



UNIVERSIDADE FEDERAL DE RORAIMA  
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

WALTER EDUARDO FERREIRA PARENTE

MODELO DE HEISENBERG ANTIFERROMAGNÉTICO COM INTERAÇÃO  
DZYALOSHINSKI-MORIYA E SUBMETIDO A CAMPO MAGNÉTICO EXTERNO

Boa Vista

2009

# **Livros Grátis**

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

Milhares de livros grátis para download.

WALTER EDUARDO FERREIRA PARENTE

MODELO DE HEISENBERG ANTIFERROMAGNÉTICO COM INTERAÇÃO  
DZYALOSHINSKI-MORIYA E SUBMETIDO A CAMPO MAGNÉTICO EXTERNO

Dissertação apresentada como  
pré-requisito para conclusão do  
Curso de Mestrado em Física.

Orientadora: Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Josefa  
T. de M. Pacobahyba.

Boa Vista

2009

#### Dados Internacionais de Catalogação-na-publicação (CIP)

P228m Parente, Walter Eduardo Ferreira.  
Modelo de Heisenberg antiferromagnético com interação Dzyaloshinski-Morya e submetido a campo magnético externo / Walter Eduardo Ferreira Parente. – Boa Vista, 2009.  
121 f. : il.

Orientadora: Profa. Dra. Josefa T. de M. Pacobahyba .  
Dissertação (mestrado) – Universidade Federal de Roraima ,  
Programa de Pós-Graduação em Física.

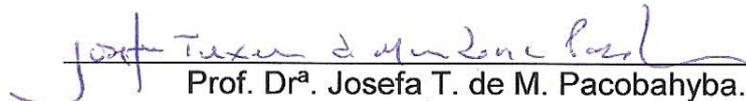
1 – Mecânica Estatística. 2 – Modelo de Heisenberg. 3 – Diagrama de fase. I Título. II – Pacobahyba, Josefa T. de M.

CDU – 531.19

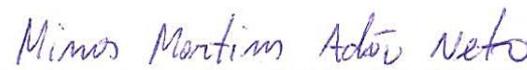
WALTER EDUARDO FERREIRA PARENTE

**MODELO DE HEISENBERG ANTIFERROMAGNÉTICO COM INTERAÇÃO  
DZYALOSHINSKI-MORIYA E SUBMETIDO A CAMPO MAGNÉTICO EXTERNO**

Monografia apresentada como pré-requisito para conclusão do Curso de Mestrado em Física da Universidade Federal de Roraima, defendida em 02 de outubro de 2009 e avaliada pela seguinte banca examinadora:

  
\_\_\_\_\_  
Prof. Dr<sup>a</sup>. Josefa T. de M. Pacobahyba. -  
Orientadora / UFRR

  
\_\_\_\_\_  
Prof. Dr. Ijanílio G. de Araújo  
UFRR

  
\_\_\_\_\_  
Prof. Dr. Mimos Martins Adão Neto  
UFAM

## AGRADECIMENTOS

Inicialmente gostaria de agradecer ao Grande Arquiteto do Universo por me iluminar e oferecer todas as ferramentas para que eu pudesse concluir mais esta etapa dos meus estudos.

Muitas são as pessoas que eu devo agradecer, mas estas são mais que especiais.

Do fundo do coração, gostaria de agradecer a minha orientadora (Josefa Pacobahyba) que incansavelmente acreditou em mim, teve uma paciência de MÃE (como era chamada por mim e meus amigos na sala do mestrado). É um exemplo de professora e orientadora.

Ao meu filho, que veio abrilhantar minha vida. Uma prova de teste no meio do Mestrado pra ver se o baixinho agüenta.

A minha esposa que ta ficando mais maluca que eu na física, por sempre me perturbar nos momentos de estudo e por me aturar nos momentos de stress.

Aos meus pais, por tudo que fizeram por mim, vocês são responsáveis pelo que sou hoje. Aos meus irmãos, por estarem sempre ao meu lado. A minha família como um todo (avós, tios, primos, etc. - é muita gente) que de alguma forma me aturaram e ajudaram nesse momento de loucura.

A todos os meus AMIGOS que convivem comigo (não citarei nomes para não cometer injustiça).

Aos colegas de Mestrado, em especial a Denise por me passar cola nas provas e estimular a fazer as listas (promessa é dívida).

Aos Professores do Programa de Mestrado em Física, que de alguma maneira contribuíram para que esse trabalho fosse concluído, em especial ao Professor Adriano por tudo o que fez por mim durante esse curso.

Ao Professor Luiz Henrique Pacobahyba, que tirou minhas dúvidas dos programas que utilizei.

A CAPES que me ajudou financeiramente (com alguns poucos atrasos) durante dois anos do curso.

E peço desculpas aqueles que por ventura me esqueci de mencionar.

## RESUMO

Neste trabalho estudaremos os diagramas de fase e os comportamentos das magnetizações total e alternada do modelo de Heisenberg antiferromagnético de spin-1/2, com interação Dzyaloshinski-Moriya e submetido a campo magnético externo, utilizando a técnica de campo médio, com o método variacional de Bogoliubov, e a técnica do operador diferencial, ambos para um aglomerado de dois spins e para uma rede cúbica simples. Utilizando a técnica de campo médio, estudamos os diagramas de fases nos planos **H-T** e **T-D** para as redes cúbicas simples ( $z=6$ ) e quadrada ( $z=4$ ), onde, quando comparamos os gráficos das redes, obteve-se resultados esperados fisicamente. Utilizando o formalismo da teoria do campo efetivo, baseado na técnica do operador diferencial, discutiremos além das propriedades termodinâmicas do sistema e os diagramas de fases, o limite de estabilidade antiferromagnética nos diagramas **H-D**, **H- $\Delta$**  e **D- $\Delta$**  no estado fundamental, onde os resultados destes foram refletidos nos gráficos das magnetizações.

## Abstract

We study the phase diagrams and the behavior of the total magnetization and staggered the Heisenberg model antiferromagnetic spin-1/2 with Dzyaloshinski-Moriya interaction and subjected to external magnetic field, using the technique of mean field with the Bogoliubov variational method, and the technique of differential operator, both for a cluster of two spins and a simple cubic network. Using the technique of mean field, we studied the phase diagrams **H-T** and **T-D** for the networks simple cubic ( $z=6$ ) and square ( $z=4$ ), which compared the results of the networks, we obtained the expected results physically. Using the formalism of effective field theory, based on a differential operator, we will discuss in addition to the thermodynamics properties of the system and the phase diagrams, the stability limit diagrams antiferromagnetic **H-D**, **H- $\Delta$**  and **D- $\Delta$**  and ground state, where the results these were reflected in the results of magnetization.

## LISTA DE FIGURAS

1.1 Ilustração esquemática de cristais ferromagnéticos em uma rede bi-dimensional.....	14
1.2 Comportamento da magnetização do níquel em função da temperatura, juntamente com a curva teórica para $S = 12$ obtida por teoria de campo médio. Os valores experimentais foram obtidos por P. Weiss e R. Forrer (1926). . . . .	15
1.3 Ilustração esquemática de alguns arranjos de spins antiferromagnéticos: a) rede cúbica simples. b) rede cúbica de corpo centrado. c) rede fcc para o caso de interação negativa entre vizinhos mais próximos. A rede fcc consiste em quatro redes cúbicas simples interpenetrantes. O vetor $\underline{r}$ liga os vizinhos mais próximos. . . . .	18
1.4 Magnetização espontânea em função da temperatura para as granadas de ferro do tipo $A_3Fe_5O_{12}$ . . . . .	19
2.1 Representação esquemática de um sistema com $N$ partículas (sistema $\Omega \cup \Omega'$ ).....	44
2.2 Topologias das redes (a) rede Kagomé, (b) quadrada, (c) triangular e (d) cúbica simples com aglomerado de dois spins.. . . .	56
3.1 Diagrama de fase no plano D-T para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) com diferentes valores de $h$ , para o modelo de Heisenberg, obtido por MFA-2. . . . .	71
3.2 Diagrama de fase com diferentes valores de $h$ , para o modelo de Heisenberg, no plano D-T para uma rede quadrada ( $z = 4$ ) obtido por MFA-2. . . . .	72
3.3 Diagrama de fase no plano H-T para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ), variando o valor da anisotropia $d$ e $\Delta = 0$ . . . . .	73
3.4 Diagrama de fase no plano H- T para uma rede quadrada ( $z = 4$ ), com vários valores de $\Delta = 0$ . . . . .	74
3.5 Comportamento da magnetização total em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores de campo externo e anisotropia DM nula ( $d = 0$ ).. . . .	76
3.6 Comportamento da magnetização total em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores de campo externo e anisotropia DM ( $d = 2$ ). . . . .	77
3.7 Comportamento da magnetização total em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores de campo externo e anisotropia DM ( $d = 3$ ). . . . .	78
3.8 Comportamento da magnetização total em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores anisotropia DM ( $D$ ) e campo externo fixo ( $h = 2$ ). . . . .	79
3.9 Comportamento da magnetização total em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores anisotropia DM ( $D$ ) e campo externo fixo ( $h = 4$ ). . . . .	80
3.10 Comportamento da magnetização total em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores anisotropia DM ( $D$ ) e campo externo fixo ( $h = 5$ ). . . . .	81
3.11 Comportamento da magnetização alternada em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores de campo externo ( $H$ ) e anisotropia DM fixa ( $d = 0$ ). . . . .	82

3.12 Comportamento da magnetização alternada em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores de campo externo ( $H$ ) e anisotropia DM fixa ( $d = 2$ ).	83
3.13 Comportamento da magnetização alternada em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores de campo externo ( $H$ ) e anisotropia DM fixa ( $d = 4$ ).	84
3.14 Comportamento da magnetização alternada em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores da anisotropia DM ( $D$ ) e campo externo fixo ( $h = 0$ ).	85
3.15 Comportamento da magnetização alternada em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores da anisotropia DM ( $D$ ) e campo externo fixo ( $h = 2$ ).	86
3.16 Comportamento da magnetização alternada em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores da anisotropia DM ( $D$ ) e campo externo fixo ( $h = 4$ ).	87
4.1 Comportamento experimental da susceptibilidade magnética em função da temperatura para o composto $\text{La}_2\text{CuO}_4$ na presença de um campo magnético externo $H = 3.0\text{T}$ (COLLINS, et. al., 1988).	92
4.2 Diagrama de fase para o composto $\text{La}_2\text{CuO}_4$ . No lado esquerdo temos o diagrama no plano $T$ - $H$ obtido através de medidas de magnetização ( $T_N = 253 \pm 0.5 \text{ K}$ , $T_t = 251.5 \pm 0.5 \text{ K}$ ). No lado direito temos o comportamento da magnetização em função da temperatura obtida ao longo da linha crítica $T_N(H)$ (SHIRANE, et. al., 1987).	93
4.3 Diagrama de fase do estado fundamental no plano $H$ - $D$ obtido por EFT-2.	98
4.4 Diagrama de fase do estado fundamental no plano $H$ - $\Delta$ obtido por EFT-2.	99
4.5 Diagrama de fase do estado fundamental no plano $D$ - $\Delta$ obtido por EFT-2.	100
4.6 Diagrama de fase no plano $D$ - $T$ para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) com diferentes valores de $h$ , para o modelo de Heisenberg, obtido por EFT-2.	101
4.7 Diagrama de fase no plano $D$ - $T$ para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) com diferentes valores de $h$ , para o modelo de Ising, obtido por EFT-2.	102
4.8 Diagrama de fase no plano $H$ - $T$ para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ), variando o valor da anisotropia $d$ e $\Delta = 0$ .	103
4.9 Diagrama de fase no plano $H$ - $T$ para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ), variando o valor da anisotropia $d$ e $\Delta = 1$ .	104
4.10 Diagrama de fase no plano $H$ - $T$ para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ), com $d = 0$ e $\Delta = 0$ , utilizando EFT-2 e MFA-2.	105
4.11 Diagrama de fase no plano $H$ - $T$ para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ), com $d = 2$ e $\Delta = 0$ , utilizando EFT-2 e MFA-2.	106
4.12 Diagrama de fase no plano $H$ - $T$ para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ), com $h = 0$ e $\Delta = 0$ , utilizando EFT-2 e MFA-2.	106
4.13 Diagrama de fase no plano $H$ - $T$ para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ), com $h = 2$ e $\Delta = 0$ , utilizando EFT-2 e MFA-2.	107
4.14 Comportamento da magnetização total em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores de campo externo ( $h$ ) e anisotropia DM ( $d = 0$ ).	108
4.15 Comportamento da magnetização total em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores de campo externo ( $h$ ) e anisotropia DM ( $d = 2$ ).	109

4.16 Comportamento da magnetização total em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores de campo externo ( $h$ ) e anisotropia DM ( $d = 3$ ). . . . .	110
4.17 Comportamento da magnetização total em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores anisotropia DM ( $d$ ) e campo externo fixo ( $h = 2$ ). . . . .	111
4.18 Comportamento da magnetização total em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores anisotropia DM ( $d$ ) e campo externo fixo ( $h = 4$ ). . . . .	112
4.19 Comportamento da magnetização total em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores anisotropia DM ( $d$ ) e campo externo fixo $h = 5$ . . . . .	113
4.20 Comportamento da magnetização alternada em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores de campo externo ( $h$ ) e anisotropia DM fixa ( $d = 0$ ). . . . .	114
4.21 Comportamento da magnetização alternada em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores de campo externo ( $h$ ) e anisotropia DM fixa ( $d = 2$ ). . . . .	115
4.22 Comportamento da magnetização alternada em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores de campo externo ( $h$ ) e anisotropia DM fixa ( $d = 3$ ). . . . .	116
4.23 Comportamento da magnetização alternada em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores de anisotropia DM ( $d$ ) campo externo fixo ( $h = 0$ ). . . . .	117
4.24 Comportamento da magnetização alternada em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores de anisotropia DM ( $d$ ) campo externo fixo ( $h = 2$ ). . . . .	118
4.25 Comportamento da magnetização alternada em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores de anisotropia DM ( $d$ ) campo externo fixo ( $h = 4$ ). . . . .	119
4.26 Comportamento da magnetização alternada em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores de anisotropia DM ( $d$ ) campo externo fixo ( $h = 5$ ). . . . .	120

## LISTA DE TABELAS

TABELA 1 - Valores da temperatura crítica TC para o modelo de Ising - 1/2 em diversas topologias de rede.(NETO, J. S. C., 2004) .....	58
TABELA 2 - Valores da temperatura crítica para os modelos clássicos e quânticos com interação F e AF numa rede cúbica simples.(NETO, J. S. C., 2004) .....	61

## SUMÁRIO

### RESUMO

### ABSTRACT

1	<b>INTRODUÇÃO</b> .....	13
1.1	Considerações Iniciais.....	13
1.2	Ordenamento Magnético.....	15
1.3	Modelagem Teórica do Magnetismo.....	22
1.4	Outras Interações.....	24
1.5	Objetivo e Apresentação do Trabalho.....	31
2	<b>TEORIAS DE CAMPO EFETIVO</b> .....	33
2.1	Considerações Iniciais.....	33
2.2	Aproximação de Campo Médio em Aglomerados Finitos.....	35
2.2.1	Aplicação da Teoria de Campo Médio no Modelo de Ising (1D).....	36
2.3	Método Variacional: Desigualdade de Bogoliubov.....	39
2.3.1	Aplicação no modelo de Ising (1D).....	41
2.4	Técnica do Operador Diferencial.....	44
2.4.1	Outras Aproximações.....	52
2.5	Outros Modelos.....	60
3	<b>MÉTODO VARIACIONAL APLICADO AO MODELO DE HEISENBERG ANTIFERROMAGNÉTICO COM INTERAÇÃO DZYALOSHINSKI-MORIYA E SUBMETIDO A CAMPO MAGNÉTICO EXTERNO</b> .....	63
3.1	Considerações Gerais.....	63
3.2	Modelo e Formalismo.....	65
3.3	Resultados.....	70
3.4	Diagramas de Fase.....	71
3.5	Magnetização Total e Alternada ( <i>Staggered</i> ).....	74
4	<b>TÉCNICA DO OPERADOR DIFERENCIAL APLICADO AO MODELO DE HEISENBERG ANTIFERROMAGNÉTICO COM INTERAÇÃO DZYALOSHINSKI-MORIYA E SUBMETIDO A CAMPO MAGNÉTICO EXTERNO</b> .....	88
4.1	Considerações Gerais.....	88
4.2	Limite de estabilidade da fase Antiferromagnética.....	96
4.2.1	Estado Fundamental ( $T = 0$ ).....	97
4.2.2	Diagramas de Fase.....	99
4.3	Magnetização Total e Alternada.....	101
5	<b>CONCLUSÕES</b> .....	121

## 1 INTRODUÇÃO

### 1.1 CONSIDERAÇÕES INICIAIS

A fascinação do homem pelo magnetismo datam do século VIII A.C.(REZENDE, 2004), desde a descoberta da magnetita, (óxido ferroso  $-Fe_2O_4$ ), que era uma pedra que tinha o "poder" de atrair pedaços de ferro. As primeiras observações que se têm notícia é que a magnetita foi encontrada na vila de Magnésia ad Sypilum, na Ásia Menor, de onde derivou o nome magneto e suas variações. Sócrates, Platão e outros, na Grécia antiga, chamaram essa pedra de "pedra de Lídia" e "pedra de Herácle", respectivamente. Petrus de Maricourt (HARMAN, 2002) foi o primeiro experimentalista que estudou os magnetos, onde identificou a existência de dois pólos, e lhes deu nomes de norte e sul, também verificou que os pólos se atraem. Ele observou que a quebra de uma dessas pedras originavam dois novos magnetos e que estes não perdiam a sua propriedade de atrair metais e que continuavam com dois pólos. Recentemente Morris et al. (2009) comprovaram experimentalmente a existência do monopolo magnético no material Titanato de Disprósio  $Dy_2Ti_2O_7$ .

O estudo sistemático do magnetismo só veio no século XVII, a partir de estudos realizados pelo cientista inglês William Gilbert, onde o mesmo tinha interesse em desvendar certas crenças da época, pois acreditava-se que os ímãs interagindo com outros materiais

poderia ter efeitos curativos no corpo humano (LEON, 1988). Contudo, no seu livro publicado em 1600, *De Magnete Magneticisque Corporibus et de Magno Magnete Tellure* (Sobre o Ímã, os Corpos Magnéticos e o Grande Ímã, a Terra), Gilbert somente descreveu as propriedades magnéticas dos ímãs e apresentou sua teoria de que a Terra se apresenta como um grande ímã.

Muitos pesquisadores investigaram as propriedades magnéticas da matéria, antes mesmo de que uma teoria adequada tivesse sido resolvida. Com o advento da mecânica quântica estas propriedades puderam ser compreendidas. Essencialmente quântico, o magnetismo em materiais se deve muito ao spin, propriedade intrínseca do elétron. É a disposição desses momentos magnéticos em um material que origina diferentes tipos de magnetismos encontrados na natureza. Os principais fenômenos magnéticos apresentados pelos diversos tipos de materiais são chamados de diamagnetismo, paramagnetismo, ferromagnetismo, antiferromagnetismo e ferrimagnetismo.

Para caracterizar o ordenamento magnético dos materiais é necessário atribuir-lhes algumas grandezas. Microscopicamente os cristais são formados por vários elétrons resultando no spin total (spin + momento angular), os quais são propriedades que podem assumir números inteiros ou semi-inteiros, segundo as regras de Hund, e portanto, em função deles, define-se nos cristais grandezas macroscópicas que os caracterizam mediante esse efeito coletivo dos momentos magnéticos. A magnetização na matéria é medida através dos momentos de dipolo  $\vec{\mu}$  ( $= -g\mu_B \vec{J}$ , onde  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ ) que os dotam, ou seja, a soma dos momentos de dipolo por unidade de volume caracteriza a magnetização, definida como

$$\vec{M} = \frac{1}{V} \left\langle \sum_i \vec{\mu}_i \right\rangle, \quad (1.1)$$

onde  $\langle \dots \rangle$  representa a média térmica. A Eq. (1.1) faz a conexão do sistema macroscópico  $\vec{\mu}_i$  para o macroscópico  $\vec{M}$ . Além da magnetização, há várias outras grandezas termodinâmicas, como por exemplo, calor específico podem ser calculadas. Experimentalmente

e teoricamente, a magnetização total caracteriza o parâmetro de ordem<sup>1</sup>, e no caso do sistema antiferromagnético o parâmetro de ordem é a magnetização alternada. Nem sempre numa transição de fase um parâmetro de ordem pode ser levado em conta. Num modelo de polímeros existe fase não-polimerizada para uma fase polimerizada não ficando caracterizado um parâmetro de ordem, ver Stilck et al. (2006) e Wheeler (1980).

Para descrever microscopicamente um sólido magnético devemos levar em conta três problemas distintos que são a natureza dos portadores de momentos magnéticos; a origem das interações entre eles e a termodinâmica do sistema constituído por um conjunto de portadores de momento magnético em interação. A interação magnética entre os momentos magnéticos existente num sólido é responsável pela ordem magnética. Falaremos agora de algumas dessas ordens magnéticas.

## 1.2 ORDENAMENTO MAGNÉTICO

· *Ferromagnetismo*: os materiais ferromagnéticos, como ferro, aço, cobalto e níquel são capazes de se tornar altamente magnéticos quando aplicado um campo magnético relativamente fraco. Eles são caracterizados por ter uma magnetização espontânea a temperaturas abaixo de uma certa temperatura crítica (temperatura de Curie -  $T_C$ ). Essa magnetização é observada mesmo na ausência de campo aplicado no material em questão. Isto nos sugere que os spins dos átomos (ou de moléculas) que constituem o material tendem a alinhar-se uns aos outros, dando origem a momentos de dipólos magnéticos altamente interagentes que se alinham paralelamente entre si. Podemos observar tal situação na ilustração esquemática na figura (1.1), no caso de uma pequena rede bi-dimensional.

Devido a sua complexidade, o entendimento dos fenômenos magnéticos intrigou os homens por mais de dois séculos depois dos trabalhos de Gilbert. Somente em 1907, Pierre Weiss (1907) elaborou uma teoria fenomenológica que era capaz de explicar qualitativa-

---

<sup>1</sup>Em 1937, Landau fez estudos sobre transição de fases contínuas. A teoria proposta apoiava-se no conceito de parâmetro de ordem, o qual hoje é amplamente utilizado na literatura, e com isto escreveu uma expansão analítica da energia livre como série de potências deste parâmetro de ordem.

