Nas próximas seções serão construídos os diagramas de fase e discutidos os dois casos mais relevantes, $S = 1$ e $S = 3/2$, uma vez que o caso original de van Hemmen já foi bastante estudado no trabalho original [9], e nos trabalhos de Sousa e colaboradores [21, 22].

4.2 Diagrama de Fase do caso $S = 1$

A primeira generalização do modelo de van Hemmen é a extensão das variáveis de spin $S = 1/2$ para $S = 1$. Neste contexto, a anisotropia de íon

único passa a ter um papel bastante relevante na topologia do diagrama de fase e nas propriedades termodinâmicas do modelo. Portanto, para o caso $S = 1$, as equações (4.2), (4.3) e (4.4) se reduzem, respectivamente, a

$$\begin{aligned} \beta f = & \frac{K_0 m^2}{2} + Kq^2 - \frac{p}{4} \left\{ \ln \left[1 + 2 \cosh(K_0 m + 2Kq) \right] \right. \\ & + 2 \ln \left[1 + 2 \cosh(K_0 m) \right] + \ln \left[1 + 2 \cosh(K_0 m - 2Kq) \right] \left. \right\} \\ & - (1-p) \frac{1}{4} \left\{ \ln \left[1 + 2 \exp(\beta D) \cosh(K_0 m + 2Kq) \right] \right. \\ & + 2 \ln \left[1 + 2 \exp(\beta D) \cosh(K_0 m) \right] + \ln \left[1 + 2 \exp(\beta D) \cosh(K_0 m - 2Kq) \right] \left. \right\}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

$$\begin{aligned} m = & \frac{1}{2} \left\{ p \left[\frac{\sinh(K_0 m + 2Kq)}{1 + 2 \cosh(K_0 m + 2Kq)} + 2 \frac{\sinh(K_0 m)}{1 + 2 \cosh(K_0 m)} \right. \right. \\ & + \left. \frac{\sinh(K_0 m - 2Kq)}{1 + 2 \cosh(K_0 m - 2Kq)} \right] + (1-p) \left[\frac{\exp(\beta D) \sinh(K_0 m + 2Kq)}{1 + 2 \exp(\beta D) \cosh(K_0 m + 2Kq)} \right. \\ & + \left. \left. 2 \frac{\exp(\beta D) \sinh(K_0 m)}{1 + 2 \exp(\beta D) \cosh(K_0 m)} + \frac{\exp(\beta D) \sinh(K_0 m - 2Kq)}{1 + 2 \exp(\beta D) \cosh(K_0 m - 2Kq)} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.6)$$

$$\begin{aligned} q = & \frac{1}{2} \left\{ p \left[\frac{\sinh(K_0 m + 2Kq)}{1 + 2 \cosh(K_0 m + 2Kq)} - \frac{\sinh(K_0 m - 2Kq)}{1 + 2 \cosh(K_0 m - 2Kq)} \right] \right. \\ & + \left. (1-p) \left[\frac{\exp(\beta D) \sinh(K_0 m + 2Kq)}{1 + 2 \exp(\beta D) \cosh(K_0 m + 2Kq)} - \frac{\exp(\beta D) \sinh(K_0 m - 2Kq)}{1 + 2 \exp(\beta D) \cosh(K_0 m - 2Kq)} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.7)$$

As diagramações e análises dos diagramas de fase serão realizadas inicialmente separando os casos das transições entre as fases vidro de spin e a paramagnética; entre as fases ferromagnética e paramagnética. Por fim, serão apresentados os diagramas de fase completos, envolvendo as fases vidro de spin, ferromagnética, mista e paramagnética.

4.2.1 Transição de Fase: Vidro de Spin - Paramagnética

Na fase vidro de spin a magnetização é nula. Assim, as expressões da energia livre e do parâmetro de vidro de spin se reduzem a

$$\beta f_{VS} = Kq^2 - \frac{p}{2} \left\{ \ln \left[1 + 2 \cosh(2Kq) \right] + \ln 3 \right\}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{(1-p)}{2} \left\{ \ln \left[1 + 2 \exp(\beta D) \cosh(2Kq) \right] + \ln[1 + 2 \exp(\beta D)] \right\}; \\
q_{VS} & = p \left[\frac{\sinh(2Kq)}{1 + 2 \cosh(2Kq)} \right] + (1-p) \left[\frac{\exp(\beta D) \sinh(2Kq)}{1 + 2 \exp(\beta D) \cosh(2Kq)} \right]. \quad (4.8)
\end{aligned}$$

A magnetização nas fases vidro de spin e paramagnética também é nula, e, na transição vidro de spin-paramagnética, o parâmetro de ordem da fase vidro de spin tende a zero ($q \rightarrow 0$). Portanto, a equação (4.8) pode ser expandida em série de potências, até primeira ordem em q , resultando em

$$e^{\beta D} = \frac{3 - 2pK}{6K - 2pK - 6}. \quad (4.9)$$

Por outro lado, no caso da transição de fase de primeira ordem, suas linhas são obtidas resolvendo o seguinte sistemas de equações

$$\begin{aligned}
f(1) & = F_{VS} - F_{Pa} \\
f(2) & = q - q(T, D, P).
\end{aligned} \quad (4.10)$$

Quando $p = 0$, todos os spins da rede estão sujeitos à ação de uma anisotropia de magnitude D (obtem-se a mesma expressão obtida por Sousa [21]). Quando $p = 1$, tem-se ao caso em que todos os spins estão livres da ação da anisotropia de íon único, isto é, $D = 0$. Os resultados deste trabalho reproduzem os resultados originais obtidos por van Hemmen quando a temperatura crítica é $T_c = 2/3$, no estado fundamental.

A análise numérica da equação (4.9) fornece as linhas de transição de fase de segunda ordem entre as fases vidro de spin e paramagnética no espaço $T - D$. Dois tipos de diagramas de fase serão analisados: o primeiro será considerado na região $D < 0$ do espaço $T - D$, e o segundo será analisado na região $D > 0$.

Na figura 4.2 é exibido o lado $D < 0$ do espaço $T - D$ dos diagramas da transição entre as fases vidro de spin e a paramagnética. O diagrama de fase no plano $T - D$ do modelo de van Hemmen para spin $S = 1$, da figura 4.1, mostra as seguintes informações:

i) No caso $p = 0$, para pequenos valores de $|D|$ e altas temperaturas, a

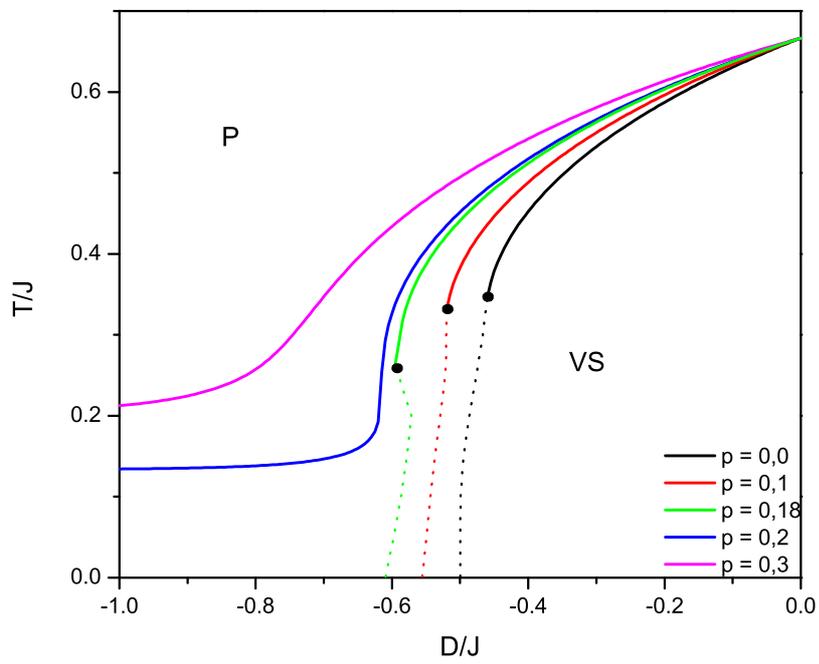


Figura 4.1: Diagrama de fase no plano T-D para o modelo de van Hemmen de spin $S = 1$. As linhas contínuas representam as transições de fase de segunda ordem e os pontos pretos representam pontos tricríticos.