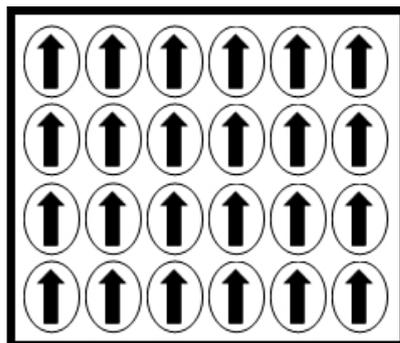


Figura 1.1: Ilustração esquemática de cristais ferromagnéticos em uma rede bidimensional.

mente o comportamento dos materiais ferromagnéticos. A magnetização espontânea que esses materiais possuem, mesmo sem a necessidade de aplicação de um campo magnético sobre eles, só ocorria abaixo de uma temperatura crítica  $T_C$ , chamada de temperatura de Curie, tornando-se nula em temperaturas maiores que a temperatura crítica, onde o material torna-se paramagnético. A teoria de Weiss postulou que cada dipolo magnético associado a um dado íon do material é influenciado por um campo magnético efetivo que é originado pelos dipolos magnéticos vizinhos. Esse campo magnético efetivo faz com que os dipolos magnéticos alinhem-se em uma mesma direção. Na figura (1.2) temos o comportamento da magnetização espontânea de um cristal ferromagnético de níquel.

Por mais que a teoria de Weiss consiga reproduzir qualitativamente várias propriedades de compostos ferromagnéticos (ex: MnSb, CrTe, CrTe, CrO<sub>2</sub>, CrBr<sub>3</sub>, EuO, EuS), do ponto de vista quantitativo ela apresenta sérias inconsistências. Por exemplo, Weiss imaginava que a energia de interação entre os momentos magnéticos no interior desses materiais era do tipo dipolo-dipolo, e que ela era responsável pelo ordenamento ferromagnético. Contudo, a energia dipolar  $\Delta E_d \simeq \frac{\mu^2}{a^3}$  ( $\mu$  é o momento magnético do íon e  $a$  é o parâmetro da rede cristalina) não explica fisicamente os altos valores da temperatura crítica. Vamos supor, utilizando o raciocínio qualitativo, que nos compostos ferromagnéticos o ordenamento dos momentos magnéticos ocorre porque a energia de interação, aqui

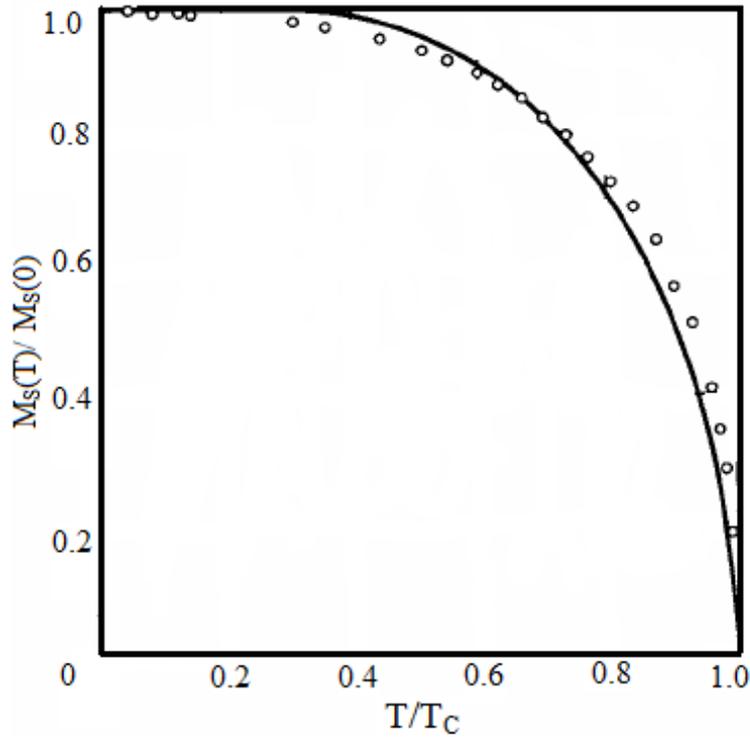


Figura 1.2: Comportamento da magnetização do níquel em função da temperatura, juntamente com a curva teórica para  $S = \frac{1}{2}$  obtida por teoria de campo médio. Os valores experimentais foram obtidos por P. Weiss e R. Forrer (1926).

representada pela energia dipolar  $\Delta E_d$ , é suficientemente maior que a energia térmica  $k_B T$  ( $k_B$  é a constante de Boltzmann), isto é,  $\Delta E_d \gg k_B T$ . Se há um aumento da temperatura, a magnetização decresce, e quando atingimos a temperatura crítica, a ordem é destruída por causa fundamentalmente da energia térmica ser da mesma magnitude de  $\Delta E_d$ , isto é,  $\Delta E_d \simeq k_B T_C$ . Se considerarmos  $\mu = \mu_B$  (magneton de Bohr),  $a \simeq \text{Å}$  e a constante  $k_B$ , a temperatura crítica fica da ordem de  $T_C \simeq 10^{-1} K$  que é bem menor que a temperatura crítica obtida experimentalmente que é da ordem de  $T_C \simeq 10^3 K$ . Logo, a origem microscópica do forte magnetismo (altos valores de  $T_C$ ) não se deve a interação magnética entre os íons nos compostos ferromagnéticos, por mais que a interação dipolar esteja sempre presente, ela é de natureza extremamente fraca e sozinha não explica o fer-

romagnetismo, por outro lado, os materiais orgânicos apresentam baixos valores para  $T_C$  o que torna a interação dipolar indispensável para descrever as propriedades magnéticas desses novos compostos (JONGH; MIEDEMA, 1974). As propriedades magnéticas têm sido associadas ultimamente aos momentos magnéticos localizados nos íons, ficando o elétron responsável pelo magnetismo, com seu momento angular intrínseco, o spin.

A explicação microscópica do magnetismo, só foi possível com o advento da mecânica quântica, em especial por Heisenberg (1928), que mostrou ser a interação forte de natureza eletrostática. Esta interação tem origem devido às restrições impostas pelo princípio de exclusão de Pauli à função de onda eletrônica total. Isso faz com que os autovalores da energia dependam das orientações relativas do spin eletrônico. Portanto, o estado fundamental do sistema é tal que os spins só podem ter uma única orientação relativa. A quantidade de energia necessária para levar o sistema para outra configuração possível é chamada de interação de troca (*exchange*)  $J$ . O valor e o sinal de  $J$  em materiais magnéticos é uma consequência direta da distribuição eletrônica dentro do material em questão. Sendo  $J$  de origem eletrostática ( $\simeq e^2/a$ ), pode-se mostrar que esta energia é forte o suficiente para explicar o campo molecular intenso na teoria de Weiss e também estimar corretamente o valor de  $T_C$ , ou seja,  $T_C \simeq e^2/k_B a \simeq 10^3 K$ . À primeira vista, parece muito estranho como uma energia de origem eletrostática faz com que os momentos magnéticos nos sólidos cristalinos (ou até amorfos) fiquem configurados numa dada direção específica. Deve-se ressaltar que, nos sólidos temos a presença de dois tipos de interações: eletrostática e dipolar, mas no forte magnetismo nos sólidos apenas a interação eletrostática é predominante. Por outro lado, existem compostos, como por exemplo a liga metálica diluída  $Eu_xSr_{1-x}S$ , que no regime de altas concentrações apresenta um ordenamento dos momentos magnéticos que caracteriza uma nova fase magnética denominada de vidro de spin, no qual a interação dipolar é fundamental para o entendimento dos resultados experimentais.

· *Antiferromagnetismo* é o fenômeno que ocorrem em materiais cujo os momentos magnéticos em média se orientam antiparalelamente (ver figura 1.3). Este ordenamento ocorre



de forma não aleatória, mas cada spin da rede cristalina interage com seus primeiros vizinhos, cujo mínimo de energia corresponde os momentos antiparalelos. O momento de dipolo magnético de cada átomo da rede cristalina tem módulo igual ao de seu vizinho mais próximo, por isso ele não possui magnetização espontânea, pois há o cancelamento mútuo dos momentos de dipolo magnético. Este tipo de ordenamento magnético ocorre em temperatura inferior a  $T_N$  (temperatura de Néel). Os compostos antiferromagnéticos mais simples são os fluoretos  $MnF_2$  [ $T_N = 75K$ ] e  $FeF_2$  [ $T_N = 90K$ ] que apresentam uma estrutura cristalina de corpo centrado, e os compostos com  $F_3$ ,  $KMnF_3$  [ $T_N = 95K$ ],  $KNiF_3$  [ $T_N = 275K$ ] e  $RbMnF_3$  [ $T_N = 82K$ ] com estrutura de *perovskita* numa rede cúbica simples. A estrutura cristalina desses antiferromagnetos consiste em duas sub-redes equivalentes  $A$  (spin *up*  $\uparrow$ ) e  $B$  (spin *down*  $\downarrow$ ) interpenetrantes, tendo cada uma um valor médio dos momentos magnéticos, que corresponde a magnetização de sub-rede, não nulo na ausência de campo externo. A interação de troca é negativa ( $J < 0$ ), isso faz com que os momentos magnéticos se orientem antiparalelamente sobre toda a rede cristalina, e na ausência de campo externo temos  $m_A = -m_B$ , que são as magnetizações das sub-redes  $A$  e  $B$ , respectivamente. Porém, existem outros compostos antiferromagnéticos que possuem estruturas constituídas por várias sub-redes como, por exemplo, os compostos magnéticos de face centrada  $MnO$  [ $T_N = 120K$ ],  $FeO$  [ $T_N = 198K$ ],  $CoO$  [ $T_N = 291K$ ] e  $NiO$  [ $T_N = 530K$ ], onde as magnetizações das sub-redes são todas colineares. Nesses compostos a susceptibilidade magnética total  $\chi_0 = \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_{H=0}$ , (onde a magnetização total a campo nulo é dada por  $M = M_A + M_B$ ) exibe um ponto de máximo na temperatura  $T_N$ , o que os diferenciam drasticamente dos ferromagnetos que em  $T = T_C$  têm uma divergência em  $\chi_0$ .

Diferente dos compostos ferromagnéticos, que têm a transição de fase destruída (não tem  $T_C$  por exemplo) quando aplicado um campo magnético externo na direção do eixo fácil da magnetização, os antiferromagnetos podem exibir diversos tipos de ordenamento magnético no diagrama de fase no plano  $T - H$ . O desenvolvimento teórico do antiferromagnetismo foi feito primeiramente por Néel (1932). Sua teoria nada mais é que a

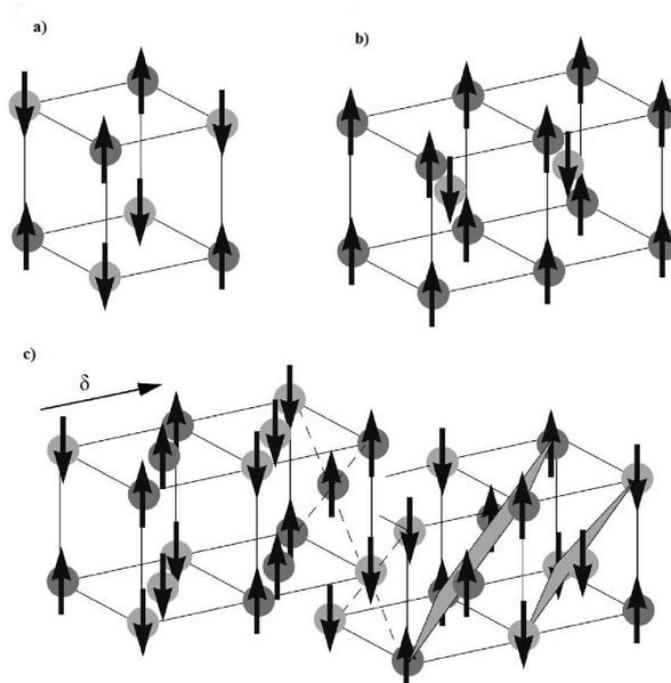


Figura 1.3: Ilustração esquemática de alguns arranjos de spins antiferromagnéticos: a) rede cúbica simples. b) rede cúbica de corpo centrado. c) rede fcc para o caso de interação negativa entre vizinhos mais próximos. A rede fcc consiste em quatro redes cúbicas simples interpenetrantes. O vetor  $\delta$  liga os vizinhos mais próximos.

aplicação da teoria do campo molecular de Weiss, onde o sistema antiferromagnético é dividido em duas ou mais sub-redes interpenetrantes.

· *Ferrimagnetismo*: Neste tipo de ordenamento, os momentos se ordenam antiparalelamente, sendo que, as magnitudes dos momentos das duas sub-redes na ausência do campo externo são diferentes, ou seja, não há compensação da magnetização, como ocorre nos antiferromagnetos ( $M_A + M_B = 0$ ). Alguns exemplos desses tipos de compostos são os constituídos metais de transição, tais como:  $MnO$ ,  $Fe_2O_3$ ,  $3Y_2O_3$ ,  $5Fe_2O_3$ . Há uma temperatura crítica  $T_C$  para os ferrimagnetos no qual  $M = M_A + M_B$  se anula, porém, mesmo antes desse valor crítico  $T_C$  temos uma temperatura de compensação  $T_{cp}$  ( $M_A = -M_B$ ) onde  $M$  também se anula, não caracterizando uma transição de fase. Para  $T > T_{cp}$ , a magnetização total cresce e à medida que a temperatura aumenta,  $M$  atinge um ponto

de máximo e decresce até finalmente se anular novamente em  $T_C$ , onde para  $T > T_C$  não temos mais ordem magnética e o sistema torna-se paramagnético. Na figura (1.4) apresentamos o comportamento da magnetização espontânea em função da temperatura para as granadas de ferro do tipo  $A_3Fe_5O_{12}$  ( $A$  é um dos elementos dos metais das terras-raras) obtidos experimentalmente por Pauthenet (1958).

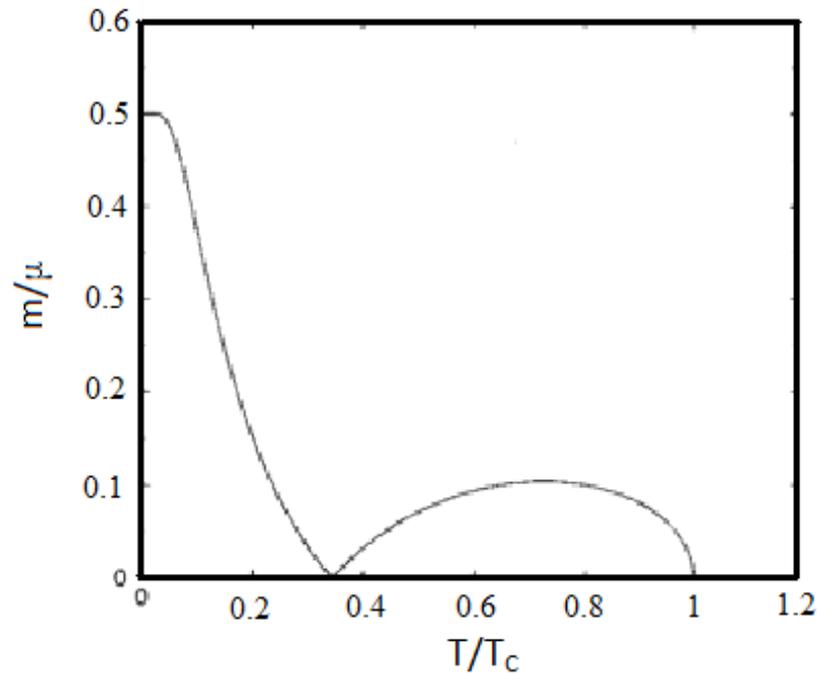


Figura 1.4: Magnetização espontânea em função da temperatura para as granadas de ferro do tipo  $A_3Fe_5O_{12}$

A susceptibilidade magnética ( $\chi$ ) é outra grandeza importante para identificar a ordem magnética do sistema, tanto teoricamente como experimentalmente. Ela é uma grandeza macroscópica que mede a resposta do material devido aos seus momentos magnéticos quando é colocado sob a ação de um campo magnético externo. Matematicamente a susceptibilidade é definida por



$$\chi^{\alpha\beta} = \frac{\partial M_\alpha}{\partial H_\beta}, \quad (1.2)$$

onde  $\chi^{\alpha\beta}$  é o elemento (tensor de ordem dois) da matriz  $\chi$ ,  $M_\alpha$  e  $H_\beta$  correspondem a componente  $\alpha = x, y, z$  da magnetização e campo magnético, respectivamente. Ao aplicarmos o campo magnético ao longo do eixo de fácil magnetização, onde só teremos única componente para o tensor susceptibilidade  $\chi$  que é expresso por

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H}. \quad (1.3)$$

As primeiras medidas experimentais da susceptibilidade foram feitas, em 1895, pelo físico francês Pierre Curie (1907). Ele mostrou que as substâncias paramagnéticas (ausência da magnetização espontânea, i.e.,  $M(T, H = 0) = 0$ ) apresentam susceptibilidade magnética à campo nulo ( $\chi_0$ ) positiva e inversamente proporcional à temperatura, conhecida como lei de Curie

$$\chi_0 = \frac{C}{T}, \quad (1.4)$$

onde  $C$  é a constante de Curie. A lei de Curie, expressa pela Eq.(1.4) é encontrada em substâncias que possuem momentos magnéticos localizados (isolantes) não interagentes (livres). Com a aplicação de um campo magnético externo  $H$ , os momentos magnéticos se acoplam energeticamente com este campo devido a energia de Zeeman ( $-\vec{\mu} \cdot \vec{H}$ ), fazendo com que esses momentos se orientem na direção de  $H$  (mínimo de energia) e desordenem devido ao ruído térmico, assim a magnetização induzida  $M(T, H)$  decrescerá com o aumento da temperatura.

Curie também estudou o comportamento da magnetização de substâncias que apresentam magnetismo espontâneo, ( $H = 0$ ), que mais tarde ficou conhecido como materiais ferromagnéticos, como função da temperatura. Ele verificou que existe uma temperatura característica, denominada temperatura de Curie ( $T_C$ ), acima da qual esses materiais ferromagnéticos se comportam como paramagnéticos (ausência de magnetização).

Analisando a susceptibilidade a campo nulo Curie verificou que esta diverge em  $T = T_C$  nos materiais ferromagnéticos segundo a lei assintótica

$$\chi_0 = \frac{C}{|T - T_C|^\gamma}, \quad (1.5)$$

onde  $\gamma$  é um expoente (crítico), praticamente constante para um dado material com mesma simetria, que caracteriza divergência da susceptibilidade na criticalidade ( $T \simeq T_C$ ).

A compreensão das origens microscópicas das propriedades magnéticas dos materiais magnéticos, a descoberta de novos materiais e fenômenos, o estudo das propriedades termodinâmicas e das excitações elementares dos materiais magnéticos, bem como o desenvolvimento de novas aplicações tecnológica, possibilitou avanços em novas tecnologias, portanto, uma melhor qualidade de vida para muitas pessoas, não só por estar ligada a grande maioria dos utensílios da vida moderna, como por exemplo a gravação magnética, que é utilizada para o armazenamento não-volátil de informações que permite regravações. Ela é essencial para o funcionamento dos gravadores de audio e vídeo, bem como de inúmeros equipamentos acionados por cartões magnéticos e tornou-se muito importante nos computadores e em algumas televisões que podem gravar programas em suas memórias internas. Também é utilizada para resolver problemas ambientais (GUENO et al., 2005), desenvolvimento de novos polímeros para a aplicação na blindagem de radiações eletromagnéticas (FAEZ, 2000), etc.

### 1.3 MODELAGEM TEÓRICA DO MAGNETISMO

Em 1928, Werner Heisenberg (1901-1976), utilizando o princípio da exclusão de Pauli e a superposição das funções de onda dos elétrons (anti-simétrica) e a energia coulombiana entre os elétrons, apresentou seu famoso modelo do ferromagnetismo (HEISENBERG, 1928) para explicar a razão de ser tão alto o campo molecular de Weiss. Ele propôs, de acordo com esse princípio, que elétrons com os mesmos números quânticos (inclusive o spin) tenderiam a permanecer afastados, enquanto os de spins diferentes se aproximavam.

Portanto, segundo esse modelo, o forte alinhamento dos spins (característica do ferromagnetismo) decorria de uma energia de troca (*exchange*) entre os spins de elétrons vizinhos. Essa energia de troca ( $J$ ), também foi proposta independentemente por Frenkel (1928) e Dorfman (1928) corresponde fisicamente a diferença de energia entre as configurações de spins paralelos (estado tripleto, que possui uma função de onda de spin simétrica) ( $\uparrow\uparrow$ ) e antiparalelos (estado singleto, que possui uma função de onda de spin antisimétrica) ( $\uparrow\downarrow$ ), isto é,  $J = E_t - E_s$ . Fazendo um cálculo simples de ordem de grandeza, podemos mostrar que a natureza da interação é eletrostática.

A energia de troca possui a propriedade de decrescer rapidamente (exponencialmente) com a distância entre os íons, diferentemente da interação coulombiana que decresce mais lentamente ( $\simeq \frac{1}{r}$ ). A razão é que  $J$  contém o produto de funções de onda de elétrons ligados em diferentes núcleos, portanto  $J$  dependerá do recobrimento (*overlap*) das funções de onda, e este *overlap* decresce exponencialmente com a distância. Desta forma, a interação de troca corresponde à uma interação de curto alcance, diferentemente da interação dipolar que é do tipo interação de longo alcance ( $\simeq \frac{1}{r^3}$ ).

Um tratamento estatístico é natural para o estudo do modelo de Heisenberg para materiais magnéticos, pois este possui um número muito grande de partículas. Alguns modelos são intratáveis analiticamente, sendo assim, aproximações numéricas são muito atraentes. Aliado a isso, com o advento de computadores de alto desempenho, simulações se tornaram uma técnica interessante para tratar tais modelos.

Na literatura, foi proposto que esse modelo possui um Hamiltoniano microscópico que descreve as propriedades físicas relevantes dos compostos magnéticos e que é dado pela seguinte expressão:

$$\mathcal{H} = - \sum_{i,j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (1.6)$$

onde  $i, j$  percorrem todos os sítios da rede,  $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$  é o operador de spin do sítio  $i$  e  $J_{ij}$  é a energia de troca entre o sítio  $i$  e outro diferente no sítio  $j \neq i$ . Se

$J_{ij} > 0$  e  $J_{ij} < 0$  corresponde a configuração dos spins paralelos (estado ferromagnético) e antiparalelos (estado antiferromagnético), respectivamente e quando  $J_{ij} = 0$ , temos um estado paramagnético. Quando os momentos magnéticos estão ajustados suficientemente, ou quando algum íon não magnético está entre os dois sítios, o Hamiltoniano (1.6) possui restrição, pois podemos desprezar as interações além dos primeiros vizinhos, assim os índices no somatório da Eq. (1.6) deve ser simbolicamente representado por  $\langle i, j \rangle$ .

Devido a não comutatividade dos operadores de spins de Pauli presentes no Hamiltoniano deste modelo, temos uma grande dificuldade no tratamento teórico e na obtenção do diagrama de fases em regiões de baixas temperaturas, que são denominadas flutuações

#### 1.4 OUTRAS INTERAÇÕES

A interação de troca é caracterizada pelo fato de ser independente da orientação dos spins, conseqüentemente o Hamiltoniano deve ser invariante por rotação de spin. Logo, o Hamiltoniano deve possuir apenas termos pares de operadores  $S_i^\nu$ , onde a forma aproximada (1.6) representa o Hamiltoniano bilinear. Vários outros termos de interação poderão ser incluídos para o verdadeiro entendimento microscópico do magnetismo, como por exemplo, o termo biquadrático

$$\hat{\mathcal{H}}_1 = - \sum_{\langle i, j \rangle} J'_{ij} \left( \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \right)^2, \quad (1.7)$$

o termo de interação antisimétrica Dzyaloshinski-Moriya (DM) (responsável pela explicação do pequeno ferromagnetismo nos materiais antiferromagnéticos),

$$\hat{\mathcal{H}}_{DM} = - \sum_{\langle i, j \rangle} \vec{D}_{ij} \cdot \left( \vec{S}_i \times \vec{S}_j \right), \quad (1.8)$$

onde  $\vec{D}_{ij} = -\vec{D}_{ji}$  é um tensor antisimétrico, interação de quatro corpos

$$\hat{\mathcal{H}}_4 = - \sum_{(i,j,l,k)} \tilde{J}_{ijkl} \left( \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \right) \left( \vec{S}_l \cdot \vec{S}_k \right), \quad (1.9)$$

etc...

A inclusão da interação DM, Eq. (1.8), no Hamiltoniano de Heisenberg ferromagnético tem induzido uma transição de fase de primeira ordem (presença de calor latente) no diagrama de fase no plano  $(T, D)$  (CORDEIRO et al., 1991; SOUSA et al., 1998; LACERDA et al., 1994). Por outro lado, analisando a inclusão no Hamiltoniano de Heisenberg antiferromagnético não é observada transição de 1ª ordem (SOUSA; GIL, 1999).

A magnitude e natureza das interações entre os momentos magnéticos dos íons que compõem o cristal é quem define o tipo de estrutura que este possui. A interação de troca, de origem eletrostática (mais o princípio da exclusão de Pauli) responsável pelo ordenamento magnético, é de natureza isotrópica, independente da direção do spin com respeito ao eixo cristalino. A energia de troca não é capaz de definir alguma orientação específica dos momentos magnéticos diferentes com respeito aos eixos cristalográficos, mas produz um ordenamento mútuo dos spins em vários sítios da rede. Fisicamente, as interações dipolar, quadrupolar, spin-órbita são responsáveis pela existência da anisotropia magnetocristalina, que se manifesta com a dependência da energia do cristal nas orientações dos momentos magnéticos dos átomos com relação ao eixo cristalino.

Um primeiro exemplo de anisotropia presente no cristal é a interação dipolar que é representada pelo seguinte Hamiltoniano

$$\mathcal{H}_{dipolar} = -4\mu_B^2 \sum_{(i,j)} \left\{ \frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - 3 \left( \hat{r}_{ij} \cdot \vec{S}_i \right) \left( \hat{r}_{ij} \cdot \vec{S}_j \right)}{r_{ij}^3} \right\}, \quad (1.10)$$

onde  $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$  é o vetor posição que separa os íons  $i$  e  $j$ ,  $\hat{r}_{ij} = \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}}$  é o vetor unitário e  $\mu_B$  o magneton de Bohr.

É importante mencionar que tanto o Hamiltoniano de Heisenberg, Eq. (1.6), como

no dipolar, Eq. (1.10), as interações spin-spin são da forma quadrática em termos dos operadores de spin  $\vec{S}_i$  e  $\vec{S}_j$  (interação bilinear). Fisicamente podemos interpretar a energia de troca como sendo a interação (acoplamento) do momento magnético  $\vec{\mu}_i = g\mu_B \vec{S}_i$  ( $\hbar \equiv 1$ ) com um campo molecular (teoria de Weiss) resultante de todos os outros momentos magnéticos vizinhos, gerando assim, um campo magnético muito intenso, da ordem de  $10^4$  *Oe*, explicando microscopicamente a origem do forte magnetismo da matéria.

O somatório da Eq.(1.10) é feito sobre todos os pares  $i$  e  $j$  de spin sobre a rede cristalina, e representa uma interação de longo-alcance. Podemos provar, devido à simetria rotacional do Hamiltoniano de Heisenberg, Eq.(1.6), que numa rede bidimensional as interações de troca bilineares entre primeiros vizinhos não são capazes de ordenar os momentos magnéticos em temperatura finita, ou seja, a magnetização espontânea é nula (MERMIN; WAGNER, 1966). A interação de longo alcance do tipo dipolar variando com a distância  $\frac{1}{r_{ij}^3}$ , presente no Hamiltoniano de Heisenberg (1.6), pode induzir ordenamento magnético em  $T > 0$  numa rede  $2d$  (SOUSA; BRANCO, 2005).

O momento magnético dos spins estão sempre associados ao magnetismo dos elementos de transição do grupo do ferro. Nos cristais formados por esses elementos, o campo cristalino geralmente remove a degenerescência orbital do estado eletrônico responsável pelo magnetismo. O valor esperado do momento orbital de um estado não degenerado é zero, (o que é chamado *quenching* do momento orbital), isto é, numa primeira aproximação a susceptibilidade estática não recebe contribuição do momento orbital. Essa contribuição somente aparece se levarmos em conta a interação spin-órbita, que é responsável pela estrutura hiperfina no espectro atômico, e é descrita pelo seguinte Hamiltoniano

$$\mathcal{H}_{\text{L.S}} = \sum_i \xi(\vec{r}_i) \vec{L}_i \bullet \vec{S}_i, \quad (1.11)$$

onde  $\xi(\vec{r}_i) = \frac{1}{2m^2 r_i} \frac{d\phi(r_i)}{dr_i}$ ,  $\phi(r_i)$  é a energia potencial elétrica entre elétrons e núcleo,  $\vec{L}_i$  e  $\vec{S}_i$  são os momentos angular e de spin, respectivamente no sítio  $i$ .

Utilizando a teoria de perturbação de segunda ordem para a energia de interação

spin-órbita, a Eq. (1.11) poderá ser reescrita na forma

$$\mathcal{H}_{\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}} = \sum_i \sum_{\alpha,\beta} \Lambda_{\alpha\beta}^i S_i^\alpha S_i^\beta, \quad (1.12)$$

sendo

$$\Lambda_{\alpha\beta}^i = 2\xi^2 \sum_{l,p} \frac{\langle p | L_i^\alpha | l \rangle \langle l | L_i^\beta | p \rangle}{E_p^0 - E_l^0}, \quad (1.13)$$

onde  $\xi^2 = \langle \xi^2 (\vec{r}_i) \rangle$  e  $E_n^0$  é o autovalor do Hamiltoniano não perturbado.

Levando em consideração as propriedades de simetria, o Hamiltoniano (1.13) pode ser reduzido. Um caso particular muito importante é o que leva apenas termos diagonais do tensor  $\Lambda_{\alpha\beta}^i = -D_i \delta_{\alpha z} \delta_{\beta z} - \Omega_i [\delta_{\alpha x} \delta_{\beta x} - \delta_{\alpha y} \delta_{\beta y}]$ , resultando assim na anisotropia ortorrômbica dada por

$$\mathcal{H}_{ion} = - \sum_i D_i (S_i^z)^2 + \sum_i \Omega_i [(S_i^x)^2 - (S_i^y)^2], \quad (1.14)$$

onde para  $\Omega_i = 0$  a Eq.(1.14) reduz-se ao caso da anisotropia uniaxial. Observe que o Hamiltoniano (1.14) representa a interação do sítio  $i$  com ele mesmo (auto-interação), que é uma consequência da interação spin-órbita, conhecida na literatura como anisotropia de íon-único. A Eq.(1.14) só é relevante para sistemas de spin  $S > \frac{1}{2}$ , pois o caso particular de spin  $S = \frac{1}{2}$  temos que  $(S_i^\nu)^2 = \frac{1}{4}$  para qualquer componente  $\nu = x, y, z$ , e conseqüentemente a Eq.(1.14) será reduzida a uma constante que pode ser desprezada nos cálculos das grandezas termodinâmicas.

A interpretação física quando incluímos a anisotropia uniaxial, dada pela Eq. (1.14), com  $\Omega_i = 0$ , no Hamiltoniano de Heisenberg, Eq.(1.6), teremos o seguinte Hamiltoniano resultante

$$\mathcal{H} = - \sum_{(i,j)} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \sum_i D_i (S_i^z)^2, \quad (1.15)$$

onde a Eq.(1.15) para o limite  $D_i = 0$  (isotrópico), as três direções espaciais  $(x, y, z)$  são energeticamente equivalentes, logo do ponto de vista da mecânica estatística as probabilidades de encontrar os spins nas três direções são iguais, resultando assim  $\langle S_i^x \rangle = \langle S_i^y \rangle = \langle S_i^z \rangle$  e  $\langle S_i^x S_j^x \rangle = \langle S_i^y S_j^y \rangle = \langle S_i^z S_j^z \rangle$ . Essa isotropia é quebrada devido a presença do segundo termo na Eq.(1.15). A anisotropia uniaxial em conjunto com o modelo de Ising foi discutido por Blume e Capel, e hoje é conhecido na literatura como **modelo Blume-Capel**, para descrever o comportamento da mistura de  $He^3 - He^4$ . Na região da anisotropia positiva ( $D_i > 0$ ), interpretamos que a direção axial (eixo  $z$ ) é probabilisticamente mais favorecida com  $\langle S_i^z \rangle > \langle S_i^x \rangle = \langle S_i^y \rangle$  e  $\langle S_i^z S_j^z \rangle > \langle S_i^x S_j^x \rangle = \langle S_i^y S_j^y \rangle$ .

Na transição de fase, por exemplo ferromagnética-paramagnética, à medida que aumentamos o valor da anisotropia  $D_i = D > 0$ , a temperatura crítica  $T_c(D)$  cresce, pois a magnetização axial  $M_z \equiv \langle S_i^z \rangle$  fica agora mais forte devido ao termo de íon-único  $D$  que favorece ainda mais a direção axial. Dizemos que para  $D > 0$  o sistema tem a classe de universalidade do modelo de Ising (expoentes críticos Ising e não temperatura crítica). No limite  $D \rightarrow \infty$ , apenas os estados  $-S$  e  $S$  do operador  $S_i^z$  são energeticamente favorecidos e temos assim um sistema com dois estados apenas interagindo axialmente, que corresponde fisicamente ao modelo de Ising de spin  $\frac{1}{2}$ . Teoricamente, todos os compostos magnéticos isolantes são descritos pelo Hamiltoniano de Heisenberg, porém devido ao forte acoplamento spin-órbita, que microscopicamente é mapeado pela anisotropia de íon-único, Eq. (1.14), podemos para o caso  $\Omega_i = 0$  e  $D_i = D > 0$  aproximar o sistema axial por um modelo de Ising com uma única componente nas direções dos spins.

Quando temos  $D_i < 0$  na Eq. (1.15) a direção axial torna-se agora "enfraquecida" energeticamente, o que resulta em  $\langle S_i^z \rangle < \langle S_i^x \rangle = \langle S_i^y \rangle$  e  $\langle S_i^z S_j^z \rangle < \langle S_i^x S_j^x \rangle = \langle S_i^y S_j^y \rangle$ . A temperatura crítica, neste caso, na qual  $M_z$  tende a zero diminui gradualmente à medida que  $D < 0$  diminui. Ao contrário do caso  $D > 0$ , onde os spins preferem se orientar axialmente, no caso  $D < 0$  os spins tendem ao plano **XY**, podemos associar este regime à classe de universalidade do modelo **XY**. Essa análise qualitativa nos dá as temperaturas críticas para os modelos de Ising (**I**), XY e Heisenberg (**H**) satisfazendo a

seguinte desigualdade:  $T_C(I) > T_C(XY) > T_C(H)$ .

Através de um método aproximativo podemos reproduzir teoricamente os três limites dos modelos de Ising, XY e Heisenberg isotrópico, podemos aproximar nosso sistema para um modelo particular, em que numa forma matemática escrevemos o seguinte Hamiltoniano efetivo de spin na forma generalizada

$$\mathcal{H} = - \sum_{(i,j)} J_{ij} (\eta_x S_i^x S_j^x + \eta_y S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z), \quad (1.16)$$

onde  $\eta_\nu \in [0, 1]$  é o parâmetro de anisotropia da componente  $\nu = x, y$  da interação dos spins. Esse Hamiltoniano (1.16) é conhecido na literatura como o modelo de Heisenberg anisotrópico e reduz-se a casos particulares dos modelos de Ising ( $\eta_x = \eta_y = 0$ ), XY ( $\eta_x = 0$  e  $\eta_y = 1$  ou  $\eta_x = 1$  e  $\eta_y = 0$ ) e Heisenberg isotrópico ( $\eta_x = \eta_y = 1$ ). Com esse modelo também podemos certificar a potencialidade dos métodos aproximativos neste sistema quântico, analisando uma rede bidimensional e verificar o teorema de Mermin e Wagner (1966) no limite isotrópico ( $\eta_x = \eta_y = 1$ ) que garante a ausência de ordem de longo-alcance em  $T > 0$ , ou seja,  $T_C = T_N = 0$ . Resumidamente, o teorema de Mermin e Wagner é expresso através das seguintes desigualdades

$$|M(T, H)| \leq \begin{cases} \left[ \frac{\pi^2 \beta^2 W}{t g^{-1} \sqrt{\frac{\pi^2 W S(S+1)}{|M(T, H)|}}} \right]^{\frac{1}{3}} S(S+1) |H|^{\frac{1}{3}} & \text{para } d = 1 \\ \left[ \frac{4\pi\beta W}{\log \left[ 1 + \frac{\pi^2 W S(S+1)}{|H| |M(T, H)|} \right]} \right]^{\frac{1}{2}} S(S+1) & \text{para } d = 2, \end{cases} \quad (1.17)$$

onde  $W = \sum_{(\mathbf{r}, \mathbf{r}')} |J(\mathbf{r} - \mathbf{r}')| |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2 < \infty$ ,  $S$  é a magnitude do spin e  $H$  o campo magnético externo. No limite de campo nulo ( $H = 0$ ) das desigualdades (1.17) vemos que  $M(T, 0) = 0$ , não apresentando ordem de longo alcance para  $T > 0$ . Para interação  $J(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  variando entre os primeiros vizinhos ou decaindo exponencialmente  $e^{-\alpha|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$  a condição  $W < \infty$  é satisfeita e o teorema de Mermin e Wagner é aplicado. Se admitirmos uma interação de longo-alcance do tipo  $J(r) = \frac{J}{r^p}$ , fica fácil mostrar que  $W < \infty$  se

e somente se  $p > d + 2$ , onde  $d$  é a dimensão, e portanto é o limite de aplicabilidade do teorema de Mermin e Wagner. Para  $p < d + 2$  observa-se que  $W \rightarrow \infty$ , e do teorema de Mermin e Wagner nada podemos afirmar sobre a existência ou não de ordem de longo-alcance. Recentemente, esse teorema foi generalizado por Bruno (2001) para incluir interação de longo-alcance, e foi provado que para  $p \geq 2d$  ( $d = 1, 2$ ) o modelo de Heisenberg isotrópico não apresenta ordem de longo alcance a  $T > 0$ , e para  $d < p < 2d$  temos presença de uma transição de fase em temperatura finita  $T_C(p) \neq 0$ .

Por outro lado, modelos quânticos (e também clássicos)  $d$  (1, 2) dimensional com interação de longo alcance antiferromagnética têm sido pouco explorados, e não existe teorema afirmando a existência ou ausência de ordem antiferromagnética para  $d < p < 2d$ . Para o limite de spin clássico, o modelo de Heisenberg  $\mathbf{F}$  e  $\mathbf{AF}$  são equivalentes, e tem sido estudado para o caso  $d = 1$  por Frohlich e colaboradores (1978), que verificaram uma ordem antiferromagnética na região  $1 < p < 2$ . Motivado pelo fato de resultados no modelo de Heisenberg antiferromagnético quântico com interação de longo alcance, Pacobahyba *et al.* (2004) analisaram uma cadeia frustrada com interação do tipo  $J_n = (-1)^n / n^p$  ( $n = 1, 2, \dots, \infty$ ) usando o formalismo da função de Green dependente de dois tempos e da temperatura, predizendo uma desordem orientacional em toda temperatura finita ( $T_N = 0$ ) para  $p = 1$  em contraste com as conjecturas de Rabin (1980), que indica uma possível transição de fase em  $p = 1.85$ , onde o modelo foi estudado em  $T = 0$  por grupo de renormalização no espaço real.

Na maioria das vezes esses resultados rigorosos são relevantes, pois certificam a potencialidade de uma dada aproximação, haja visto não podermos resolver de forma exata o Hamiltoniano (1.16) para  $d \geq 2$ . Geralmente essas teorias não reproduzem o teorema de Mermin e Wagner, por isto é adequada apenas para descrever a termodinâmica e criticalidade (diagrama de fase) de modelos com alta dimensionalidade ( $d = 3$ ), que para o caso da aproximação de campo médio esta é exata para dimensão crítica superior ou igual a 4.



## 1.4 OBJETIVO E APRESENTAÇÃO DO TRABALHO

Nesse trabalho temos como objetivo obter os diagramas de fase e a magnetização do modelo de Heisenberg quântico antiferromagnético de spin  $1/2$  anisotrópico com interação Dzyaloshinski-Moriya ( $DM$ ) e campo magnético externo ( $H$ ). Vamos abordar tal modelo utilizando a teoria de campo médio (*mean field approximation* - **MFA**) e a técnica do operador diferencial (*Effective Field Theory* - **EFT**), na tentativa de elucidar o comportamento crítico.

No capítulo 2, iremos abordar os aspectos gerais da aproximação de campo médio (Teoria de Weiss e método variacional de Bogoliubov) e a técnica do operador diferencial. Desenvolveremos os dois métodos para aglomerados ("clusters") finitos e aplicados em sistemas clássicos (Ising) e quântico (Heisenberg).

No Capítulo 3, aplicaremos um método variacional baseado na aproximação de campo médio em aglomerado com dois spins (a desigualdade de Bogoliubov), nos modelos de Ising e Heisenberg aqui proposto para obter a transição de fase. Os diagramas de fase nos planos  $(T, H)$  e  $(T, D)$  serão obtidos e comparados aos resultados obtidos por Bublitz (2003) (quando  $D = 0$ ) e por Sousa (1999) (quando  $H = 0$ ).

No Capítulo 4, a técnica do operador diferencial em aglomerados com dois spins ( $N = 2$ ) será aplicado para tratar o modelo de Heisenberg proposto onde iremos obter os diagramas de fase nos planos  $(T, H)$  e  $(T, D)$ . Faremos, então, as comparações com os resultados obtidos por teoria de campo médio, tanto para o modelo de Ising como para o modelo de Heisenberg descritos no Cap. 3.

Faremos, nesse trabalho de dissertação, a análise do diagrama de fase nos planos  $(T, H)$  e  $(T, D)$  do modelo de Heisenberg quântico de spin  $1/2$  anisotrópico com interação Dzyaloshinski-Moriya e campo magnético externo onde aplicaremos os métodos **MFA-2** e **EFT-2**, e que não dispomos na literatura nenhum resultado para elucidar o comportamento crítico de tal sistema. Os únicos resultados disponíveis na literatura são os obtidos por Bublitz (2003) (quando  $D = 0$ ) e por de Sousa (1999) (quando  $H = 0$ ), mas não há resultados encontrados utilizando a interação **DM** e o campo magnético

externo aplicados em tal modelo.

Finalmente no capítulo 5 apresentamos nossas conclusões e considerações finais.



## 2 TEORIA DE CAMPO EFETIVO

### 2.1 CONSIDERAÇÕES INICIAIS

A mecânica estatística tem como objetivo explicar as leis e os resultados da Termodinâmica para os sistemas físicos utilizando as equações de movimento clássicas ou quânticas. Para um sistema físico com um grande número de partículas interagentes, com grau de liberdade da ordem do número de Avogadro ( $N \approx 6.10^{23}$ ), é quase que impossível estabelecer determinadas condições iniciais para o sistema, pois temos aproximadamente  $10^{23}$  partículas por mol em um cubinho com parâmetro de rede da ordem de um Angstrom (BUBLITZ, 2003). Isto mostra que temos aproximadamente  $10^{24}$  equações para resolver. Utilizando supercomputadores, resolvendo tais equações com uma taxa de um milhão de equações por segundo, seriam necessários aproximadamente  $10^{11}$  anos para que chegássemos a uma solução final, tornando assim, as equações de movimento obsoletas.

Seja a função de partição  $Z = Tr e^{-\beta E_i}$ , onde  $e^{-\beta E_i}$  é proporcional ao peso estatístico para o estado da partícula,  $Tr$  representa o funcional traço,  $\beta = (k_B T)^{-1}$  ( $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $T$  a temperatura absoluta) e  $E_i$  é a energia de um determinado sistema  $i$ . O objetivo da mecânica estatística é calcular esta soma sobre todos os estados acessíveis ao sistema, ou seja, devemos efetuar o somatório



$$\mathcal{Z} = \text{Tr} e^{-\beta\mathcal{H}} = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta E\{\sigma_i\}}. \quad (2.1)$$

Na obtenção da função de partição para um sistema de  $N$  partículas, temos na função de partição o funcional  $\text{Tr}$  que representa matematicamente uma soma sobre  $(2N + 1)^N$  configurações de spin. Tentando eliminar as flutuações estatísticas ( $\sim N^{-\frac{1}{2}}$ ) a mecânica estatística de equilíbrio analisa o sistema no limite termodinâmico ( $N \rightarrow \infty$ ). Sabendo que, para um sistema de partículas interagentes apresentar uma transição de fase, é necessário estarmos no limite termodinâmico<sup>1</sup> (NETO, 2004).

Partindo da função de partição, podemos calcular todas as propriedades térmicas do modelo considerado, uma vez que nos permite calcular a energia livre de Helmholtz, que é denominada função canônica, e que faz a conexão entre a termodinâmica e a mecânica estatística que é dada por

$$F = -k_B T \ln \{Z\}. \quad (2.2)$$

Da energia livre, podemos calcular duas grandezas termodinâmicas importantes para identificar a ordem magnética de um sistema, tanto do ponto de vista teórico como experimental. A primeira grandeza é a magnetização ( $M$ ), que é a soma de todos os momentos magnéticos elementares dividido pelo volume que ocupa (grandeza intensiva), e é dada por

$$M = \frac{1}{V} \left\langle \sum_i \vec{\mu}_i \right\rangle. \quad (2.3)$$

Partindo da magnetização, podemos calcular uma outra grandeza, a suscetibilidade magnética ( $\chi$ ), que é a grandeza que caracteriza um material magnético segundo sua resposta a um campo magnético aplicado, e é dada por

---

<sup>1</sup>O Teorema de Yang e Lee fala que a condição (necessária, mas não suficiente) para existência de uma transição de fase é no limite termodinâmico, tendo em vista que em sistemas unidimensionais com interação de curto alcance não apresentam ordem de longo alcance  $T_c = 0$ .

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H}. \quad (2.4)$$

Poucos são os modelos estatísticos que apresentam cálculos exatos de suas grandezas termodinâmicas. Alguns métodos aproximativos, como a aproximação de campo médio e a técnica do operador diferencial, são muito utilizados para se ter uma primeira avaliação do comportamento de alguns sistemas. Alguns exemplos onde esses métodos obtêm bons resultados qualitativos para uma primeira análise, são o modelo de Ising (1d) com campo, modelo de Ising (2d) sem campo e o modelo n-vetorial (1d) sem campo.