transição de fase é de segunda ordem. Quando $|D|$ cresce, a temperatura crítica diminui e a linha de segunda ordem termina em um ponto tricrítico (PTC) cuja coordenada é dada por $(D/J = -0.4650, T/J = 0.3160)$. A partir deste ponto (PTC) começa a transição de primeira ordem, e do mesmo modo a temperatura crítica diminui com o aumento de $|D|$, indo a zero em $D/J = -0.5$. As duas linhas de transição de fase são separadas por um ponto tricrítico. Este caso já foi estudado por Sousa e colaboradores [21, 22]. Neste caso particular, o sistema exibe comportamento tricrítico.

ii) No caso entre $0.18 \geq p \geq 0$, o diagrama de fase apresenta uma linha de pontos tricríticos. A transição é de segunda ordem na região de altas temperaturas e de primeira ordem na região de baixas temperaturas. Os dois tipos de transições de fase são separados por pontos tricríticos. Nesta região do espaço termodinâmico, o sistema apresenta comportamento tricrítico.

iii) Para o caso $p > 0.18$, o sistema apresenta transição de fase apenas de segunda ordem entre as fases vidro de spin e a paramagnética. Como a anisotropia $D < 0$ favorece o estado $S = 0$, o seu crescimento para o lado negativo leva a uma diminuição da temperatura crítica. Nesta região do espaço termodinâmico, o comportamento tricrítico é suprimido.

O aumento do parâmetro de aleatoriedade p , como mostrado na figura 4.2, indica aumento em uma parcela dos spins que fica livre da ação da anisotropia de íon único, indicando que esta anisotropia D é fundamental para a existência do comportamento tricrítico e do aumento da temperatura crítica, como mostrado na figura 4.2. Quando $p \rightarrow 1$, todos os spins estão livres da anisotropia de campo cristalino e, assim o comportamento do modelo que está sendo estudado migra para o comportamento original de van Hemmen.

Por outro lado, na figura 4.3 é exibido o lado $D > 0$ do espaço $T - D$ do diagrama da transição de fase entre as fases vidro de spin e a fase paramagnética. Nesta região do espaço termodinâmico, o modelo não apresenta comportamento tricrítico (a transição de fase é de segunda ordem para todos valores de p). Todas as linhas de segunda ordem, para os diferentes valores de p , começam em $D/J = 0$ e $T/J = 2/3$, e as temperaturas críticas crescem juntamente com o aumento da razão D/J . Este fato pode ser entendido lembrando que valores de $D > 0$ favorecem os estados $S = \pm 1$ e, conse-

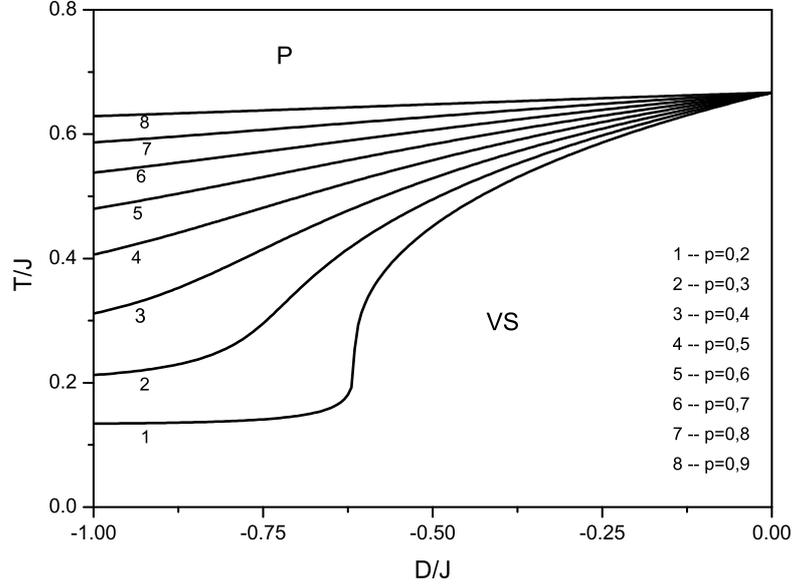


Figura 4.2: Diagrama de fase no plano T-D para o modelo de van Hemmen de spin $S=1$. Região negativa de D .

quentemente a ordem magnética vidro de spin. No limite de $p \rightarrow 1$, tem-se o caso puro com $T_c = 2/3$.

4.2.2 Transição de Fase: Ferromagnética - Paramagnética

Na fase ferromagnética a magnetização é $m \neq 0$, e o parâmetro de vidro de spin é zero ($q = 0$). As equações tornam-se

$$\beta f_F = \frac{K_0 m^2}{2} - p \left\{ \ln \left[1 + 2 \cosh(K_0 m) \right] \right\} - (1-p) \left\{ \ln \left[1 + 2 \exp(\beta D) \cosh(K_0 m) \right] \right\}.$$

$$m_F = 2p \left[\frac{\sinh(K_0 m)}{1 + 2 \cosh(K_0 m)} \right] + 2(1-p) \left[\frac{\exp(\beta D) \sinh(K_0 m)}{1 + 2 \exp(\beta D) \cosh(K_0 m)} \right]. \quad (4.11)$$

Na fase paramagnética, os dois parâmetros de ordem (vidro de spin e ferromagneto) são zero ($q = 0$ e $m = 0$), e a equação resultante é a da

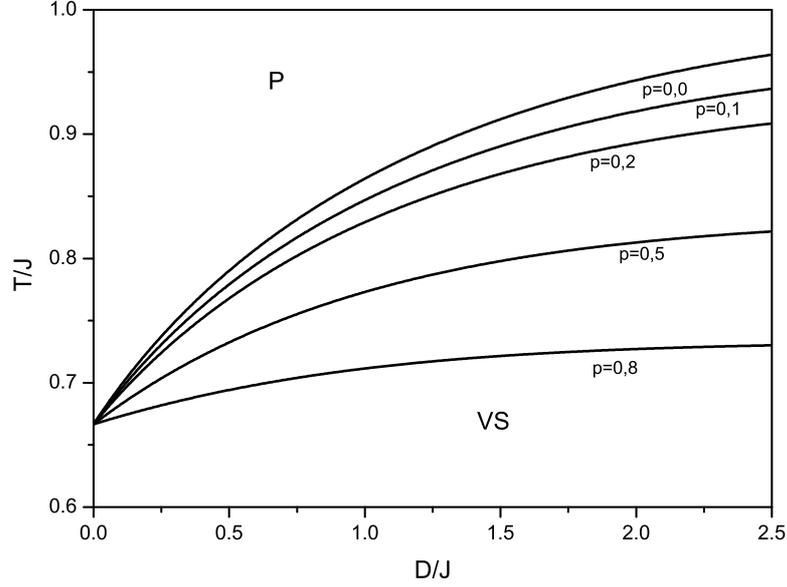


Figura 4.3: Diagrama de fase no plano T-D para o modelo de van Hemmen de spin $S=1$ na região positiva de D .