Em 1945, Onsager apresentou o primeiro modelo que admitia transição de fase ( $T_C \neq 0$ ). Ele mostrou que a temperatura crítica é dada por  $2k_B T_C = J/\ln(\sqrt{2} + 1)$ . Antes de Onsager, Kramers e Wannier (1941), Rushbrooke (1938), Pierls (1936), Bethe (1935) e Bragg e Williams (1934) já haviam obtidos resultados que contrariavam a previsão de Ising, ou seja, que a temperatura crítica não seria nula. Para uma revisão histórica sobre o modelo de Ising, ver Smart (1966).

Para se obter a solução exata do problema, é preciso calcular a soma sobre todas as configurações  $\{\sigma_i\}$  de estado para (2.1) (função canônica), o que nem sempre é possível. Isso motivou ao desenvolvimento de técnicas aproximativas para se obter a termodinâmica dos mais variados modelos, na intenção de contornar tal impossibilidade.

## 2.2 APROXIMAÇÃO DE CAMPO MÉDIO EM AGLOMERADOS FINITOS

A função de partição  $\mathcal{Z}$  é o ponto de partida teórico da mecânica estatística. Para sistemas de partículas interagentes, poucos são os modelos solúveis exatamente. Para tentar obter resultados qualitativos, o caminho mais fácil é utilizar as aproximações de campo efetivo. A aproximação de campo médio ("*mean field approximation*"-MFA) foi a primeira teoria que descreveu qualitativamente a transição de fase no ferromagneto. Nos

dias de hoje, **MFA** tem sido amplamente aplicada em vários sistemas complexos, para encontrar os primeiros resultados, que serão mais bem elaborados para estudos futuros, onde os métodos numéricos como, por exemplo, Monte Carlo e expansão em séries são aplicados. Por outro lado, devido a natureza quântica do modelo de Heisenberg, os métodos rigorosos têm resultados preliminares para alguns limites particulares, como por exemplo o sistema com interação ferromagnética em três dimensões.

### 2.2.1 APLICAÇÃO DA TEORIA DE CAMPO MÉDIO NO MODELO DE ISING (1D)

Apresentaremos a partir de agora o comportamento crítico do modelo de Ising através de aproximações de campo médio. O modelo de Ising (ISING, 1925) é uma poderosa ferramenta para a modelagem de um sistema físico real e tem sua validade julgada pela extensão de sua aplicabilidade e concordância com as observações experimentais. O modelo foi proposto por Wilhwlm Lenz ao seu aluno de doutorado Ernst Ising, inicialmente, em 1925 com o objetivo de estudar o ferromagnetismo de momentos localizados. Trata-se de um modelo paradigmático da mecânica estatística, em parte porque foi um dos primeiros a aparecer, mas sobretudo porque é um dos poucos modelos úteis (não só pedagogicamente) que tem solução analítica exata (isto é, sem cálculos aproximados). Isto lhe faz muito útil para ensinar novos tipos de aproximações e logo comparar com o resultado real.

Considere agora dois átomos vizinhos  $i$  e  $j$ , no ferromagnetismo existe uma certa tendência de que os spins  $S_i$  e  $S_j$  se orientam no mesmo sentido. Tal tendência está associada a uma constante de acoplamento  $J > 0$ . Ademais o comportamento do sistema é fundamentalmente influenciado pela temperatura  $T$  (por conveniência também podemos considerar o inverso da temperatura  $\beta = 1/k_B T$ , em que  $k_B$  é a constante de Boltzmann), pelo campo magnético externo  $H$ , e pelas condições de contorno (cc), impostas ao sistema.

No modelo clássico de Ising com dois estados (spin- $\frac{1}{2}$ ), a aproximação de campo médio é dada pelo seguinte Hamiltoniano



$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j, \quad (2.5)$$

onde  $\langle ij \rangle$  denota a soma sobre os primeiros vizinhos ( $z$ ) e  $J$  indica o parâmetro de interação de intercâmbio. Vamos apenas analisar o sistema ferromagnético ( $J > 0$ ).

A aproximação de campo médio para um aglomerado de um spin pode ser entendida imaginando que o spin  $S_i$  no Hamiltoniano (2.5) interage com os seus primeiros vizinhos através de uma média, e, portanto podemos escrever o seguinte Hamiltoniano aproximado

$$\mathcal{H}_1 = -J \sum_i S_i \left\langle \sum_{\vec{\delta}} S_{i+\vec{\delta}} \right\rangle, \quad (2.6)$$

onde

$$\left\langle S_{i+\vec{\delta}} \right\rangle = m, \quad (2.7)$$

Aplicando (2.7) em (2.6), obtemos

$$\mathcal{H}_1 = -zJm \sum_i S_i, \quad (2.8)$$

onde  $m = \langle S_i \rangle \equiv \left\langle \frac{1}{N} \sum_i S_i \right\rangle$  representa o parâmetro de ordem (magnetização por spin) do sistema, e  $z$  o número de coordenação. Estamos adotando  $\mathcal{H}_1$  o Hamiltoniano na aproximação de campo médio para um aglomerado  $N = 1$  spins (**MFA-1**).

Da Eq. (2.1), a função de partição fica

$$\mathcal{Z} = [2 \cosh(\beta z J m)]^N. \quad (2.9)$$

A magnetização é dada por

$$m = \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial (\beta z J m)} = \tanh(z K m). \quad (2.10)$$

onde  $K = \beta J$ .

Um estudo sistemático do aumento dos aglomerados no esquema **MFA** foi realizado por Suzuki e Katori (1986) para calcular a temperatura crítica do modelo de Ising numa rede quadrada. Sugeriram que o limite do tamanho do aglomerado ( $N$ ) infinito a temperatura crítica converge para a solução de Onsager. Para melhor ilustrar esta convergência de  $T_C$ , vamos desenvolver **MFA** em aglomerado com dois spins (**MFA-2**), designada na literatura de aproximação de Oguchi [ver Smart (1966)], onde o Hamiltoniano de Ising (2.5) é escrito na forma aproximada por

$$\mathcal{H}_2^{\text{MFA}} = -J\sigma_1\sigma_2 - J(z-1)m(\sigma_1 + \sigma_2), \quad (2.11)$$

sendo o último termo a soma das médias realizadas aos redores dos spins  $\sigma_1$  e  $\sigma_2$  pertencentes ao aglomerado, excluindo o par da interação, e  $m = \langle \frac{1}{2}\sigma_1 + \sigma_2 \rangle$  é a magnetização por spin nesta aproximação dada por

$$m = \frac{\sinh [2K(z-1)m]}{\cosh [2K(z-1)m] + e^{-2K}}, \quad (2.12)$$

com  $K = \beta J$ .

No limite  $m \rightarrow 0$  na Eq. (2.12) obtemos a temperatura crítica dada pela expressão

$$\frac{2(z-1)}{T_C} = 1 + \exp\left(\frac{-2}{T_C}\right), \quad (2.13)$$

com o resultado espúrio  $T_C \neq 0$  para cadeia linear ( $z = 2$ ). No caso da rede quadrada ( $z = 4$ ) encontramos  $T_C = 3.893$ , distante, ainda, do resultado exato  $T_C = 2.269$ . Aumentando ainda mais os aglomerados, mas mantendo a simetria da rede quadrada, Suzuki e Katori encontraram  $T_C = 3.125; 2.915; 2.748; 2.679; 2.631$  e  $2.575$  para  $N = 9, 21, 45, 69, 99$  e  $148$  spins, respectivamente, mostrando uma pequena convergência em direção ao resultado exato  $T_C = 2.269$ , como grande empecilho do aumento do tempo computacional.

Todas as teorias de campo efetivo (**MFA** e **EFT**, por exemplo) têm em comum uma



expressão auto-consistente para o parâmetro de ordem do tipo  $m = \Psi(m, T)$ , e que ao redor da criticalidade os expoentes críticos são universais (clássicos) independentes da dimensão espacial ( $d$ ) e da simetria do Hamiltoniano, contradizendo assim as experiências em compostos magnéticos (classe de universalidade). Uma alternativa para encontrar valores não clássicos de expoentes críticos, mas mantendo a idéia de **MFA**, foi apresentada por Suzuki (1995) quando propôs o formalismo **CAM** (*Coherent Anomaly Method*) e que tem sido aplicado numa série de modelos.

A Eq (2.10) foi obtida por Weiss, porém de forma diferente, onde usou apenas análise qualitativa do campo molecular  $\lambda (= zJ)$  não podendo explicar na época a razão física do grande valor de  $\lambda$ . No limite  $m \rightarrow 0$ , da Eq.(2.10) obtemos  $\frac{k_B T_C}{J} = z$ , que para uma rede unidimensional ( $z = 2$ ) prevê ordem de longo alcance ( $m \neq 0$ ) para  $T < T_C = 2 \frac{J}{k_B}$ , em contradição como resultado exato que mostra  $T_C = 0$ . Para uma rede quadrada ( $z = 4$ ) obtemos  $\frac{k_B T_C}{J} = 4.0$  que difere do resultado exato de Onsager (1944)  $\frac{k_B T_C}{J} = 2.262$ .

### 2.3 MÉTODO VARIACIONAL: DESIGUALDADE DE BOGOLIUBOV

Uma forma muito simples e elegante de aplicar a aproximação de campo médio é utilizar o princípio variacional baseado na desigualdade de Bogoliubov (FALK, 1970), que abordaremos a seguir.

Todo sistema físico possui uma energia livre mínima que é denominada energia livre de Helmholtz, e utilizando a desigualdade de Bogoliubov, estabelece-se um limite superior para essa energia. Esse método não faz restrições quanto a sistemas clássicos ou quânticos (estatisticamente falando). Para provar tal afirmação, consideremos um sistema dado por um Hamiltoniano  $\mathcal{H}$ , que pode ser dividido em duas partes: uma parte solúvel dada por um Hamiltoniano  $\mathcal{H}_0$  e uma não solúvel dada por um Hamiltoniano  $\mathcal{H}_1$ , assim,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{H}_1, \quad (2.14)$$

onde  $\lambda$  é um parâmetro variacional. Como a operação de mínimo corresponde a uma



transformada de Legendre, assim a conexão entre o ensemble canônico e a termodinâmica é a energia livre de Helmholtz  $Z(T, V, N)$  tornando o limite  $V, N \rightarrow \infty$  e  $v = V/N$  fixo. A energia livre de Helmholtz correspondente a  $\mathcal{H}$  é  $\mathcal{F}(\mathcal{H})$ , e é dada por:

$$\mathcal{F}(\mathcal{H}) = -k_B T \ln(\mathcal{Z}), \quad (2.15)$$

onde  $\mathcal{Z}$  é a função de partição do sistema, dada pela Eq. (2.1).

Das Eqs. (2.1), (2.14) e (2.15), obtemos:

$$\mathcal{F}(\mathcal{H}) = -k_B T \ln [Tr (e^{-\beta(\mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{H}_1)})]. \quad (2.16)$$

Estudaremos agora a dependência da energia livre de Helmholtz em  $\lambda$ . A primeira derivada da Eq. (2.16) é dada por

$$\frac{\partial \mathcal{F}(\mathcal{H})}{\partial \lambda} = \frac{\partial}{\partial \lambda} [-k_B T \ln(\mathcal{Z})] = \langle \mathcal{H}_1 \rangle. \quad (2.17)$$

A segunda derivada é dada por

$$\frac{\partial^2 \mathcal{F}(\lambda)}{\partial \lambda^2} = \frac{1}{\mathcal{Z}^2} (-\beta Tr \mathcal{H}_1 e^{-\beta \mathcal{H}}) - \beta \frac{Tr \mathcal{H}_1^2 e^{-\beta \mathcal{H}}}{\mathcal{Z}} \quad (2.18)$$

$$\frac{\partial^2 \mathcal{F}(\lambda)}{\partial \lambda^2} = -\beta (\langle \mathcal{H}_1^2 \rangle - \langle \mathcal{H}_1 \rangle^2) = -\beta \langle (\mathcal{H}_1 - \langle \mathcal{H}_1 \rangle)^2 \rangle, \quad (2.19)$$

que é o ponto de máximo.

Consequentemente, um gráfico de  $\mathcal{F}(\lambda)$  em função de  $\lambda$  é sempre côncavo. Podemos definir um funcional (série de Taylor) em relação a  $\lambda$ , que para pequenos valores de  $\lambda$  teremos

$$\Phi(\lambda) = \mathcal{F}(\lambda = 0) + \lambda \left( \frac{d\mathcal{F}(\mathcal{H})}{d\lambda} \right)_{\lambda=0} + \dots, \quad (2.20)$$

onde



$$\mathcal{F}(\lambda = 0) = \mathcal{F}_0 = -k_B T \ln \mathcal{Z}_0, \quad (2.21)$$

que é a energia livre do Hamiltoniano solúvel  $\mathcal{H}_0$ , portanto

$$\Phi(\lambda) \leq \lambda \langle \mathcal{H}_1 \rangle_0 + \mathcal{F}_0, \quad (2.22)$$

ou ainda, com a Eq. (2.14), fica

$$\Phi(\lambda) = \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 + \mathcal{F}_0, \quad (2.23)$$

onde  $\mathcal{H}_0$  é Hamiltoniano aproximado (Hamiltoniano tentativa) escrito numa forma variável em função do parâmetro variacional  $\lambda$ , e  $\langle \dots \rangle_0$  significa uma média térmica que deve ser tomada em relação a uma distribuição canônica associada ao Hamiltoniano  $\mathcal{H}_0$ .

A Eq.(2.23) caracteriza o limite superior para a energia mínima, portanto temos que escrever (2.23) como

$$\mathcal{F}(\mathcal{H}) \leq \Phi(\lambda) = \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 + \mathcal{F}_0. \quad (2.24)$$

A energia livre de campo médio é então determinada minimizando-se  $\Phi$  em relação ao parâmetro  $\lambda$ .

$$\mathcal{F}_{CM} = \frac{\partial \Phi}{\partial \lambda}. \quad (2.25)$$

Isso fornece a melhor aproximação possível da verdadeira energia livre para uma dada escolha de  $\mathcal{H}_0$ , de acordo com (2.24).

### 2.3.1 APLICACÃO NO MODELO DE ISING (1D)

Geralmente, a escolha de  $\mathcal{H}_0$  é a de um Hamiltoniano sem interação entre spins de modo a permitir o cálculo do primeiro membro da Eq. (2.24). Como exemplo, consideramos o Hamiltoniano



$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - H \sum_i S_i. \quad (2.26)$$

Considerando  $H = 0$  (campo nulo), temos que o Hamiltoniano (2.26) fica

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j. \quad (2.27)$$

O Hamiltoniano aproximado que vamos considerar é dado por

$$\mathcal{H}_0 = -\lambda \sum_i S_i, \quad (2.28)$$

onde  $\lambda$  é denominado parâmetro variacional.

A energia livre  $\mathcal{F}_0$  correspondente ao Hamiltoniano (2.26) é facilmente calculada, e é dada por

$$\mathcal{F}_0 = -k_B N T \ln [2 \cosh(\beta \lambda)]. \quad (2.29)$$

Das Eqs. (2.27) e (2.28), temos

$$\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle = \left\langle -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + \lambda \sum_{ij} S_i \right\rangle_0 = -J \sum_{\langle ij \rangle} \langle S_i S_j \rangle_0 + \lambda \sum_{ij} \langle S_i \rangle_0. \quad (2.30)$$

Uma vez que  $\mathcal{H}_0$  é um Hamiltoniano não interagente, a média  $\langle S_i S_j \rangle_0$  será desacoplada, isto é,

$$\langle S_i S_j \rangle_0 = \langle S_i \rangle_0 \langle S_j \rangle_0, \quad (2.31)$$

e para sistemas com invariância translacional temos

$$\langle S_i \rangle_0 \langle S_j \rangle_0 = m^2, \quad (2.32)$$

onde  $m$  é o parâmetro de ordem (magnetização por spin). Portanto, usando os resultados das Eqs.(2.31) e (2.32), a Eq.(2.30) ficará reescrita da seguinte forma

$$\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle = -\frac{NzJ}{2}m^2 + \lambda Nm. \quad (2.33)$$

Assim, o funcional  $\Phi(\lambda)$  por spin é dado por

$$\Phi(\lambda) = \frac{\phi(\lambda)}{N} = -\frac{1}{\beta} \ln [2 \cosh(\beta\lambda)] - \frac{zJ}{2}m^2 + \lambda m. \quad (2.34)$$

Minimizando  $\Phi(\lambda)$  em relação a  $\lambda$ , obtemos

$$\frac{\partial \Phi(\lambda)}{\partial \lambda} = 0 \rightarrow -\tanh(\beta\lambda) + m = 0, \quad (2.35)$$

ou seja,

$$m = \tanh(\beta\lambda). \quad (2.36)$$

Agora, minimizando  $\Phi(\lambda)$  em relação a  $m$  temos

$$\frac{\partial \Phi(\lambda)}{\partial m} = 0 \rightarrow \lambda - zJm = 0, \quad (2.37)$$

ou seja,

$$\lambda = zJm. \quad (2.38)$$

Substituindo (2.38) em (2.36), obtemos

$$m = \tanh(zKm). \quad (2.39)$$

A energia livre de Helmholtz fica dada por

$$\Phi(m) = -\frac{1}{\beta} \ln [2 \cosh(zKm)] + \frac{zJ}{2}m^2. \quad (2.40)$$

Observamos que a equação de estado (2.39) obtida pelo princípio variacional é a mesma encontrada usando a teoria de Weiss, a Eq.(2.10) expandida próxima da criticidade ( $T \simeq T_C, m \simeq 0$ ) corresponde a uma série de potências de  $m$  conhecida como teoria de Landau, que é útil para se analisar comportamentos multicríticos em sistemas de spin.

## 2.4 TÉCNICA DO OPERADOR DIFERENCIAL

Essa técnica que vamos utilizar tem como base as identidades de correlação de spins de Ising propostas por Callen (1963) em 1963 para o modelo de Ising de spin- $\frac{1}{2}$ , e generalizado para qualquer spin ( $S \geq \frac{1}{2}$ ) por Suzuki (1965). Com o objetivo de calcular as funções de correlação e a temperatura de transição de fase do modelo de Ising- $\frac{1}{2}$ , utilizando o método de expansão em série de altas temperaturas, Tahir-Kheli e Taggart (1969, 1973) introduziram pela primeira vez a identidade de Callen-Suzuki neste método.

A técnica do Operador Diferencial foi proposta por Honmura e Kaneyoshi (1978), que é baseada na identidade matemática  $e^{\alpha D_x} F(x) = F(x + \alpha)$ , onde  $D_x = \frac{d}{dx}$  é o operador diferencial. Essa técnica facilitou a utilização das identidades de Callen, melhorando o manuseio das variáveis de spin- $\frac{1}{2}$ . Nesse formalismo o desacoplamento é utilizado para tratar as correlações entre muitos spins. Desenvolveremos nesta seção a técnica do operador diferencial e alguns desacoplamentos e aplicaremos ao modelo de Ising -  $\frac{1}{2}$ .

Se considerarmos um modelo com  $N$  partículas interagentes em uma determinada rede, o Hamiltoniano  $\mathcal{H}$  que descreve esse sistema pode ser separado em duas partes distintas: uma representando um aglomerado  $\Omega$  de  $n < N$  variáveis de spins levando em consideração as interações dentro do aglomerado e nas suas vizinhanças, e a parte restante, que não possui spins pertencentes ao aglomerado, denotado por  $\Omega'$  (ver Fig. (2.1)). Desta forma, o Hamiltoniano do sistema é escrito da seguinte forma

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\{n\}} + \mathcal{H}'_{\{N-n\}}. \quad (2.41)$$

Para calcularmos uma média de uma quantidade termodinâmica  $A$ , temos, do for-



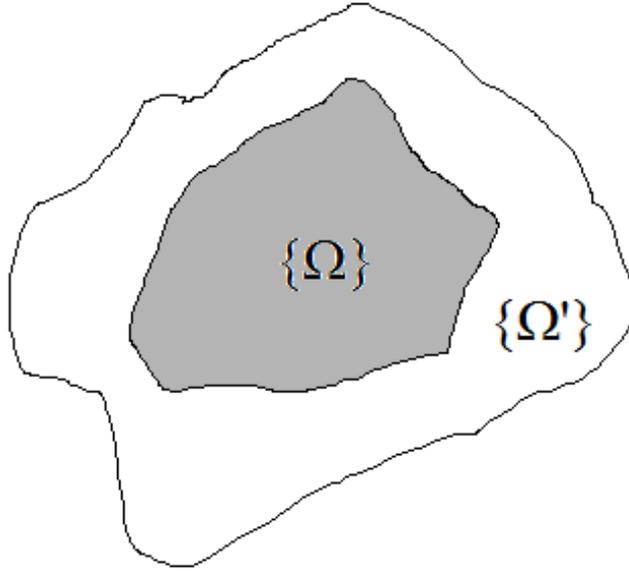


Figura 2.1: Representação esquemática de um sistema com  $N$  partículas (sistema  $\Omega \cup \Omega'$ ).

malimo do ensemble canônico, que essa média é definida por

$$\langle A \rangle = \frac{Tr (Ae^{-\beta\mathcal{H}})}{Tr (e^{-\beta\mathcal{H}})}, \quad (2.42)$$

onde o funcional  $Tr$  é no espaço de todos os spins.

No caso em que  $\mathcal{H}_{\{n\}}$  e  $\mathcal{H}'_{\{N-n\}}$  comutem, i.e.,  $[S^\nu, S^\mu] = 0$  com  $[\nu = \mu = x, y, z]$ , o traço da Eq. (2.42) pode ser efetuado em dois passos: considerando, primeiramente, o traço sobre os spins pertencentes ao aglomerado finito  $\Omega$ , i.e.,  $Tr_\Omega$ , e em seguida sobre os spins da vizinhança não pertencentes ao aglomerado  $\Omega$ , que é denominado por  $Tr_{\Omega'}$ .

Considerando o operador  $O\{n\}$  das variáveis de spin pertencentes ao aglomerado  $\Omega(n)$ , então o valor médio da grandeza  $O\{n\}$ , segundo a Eq. (2.41), é escrito da seguinte forma

$$\langle O\{n\} \rangle = \frac{Tr (O(n) e^{-\beta\mathcal{H}})}{Tr (e^{-\beta\mathcal{H}})} = \frac{Tr (O(n) e^{-\beta[\mathcal{H}_{\{n\}} - \mathcal{H}']})}{Tr (e^{-\beta\mathcal{H}})}, \quad (2.43)$$

ou ainda,

$$\langle O \{n\} \rangle = \frac{Tr' e^{-\beta \mathcal{H}'} Tr_{\{n\}} e^{-\beta \mathcal{H}_{\{n\}}}}{Tr(e^{-\beta \mathcal{H}})}. \quad (2.44)$$

Como estamos considerando que  $\mathcal{H}_{\{n\}}$  e  $\mathcal{H}'_{\{N-n\}}$  comutam, se multiplicarmos e dividirmos a Eq. (2.44) por  $Tr_{\{n\}} e^{-\beta \mathcal{H}_{\{n\}}}$ , não altera o resultado, mas nos permite escrever

$$\langle O \{n\} \rangle = \frac{1}{Tr(e^{-\beta \mathcal{H}})} Tr \left[ \frac{e^{-\beta \mathcal{H}} Tr_{\{n\}} O_{\{n\}} e^{-\beta \mathcal{H}_{\{n\}}}}{Tr_{\{n\}}(e^{-\beta \mathcal{H}_{\{n\}}})} \right]. \quad (2.45)$$

Se compararmos a Eq.(2.45) com a Eq.(2.42), indentificamos o valor médio da variável, que é dado por

$$\frac{Tr_{\{n\}} O_{\{n\}} e^{-\beta \mathcal{H}_{\{n\}}}}{Tr_{\{n\}}(e^{-\beta \mathcal{H}_{\{n\}}})}. \quad (2.46)$$

Logo, a média térmica de  $O \{n\}$  no ensemble canônico, é expressa por:

$$\langle O \{n\} \rangle = \left\langle \frac{Tr_{\{n\}} O_{\{n\}} e^{-\beta \mathcal{H}_{\{n\}}}}{Tr_{\{n\}}(e^{-\beta \mathcal{H}_{\{n\}}})} \right\rangle, \quad (2.47)$$

Temos que o funcional  $Tr_{\{n\}}$  é o traço parcial tomado sobre os auto-estados das variáveis de spin que pertencem ao aglomerado  $\Omega$ , ou seja, especificadas pelo Hamiltoniano  $\mathcal{H}_{\{n\}}$ , e a média  $\langle \dots \rangle$  é a média termodinâmica usual, efetuada sobre o hamiltoniano total  $\mathcal{H}$  do sistema. Isso é uma grande vantagem, pois não precisamos considerar todas as configurações de todo o sistema. Dessa equação pode-se identificar as partes que pertencem ao aglomerado e as que não pertencem, logo podemos derivar uma identidade muito importante sobre correlações, que é dada por

$$\langle \{n\} O \{n\} \rangle = \left\langle \{n\} \frac{Tr_{\{n\}} O_{\{n\}} e^{-\beta \mathcal{H}_{\{n\}}}}{Tr_{\{n\}}(e^{-\beta \mathcal{H}_{\{n\}}})} \right\rangle, \quad (2.48)$$

A Eq. (2.48) foi usada de forma aproximada por Sá Barreto e Fittipaldi (1985)



no estudo do modelo de Ising- $\frac{1}{2}$  com campo transverso, obtendo resultados satisfatórios comparados como, por exemplo, o método de expansão em série.

Aplicaremos os conceitos da teoria de campo efetivo baseada na técnica do operador diferencial no modelo de Ising de spin- $\frac{1}{2}$  sem campo, para ilustrar a identidade (2.48), e em particular a identidade de Callen-Suzuki; assim o Hamiltoniano (2.5) fica

$$\mathcal{H}_1 = -JS_1 \sum_{\langle \vec{\delta} \rangle} \sigma_{i+\vec{\delta}}, \quad (2.49)$$

substituindo a Eq. (2.49) em (2.47), e definindo  $O(n) = \sigma_1$  obtemos

$$\langle \sigma_1 \rangle = \left\langle \frac{\text{Tr}_1 (\sigma_1 e^{-\beta \mathcal{H}_1})}{\text{Tr}_1 (e^{-\beta \mathcal{H}_1})} \right\rangle, \quad (2.50)$$

onde  $K = \beta J$ . A função de partição fica

$$\mathcal{Z}_1 = \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}_1} = e^{K \sum_{\langle \vec{\delta} \rangle} \sigma_{1+\vec{\delta}}} + e^{-K \sum_{\langle \vec{\delta} \rangle} \sigma_{1+\vec{\delta}}} \quad (2.51)$$

$$\mathcal{Z}_1 = 2 \cosh K \sum_{\langle \vec{\delta} \rangle} \sigma_{1+\vec{\delta}}. \quad (2.52)$$

Definindo  $a = K \sum_{\langle \vec{\delta} \rangle} \sigma_{1+\vec{\delta}}$ , podemos calcular a magnetização por spin partindo da Eq. (2.52), temos

$$m = \langle \sigma_1 \rangle = \left\langle \frac{\partial \ln \mathcal{Z}_1}{\partial a} \right\rangle = \left\langle \tanh K \sum_{\langle \vec{\delta} \rangle} \sigma_{1+\vec{\delta}} \right\rangle. \quad (2.53)$$

A Eq. (2.53) é conhecida na literatura por identidade de Callen-Suzuki, onde foi aplicada ao modelo de Ising de spin- $\frac{1}{2}$  sendo deduzida pela primeira vez por Callen (1963) onde utilizou o formalismo da função de Green dependente de dois tempos e temperatura, e generalizada para spin  $S$  geral inicialmente por Suzuki (1965).

Aplicando a identidade do operador diferencial  $e^{\alpha D_x} F(x) = F(x + \alpha)$  onde  $D_x = \frac{\partial}{\partial x}$ , a Eq. (2.54) ficará

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^z e^{K\sigma_{1+\vec{\delta}} D_x} \right\rangle \tanh(x) \Big|_{x=0}. \quad (2.54)$$

Utilizando a identidade de van der Waeden<sup>2</sup> para spin- $\frac{1}{2}$ , i.e.,  $e^{\alpha\sigma_i} = \cosh \alpha + \sigma_i \sinh \alpha$ , com  $(\sigma_i = \pm 1)$ , a Eq. (2.51) ficará

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^z \cosh K D_x + \sigma_{1+\vec{\delta}} \sinh K D_x \right\rangle \tanh(x) \Big|_{x=0}. \quad (2.55)$$

A Eq.(2.55) é exata, mas de difícil manipulação matemática, pois funções de correlação de muitos spins são envolvidas no segundo membro da mesma, sendo gerado um conjunto infinito de equações acopladas de funções de correlação.

Desenvolveremos agora a Eq.(2.55) para uma rede quadrada ( $z = 4$ ) e considerando como sendo os primeiros vizinhos  $\{\sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \sigma_5\}$  do aglomerado  $\Omega = \{\sigma_1\}$ , portanto ficaremos

$$m = (\alpha_x + \sigma_2 \beta_x) (\alpha_x + \sigma_3 \beta_x) (\alpha_x + \sigma_4 \beta_x) (\alpha_x + \sigma_5 \beta_x) \tanh(x) \Big|_{x=0}, \quad (2.56)$$

onde  $\alpha_x = \cosh(KD_x)$  e  $\beta_x = \sinh(KD_x)$ .

Usando o fato que  $\Phi_{par}(D_x) \tanh x \Big|_{x=0} = 0$ , a Eq. (2.56) pode ser reescrita na forma

$$m = A \langle \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4 + \sigma_5 \rangle + B \langle \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 + \sigma_2 \sigma_3 \sigma_5 + \sigma_3 \sigma_4 \sigma_5 + \sigma_2 \sigma_4 \sigma_5 \rangle, \quad (2.57)$$

ou usando simetria translacioanal ficamos

$$m = 4Am + 4B \langle \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 \rangle, \quad (2.58)$$

---

<sup>2</sup>Uma generalização da identidade de Van der Waerden tem sido discutida por Balcerzak (2002) para spin S-geral.

onde  $A = \alpha_x^3 \beta_x \tanh(x) \big|_{x=0} = \frac{t_4+2t_2}{8}$ ,  $B = \alpha_x \beta_x^3 \tanh(x) \big|_{x=0} = \frac{t_4-2t_2}{8}$  e  $t_n = \tanh(nK)$ .

A Eq.(2.58) possui muitas outras expressões similares que podem ser obtidas para funções de correlação, e são conhecidas por equações de Dobrushin-Lanford-Ruelle (1969), e usadas em teorias de campos para escrever a distribuição de probabilidade no limite de volume infinito de uma forma mais rigorosa (PARISI, 1988).

Fazendo uma primeira aproximação (superior a **MFA**), as funções de correlação dos spins são desacopladas na forma

$$\langle \sigma_i \sigma_j \dots \sigma_n \rangle \simeq \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \dots \langle \sigma_n \rangle, \quad (2.59)$$

com  $i \neq j \neq \dots \neq n$ , e é conhecida como aproximação de Zernike (1940). Usando a aproximação (2.59), a Eq. (2.58) ficará reescrita na forma de **EFT-1** (*Effective Field Theory*)

$$m = A_1(T) m + A_3(T) m^3, \quad (2.60)$$

onde  $A_1(T) = 4A = \frac{1}{2}(t_4 + 2t_2)$  e  $A_3(T) = 4B = \frac{1}{2}(t_4 - 2t_2)$ , lembrando que  $t_n = \tanh(nK)$  e  $T = K^{-1}$ .

A partir da Eq. (2.60) podemos obter numericamente a temperatura crítica  $T_C$  fazendo  $m \rightarrow 0$ , resultando na seguinte expressão

$$A_1(T_C) = 1, \quad (2.61)$$

encontrando da Eq. (2.61)  $\frac{k_B T_C}{J} = 3.089$  (4.00, **MFA**), que pode ser comparada com a solução exata  $\frac{k_B T_C}{J} = 2.269$ . Da Eq. (2.60) podemos mostrar que próximo da criticalidade a magnetização se anula segundo uma lei de potência com um expoente crítico  $\beta = \frac{1}{2}$ , resultado este esperado, pois estamos tratando o sistema através de campo efetivo resultando sempre numa expressão autoconsistente para a magnetização do tipo  $m = \Phi(m)$ .

Podemos aplicar o desacoplamento (2.59) para qualquer rede com número de coordenação

nação  $z$ , o que significa fazer a seguinte aproximação na Eq. (2.55)

$$m = \prod_{\vec{\delta} \neq \pm 1}^z \left\langle \alpha_x + \sigma_{1+\vec{\delta}} \beta_x \right\rangle \tanh(x) |_{x=0}, \quad (2.62)$$

ou

$$m = \left( \alpha_x + \sigma_{1+\vec{\delta}} \beta_x \right)^z \tanh(x) |_{x=0}. \quad (2.63)$$

Usando o fato de que  $\Phi_{par}(D_x) \tanh x |_{x=0} = 0$  podemos escrever a Eq. (2.63) na seguinte forma reduzida e geral

$$m = \sum_{p=0}^{[z]} A_{2p+1}^z(T) m^{2p+1}, \quad (2.64)$$

com

$$A_n^z(T) = \frac{z!}{(z-n)!n!} \alpha_x^{z-n} \beta_x^n \tanh x |_{x=0}, \quad (2.65)$$

onde  $[z] = \frac{z-1}{2}$  e  $\frac{z-2}{2}$  se  $z$  for ímpar ou par, respectivamente.

Da Eq. (2.61) no limite  $m \rightarrow 0$  obtemos a temperatura crítica pela expressão

$$A_n^z(T_C) = 1, \quad (2.66)$$

que para uma rede linear ( $z = 2$ ) obtemos a solução exata  $T_C = 0$ , que é um resultado consideravelmente melhor que o resultado espúrio de **MFA** que encontra  $T_C = 2.00$ . Outras redes podem ser encontradas, como por exemplo a rede cúbica simples ( $z = 6$ ) que encontra a partir da Eq. (2.66)  $\frac{k_B T_C}{J} = 5.073$  (6.000, **MFA**) que é comparada com resultados de simulação Monte Carlo (LANDAU, 2000)  $\frac{k_B T_C}{J} = 4.511$ .

Essa teoria possibilita obter várias outras propriedades termodinâmicas (energia interna, calor específico, suscetibilidade e energia livre), contudo nos deteremos neste reabalo a analisar a criticalidade, onde  $T_C$  será obtido. O presente formalismo, expresso pela equação de estado (2.64), encontra expoentes clássicos e na sua versão simples de

um único spin não consegue distinguir a topologia, como quase todos os outros métodos não conseguem. Por exemplo, uma rede bidimensional com topologia triangular tem o mesmo número de coordenação  $z = 6$  de uma rede cúbica simples, ou seja, a aproximação **EFT-1** encontra a partir da Eq. (2.66)  $\frac{k_B T_C}{J} = 5.073$  para as duas redes mencionadas.

A aproximação de campo médio (**MFA**) consiste em reescrever a média da tangente hiperbólica (2.50) da média do argumento, ou seja,

$$m = \left\langle \tanh K \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}} \right\rangle \simeq \sigma_1 = \tanh K \left\langle \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}} \right\rangle \quad (2.67)$$

$$m = \tanh(zKm) \quad (2.68)$$

que reproduz o mesmo resultado de **MFA-1** dado pela Eq.(2.10), reproduzindo erroneamente  $T_C(z=2) \neq 0$ . O resultado de **EFT-1** (2.64) que usa o desacoplamento (2.59), onde as funções de correlação entre diferentes spins são tratados aproximadamente, mas em relação cinemática  $\sigma_i^{2n} = 1$  ( $\sigma_i = \pm 1$ ) foi tratada de forma exata com uso da identidade de van der Weerden ( $e^{\lambda\sigma_i} = \cosh \lambda + \sigma_i \sinh \lambda$ ). Por outro lado, a **MFA** trata tanto as correlações como as auto-correlações  $\langle \sigma_i^2 \rangle$  de formas aproximadas, levando conseqüentemente ao resultado espúrio  $T_C(z=2) \neq 0$ . O uso de **EFT-1** (2.64) que usa o desacoplamento (2.55), onde as funções de correlação entre diferentes spins são tratados com uma aproximação, trata de forma exata a relação de cinemática de spins  $\sigma_i^{2n} = 1$  ( $\sigma_i = \pm 1$ ) através da identidade de van der Waerden, enquanto que **MFA** trata aproximadamente tanto as correlações como as auto-correlações  $\sigma_i^{2n}$ . Sendo o **MFA** um dos métodos mais utilizados para resolução de problemas de muitos corpos na mecânica estatística, é possível encontrar na literatura uma variedade de modelos estudados, para sistemas superiores a dois, tais como: metamagneto (RUNER; FIGUEIREDO, 1998), vidro de spin (WALASEK; CIEPLAK, 1997), modelo de Heisenberg AF (TRUDEAU; PLUMER), modelo de Heisenberg com interação Dzyaloshinski-Moriya (SOUSA; FITTIPALDI, 1994), entre outros.

Em contrapartida, **EFT** apresenta melhorias nos processos qualitativos e quantita-



tivos com relação a **MFA**, como, por exemplo: numa rede unidimensional **EFT** obtém resultados exatos para as propriedades termodinâmicas do modelo de Ising- $\frac{1}{2}$  (BARRETO; FITTIPALDI, 1981) com  $T_C = 0$ . Metodologicamente, **EFT** trata exatamente a cinemática de spin fazendo com que o modelo com interação de curto alcance não apresente ordem de longo alcance em uma dimensão. É preciso mencionar que a medida em que crescemos os sistemas de aglomerados e também se utilizando de desacoplamento (SOUSA; 1998), temos melhorias na parte qualitativa para estas grandezas críticas, como uma relativa convergência em direção ao resultado exato.

### 2.4.1 OUTRAS APROXIMAÇÕES

Da forma análoga a Eq.(2.53) podemos obter, usando (2.50) em (2.48) a identidade de Callen generalizada

$$\langle \{n\} \sigma_1 \rangle = \left\langle \{n\} \tanh \left( K \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}} \right) \right\rangle, \quad (2.69)$$

onde  $\{n\}$  representa qualquer variável com spin não pertencente ao aglomerado  $\Omega = \{\sigma_1\}$ . Usando os mesmos procedimentos para obtenção da Eq.(2.57) numa rede quadrada, a Eq.(2.69) será reescrita como

$$\begin{aligned} \langle \{n\} \sigma_1 \rangle &= A_1(K) \{n\} (\sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4 + \sigma_5) + \\ &A_3(K) [(\sigma_2\sigma_3\sigma_4 + \sigma_2\sigma_3\sigma_5 + \sigma_3\sigma_4\sigma_5 + \sigma_2\sigma_4\sigma_5)]. \end{aligned} \quad (2.70)$$

Escolhendo  $\{n\} = 1$  e  $\{n\} = \sigma_2$ , da Eq. (2.70) obtemos

$$m = 4A_1(K) m + 4A_3(K) \Gamma, \quad (2.71)$$



e

$$\begin{aligned} \langle \sigma_2 \sigma_1 \rangle &= A_1(K) [1 + \langle \sigma_2 \sigma_3 \rangle + \langle \sigma_2 \sigma_4 \rangle + \langle \sigma_2 \sigma_5 \rangle] + \\ &A_3(K) [\langle \sigma_3 \sigma_4 \rangle + \langle \sigma_3 \sigma_5 \rangle + \langle \sigma_4 \sigma_5 \rangle + \langle \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 \sigma_5 \rangle], \end{aligned} \quad (2.72)$$

onde usamos a identidade de cinemática de spin  $\sigma_i^2 = 1$ ,  $m = \langle \sigma_i \rangle \forall i = (1 - N)$  e  $\Gamma = \langle \sigma_i \sigma_j \sigma_l \rangle \forall i \neq j \neq l \neq 1$ . As Eqs.(2.71) e (2.72) são exatas, mas de difícil manipulação matemática, assim para resolvê-las vamos usar um desacoplamento nas funções de correlação.

Kaneyoshi e colaboradores (1981) foram os primeiros a tentar melhorar o valor de  $T_C$ , onde utilizaram um desacoplamento em que as flutuações no dado sítio  $i \neq 1$  são proporcionais as flutuações do spin do aglomerado  $\Omega$ , ou seja,

$$\sigma_i \simeq \langle \sigma_i \rangle + \lambda (\sigma_i - \langle \sigma_i \rangle), \quad (2.73)$$

onde  $\lambda$  representa o campo de relação de Onsager (1936) que mede a correlação de curto alcance dos spins  $\sigma_i$  (externos ao aglomerado) com o spin  $\sigma_1$  (pertencente ao aglomerado).

Substituindo (2.73) nas Eqs.(2.71) e (2.72), obtemos duas equações acopladas para magnetização  $m$  e para o parâmetro  $\lambda$  que podem ser resolvidas simultaneamente para cada valor de temperatura, ou seja,

$$m = [4A_1(K) + 12A_3(K)\lambda^2 - 8A_3(K)\lambda^3] m + [4A_3(K)(1 - 3\lambda^2 + 2\lambda^3)] m^3 \quad (2.74)$$

e



$$\begin{aligned}
m^2 + \lambda(1 - m^2) &= A_1(K) + 3A_1(K)A_3(K)m^2 + A_3(K)m^4 + \\
&3[A_1(K) + A_3(K) + 2A_3(K)m](1 - m^2)\lambda^2 - \\
&8A_3(K)m^2(1 - m^2)\lambda^3 + A_3(K)m^2(1 + 3m^2)(1 - m^2)\lambda^4.
\end{aligned} \tag{2.75}$$

Como estamos interessados na criticalidade, então fazamos  $m \rightarrow 0$  nas Eqs.(2.74) e (2.75) e teremos

$$1 = 4A_1(K_C) + 12A_3(K_C)\lambda_C^2 - 8A_3(K_C)\lambda_C^3 \tag{2.76}$$

e

$$\lambda_C = A_1(K_C) + 3[A_1(K_C)\lambda_C^2 + A_3(K_C)]\lambda_C^2 + A_3(K_C)\lambda_C^4. \tag{2.77}$$

Das Eqs.(2.76) e (2.77) a temperatura crítica apresenta resultado equivalente à aproximação de Bethe Peierls, ou seja,  $\frac{k_B T_C}{J} = \frac{2}{\ln 2}$  e  $\lambda_C = \frac{1}{3}$ . Generalizando para qualquer número de coordenação  $z$  obtemos

$$\begin{cases} \frac{k_B T_C}{J} = \frac{2}{\ln\left(\frac{z}{z-2}\right)} \\ \lambda_C = \frac{1}{z-1} \end{cases} \tag{2.78}$$

Taggart e Fittipaldi (1982) sugeriram uma alternativa para se obter as funções de correlação, e denominaram de aproximação do tripleto médio. Escolhendo  $\{n\} = \coth K \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}}$  na Eq. (2.69) obtemos

$$\left\langle \sigma_1 \coth K \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}} \right\rangle = 1. \tag{2.79}$$

Aplicando os mesmos procedimentos da obtenção da Eq.(2.55), podemos reescrever a Eq. (2.79) numa rede quadrada ( $z = 4$ ) na forma



$$1 = 4\tilde{A}(K) \langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle + 4\tilde{B}(K) \langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 \rangle, \quad (2.80)$$

sendo  $\tilde{A}(K) = \frac{1}{8} [\coth(4K) + 2\coth(2K)]$ ,  $\tilde{B}(K) = \frac{1}{8} [\coth(4K) - 2\coth(2K)]$  e usamos a propriedade de simetria translacional (i.e.,  $\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle \forall i \neq 1$  e  $\langle \sigma_1 \sigma_i \sigma_j \sigma_l \rangle = \langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 \rangle \forall i \neq j \neq l \neq 1$ ).

Calculando  $m = \langle \sigma_p \rangle$  ( $p \neq 1, 2, 3, 4, 5$ ) e tomando como base a Eq.(2.80) encontramos

$$m = 4\tilde{A}(K) \langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_p \rangle + 4\tilde{B}(K) \langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 \sigma_p \rangle, \quad (2.81)$$

fazendo  $\Gamma = \langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_p \rangle$  e  $\Lambda = \langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 \sigma_p \rangle$ , a Eq.(2.81) fica reescrita por

$$m = 4\tilde{A}(K) \Gamma + 4\tilde{B}(K) \Lambda. \quad (2.82)$$

Na aproximação do tripleto médio, Taggart e Fittipaldi sugeriram que em  $T = T_C$  a função de correlação  $\Lambda$  tende a zero mais rapidamente que  $\Gamma$ , portanto, usando as Eqs.(2.71) e (2.82) obtemos a temperatura crítica auto-consistente pela expressão

$$B(K_C) = \tilde{A}(K_C) [1 - 4A(K_C)], \quad (2.83)$$

que resolvendo numericamente, encontramos  $T_C = 2.680$ . Usando a aproximação (2.73) nas Eqs.(2.80) e (2.82), Taggart (1982) obteve resultados mais próximos ( $T_C = 2.490$ ) do valor exato  $T_C = 2.262$  para o modelo de Ising- $\frac{1}{2}$  na rede quadrada.

Vimos que até agora as aproximações aplicadas na técnica do operador diferencial utilizaram aglomerado com apenas um spin, ou seja, teve como ponto de partida o Hamiltoniano (2.49). A fim de ilustrar a técnica do operador diferencial para aglomerado finito, vamos escolher um aglomerado com dois spins, e assim o Hamiltoniano de Ising (2.27) para este aglomerado é dado por

$$\mathcal{H}_2 = -J\sigma_1\sigma_2 - a_1\sigma_1 - a_2\sigma_2, \quad (2.84)$$

onde  $a_n = J \sum_{\vec{\delta}_n} \sigma_{n+\vec{\delta}_n}$  ( $n = 1, 2$ ).