energia livre

$$\beta f_P = -p \ln(4) - \frac{(1-p)\beta D}{4} - (1-p) \{ \ln[2 + 2 \exp(2\beta D)] \}.$$

Na transição de fase ferromagnética-paramagnética, o parâmetro de ordem da fase ferromagnética tende a zero $m \rightarrow 0$. Portanto, a equação (4.11) pode ser expandida em série de potências, ou seja,

$$\begin{aligned} m &= 2p \left[\frac{K_0 m}{3} \right] + 2(1-p) \left[\frac{e^{\beta D} K_0 m}{1 + 2e^{\beta D}} \right], \\ 1 &= 2p \left[\frac{K_0}{3} \right] + 2(1-p) \left[\frac{e^{\beta D} K_0}{1 + 2e^{\beta D}} \right]. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Isolando $e^{\beta D}$, tem-se

$$e^{\beta D} = \frac{3 - 2pK_0}{3(2K_0 - 2pK_0/3 - 2)}. \quad (4.13)$$

No caso particular $p = 1$, correspondente ao caso em que todos os spins estão livres da ação da anisotropia de íon único, isto é, $D = 0$, os resultados deste trabalho reproduzem os resultados originais obtido por van Hemmen, que obteve no estado fundamental a temperatura crítica igual a $T_c = 2/3$. Além disso, a temperatura T/J em função de J_0/J é dada por

$$\frac{T}{J} = \frac{2 J_0}{3 J}, \quad (4.14)$$

No caso em que $p = 0$, obtém-se a mesma expressão obtida por Sousa [21],

$$e^{\beta D} = \frac{1}{2K_0 - 2}. \quad (4.15)$$

Neste último caso, fixando J_0/J , observa-se para o caso $D \gg 0$ a razão

$$\frac{J_0/J}{T/J} \rightarrow 1.$$

Por outro lado, para $D < 0$, porém com $|D| \gg 0$, a temperatura crítica é tal que $T/J \rightarrow 0$.

A análise numérica da equação (4.13) fornece as linhas de transição de fase de segunda ordem entre as fases ferromagnética e paramagnética no espaço $T - J_0$. Assim, o diagrama de fase, mostrado na figura 4.4, exhibe linhas de segunda ordem (linhas contínuas) e linhas de primeira ordem (linhas pontilhadas) para diversos valores de parâmetro de anisotropia D e $p = 0$.

Para $D = -0.01$ ($D \rightarrow 0$) a transição da fase ferromagnética para a paramagnética é inteiramente de segunda ordem. No caso de $D > -0.01$, o sistema apresenta comportamento tricrítico, isto é, a transição de fase é de segunda ordem em regiões com temperaturas mais altas, e de primeira ordem em regiões com temperaturas menores. O aumento de $|D|$, com $D < 0$, leva a transição de fase de primeira ordem para a região de temperaturas mais altas (crescente). Portanto, para $|D| \rightarrow \infty$, a transição de fase será completamente de primeira ordem. Neste caso, todos os spins estão sob ação do campo anisotrópico. Há uma competição entre D e J_0 . Se por um lado o aumento de $|D|$ no sentido negativo leva o sistema a preferir ficar no estado com $S = 0$, o crescimento de J_0 força os spins a se alinharem paralelamente.

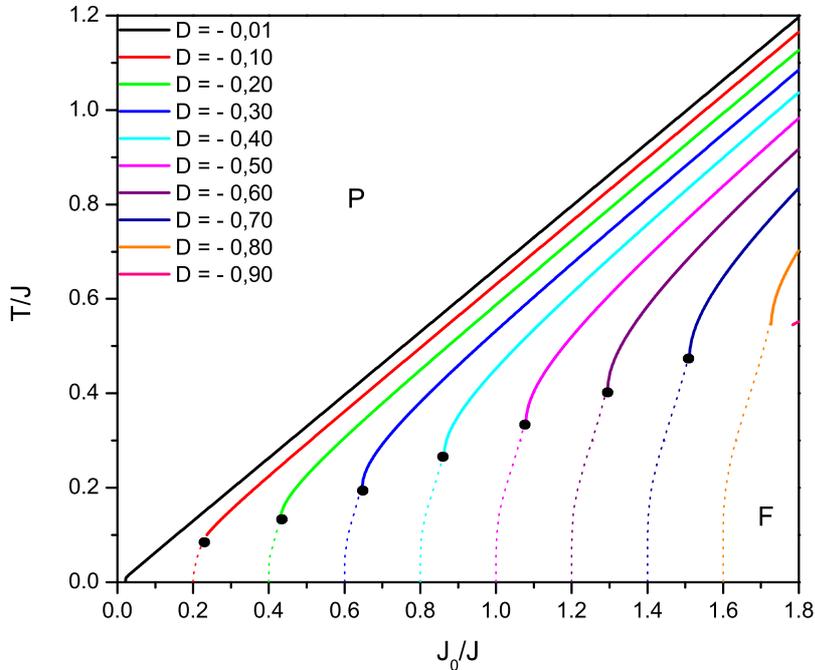


Figura 4.4: Diagrama de fase no plano T-J para o modelo de van Hemmen de spin $S=1$ mostrando as linhas de segunda ordem e linhas de primeira ordem para diversos parâmetros da anisotropia D , com $p = 0.0$

Esta competição aumenta a complexidade do sistema, e deve induzir uma transição de fase de primeira ordem a temperaturas mais altas.

No caso de $p \neq 0$, o diagrama de fase T/J versus J_0/J exibido na figura 4.5 mostra $D = -0.3$ e diversos valores de p . Na região de $0.14 \geq p \geq 0$, o sistema apresenta comportamento tricrítico, isto é, apresenta linha de segunda ordem e linhas de primeira ordem separadas por pontos tricríticos. Este diagrama está indicando que, para $D = -0.3$ e $p > 0.14$, a fase vidro de spin desaparece. Uma vez que a transição de fase de segunda ordem entre as fases ferromagnéticas e paramagnéticas começa em $T/J = 0$ e $J_0/J = 0$ e se estende para todos outros valores, para quaisquer valores da temperatura e de J_0 maiores que zero só existirão as fases ferromagnética e paramagnética.