Escolhendo  $O(\Omega) = \frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2)$  e usando (2.84) na Eq.(2.47) obtemos a magnetização por spin

$$m = \left\langle \frac{\sinh \beta (a_1 + a_2)}{\cosh \beta (a_1 + a_2) + e^{-2K} \sinh \beta (a_1 - a_2)} \right\rangle, \quad (2.85)$$

sendo  $m = \langle \frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2) \rangle$ .

A Eq.(2.85) foi obtida independentemente por Siqueira (1986) e Jascur (1986). Uma análise simples desta expressão evidencia a presença de dois tipos de vizinhos presentes nos somatórios em  $\vec{\delta}_n$ . Para desenvolvermos a Eq.(2.85) vamos definir dois operadores diferenciais  $D_x \equiv \frac{\partial}{\partial x}$  e  $D_y \equiv \frac{\partial}{\partial y}$ , com isto é possível generalizar a identidade dada por uma variável, ou seja,

$$\exp(aD_x + bD_y) g(x, y) = g(x + a, y + b), \quad (2.86)$$

onde  $g(x, y)$  é uma função analítica. Usando a identidade (2.86), podemos reescrever a Eq. (2.85) na forma

$$m = \left\langle \exp \left( KD_x \sum_{\vec{\delta}_1} \sigma_{1+\vec{\delta}_1} + KD_y \sum_{\vec{\delta}_2} \sigma_{2+\vec{\delta}_2} \right) \right\rangle g(x, y) |_{x,y=0}, \quad (2.87)$$

sendo

$$g(x, y) = \left\langle \frac{\sinh(x + y)}{\cosh(x + y) + e^{-2K}(x - y)} \right\rangle, \quad (2.88)$$

Na Eq.(2.87) as somatórias  $\sum_{\vec{\delta}_1}$  e  $\sum_{\vec{\delta}_2}$  são feitas sobre todos os primeiros vizinhos dos spins  $\sigma_1$  e  $\sigma_2$  externos ao aglomerado com dois spins, respectivamente. Dependendo da topologia da rede, os spins  $\sigma_1$  e  $\sigma_2$  podem admitir vizinhos em comum (i.e., spins comuns circundantes aos sítios  $\sigma_1$  e  $\sigma_2$ ), então a Eq. (2.87) pode ser reescrita como

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}_1}^{z-1-z'} e^{KD_x \sigma_{1+\vec{\delta}_1}} \prod_{\vec{\delta}_2}^{z-1-z'} e^{KD_y \sigma_{2+\vec{\delta}_2}} \prod_{\vec{\delta}}^{z'} e^{K(D_x+D_y)\sigma_{\vec{\delta}}} \right\rangle g(x, y) |_{x,y=0}, \quad (2.89)$$

onde  $z'$  é o número de primeiros vizinhos comuns aos spins  $\sigma_1$  e  $\sigma_2$  do aglomerado. Claramente, a forma explícita de vizinhos, comuns ou não, aos sítios 1 e 2 no aglomerado de dois spins assegura a distinção entre redes de estruturas (topologias) diferentes. Para ilustrar a topologia da rede no aglomerado com dois spins, na Fig.(2.2) apresentamos a rede Kagomé, ( $z = 4$ ,  $z' = 1$ ), quadrada ( $z = 4$ ,  $z' = 0$ ) triangular ( $z = 6$ ,  $z' = 2$ ) e a cúbica simples ( $z = 6$ ,  $z' = 0$ ).

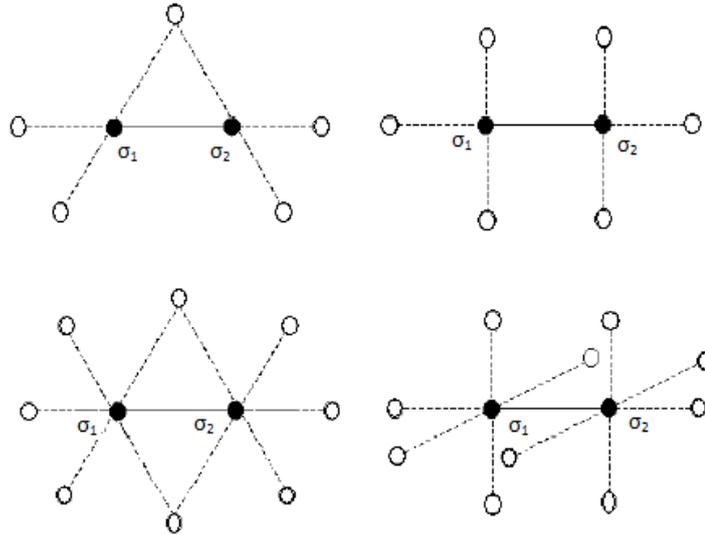


Figura 2.2: Topologias das redes (a) rede Kagomé, (b) quadrada, (c) triangular e (d) cúbica simples com aglomerado de dois spins.

Aplicando a identidade de van der Waerden na Eq.(2.89) ficaremos



$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}_1}^{z-1-z'} e^{\alpha_x + \sigma_{1+\vec{\delta}_1} \beta_x} \prod_{\vec{\delta}_2}^{z-1-z'} e^{\alpha_y + \sigma_{2+\vec{\delta}_2} \beta_y} \prod_{\vec{\delta}}^{z'} e^{\alpha_{x+y} + \sigma_{\vec{\delta}} \beta_{x+y}} \right\rangle g(x, y) |_{x,y=0}, \quad (2.90)$$

onde  $\alpha_\nu$  ( $\nu = x, y$ ) =  $\cosh(KD_\nu)$ ,  $\beta_\nu = \sinh(KD_\nu)$ ,  $\alpha_{x+y} = \cosh[K(D_x + D_y)]$  e  $\beta_{x+y} = \sinh[K(D_x + D_y)]$ . A Eq.(2.90) é exata, porém de difícil manipulação matemática por envolver funções de correlação de vários spins, gerando desta maneira um conjunto infinito de equações acopladas. Desacoplando as funções de correlação da Eq.(2.90) segundo a aproximação de Zernike (1940) (2.56), ficaremos

$$m = (\alpha_x + m\beta_x)^{z-1-z'} (\alpha_y + \beta_y)^{z-1-z'} (\alpha_{x+y} + m\beta_{x+y})^{z'} g(x, y) |_{x,y=0}, \quad (2.91)$$

Da Eq.(2.88) temos que a função  $g(x, y)$  é ímpar [i.e.,  $g(-x, -y) = -g(x, y)$ ] e a aplicação de qualquer operador par  $\widehat{\varphi}_{par}(D_x, D_y)$  nesta função  $g(x, y)$  é zero no limite de  $x, y \rightarrow 0$ . Usando esta propriedade de paridade para função  $g(x, y)$ , a Eq.(2.91) pode ser expandida em potências ímpares de  $m$ , que fisicamente é esperado, isto porque esta equação de estado é invariante pela mudança de  $m$  por  $-m$  (não existe direção axial privilegiada) e até primeira ordem é dada por

$$m = A_1^{z,z'}(K) m, \quad (2.92)$$

sendo

$$A_1^{z,z'}(K) = \left[ 2(z-1-z') \alpha_x^{z-z'-2} \alpha_y^{z-z'-1} \beta_x + z' \alpha_x^{z-z'-1} \alpha_y^{z-z'-1} \alpha_{x+y}^{z'-1} \beta_{x+y} \right] g(x, y) |_{x,y=0}. \quad (2.93)$$

Nesta teoria de campo efetivo em aglomerados de dois spins (**EFT-2**), a temperatura crítica é obtida da Eq.(2.92) com o limite  $m \rightarrow 0$ , ou seja

$$A_1^{z,z'}(K) = 1, \quad (2.94)$$

onde percebemos da Eq.(2.94) a possibilidade de distinguir  $T_C$  para redes com topologias diferentes.

Resolvendo numericamente a Eq.(2.94) encontramos os valores de  $T_C \equiv K_C^{-1}$  do modelo de Ising- $\frac{1}{2}$  para várias topologias de rede. Os valores de  $T_C$  obtidos através de aproximações **EFT-1** e **EFT-2** para as redes Kagomé, quadrada, triangular e cúbica simples estão apresentados na tabela (II.1) e são comparados com os resultados exatos para os casos de redes  $2d$  e simulação Monte Carlo ( $3d$ ). Observamos que **EFT-2** apresenta resultados qualitativos ligeiramente melhores que os obtidos por **EFT-1** em comparação com os resultados exatos. Devemos mencionar, ainda que sendo esta **EFT-2** uma aproximação do tipo campo médio [i. e.,  $m = \Psi(m, T)$ ], os expoentes críticos continuam universais (independe da dimensionalidade) e iguais aos valores clássicos ( $\beta = 1/2$ ,  $\gamma = 1$ ,  $\nu = 1/2$ ,  $\eta = 0$ ,  $\delta = 3$ ).

Tabela II.1: Valores da temperatura crítica  $T_C$  para o modelo de Ising -  $1/2$  em diversas topologias de rede.(NETO, J. S. C., 2004)

Redes	$z$	$z'$	EFT-1	EFT-2	Exatos/Monte Carlo
Kagomé	4	1	3.090	2.923	2.143
Quadrada	4	0	3.090	3.025	2.269
Triangular	6	2	5.073	4.950	3.641
Cúbica Símples	6	0	5.073	5.039	4.511

## 2.5 OUTROS MODELOS

Na mecânica estatística diversos modelos quânticos têm sido estudados, como por exemplo, Heisenberg, Ising com campo transversal, Hubbard, Kondo. Ao contrário de sistemas clássicos que apresentam certas dificuldades com interações microscópicas presentes nos termos do Hamiltoniano, os modelos quânticos acrescentam mais uma dificuldade que são as diversas relações de comutação entre os operadores do Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (\eta_x \sigma_i^x \sigma_j^x + \eta_y \sigma_i^y \sigma_j^y + \sigma_i^z \sigma_j^z), \quad (2.95)$$

onde  $J$  é a energia de troca ( $J > 0$  e  $J < 0$  correspondem ao modelo ferromagnético e antiferromagnético, respectivamente),  $\eta_\nu \in [0, 1]$  é o parâmetro de anisotropia,  $\langle i, j \rangle$  representa a soma sobre os primeiros vizinhos e  $\sigma_i^\nu$  é a componente  $\nu = x, y, z$  do operador de spin de Pauli no sítio  $i$ .

A técnica do operador diferencial em aglomerado com dois spins foi desenvolvida para o Hamiltoniano (2.95) por Idogaki e Uryû (1992) para o caso do sistema ferromagnético. Numa rede quadrada ( $2d$ ) foi encontrado erroneamente que este modelo no limite isotrópico ( $\eta_x = \eta_y = 1$ ) apresenta ordem de longo alcance, em contradição com o teorema de Mermin e Wagner. Por outro lado, quando aplicada essa técnica nesse modelo numa rede tridimensional, os resultados qualitativos das propriedades termodinâmicas e temperatura crítica são satisfatórios, estabelecendo-se assim a desigualdade  $T_C$  (Ising)  $>$   $T_C$  (XY)  $>$   $T_C$  (Heisenberg). Do ponto de vista quantitativo, os resultados de  $T_C$  não são comparáveis com os obtidos por simulação de Monte Carlo (LANDAU, 2000; MURTAZAE et al., 1999; SOUSA; COSTA; LYRA, 2000) e expansão em série (IDOGAKI; TANAKA; TUCKER, 1998).

O modelo (2.95) com interação antiferromagnética foi estudado pela técnica do operador diferencial por Araújo e colaboradores (ARAÚJO; NETO; SOUSA, 1998), onde o comportamento da magnetização de subrede em função da temperatura foi analisado. Os resultados foram satisfatórios em comparação com os resultados mais rigorosos.

A generalização do modelo (2.95) para spins clássicos usando a técnica do operador diferencial foi também realizada (SOUSA; ALBUQUERQUE,1997; SOUSA,1998; ALBUQUERQUE, 2000), onde foi mostrado que  $T_C = T_N$  para todo modelo clássico analisado (SOUSA, 1998) de acordo com os resultados de simulação de Monte Carlo (ALBUQUERQUE, 2000; GOTTLÖB; HANSENBUSCH; 1993, 1994; CHEN; FERRENBURG; LANDAU, 1993). Desses resultados (ARAUJO; NETO; SOUSA, 1998; SOUSA; ALBUQUERQUE,1997; SOUSA,1998) são mostrados que  $T_{C,N}$  (clássico)  $>$   $T_N$  (quântico)  $\geq T_C$  (quântico). Diante desta consistência qualitativa, outros sistemas quânticos mais complexos foram estudados usando a técnica do operador diferencial em aglomerados com dois spins. A técnica do operador diferencial em aglomerados com dois spins aplicada ao modelo de Heisenberg ferromagnético com a interação biquadrática e íon-único, que é descrito pelo Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{p}_{ij} - J' \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{p}_{ij}^2 - D \sum_i (S_i^z)^2, \quad (2.96)$$

onde  $\hat{p}_{ij} = S_i^z S_j^z + \gamma (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y)$ , com  $S_i^z = 0, \pm 1$ ,  $J$  é a interação de troca bilinear,  $J'$  a interação biquadrática e  $D$  a anisotropia de íon-único, foi estudada por Idogaki e colaboradores (IDOGAKI; TANAKA; TUCKER, 1998).

A análise do comportamento tricrítico do modelo de Heisenberg ferromagnético também tem sido estudado utilizando a técnica do operador diferencial, onde a inclusão da interação Dzyaloshinski-Moriya (**DM**) no Hamiltoniano (2.95) é dada por

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{D}_{ij} \cdot (\vec{S}_i \wedge \vec{S}_j), \quad (2.97)$$

onde  $D_{ji} = -D_{ij}$  é o tensor anti-simétrico da interação **DM**. Incluindo a interação **DM** (2.97), na Eq. (2.95), Lacerda, de Sousa e Fittipaldi (1998) mostraram que o sistema ferromagnético com  $\vec{D}_{ij} = D_z$  (direção axial) apresenta no diagrama de fase no plano  $(T, D)$ , transição de 1ª e 2ª ordem. Para a interação antiferromagnética ( $J < 0$ ), Gil e de Sousa (1999) usando o método variacional mostraram ausência de transição de primeira ordem.

Alguns resultados preliminares usando a técnica do operador diferencial confirmaram a ausência do ponto tricrítico no diagrama  $(T, D)$  para o modelo **DM** antiferromagnético (BUBLITZ, 2008).

Na Tabela (II.2), apresentamos os resultados de  $T_C$  (caso  $F$ ) e  $T_N$  (caso  $AF$ ) para os modelos Ising, XY (clássico e quântico), e Heisenberg (clássico e quântico) numa rede cúbica simples ( $z = 6$ ) obtidas por **MFA-2**, **EFT-2**, Monte Carlo (MURTAZAE et al., 1999; SOUSA; COSTA; LYRA, 2000; SANDVIK, 1998; GOTTLÖB; HANSENUSCH, 1993,1994; CHEN; FERRENBURG; LANDAU, 1993) e expansão em série (RUSHBROOKE; WOOD, 1967). Apesar dos resultados quantitativos para  $T_C$  e  $T_N$  obtidos por **MFA-2** e **EFT-2** não serem bons quando comparados com resultados rigorosos de expansão em séries e Monte Carlo, esses são qualitativamente corretos [ $T_C$  (clássico)  $>$   $T_N$  (quântico)  $\geq$   $T_C$  (quântico);  $T_C$  (I)  $>$   $T_C$  (XY)  $>$   $T_C$  (H)]. Entretanto para uma rede quadrada observamos a violação do teorema de Mermin Wagner, ou seja, encontramos  $T_C = T_N \neq 0$ .

Tabela II.2: Valores da temperatura crítica para os modelos clássicos e quânticos com interação F e AF numa rede cúbica simples. (NETO, J. S. C., 2004)

Modelos	Métodos	$T_C$	$T_N$
Ising	MFA-2	5.847	5.847
	EFT-2	5.039	5.039
	Monte Carlo	4.511	4.511
XY Clássico	MFA-2	5.843	5.843
	EFT-2	5.034	5.034
	Monte Carlo	4.405	4.405
XY Quântico	MFA-2	5.787	5.787
	EFT-2	4.980	4.980
	Séries	4.001	4.001
Heisenberg Clássico	MFA-2	5.841	5.841
	EFT-2	5.031	5.031
	Monte Carlo	4.329	4.329
Heisenberg Quântico	MFA-2	5.719	5.771
	EFT-2	4.891	4.947
	Monte Carlo	3.360	3.593

### 3 MÉTODO VARIACIONAL APLICADO AO MODELO DE HEISENBERG ANTIFERROMAGNÉTICO COM INTERAÇÃO DZYALOSHINSKI-MORIYAE SUBMETIDO A CAMPO MAGNÉTICO EXTERNO

#### 3.1 CONSIDERAÇÕES INICIAIS

Em 1932 Néel (1932) propôs a investigação sistemática do antiferromagnetismo, onde determinou a temperatura crítica ( $T_N$ ) na qual as magnetizações das sub-redes se anulam para um modelo de Ising com interação entre primeiros vizinhos. Nos últimos anos os antiferromagnetos ou metamagnetos (clássicos e quânticos) têm recebido atenção especial quando na presença de um campo magnético, pois em diversos tipos de materiais ou ligas antiferromagnéticas, torna-se possível transições de fases induzidas e presença de diversos pontos multicríticos (bicrítico, tricrítico, etc) no diagrama de fase (KINCARD; COHEN, 1975; MOREIRA; FIGUEIREDO; HENRIQUES, 2000).



A grande motivação de se estudar o modelo de Heisenberg quântico de spin- $\frac{1}{2}$  AF está no fato de ser um importante modelo na descrição de supercondutores em altas temperaturas, por exemplo, o composto  $La_{2-x}Ba_xCuO_4$ , que na fase isolante é descrito por um antiferromagneto Heisenberg quase bidimensional. Esse composto têm sido estudado experimentalmente e é observado um fraco acoplamento entre os planos de  $CuO_2$  (SHIRANE et al., 1987; ENDOH et al., 1988). Ele tem alta anisotropia, havendo um forte acoplamento entre íons pertencentes ao mesmo plano  $CuO_2$ , e um fraco acoplamento entre os planos.

As propriedades críticas do modelo de Heisenberg de spin  $\frac{1}{2}$  antiferromagnético têm sido tratada na literatura por vários métodos da mecânica estatística, tal como expansão de altas temperaturas (RUSHBROOKE; WOOD, 1967), simulação de Monte Carlo (YING, 1993; MAKIVIC; DING, 1991), teoria de onda de spin (TAKAHASHI, 1989; HAMER; WEIHONG; ARNDT, 1992), método da função de Green (WEI; DU, 1993), grupo de renormalização (CHAKRAVARTY et al., 1988; SOUSA; PLASCAK, 1997; SOUSA; ARAÚJO, 1997), expansão variacional cumulativa (LI; CHENG, 1995) e o método de anomalia coerente (MANO, 1990). Nas referências (SOUSA; PLASCAK, 1997; SOUSA; ARAÚJO, 1997; LI; CHENG, 1995; MANO, 1990) mostrou-se que as influências quânticas modificam a criticalidade com  $T_N$  (caso **AF**)  $>$   $T_C$  (caso **F**) no regime de Heisenberg anisotrópico.

Nos últimos anos a anisotropia conhecida como interação Dzyaloshinsky-Moriya (**DM**) (DZYALOSHINSKI, 1958; MORIYA, 1960) tem despertado muita atenção dos pesquisadores. A interação **DM** é utilizada para descrever certas classes de isolantes (KEFFER, 1966), bem como no estudo de vidro de spin (YI; BUTTNER; USADEL, 1993) e também para explicar o fraco ferromagnetismo em baixas temperaturas da fase ortorrômbica do antiferromagneto  $La_2CuO_4$  (KOSHIBAE; OHTA; MAEKAWA, 1993). A influência da interação **DM** nas propriedades críticas do modelo de Heisenberg ferromagnético não leva a uma nova classe de universalidade como mostrado por Cordeiro e colaboradores (1991). O diagrama de fase deste modelo foi obtido utilizando a aproximação de campo

médio com aglomerado de dois spins (SOUSA; ALBUQUERQUE, FITTIPALDI, 1994), bem como pela teoria de campo efetivo correlacionado. A teoria linear de ondas de spin, aplicada ao modelo quântico de Heisenberg ( $1D$  e  $2D$ ) antiferromagnético de spin- $\frac{1}{2}$  com interação, foi utilizada para estudar a estabilidade da fase de Néel. Foi observado que em  $T = 0$  em  $1D$ , a fase desordenada desaparece acima de um valor crítico da anisotropia axial e em  $2D$  a instabilidade da ordem de Néel ocorre abaixo desse valor crítico.

### 3.2 MODELO E FORMALISMO

Nos próximos capítulos iremos estudar o modelo de Heisenberg Antiferromagnético de spin  $1/2$  com anisotropia Dzyaloshinski-Moriya (**DM**) e submetido a um campo magnético externo, descrito pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} J [(1 - \Delta) (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z] - \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{D}_{ij} \cdot (\vec{S}_i \times \vec{S}_j) - H \sum_i S_i^z, \quad (3.1)$$

onde  $\Delta \in [0, 1]$  é o parâmetro de anisotropia,  $H$  é o campo magnético externo na direção axial (eixo  $z$ ),  $J$  é a interação de troca antiferromagnética (**AF**). O índice no somatório  $\langle i,j \rangle$  significa que a soma é feita sobre todos os pares de primeiros vizinhos,  $S_i^\nu$  ( $\nu = x, y, z$ ) são as componentes do operador de Pauli de spin  $\frac{1}{2}$  no sítio  $i$ , e  $\vec{D}_{ij}$  é o vetor de acoplamento DM. O vetor de acoplamento é antisimétrico, ou seja,  $\vec{D}_{ij} = -\vec{D}_{ji}$ . Por conveniência, vamos assumir que  $\vec{D}_{ij}$  é paralelo a direção do eixo  $z$ .

O modelo Eq.(3.1) com  $H = 0$  e  $D_{ij} = D_{\hat{k}}$  ( $\hat{k}$  é o vetor axial) foi estudado por Sousa et. al. (2008) e foi observado uma transição de fase de segunda ordem sem a presença de primeira ordem, como acontece para o caso ferromagnético (LACERDA et al., 1994).

Como estamos interessados em estudar a linha de estabilidade entre as fases paramagnética e antiferromagnética, vamos dividir a rede em duas sub-redes interpenetrantes

(A e B). Assim a Eq.(3.1) torna-se

$$\mathcal{H} = \begin{aligned} & J \sum_{\langle i,j \rangle} [(1 - \Delta) (S_{A_i}^x S_{B_j}^x + S_{A_i}^y S_{B_j}^y) + S_{A_i}^z S_{B_j}^z] - \\ & - \sum_{\langle i,j \rangle} D (S_{A_i}^x S_{B_j}^y - S_{A_i}^y S_{B_j}^x) - H \sum_{i \in A} S_{A_i}^z - H \sum_{i \in B} S_{B_i}^z \end{aligned} \quad (3.2)$$

Utilizando o método variacional na aproximação de campo médio (desigualdade de Bogoliubov) e utilizando um aglomerado com dois spins, o Hamiltoniano tentativa  $\mathcal{H}_0$  é dado por:

$$\mathcal{H}_0 = \sum_p \left\{ \begin{aligned} & J [(1 - \Delta) (S_{A_p}^x S_{B_p}^x + S_{A_p}^y S_{B_p}^y) + S_{A_p}^z S_{B_p}^z] - \\ & - D (S_{A_p}^x S_{B_p}^y - S_{A_p}^y S_{B_p}^x) - (\eta_A + H) S_{A_p}^z - (\eta_B + H) S_{B_p}^z \end{aligned} \right\}, \quad (3.3)$$

onde  $\eta_A$  e  $\eta_B$  são os parâmetros variacionais das sub-redes  $A$  e  $B$ , respectivamente, e o somatório  $\sum_p$  caracteriza que o número de aglomerados  $\eta_p = \frac{N}{2}$  comporta dois sítios cada, assim a soma é feita aos pares.

Da Eq.(2.24) percebemos que é necessário o cálculo da média das energias  $\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0$  e de  $\mathcal{Z}_0$ , portanto, das Eqs. (3.2) e (3.3), temos:

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 = & \left\langle \begin{aligned} & J \sum_{\langle i,j \rangle} [(1 - \Delta) (S_{A_i}^x S_{B_j}^x + S_{A_i}^y S_{B_j}^y) + S_{A_i}^z S_{B_j}^z] - H \sum_{i \in A} S_{A_i}^z - H \sum_{i \in B} S_{B_i}^z \\ & - \sum_{\langle i,j \rangle} D (S_{A_i}^x S_{B_j}^y - S_{A_i}^y S_{B_j}^x) \end{aligned} \right\rangle_0 \\ & - \left\langle \begin{aligned} & \sum_p J [(1 - \Delta) (S_{A_p}^x S_{B_p}^x + S_{A_p}^y S_{B_p}^y) + S_{A_p}^z S_{B_p}^z] - D (S_{A_p}^x S_{B_p}^y - S_{A_p}^y S_{B_p}^x) \\ & - (\eta_A + H) S_{A_p}^z - (\eta_B + H) S_{B_p}^z \end{aligned} \right\rangle_0. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Usando o fato de que todos os pares de ligações são eliminadas, ficando apenas os íons externos aos aglomerados e fazendo a seguinte aproximação  $\langle S_{A_i}^\nu S_{B_j}^\nu \rangle_0 = \langle S_{A_i}^\nu \rangle \langle S_{B_j}^\nu \rangle \delta_{\nu z} =$

$m_A m_B \delta_{\nu z}$ , que corresponde aos íons livres. Aqui  $m_\nu$  é a magnetização da sub-rede  $\nu$ . Assim,

$$\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 = \frac{N}{2} J (z - 1) m_A m_B + \eta_A \frac{N}{2} m_A + \eta_B \frac{N}{2} m_B. \quad (3.5)$$

A função de partição do sistema é

$$Z = Tr_{12} e^{-\beta \mathcal{H}_0}, \quad (3.6)$$

com (3.3) em (3.6) obtemos

$$Z_0 = Tr \exp \left\{ -\beta \left[ \begin{array}{l} J \left[ (1 - \Delta) \left( S_{A_p}^x S_{B_p}^x + S_{A_p}^y S_{B_p}^y \right) + S_{A_p}^z S_{B_p}^z \right] - \\ - D \left( S_{A_p}^x S_{B_p}^y - S_{A_p}^y S_{B_p}^x \right) - (\eta_A + H) S_{A_p}^z - (\eta_B + H) S_{B_p}^z \end{array} \right] \right\}^{\frac{N}{2}}. \quad (3.7)$$

Definindo o operador  $\hat{A}$  como

$$\hat{A} = \begin{array}{l} J \left[ (1 - \Delta) \left( S_{A_p}^x S_{B_p}^x + S_{A_p}^y S_{B_p}^y \right) + S_{A_p}^z S_{B_p}^z \right] - \\ - D \left( S_{A_p}^x S_{B_p}^y - S_{A_p}^y S_{B_p}^x \right) - (\eta_A + H) S_{A_p}^z - (\eta_B + H) S_{B_p}^z \end{array}, \quad (3.8)$$

a Eq. (3.7) ficará reescrita por

$$Z = [Tr (e^{-\beta \hat{A}})]^{\frac{N}{2}} = \left[ \sum_n e^{-\beta \lambda_N} \right]^{\frac{N}{2}}, \quad (3.9)$$

onde  $\lambda_N$  são os autovalores da matriz  $\hat{A}$ . Na base  $\{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\}$ ,  $\hat{A}$  é escrita por

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} J - \eta_A - \eta_B - 2H & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -J - \eta_A + \eta_B & 2J(1 - \Delta) - 2D_i & 0 \\ 0 & 2J(1 - \Delta) + 2D_i & J + \eta_A - \eta_B & 0 \\ 0 & 0 & 0 & J + \eta_A + \eta_B + 2H \end{pmatrix}. \quad (3.10)$$

Diagonalizando a matriz (3.10) obtemos os seguintes autovalores:

$$\lambda_1 = J - \eta_A - \eta_B - 2H \quad (3.11)$$

$$\lambda_2 = J + \eta_A + \eta_B + 2H \quad (3.12)$$

$$\lambda_3 = -J + \sqrt{4J^2(1 - \Delta)^2 + 4D^2 + (\eta_A - \eta_B)^2} \quad (3.13)$$

$$\lambda_4 = -J - \sqrt{4J^2(1 - \Delta)^2 + 4D^2 + (\eta_A - \eta_B)^2}. \quad (3.14)$$

Substituindo os autovalores (3.11) – (3.14) na Eq. (3.9) obtemos

$$Z_0 = \left\{ \begin{array}{l} 2e^{-\beta J} \cosh \beta [(\eta_A + \eta_B + 2H)] + \\ + 2e^{\beta J} \cosh \beta \left[ \sqrt{4J^2(1 - \Delta)^2 + 4D^2 + (\eta_A - \eta_B)^2} \right] \end{array} \right\}^{\frac{N}{2}}. \quad (3.15)$$

Para calcularmos o mínimo da energia, usaremos a desigualdade de Bogoliubov vista na Eq. (2.24). Temos então, a seguinte equação

$$f(\eta) = \frac{\phi(\eta)}{N} = -\frac{k_B T}{2} \ln \left\{ \begin{array}{l} 2e^{-\beta J} \cosh \beta [(\eta_A + \eta_B + 2H)] + \\ + 2e^{\beta J} \cosh \beta \left[ \sqrt{4J^2(1 - \Delta)^2 + 4D^2 + (\eta_A - \eta_B)^2} \right] \end{array} \right\} + \\ + \frac{\eta_A m_A}{2} + \frac{\eta_B m_B}{2} + \frac{J}{2} (z - 1) m_A m_B \quad (3.16)$$

Minimizando (3.16) com relação a  $m_A$  e  $m_B$  obtemos os valores dos parâmetros variacionais, que são dados por  $\eta_A = -J(z - 1)m_B$  e  $\eta_B = -J(z - 1)m_A$ . Agora mini-

mizando (3.16) com relação aos parâmetros variacionais, obtemos a magnetização para a sub-rede  $A$  e  $B$ , onde são dadas pelas seguintes equações de estado

$$m_A = \frac{e^{-K} \sinh \beta [-J(z-1)(m_A + m_B) + 2H] + e^K W \sinh \beta \Omega}{e^{-K} \cosh \beta [-J(z-1)(m_A + m_B) + 2H] + e^K \cosh \beta \Omega} \quad (3.17)$$

$$m_B = \frac{e^{-K} \sinh \beta [-J(z-1)(m_A + m_B) + 2H] - e^K W \sinh \beta \Omega}{e^{-K} \cosh \beta [-J(z-1)(m_A + m_B) + 2H] + e^K \cosh \beta \Omega}, \quad (3.18)$$

onde  $W = \frac{J(z-1)(m_A - m_B)}{\Omega}$ ,  $\Omega = \left[ \sqrt{J^2(z-1)^2(m_A - m_B)^2 + 4J^2(1 - \Delta)^2 + 4D^2} \right]$  e  $K = \beta J$ .

Para analisar a criticalidade do sistema (i.e., obter  $T_N(H, D)$ ), definiremos um parâmetro de ordem que caracteriza a transição de fase. Nem sempre numa transição de fase um parâmetro de ordem pode ser levado em conta. Em um modelo de polímeros existe uma transição de fase que vai de uma fase não-polimerizada para uma fase polimerizada não ficando caracterizado um parâmetro de ordem, como foi mostrado por STILCK (2006) e WHEELER (1980). Os dois parâmetros que utilizaremos são as magnetizações total ( $m$ ) e staggered ( $m_S$ ), que são dadas por

$$m = \frac{1}{2}(m_A + m_B) \quad (3.19)$$

$$m_S = \frac{1}{2}(m_A - m_B). \quad (3.20)$$

Substituindo (3.17) e (3.18) nas Eq.(3.19) e (3.20), reescrevemos as equações de estados em termos de  $m$  e  $m_S$  por

$$m_S = \frac{W_1 \sinh 2K \Omega_1}{e^{-2K} \cosh [2K(h - (z-1)m)] + \cosh 2K \Omega_1}, \quad (3.21)$$

e



$$m = \frac{\sinh [2K (h - (z - 1) m)]}{\cosh [2K (h - (z - 1) m)] + e^{2K} \cosh 2K \Omega_1}. \quad (3.22)$$

onde  $W_1 = \frac{(z-1)m_S}{\Omega_1}$ ,  $\Omega_1 = \sqrt{(z-1)^2 m_S^2 + (1-\Delta)^2 + D_0^2}$ ,  $D_0 = D/J$  e  $h = \frac{H}{J}$ .

A energia livre minimizada substituindo  $m$ ,  $m_S$ ,  $\eta_A$  e  $\eta_B$  fica escrita na forma

$$f(m, m_S) = -\frac{k_B T}{2} \ln \left\{ \frac{2e^{-K} \cosh 2K [(h - (z - 1) m)] +}{+2e^K \cosh 2K \sqrt{(z - 1)^2 m_S^2 + (1 - \Delta)^2 + D_0^2}} \right\} - \frac{J}{2} (z - 1) (m^2 - m_S^2). \quad (3.23)$$

### 3.3 RESULTADOS

Das Eqs.(3.21) e (3.22), obtemos os parâmetros  $m$  e  $m_S$  resolvendo simultaneamente duas equações não lineares acopladas como uma função da temperatura, do campo magnético, da interação  $D_0$  e da anisotropia  $\Delta$ . Na ausência de campo externo ( $H = 0$ ), espera-se fisicamente que as magnetizações das sub-redes  $A$  e  $B$  sejam opostas (i.e.,  $m_A = -m_B$ ) e diferente de zero para  $T < T_N(0)$ .

Essa dissertação tem como objetivo determinar os diagramas de fases nos planos  $(T, H)$  e  $(T, D)$  como função da anisotropia  $\Delta$ ; trataremos os metamagnetos de Ising ( $\Delta = 1$ ) e de Heisenberg ( $\Delta = 0$ ) nas redes cúbica simples e quadrada. A linha crítica é obtida através do procedimento da construção de Maxwell que consiste nas igualdades das energias livres das fases **AF** e **P** ( $m_S = 0$ ). Na fase **AF** a energia livre é dada pela Eq. (3.23) e as equações de estado pelas equações (3.21) e (3.22). Na fase paramagnética (**P**) temos que  $m_S = 0$  e  $m = m_0$ , e das equações (3.21) e (3.23) obtemos, respectivamente, a equação de estado e energia livre pelas expressões

$$m_0 = \frac{\sinh [2K (h - (z - 1) m_0)]}{\cosh [2K (h - (z - 1) m_0)] + e^{2K} \cosh 2K \sqrt{(1 - \Delta)^2 + D_0^2}} \quad (3.24)$$

$$f(m_0) = -\frac{k_B T}{2} \ln \left\{ \frac{2e^{-K} \cosh 2K [(h - (z - 1) m_0)] +}{+2e^K \cosh 2K \left[ \sqrt{(1 - \Delta)^2 + D_0^2} \right]} \right\} - \frac{J}{2} (z - 1) m_0^2 \quad (3.25)$$

A linha crítica  $T_N(D)$  e  $T_N(H)$  para dados valores de  $\Delta$  e número de coordenação  $z$  é obtida resolvendo simultaneamente as Eqs. (3.21), (3.22) e (3.23) e fazendo a igualdade entre as energias livres  $f(m, m_s) = f(m_0)$ . Podemos mostrar analiticamente que existirá um campo crítico  $H_C = zJ$ , no limite de  $T = 0$  (estado fundamental) e  $D_0 = 0$ , que independerá do parâmetro de anisotropia  $\Delta$ , ou seja, os modelos **AF** de Heisenberg- $\frac{1}{2}$  e Ising- $\frac{1}{2}$  possuem o mesmo ponto crítico  $H_C$  em  $T = 0$ . Isso deve ocorrer devido a aproximação (campo médio) que utilizamos, que certamente uma teoria um pouco mais elaborada pode desvendar a veracidade desse resultado, por exemplo, resultados recentes de grupo de renormalização (OKUNISHI et al., 1999) no modelo de Heisenberg **AF** unidimensional em  $T = 0$ , mostram a existência de um campo crítico em que  $H_C = 1.883J$  que é diferente do valor  $H_C = 2.0J$  para o metamagneto de Ising. No limite  $T = 0$  para o caso do ponto crítico  $D_C$  não satisfaz o comportamento  $D_C = zJ$ , mas os modelos **AF** de Heisenberg- $\frac{1}{2}$  e Ising- $\frac{1}{2}$  possuem o mesmo ponto crítico  $D_C$  em  $T = 0$ . Cálculos antigos de ondas de spin (NETO, M. A., 2004), que é muito apropriado no regime de baixas temperaturas, no modelo de Heisenberg quântico **AF** na presença de um campo externo indica que o ponto crítico em  $T = 0$  vale  $H_C = zJ$  analogamente ao equivalente clássico (modelo de Ising), que a dependência entre  $H$  e  $T$  é dado para  $T \simeq 0$  pela expressão

$$\frac{H}{H_C} \simeq 1 - AT^{\frac{3}{2}}, \quad (3.26)$$

onde  $A = \xi(3/2)(1/4\pi^2)^{3/4}$  (para uma rede cúbica símples) é uma constante que depende

da topologia de rede e  $H_C = zJ$  (BUBLITZ, 2004). Usaremos esse resultado como guia da validade dos nossos métodos aproximativos.

### 3.4 DIAGRAMAS DE FASE

Nesta seção iremos mostrar os resultados dos diagramas de fase para o modelo de Heisenberg quântico de spin -  $\frac{1}{2}$  **AF** submetido a um campo externo e a interação **DM**, aplicando nas redes cúbica simples ( $z = 6$ ) e quadrada ( $z = 4$ ). Iremos utilizar as notações  $h = H/J$  e  $d = D/J$ .

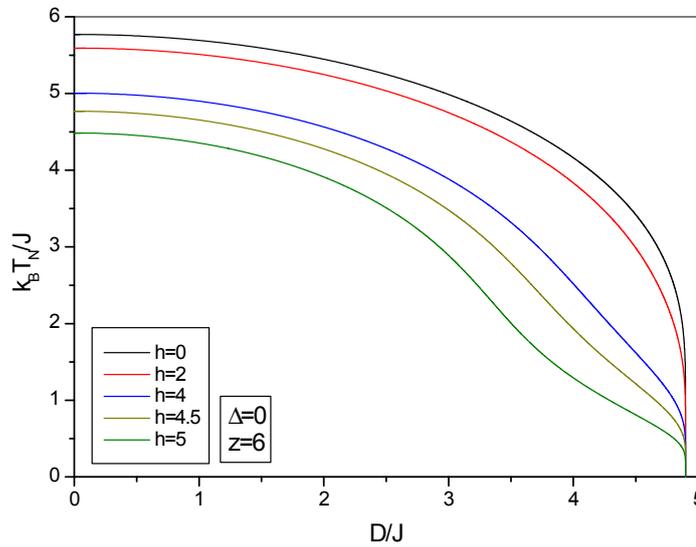


Figura 3.1: Diagrama de fase no plano  $D - T$  para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) com diferentes valores de  $h$ , para o modelo de Heisenberg, obtido por **MFA-2**.

Na figura (3.1) mostramos o diagrama de fase observando o comportamento de  $T_N(D)$  para o modelo de Heisenberg- $\frac{1}{2}$  **AF** numa rede cúbica simples, para alguns valores do campo externo, onde o caso de campo externo nulo ( $H = 0$ ) foi obtido previamente por Sousa e Gil (1999). Este modelo possui uma transição de segunda ordem com o valor

de  $D_0 = D_C = 4.90$ , que é igual ao obtido na referência anterior, para qualquer que seja o valor do campo externo  $H$ . À medida que vamos aumentando o valor do campo, a temperatura de transição vai diminuindo. Para altos campos temos uma mudança na concavidade da curva crítica  $T_N(D)$ . Veremos adiante que o mesmo comportamento ocorre para o diagrama de fase  $H$  versus  $T$  e tentaremos chegar à conclusão desse comportamento. Para o modelo de Ising temos que  $D_C$  e  $T_N$  são menores que no modelo de Heisenberg, tanto na rede quadrada como na rede cúbica simples, com um único valor de  $D_C$  para todos os campos aplicados.

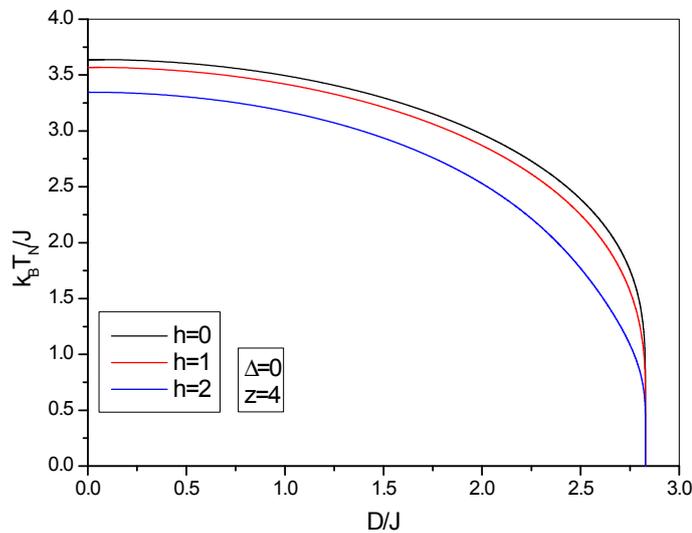


Figura 3.2: Diagrama de fase com diferentes valores de  $h$ , para o modelo de Heisenberg, no plano  $D - T$  para uma rede quadrada ( $z = 4$ ) obtido por **MFA-2**.

A figura (3.2) apresenta os resultados para o modelo de Heisenberg- $\frac{1}{2}$  **AF** para uma rede quadrada ( $z = 4$ ) com alguns valores do campo externo  $H$ . Este modelo também possui transição de fase de segunda ordem com o valor de  $D_C = 2.82$ , para todos os valores do campo externo. O comportamento da temperatura de transição é o mesmo do caso anterior, e também a temperatura diminui à medida que aumentamos o campo.

Os dois diagramas de fase seguintes, figuras (3.3) e (3.4), temos o limite de estabilidade, dado por uma linha contínua, entre as fases antiferromagnética (**AF**) e paramagnética (**P**) no plano  $T - H$  para as redes cúbica simples ( $z = 6$ ) e quadrada ( $z = 4$ ), respectivamente, e vários valores de  $D_0$ , usando a teoria de campo médio **MFA-2** para o modelo de Heisenberg- $\frac{1}{2}$  **AF**.

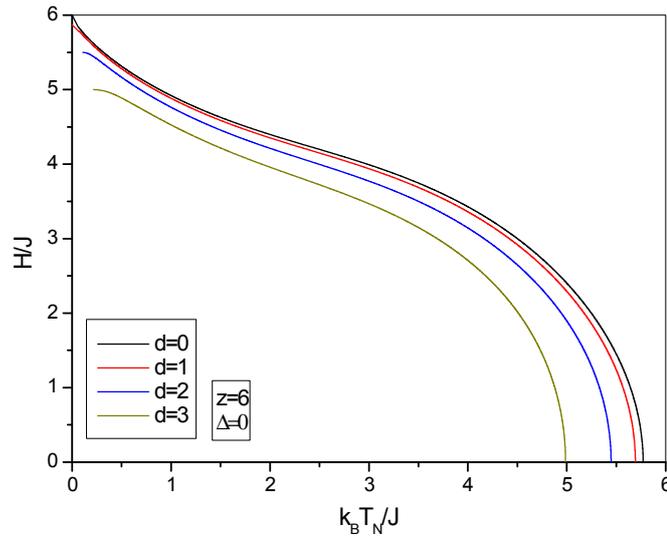


Figura 3.3: Diagrama de fase no plano  $H - T$  para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ), variando o valor da anisotropia  $d$  e  $\Delta = 0$ .

Observamos nas figuras (3.3) e (3.4) que na região de baixas temperaturas (altos campos,  $H = H_C$ ) obtivemos um comportamento assintótico exponencial  $\frac{H}{H_C} \simeq 1 - Ae^{-\frac{a}{T}}$  em desacordo com a previsão de ondas de spin dado pela Eq.(3.26). Este mesmo resultado foi obtido para  $D_0 = 0$  por Bublitz (2003). Nos mesmos diagramas de fase detectamos uma mudança de concavidade da curva crítica  $T_N(H)$ , que para  $\frac{H}{zJ} \lesssim 3,5$  temos a mudança de concavidade. Fisicamente, os resultados da mudança de concavidade podem ser interpretados como sendo devido ao *crossover* no regime de altas temperaturas, onde **MFA-2** é qualitativamente confiável, para o regime de baixas temperaturas (altos

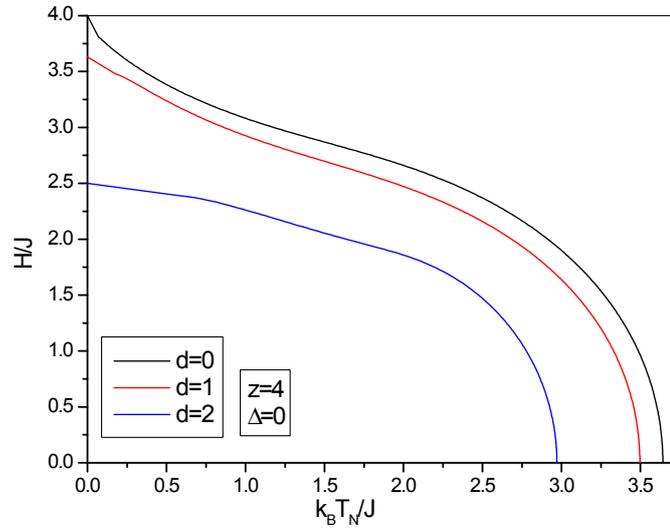


Figura 3.4: Diagrama de fase no plano  $H - T$  para uma rede quadrada ( $z = 4$ ), com vários valores de  $d$  e  $\Delta = 0$ .

campos) no qual as flutuações quânticas são predominantes (relação de comutações são relevantes) e **MFA-2** não é geralmente apropriada para descrever curvas críticas. Um exemplo prático dessa inconsistência física apresentada por **MFA-2**, podemos citar a não verificação do teorema de Mermin e Wagner que garante que  $T_N = 0$  no modelo de Heisenberg  $2D$  isotrópico.