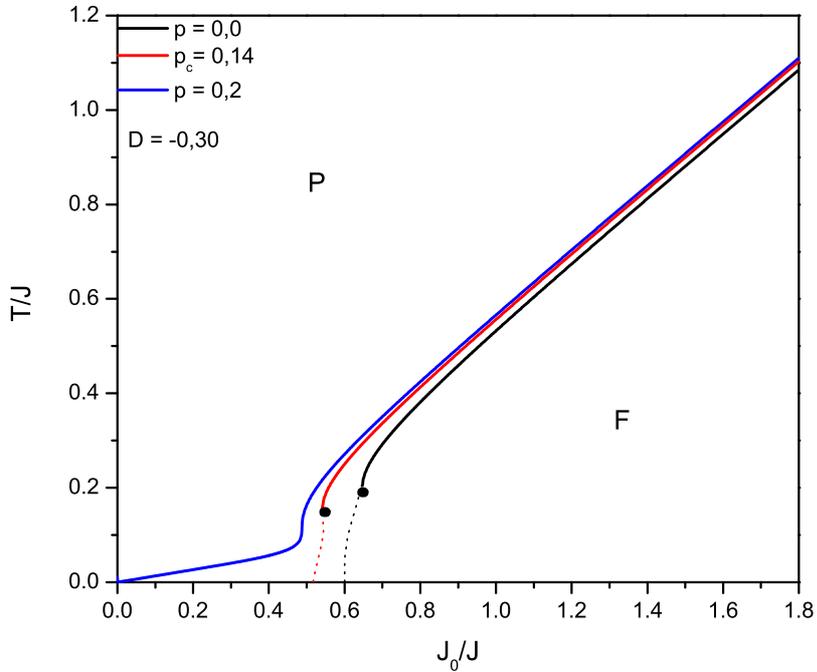


Figura 4.5: Diagrama de fase no plano T-J para o modelo de van Hemmen de spin $S = 1$ para anisotropia $D = -0.3$ e para diversos valores de p

Na tabela 1 são apresentando os valores de p para os quais a transição de fase de primeira ordem é suprimida.

No caso onde $p > p_c$, para qualquer valor de D , as linhas de primeira ordem são suprimidas, e a linha de segunda ordem se estende até a temperatura zero e $J_0/J = 0$. A figura 4.6 mostra o caso $p = 0.7$, indicando que as linhas começam a se fundir umas com as outras de tal modo que, para $p = 1$, todas as linhas se fundem em uma única linha de segunda ordem.

4.2.3 Diagrama de Fase Completo: Fases Ferromagnética, Vidro de Spin e Paramagnética

A análise das equações (4.5), (4.6) e (4.7) fornece o diagrama completo do modelo de van Hemmen generalizado com spins $S = 1$ e anisotropia

Tabela 4.1: Supressão das linhas de primeira ordem

D	p_c
-0,20	0,11
-0,30	0,14
-0,40	0,15
-0,50	0,15
-0,60	0,18
-0,70	0,18
-0,80	0,17

aleatória de íon único. Considerando o caso particular $p = 1$, correspondente ao caso puro $D = 0$, o diagrama de fase corresponde ao modelo original de van Hemmen, com o eixo vertical multiplicado por $2/3$. Como vimos anteriormente, no estado fundamental ($T = 0$) as expressões do nosso modelo reproduzem o resultado original de van Hemmen, de maneira que a transição mista-ferromagnética é encontrada no mesmo ponto do espaço termodinâmico, $J_0/J = 2/3$.

Estamos interessados em estudar os efeitos da anisotropia aleatória no diagrama de fase. Portanto, vamos analisar os casos com $D \neq 0$, lembrando que o caso $D > 0$ favorece os estados $S = \pm 1$ e, em consequência, no limite de $d \rightarrow \infty$, o sistema passa a ter dois estados ($S = \pm 1$), recuperando o caráter do modelo de Ising. Por outro lado, no caso de $D < 0$, o estado de spin nulo ($S = 0$) é favorecido, e por isso à medida em que $|D|$ cresce no sentido negativo, tende a eliminar a fase mista.

As linhas de transições de fase de segunda ordem entre as fases ferromagnética-paramagnética, ferromagnética-vidro de spins e a vidro de spin-paramagnética são obtidas expandindo-se os parâmetros m_F e q_{vidro} quando eles tenderem a zero na transição de fase. As linhas de primeira ordem nessas transições são obtidas igualando as energias livres em cada fase e, considerando a expressão do parâmetro de ordem, na transição ferromagnética-

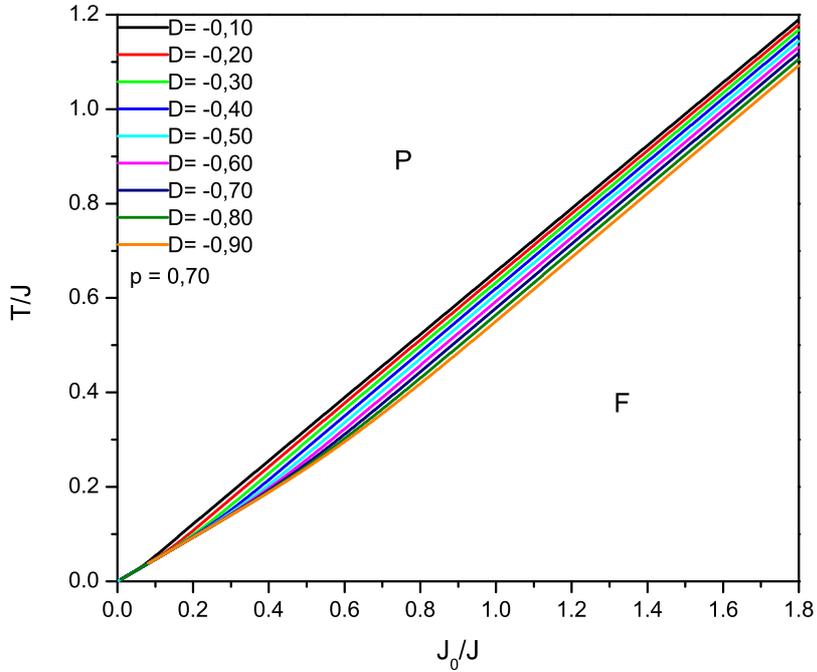


Figura 4.6: Diagrama de fase no plano T-J apresentando o caso $p = 0,7$, a tendência das linhas fundirem-se em uma única linha de segunda ordem. Fato ocorrido para $p = 1$.

paramagnética teremos um sistema com duas equações

$$f_1 = f(Fe) - f(Pa),$$

$$f_2 = m - m(T, J_0, D, p).$$

Na transição vidro de spin-paramagnética teremos um sistema de equação semelhante:

$$f_1 = f(FVS) - F(Pa),$$

$$f_2 = q - q(T, J, D, p).$$

Por outro lado, as linhas de transição entre as fases ferromagnética e mista são obtidas igualando-se as energias livres de cada fase (em função dos seus respectivos parâmetros de ordem). Considerando o parâmetro de ordem

de cada fase, tem-se um sistema com quatro equações

$$\begin{aligned} f_1 &= f(Fe(m_1)) - f(mista(m_2, q_2)), \\ f_2 &= m_1 - m_1(T, J_0, D, m_1, p), \\ f_3 &= m_2 - m_2(T, J_0, D, m_2, p), \\ f_4 &= q_2 - q_2(T, J_0, D, q_2, p). \end{aligned}$$

Na transição entre as fases vidro de spin-mista, o sistema de equações tem a mesma estrutura, isto é

$$\begin{aligned} f_1 &= f(fe(q_1)) - f(mista(m_2, q_2)), \\ f_2 &= q_1 - q_1(T, J_0, D, q_1, p), \\ f_3 &= m_2 - m_2(T, J_0, D, m_2, p), \\ f_4 &= q_2 - q_2(T, J_0, D, q_2, p). \end{aligned}$$

A figura 4.7 apresenta o diagrama completo do modelo de van Hemmen (generalizado) para o caso $p = 0$. Este diagrama mostra vários valores da anisotropia, ou seja, $D = -0.10$, $D = -0.12$, $D = -0.14$ e $D = -0.16$, e claramente indica que o aumento da anisotropia no sentido negativo contribui para o desaparecimento da fase mista. Para $D/J = -0.1$ obtém-se o diagrama já mostrado por Sousa e colaboradores [21]. Mantendo $p = 0$ e crescendo para o lado negativo os valores do parâmetro de anisotropia, o efeito desta mudança é diminuir o tamanho da fase mista e aumentar o da fase de vidro de spin. Quando D atinge o valor $D_c = -\frac{1}{6}$, a fase mista desaparece completamente. Este fenômeno pode ser compreendido através do fato de que valores negativos do parâmetro da anisotropia favorecem o estado com spin nulo $S = 0$, o que contribui para o desaparecimento da fase mista.

Na tabela 2 são exibidos os valores de p e D_c para os quais a fase mista é suprimida.

A figura 4.8 mostra o diagrama de fase para diversos valores de p para uma anisotropia fixa $D = -0.2$ em uma região onde a fase mista já foi

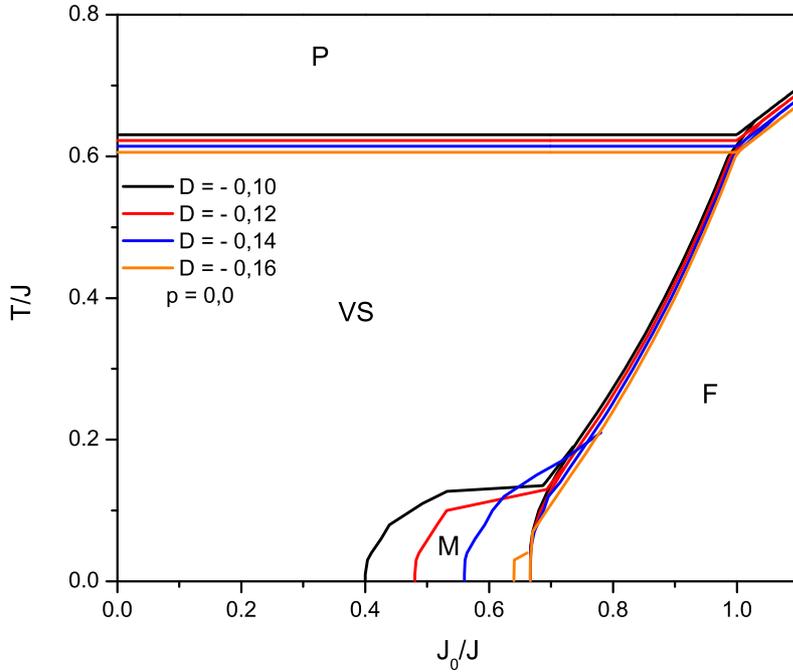


Figura 4.7: Diagrama de fase no plano $T/J - J_0/J$ para o modelo de van Hemmen de spin $S = 1$ para $p = 0$. O diagrama mostra a fase mista sendo suprimida.

suprimida. Tal diagrama evidencia o aumento do parâmetro p , que corresponde a uma diluição na ação da anisotropia, levando o sistema a aumentar o tamanho da fase ferromagnética (ou seja, ela existe para valores menores de J_0).

4.3 Diagrama de Fase: Caso $S = 3/2$

Uma outra generalização do modelo de van Hemmen é a extensão das variáveis de spins $S = 1/2$ para $S = 3/2$. A anisotropia de íon único aleatória torna-se bastante relevante na topologia do diagrama de fase e nas propriedades termodinâmicas do modelo. No caso em que $S = 3/2$, os efeitos do campo cristalino D nas propriedades termodinâmicas do modelo de van Hemmen é marcante, pois para $D > 0$, os estados $\pm 3/2$ dos spins são fa-

Tabela 4.2: Supressão da fase mista

D	p_c
-0,1666	0,0
-0,1850631171	0,1
-0,2080586802	0,2
0,2376244042	0,3
-0,27704537	0,4
-0,332237214	0,5
-0,415018748	0,6
-0,552992127	0,7
-0,589882683	0,8

favorecidos e, no limite em $D \rightarrow \infty$, os spins assumem somente um desses dois estados com a mesma probabilidade. Portanto, voltamos ao modelo original de van Hemmen, uma vez que os spins do sistema só podem assumir dois estados (spins de Ising $\pm 3/2$). Por outro lado, para o caso em que $D < 0$, os estados favorecidos são $S = \pm 1/2$ e, do mesmo modo, quando $|D| \rightarrow \infty$ no sentido negativo, nosso modelo novamente volta a ser de dois estados (mas agora com $S = \pm 1/2$). Para valores intermediários, ocorrem competições entre as interações presentes no modelo, fato que enriquece o diagrama de fase. Portanto, para o caso em que $S = 3/2$, as equações (4.2), (4.3), e (4.4) se reduzem respectivamente a

$$\begin{aligned}
\beta f &= \frac{K_0 m^2}{2} + K q^2 - \frac{p}{4} \left\{ \ln \left[2 \cosh \left(\frac{K_0 m}{2} + K q \right) + 2 \cosh \left(\frac{3K_0 m}{2} + 3K q \right) \right] \right. \\
&+ 2 \ln \left[2 \cosh \left(\frac{K_0 m}{2} \right) + 2 \cosh \left(\frac{3K_0 m}{2} \right) \right] \\
&+ \left. \ln \left[2 \cosh \left(\frac{K_0 m}{2} - K q \right) + 2 \cosh \left(\frac{3K_0 m}{2} - 3K q \right) \right] \right\} - (1-p) \frac{\beta D}{4} \\
&- \frac{(1-p)}{4} \left\{ \ln \left[2 \exp(2\beta D) \cosh \left(\frac{3K_0 m}{2} + 3K q \right) + 2 \cosh \left(\frac{K_0 m}{2} + K q \right) \right] \right. \\
&+ \left. 2 \ln \left[2 \exp(2\beta D) \cosh \frac{3K_0 m}{2} + 2 \cosh \left(\frac{K_0 m}{2} \right) \right] \right\}
\end{aligned}$$

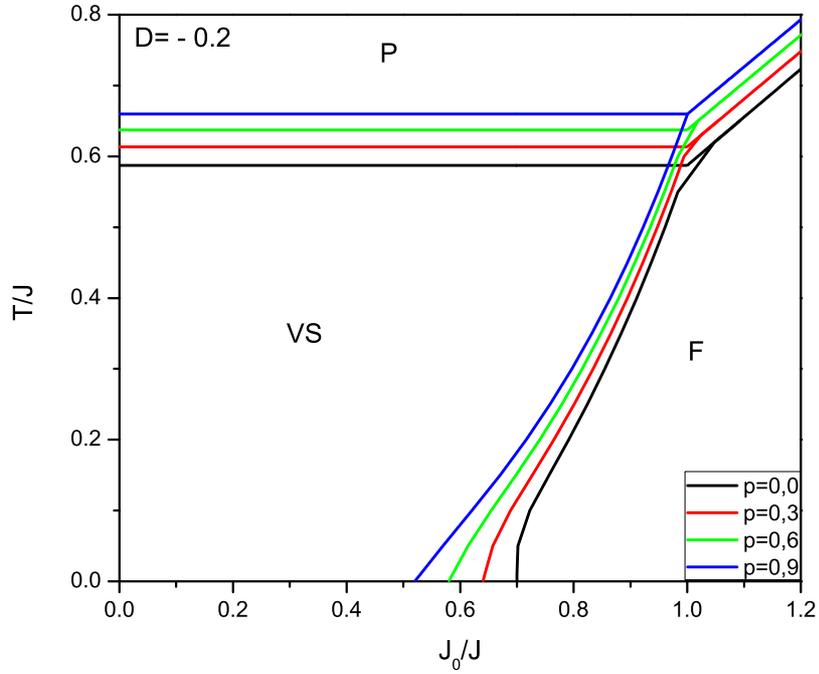


Figura 4.8: Diagrama de fase no plano $T/J - J_0/J$ para o modelo de van Hemen de spin $S = 1$ na região negativa de D . O diagrama mostra que a fase mista já foi suprimida.

$$- \ln \left[2 \exp(2\beta D) \cosh \left(\frac{3K_0 m}{2} - 3Kq \right) + 2 \cosh \left(\frac{K_0 m}{2} - Kq \right) \right], \quad (4.16)$$

$$m = \frac{1}{8} \left\{ p \left[\frac{3 \sin \left(\frac{3K_0 m}{2} + 3Kq \right) + \sin \left(\frac{K_0 m}{2} + Kq \right)}{\cosh \left(\frac{3K_0 m}{2} + 3Kq \right) + \cosh \left(\frac{K_0 m}{2} + Kq \right)} \right. \right. \\ + 2 \frac{3 \sin \left(\frac{3K_0 m}{2} \right) + \sin \left(\frac{K_0 m}{2} \right)}{\cosh \left(\frac{3K_0 m}{2} \right) + \cosh \left(\frac{K_0 m}{2} \right)} \\ \left. \left. + \frac{3 \sin \left(\frac{3K_0 m}{2} - 3Kq \right) + \sin \left(\frac{K_0 m}{2} - Kq \right)}{\cosh \left(\frac{3K_0 m}{2} - 3Kq \right) + \cosh \left(\frac{K_0 m}{2} - Kq \right)} \right] \right\}$$

$$\begin{aligned}
& + (1-p) \left[\frac{3 \exp(2\beta D) \sin\left(\frac{3K_0 m}{2} + 3Kq\right) + \sin\left(\frac{K_0 m}{2} + Kq\right)}{\exp(2\beta D) \cosh\left(\frac{3K_0 m}{2} + 3Kq\right) + \cosh\left(\frac{K_0 m}{2} + Kq\right)} \right. \\
& + 2 \frac{3 \exp(2\beta D) \sin\left(\frac{3K_0 m}{2}\right) + \sin\left(\frac{K_0 m}{2}\right)}{\exp(2\beta D) \cosh\left(\frac{3K_0 m}{2}\right) + \cosh\left(\frac{K_0 m}{2}\right)} \\
& \left. + \frac{3 \exp(2\beta D) \sin\left(\frac{3K_0 m}{2} - 3Kq\right) + \sin\left(\frac{K_0 m}{2} - Kq\right)}{\exp(2\beta D) \cosh\left(\frac{3K_0 m}{2} - 3Kq\right) + \cosh\left(\frac{K_0 m}{2} - Kq\right)} \right] \Bigg\}, \quad (4.17)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
q & = \frac{1}{8} \left\{ p \left[\frac{3 \sin\left(\frac{3K_0 m}{2} + 3Kq\right) + \sin\left(\frac{K_0 m}{2} + Kq\right)}{\cosh\left(\frac{3K_0 m}{2} + 3Kq\right) + \cosh\left(\frac{K_0 m}{2} + Kq\right)} \right. \right. \\
& - \left. \frac{3 \sin\left(\frac{3K_0 m}{2} - 3Kq\right) + \sin\left(\frac{K_0 m}{2} - Kq\right)}{\cosh\left(\frac{3K_0 m}{2} - 3Kq\right) + \cosh\left(\frac{K_0 m}{2} - Kq\right)} \right] \\
& + (1-p) \left[\frac{3 \exp(2\beta D) \sin\left(\frac{3K_0 m}{2} + 3Kq\right) + \sin\left(\frac{K_0 m}{2} + Kq\right)}{\exp(2\beta D) \cosh\left(\frac{3K_0 m}{2} + 3Kq\right) + \cosh\left(\frac{K_0 m}{2} + Kq\right)} \right. \\
& \left. \left. - \frac{3 \exp(2\beta D) \sin\left(\frac{3K_0 m}{2} - 3Kq\right) + \sin\left(\frac{K_0 m}{2} - Kq\right)}{\exp(2\beta D) \cosh\left(\frac{3K_0 m}{2} - 3Kq\right) + \cosh\left(\frac{K_0 m}{2} - Kq\right)} \right] \right\}. \quad (4.18)
\end{aligned}$$

O modelo de van Hemmen exibe as fases paramagnética, ferromagnética, vidro de spin e a chamada fase mista, as quais apresentam magnetização e parâmetro de ordem do vidro de spin diferentes de zero. As expressões para energia livre e as equações de estado de cada fase serão listadas a seguir.

Fase ferromagnética: nesta fase a magnetização é diferente de zero ($m \neq 0$) e com parâmetro de vidro de spin nulo ($q = 0$). As expressões para a energia livre e a magnetização são dadas por

$$\begin{aligned}
\beta f_F & = \frac{K_0 m^2}{2} - (1-p) \frac{\beta D}{4} \\
& - p \left\{ \ln \left[2 \cosh\left(\frac{K_0 m}{2}\right) + 2 \cosh\left(\frac{3K_0 m}{2}\right) \right] \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - (1-p) \left\{ \ln \left[2 \exp(2\beta D) \cosh \left(\frac{3K_0 m}{2} \right) + 2 \cosh \left(\frac{K_0 m}{2} \right) \right] \right\}, \\
m_F &= \frac{p}{2} \left[\frac{3 \sin \left(\frac{3K_0 m}{2} \right) + \sin \left(\frac{K_0 m}{2} \right)}{\cosh \left(\frac{3K_0 m}{2} \right) + \cosh \left(\frac{K_0 m}{2} \right)} \right] \\
& + \frac{(1-p)}{2} \left[\frac{3 \exp(2\beta D) \sin \left(\frac{3K_0 m}{2} \right) + \sin \left(\frac{K_0 m}{2} \right)}{\exp(2\beta D) \cosh \left(\frac{3K_0 m}{2} \right) + \cosh \left(\frac{K_0 m}{2} \right)} \right].
\end{aligned}$$

Fase vidro de spin: é caracterizada por um parâmetro de ordem diferente de zero ($q \neq 0$) e pelo fato de não possuir magnetização ($m = 0$). Portanto, as expressões da energia livre e do parâmetro de ordem são dadas por

$$\begin{aligned}
\beta f_{VS} &= Kq^2 - (1-p) \frac{\beta D}{4} - \frac{(1-p)}{2} \ln[2 + 2 \exp(2\beta D)] \\
& - \frac{p}{2} \left\{ \ln \left[2 \cosh(Kq) + 2 \cosh(3Kq) \right] + \ln 4 \right\} \\
& - \frac{(1-p)}{2} \left\{ \ln \left[2 \exp(2\beta D) \cosh(3Kq) + 2 \cosh(Kq) \right] \right\}, \\
q_{VS} &= \frac{p}{4} \left[\frac{3 \sin(3Kq) + \sin(Kq)}{\cosh(3Kq) + \cosh(Kq)} \right] \\
& + \frac{(1-p)}{4} \left[\frac{3 \exp(2\beta D) \sin(3Kq) + \sin(Kq)}{\exp(2\beta D) \cosh(3Kq) + \cosh(Kq)} \right].
\end{aligned}$$

Fase paramagnética: é caracterizada por não possuir parâmetro de ordem. Assim, $m = 0$ e $q = 0$. Sua energia livre é dada por

$$\beta f_P = -p \ln(4) - \frac{(1-p)\beta D}{4} - (1-p) \{ \ln[2 + 2 \exp(2\beta D)] \}.$$

No caso de spin $S = \frac{3}{2}$, vamos analisar somente as transições de fase entre vidro de spin e a fase paramagnética.

4.3.1 Transição de Fase : Vidro de Spin - Paramagnética para $S = 3/2$

Nas fases vidro de spin e paramagnética a magnetização é nula $m = 0$. Na transição vidro de spin-paramagnética o parâmetro de ordem da fase vidro de spin tende a zero ($q \rightarrow 0$). Portanto, a equação (4.8) pode ser expandida em série de potências até primeira ordem em q , resultando em

$$e^{\beta D} = \frac{K + 4pK - 4}{4 + pK - 6K}. \quad (4.19)$$

A solução numérica da equação (4.19) fornece as linhas de segunda ordem no plano T/J versus D/J para todos os valores do parâmetro p da anisotropia de campo cristalino. Portanto, o diagrama de fase mostrado na figura (4.9) exibe linhas de segunda ordem para todos os valores de p . Todas as linhas de segunda ordem partem do lado positivo de D em região de temperaturas mais altas e, à medida em que o campo cristalino decresce a temperatura crítica também diminui, passando pela temperatura do modelo puro quando $D = 0$. Este fato pode ser entendido levando-se em conta que $D > 0$ favorece os estados $\pm 3/2$, permitindo ordenamento do sistema na fase vidro de spin. Analisando o caso $p = 0$ (todos os spins da rede estão sujeitos à ação de uma anisotropia de magnitude D) verifica-se que a linha começa pela temperatura crítica dada por $T_c = 1.906566$. O decréscimo de D também corresponde a uma diminuição na temperatura. Se $D = 0$, a temperatura crítica é a do modelo puro de van Hemmen. Quando o parâmetro p cresce, correspondendo a uma diluição no campo cristalino, uma quantidade menor de spins estarão sujeitos à ação desse campo. As linhas começam em temperaturas menores e decrescem com D , e posteriormente passam pela temperatura crítica do modelo puro de van Hemmen quando $D = 0$. O crescimento de D no sentido negativo levam a temperaturas críticas menores, tendendo a um valor constante quando $D \rightarrow -\infty$ e, ao contrário, a temperatura crítica estabiliza-se em valores maiores quando os valores de p crescem.

O diagrama de fase exibe transição de primeira ordem dentro da fase ordenada, separando as fases $q_1 = 1/2$ e $q_2 = 3/2$. Essas linhas de primeira ordem terminam em um ponto crítico. As coordenadas desses pontos críticos também são exibidas no diagrama da figura (4.9).

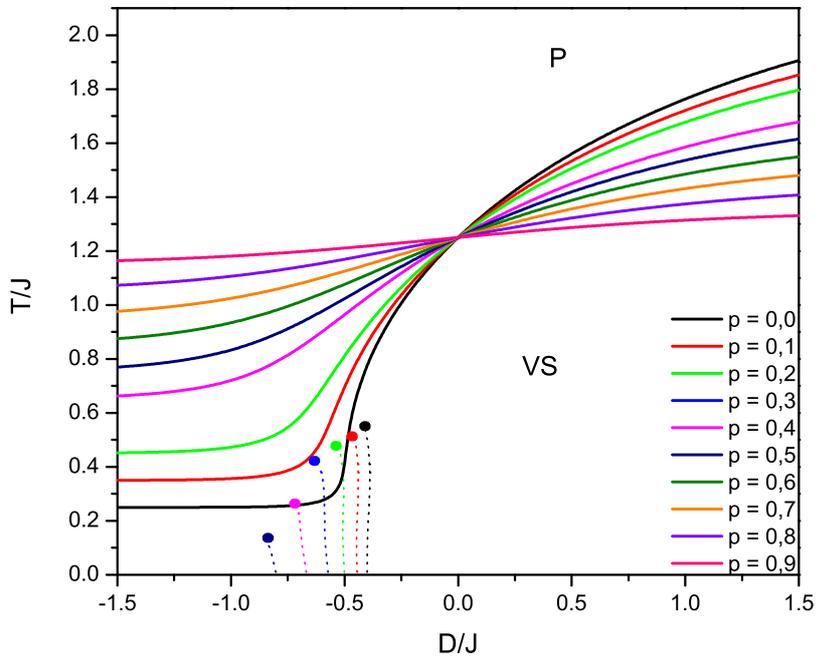


Figura 4.9: Diagrama de fase no plano $T/J - D/J$ para o modelo de van Hemmen de spin $S = \frac{3}{2}$ mostrando as linhas de segunda ordem entre as fases paramagnéticas e vidro de spin, e primeira ordem da fase vidro de spin.

Capítulo 5

Conclusões e Perspectivas

Nesta dissertação foi discutido sistematicamente o diagrama de fase do modelo de van Hemmen na presença da anisotropia aleatória de íon único com spins $S = 1$ e $S = 3/2$. Todas as análises foram realizadas para o caso da distribuição bimodal governando a interação aleatória, que forneceu três fases ordenadas (vidro de spin, mista e ferromagnética).

O trabalho foi redigido obedecendo ao seguinte roteiro. No capítulo 1 foi apresentada uma breve introdução sobre fenômenos críticos e transição de fase. No capítulo 2, foi apresentada a aproximação de campo médio de Weiss, que foi utilizada para obter as energias livres e as equações de estados do modelo de van Hemmen generalizado. No capítulo 3 foram calculadas todas as grandezas físicas necessárias para a obtenção do diagrama de fase completo. Apesar de serem analisados em detalhes somente os casos particulares de spins $S = 1$ e $S = 3/2$, foi considerado o modelo de van Hemmen generalizado, incluindo anisotropia de íon único aleatória, variáveis de spin inteiro e semi-inteiro e distribuição de probabilidade $P(\xi, \eta)$ para a interação de troca, além da distribuição que governa o campo cristalino aleatório. Este estudo generalizou os trabalhos de Sousa e colaboradores [21, 22] e o trabalho de Almeida e Brady Moreira [24]. No capítulo 4, foram apresentados e discutidos os diagramas de fase para os casos $S = 1$ e $S = 3/2$. Finalmente, o capítulo 5 contém as principais conclusões e sugestões de continuidade para este trabalho. As conclusões desta pesquisa serão listadas separadamente para os casos $S = 1$ e $S = 3/2$.

Inicialmente foi estudado o diagrama de fase no plano T/J versus D/J da transição da fase vidro de spin para a fase paramagnética. Neste espaço o diagrama de fase mostrado na figura 4.1 exibe linhas de segunda ordem e linhas de primeira ordem separadas por pontos tricríticos. Este comportamento é explorado no intervalo de $0 \leq p \leq 0.18$, em que as linhas de segunda ordem correspondem à região de temperaturas mais altas e pequenos valores de $|D|$. O crescimento de $|D|$ para o sentido negativo leva a uma diminuição da temperatura. Assim, as linhas de segunda ordem terminam em um ponto tricrítico, seguindo a linha de primeira ordem. Na transição de primeira ordem, um pequeno crescimento de $|D|$ já leva a temperatura crítica a zero. Por outro lado, para $p > 0.18$, a transição de fase é somente de segunda ordem, e o crescimento de p favorece o comportamento do modelo puro de van Hemmen.

Já a transição da fase ferromagnética para a paramagnética foi mostrada na figura 4.4 no espaço T/J versus J_o/J para diversos valores do parâmetro da anisotropia aleatória de íon único. O diagrama mostra que, para D próximo de zero, este sistema somente apresenta as fases ferromagnética e paramagnética não existindo as fases mista e a de vidro de spin. Também foi visto que nesta transição aparecem linhas de primeira ordem somente para valores de $D \geq 0.1$. As linhas de transições de primeira ordem são crescentes, isto é, começam em altas temperaturas e terminam em temperatura nula, indicando que, para $D \gg 1$, as transições entre as fases ferromagnética e paramagnética são exclusivamente de primeira ordem.

O diagrama de fase completo, que contempla as fases ferromagnética, paramagnética, vidro de spin e mista, no espaço T/J versus J_o/J , é mostrado na figura 4.7. O diagrama de fase ilustra como o crescimento da anisotropia de íon único no sentido negativo leva ao desaparecimento da fase mista e ao crescimento da fase vidro de spin. Na tabela 2 foram mostrados os valores críticos D_c para os quais a fase mista é suprimida, para cada valor de p . Portanto, a anisotropia aleatória de íon único mostrou-se importante para o desaparecimento da fase mista.

A solução numérica da equação (4.19) fornece as linhas de segunda ordem no plano T/J versus D/J para todos os valores do parâmetro p da anisotropia de campo cristalino. Portanto, o diagrama de fase apresentado na

figura 4.9 exibe linhas de segunda ordem para todos os valores de p . As linhas de segunda ordem partem do lado positivo de D em região de temperaturas mais altas, e à medida que o campo cristalino decresce, a temperatura crítica também diminui, passando pela temperatura do modelo puro quando $D = 0$. Este fato pode ser entendido levando em conta que $D > 0$ favorece os estados $\pm 3/2$. Assim, permite-se ordenar o sistema na fase vidro de spin. Analisando o caso $p = 0$ (todos os spins da rede estão sujeitos a ação de uma anisotropia de magnitude D), verifica-se que a linha começa na temperatura crítica dada por $T_c = 1.906566$ e o decrescimento de D corresponde também a uma diminuição da temperatura. Quando $D = 0$, a temperatura crítica é a do modelo puro de van Hemmen. Se o parâmetro p cresce (correspondendo a uma diluição no campo cristalino, que indica uma quantidade menor de spins estão sujeitos à ação desse campo), as linhas começam em temperaturas menores e decrescem com D , passando pela temperatura crítica do modelo puro de van Hemmen quando $D = 0$. O crescimento de D no sentido negativo leva a temperaturas críticas menores, tendendo a um valor constante quando $D \rightarrow -\infty$. Contrariamente, a temperatura crítica estabiliza-se em valores constantes maiores quando os valores de p aumentam. O diagrama de fase exibe transição de fase de primeira ordem dentro da fase ordenada, separando a fase $q_1 = 1/2$ e a fase $q_2 = 3/2$. Essas linhas de primeira ordem terminam em um ponto crítico.

Como perspectiva futura pode-se propor a este sistema diversas abordagens diferentes. Por exemplo, para o caso $3/2$ abordou-se somente a transição de fase entre as fases vidro de spins e a fase paramagnética. Portanto, este trabalho pode ser completado pelo estudo do diagrama de fase completo, onde exibe-se a transições de fase entre as diversas fases, isto é, ferromagnética-paramagnética, entre as fases vidro de spins-ferromagnética, a transição ferromagnética-mista e a transição vidro de spins-mista. Por outro lado, para o caso $S = 1$ e o caso $S = 3/2$, o estudo das propriedades termodinâmicas (magnetização, suscetibilidade, calor específico, etc) devem ser abordadas para refletir as propriedades dos diagramas de fases obtidos neste trabalho.

Este problema pode ser tratado, ainda classicamente, utilizando uma aproximação mais sofisticada através de simulação de Monte Carlo, grupo de

renormalização, ou mesmo em uma aproximação de campo médio tal como a de Beth-Pierls, a aproximação de pares. Uma abordagem mais realista poderia tratar o modelo quanticamente, através da Hamiltoniana de Heisenberg anisotrópica, utilizando uma das diversas aproximações de campo médio disponíveis na literatura.

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, 253 (1925).
- [7] Golden Feld, Nigel, Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group, Perseus Books, Massachusetts, 1992.
- [8] W. Heisenberg, Z. Phys. 49, 619 (1928).
- [9] Hemmen, J.L. van, (1982), Phys. Rev. Letters 49, 409.
- [10] L. Onsager, Phys. Rev. 65, 117 (1944).
- [11] Philosophical Magazine 87, No. 34, 5309(2007).
- [12] K. Wilson and J. B.Kogut, Phys. Rep. 12C 77 (1974).
- [13] P. Weiss, J. Physique 6, 661 (1907).
- [14] H.A. Bethe, Proc. Roy. Soc. London A 150, 552 (1935).

-
- [15] R. E. Peierls, Proc. Roy. Soc. (London) A-154, 207 (1936).
- [16] Cannella, V., and Mydosh, J.A., (1972), Phys. Rev. B, 6, 4220.
- [17] Edwards, S. F., and Anderson, P. W., (1975), J. Phys. F., 5, 965.
- [18] Sherrington, D., and Kirkpatrick, S., (1978), Phys. Rev. B, 17, 4384.
- [19] Almeida, J.R.L. de, and Thouless, D.F., (1978), J. Phys. A: Math. Gen, 11, n 5, 983.
- [20] Parisi, G., (1979), Phys. Rev. Letters, 23, 1754.
- [21] Nogueira, Y. ; Azevedo, J. R. V. ; Sousa, J. R. . The van Hemmen model in the presence of random field. Brazilian Journal of Physics, v. 37, n. submetido, p. 331-336, (2007).
- [22] J. Nunes da Silva, Modelo de van Hemmen anisotrópico de spin 3/2, (2007), Dissertação de Mestrado, UFAM.
- [23] P. T. Muzy, A. P. Vieira, S. R. Salinas, Physica A 359 (2006) 469-477.
- [24] Almeida, J.R.L. de, and Brady Moreira, F.G., (1986), Z. Physik B, 63, n^o 3, 365.

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](#)