### 3.5 MAGNETIZAÇÃO TOTALE ALTERNADA (STAGGERED)

Nesta seção iremos estudar o comportamento das magnetizações total e alternada. Para isso, resolvemos simultaneamente o conjunto de Eqs. (3.21) e (3.22) agora para todos os termos da expansão, obtendo os comportamentos de  $m$  e  $m_S$  como uma função da temperatura utilizando **MFA-2**.

Nas figuras (3.5), (3.6) e (3.7) temos o comportamento da magnetização  $m = \frac{1}{2}(m_A + m_B)$  em função da temperatura para uma rede cúbica simples e  $\Delta = 0$ . Inicialmente iremos

fixar a anisotropia **DM** e variar o campo externo ( $H$ ). Observamos que na ausência de campo externo ( $H = 0$ ) a magnetização é nula, isto porque as magnetizações das sub-redes apresentam valores opostos ( $m_A = -m_B$ ) para qualquer temperatura. Por outro lado, a presença do campo externo ( $H > 0$ ) neste modelo **AF** faz com que  $|m_A| > |m_B|$ , devido à indução magnética na direção axial (direção de  $m_A$ ). Em baixas temperaturas [ $T < T_N(H)$ ] temos o crescimento da magnetização em consequência da existência de uma ordem **AF** ( $m_S \neq 0$ ) no sistema. Em altas temperaturas, [ $T > T_N(H)$ ] a ordem **AF** é destruída ( $m_S = 0$ ) e a magnetização decresce com o aumento da temperatura representando o comportamento da magnetização induzida por campo de um sistema paramagnético [ $T > T_N$ ]. Logo, para vários valores do campo  $H < H_C$  a magnetização  $m(T, H)$  apresenta uma descontinuidade em  $T = T_N(H)$ , caracterizando desta forma a transição de fase (2ª ordem) deste modelo. Para altos valores do campo magnético ( $H > H_C$ ), a ordem **AF** é destruída, isto é,  $m(T, H)$  decresce com o aumento da temperatura.

Nas figuras (3.8), (3.9) e (3.10) iremos fixar os valores do campo externo ( $H$ ) e iremos variar os valores da anisotropia **DM** ( $D_0$ ). Notamos o mesmo comportamento que ocorre quando fixamos a anisotropia **DM** e variamos o campo, onde à medida que aumentamos a anisotropia **DM**, o valor da temperatura de transição diminui independentemente do tipo de rede e do parâmetro de anisotropia  $\Delta$ , ou seja, para o modelo de Ising e Heisenberg. Contudo, notamos que a magnetização é a mesma para todas as anisotropias **DM**, independentemente do valor do campo, até chegar na temperatura crítica ( $T = T_N$ ), onde a mesma apresenta descontinuidade e a magnetização passa a ser de um sistema paramagnético (a magnetização decresce com o aumento da temperatura).

Nas figuras (3.11)-(3.16) temos a dependência da magnetização staggered em função da temperatura, parâmetro de ordem do sistema **AF**. Sendo a transição de fase de 2ª ordem, observamos claramente o decréscimo do parâmetro de ordem à medida que a temperatura aumenta anulando-se continuamente em  $T = T_N$ . A influência do campo externo é de desordenar o sistema em temperaturas  $T_N(H > 0) < T_N(H = 0)$ , ou seja,

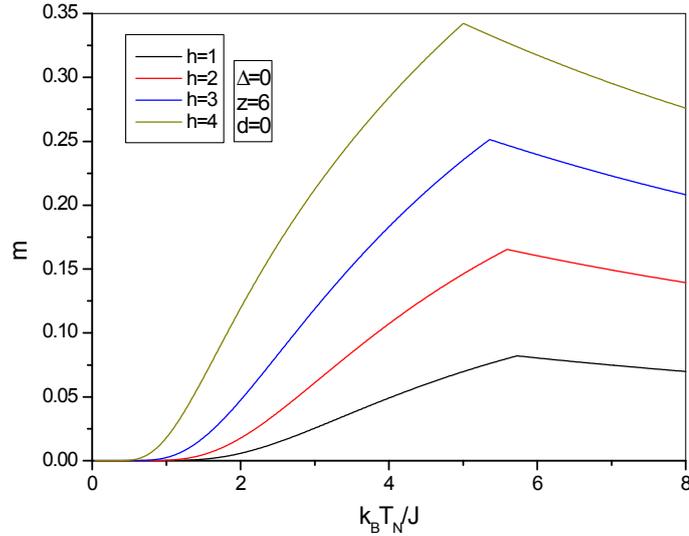


Figura 3.5: Comportamento da magnetização total em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores de campo externo e anisotropia **DM** nula ( $d = 0$ ).

$T_N$  diminui com o aumento de  $H$ . Inicialmente, nas figuras (3.11), (3.12) e (3.13), fixamos o valor da anisotropia **DM** e variamos o campo externo ( $H$ ). Em todos os gráficos a magnetização staggered em  $T = 0$  tem o mesmo valor, independentemente do valor do campo externo aplicado. À medida em que aumentamos o valor da anisotropia **DM** a magnetização staggered e a temperatura crítica diminuem. O comportamento da magnetização staggered para o modelo de Ising e para a rede quadrada é o mesmo que o apresentado numa rede cúbica simples utilizando o modelo de Heisenberg, diferenciando apenas pelos valores dos pontos críticos de  $T_C$  e  $m_S$ , que são menores no modelo de Ising e na rede quadrada.

Nas figuras (3.14), (3.15) e (3.16), fixamos o campo externo ( $H$ ) e variamos o valor da anisotropia **DM**. Diferentemente do comportamento das figuras (3.11) – (3.13), as figuras (3.14) – (3.16) não apresentam a mesma magnetização staggered e à medida em que aumentamos a anisotropia **DM** diminui o valor de  $m_S$ , contudo esta possui os mesmos

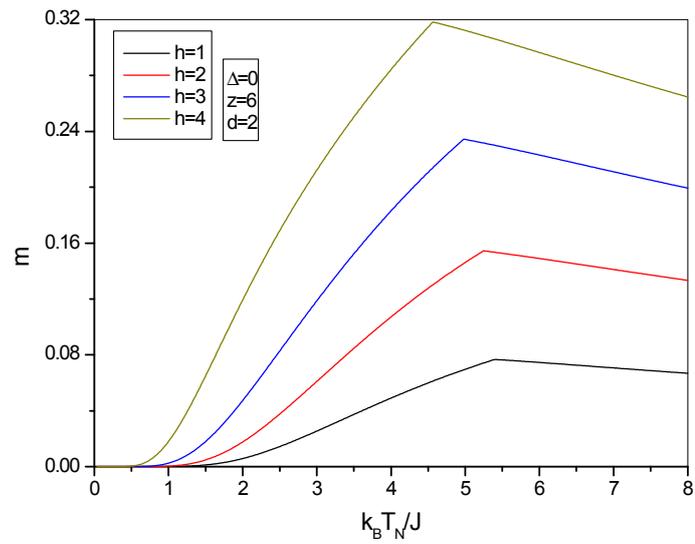


Figura 3.6: Comportamento da magnetização total em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores de campo externo e anisotropia **DM** ( $d = 2$ ).

valores para qualquer campo externo. A temperatura crítica ( $T_N$ ) também diminui com o aumento da anisotropia **DM**.

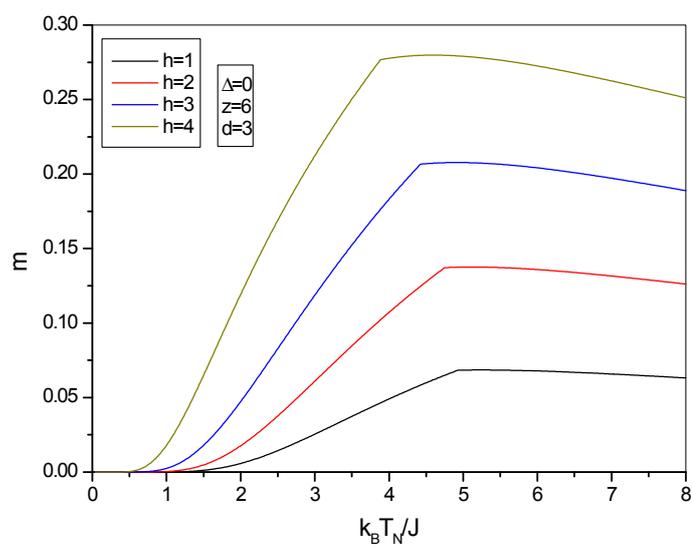


Figura 3.7: Comportamento da magnetização total em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores de campo externo e anisotropia  $\mathbf{DM}$  ( $d = 3$ ).

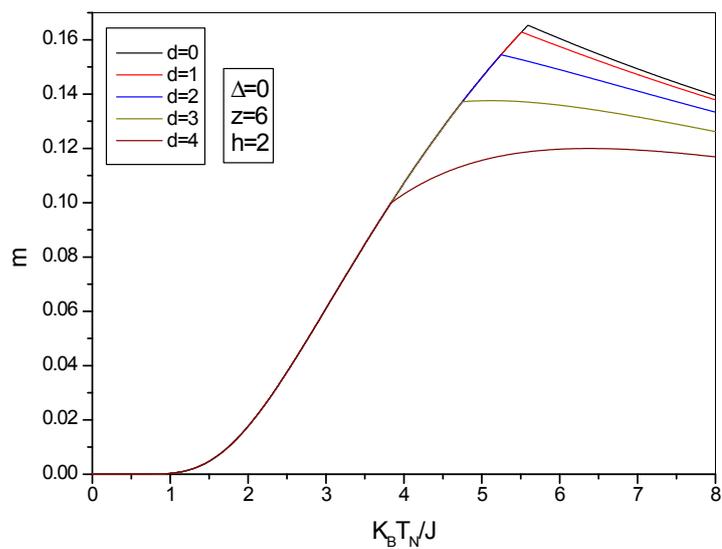


Figura 3.8: Comportamento da magnetização total em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores anisotropia  $\mathbf{DM}$  ( $D$ ) e campo externo fixo ( $h = 2$ ).

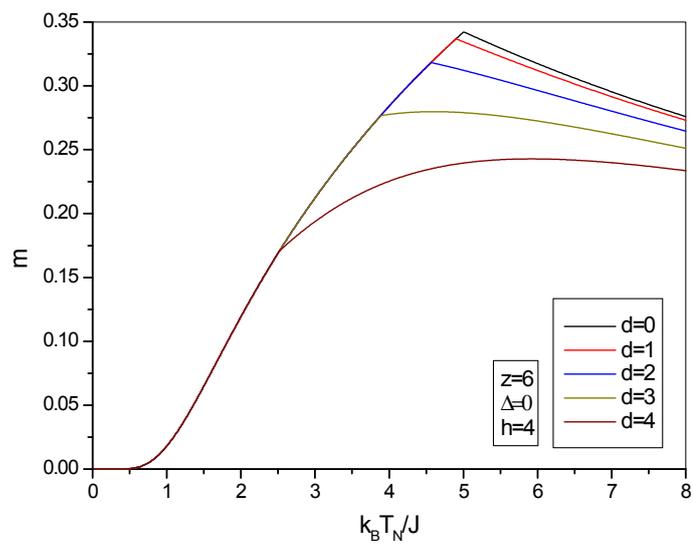


Figura 3.9: Comportamento da magnetização total em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores anisotropia  $\mathbf{DM}$  ( $D$ ) e campo externo fixo ( $h = 4$ ).

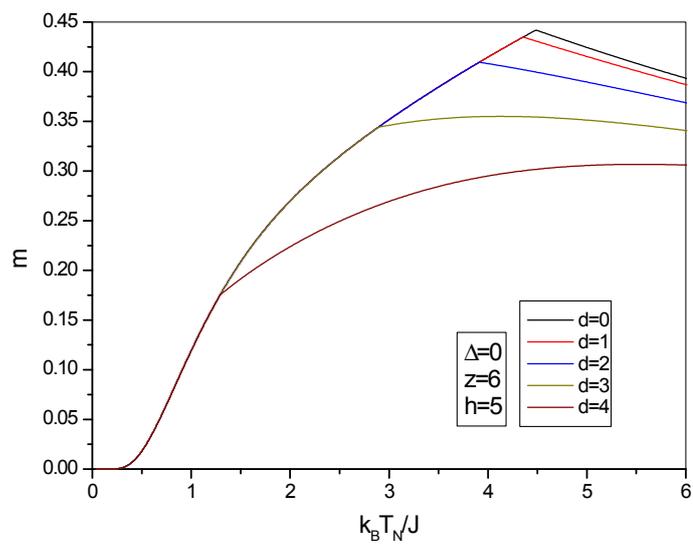


Figura 3.10: Comportamento da magnetização total em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores anisotropia  $\mathbf{DM}$  ( $D$ ) e campo externo fixo ( $h = 5$ ).

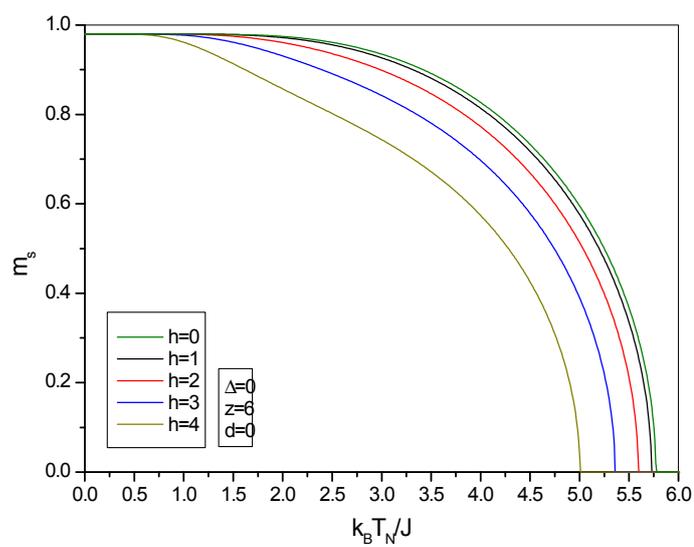


Figura 3.11: Comportamento da magnetização alternada em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores de campo externo ( $H$ ) e anisotropia **DM** fixa ( $d = 0$ ).

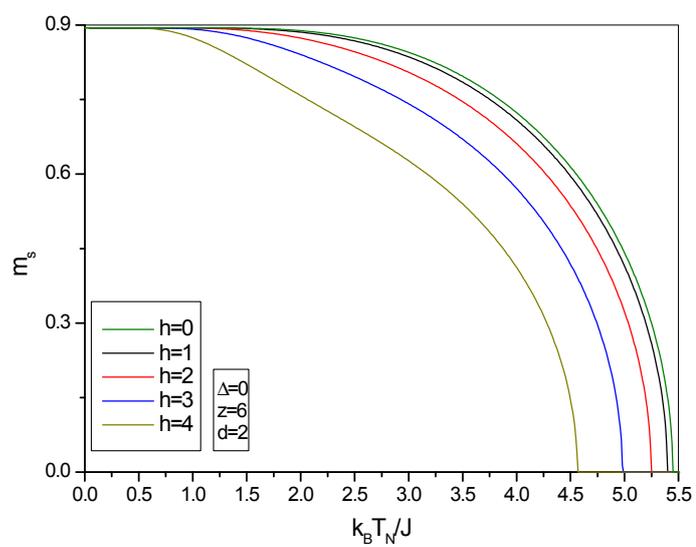


Figura 3.12: Comportamento da magnetização alternada em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores de campo externo ( $H$ ) e anisotropia **DM** fixa ( $d = 2$ ).

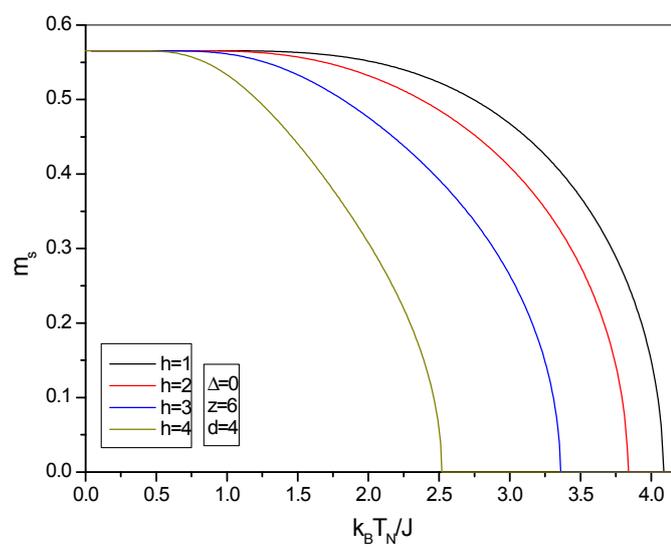


Figura 3.13: Comportamento da magnetização alternada em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores de campo externo ( $H$ ) e anisotropia **DM** fixa ( $d = 4$ ).

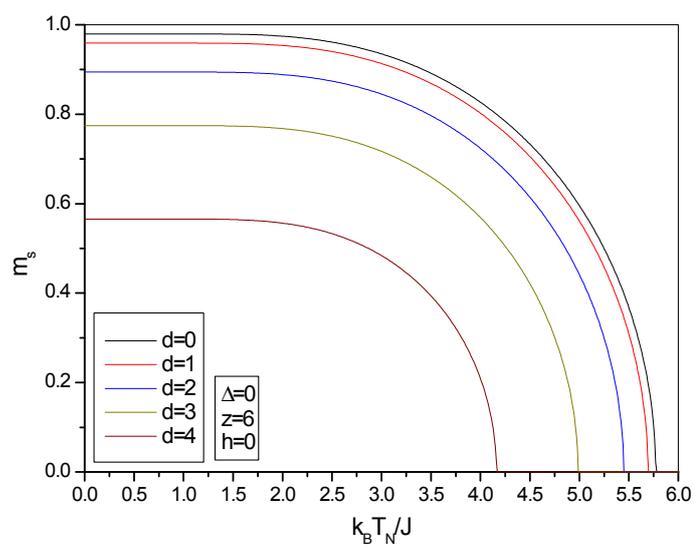


Figura 3.14: Comportamento da magnetização alternada em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores da anisotropia **DM** ( $D$ ) e campo externo fixo ( $h = 0$ ).

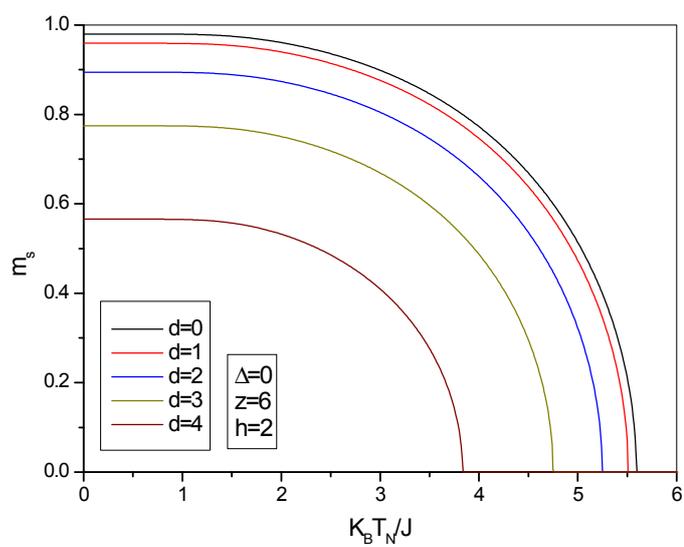


Figura 3.15: Comportamento da magnetização alternada em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores da anisotropia  $\mathbf{DM}$  ( $D$ ) e campo externo fixo ( $h = 2$ ).

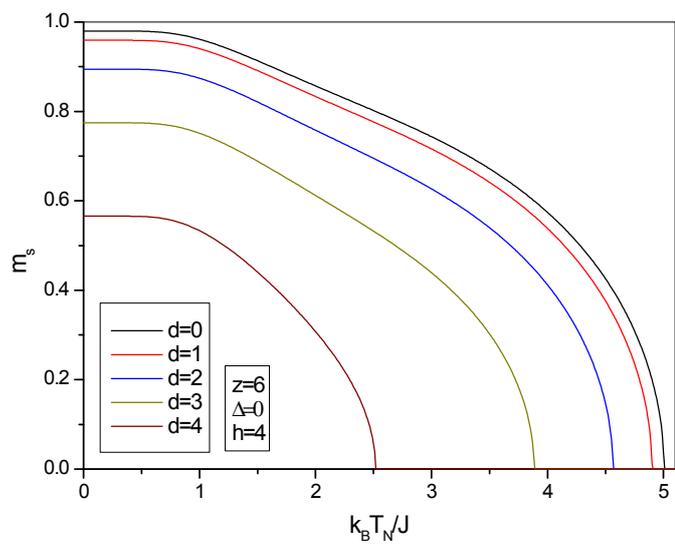


Figura 3.16: Comportamento da magnetização alternada em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores da anisotropia  $\mathbf{DM}$  ( $D$ ) e campo externo fixo ( $h = 4$ ).

## 4 TÉCNICA DO OPERADOR DIFERENCIAL APLICADA AO MODELO DE HEISENBERG ANTIFERROMAGNÉTICO COM INTERAÇÃO DZIALOSHINSKI-MORIYAE SUBMETIDO A CAMPO MAGNÉTICO EXTERNO

### 4.1 CONSIDERAÇÕES GERAIS

A teoria de campo efetivo, que é baseada na técnica do operador diferencial, foi estudada no Cap. 2 onde vimos que ela foi proposta por Honmura e Kaneyoshi (1978). Desenvolvemos essa técnica anteriormente para tratar sistemas de spins numa abordagem de aglomerados finitos (tamanho  $N$ ), onde o caso especial de aglomerado com dois spins (**EFT-2**) foi aplicado com sucesso numa variedade de modelos: Ising de spin- $\frac{1}{2}$  puro (BOBAK; JASCUR, 1986), (FALK, 1964) e diluído (TOMCZAK, et al., 1987), Blume-Capel (BOBAK; KARABA, 1987; TUCJER, 1990), Heisenberg ferromagnético de spin  $S = \frac{1}{2}$  (IDOGAKI; URYŪ, 1992; BOBAK; MOCKVICAK; SIVULKA, 1993),  $S = 1$

(IDOGAKI; TANAKA; TUCKER, 1998; IDOGAKY; MIYOSHI; TUCKER, 1996) e spins mistos ( $S = \frac{1}{2}$  e  $S = 1$ ) (MIYOSHI; TANAKA; TUCKER, 1999),  $n$ -vetorial (XU, et. al., 1998; SOUSA; ALBUQUERQUE, 1997), Heisenberg antiferromagnético (SOUSA, 1998).

O diagrama de fases no plano  $(T, H)$  do modelo de Ising obtidos através de **EFT-1** é qualitativamente correto, mas possui pequenas imperfeições se comparado com os resultados obtidos pela simulação de Monte Carlo (HERNANDEZ; DIEP; BERTRAND, 1993). Na ausência de interações de segundos vizinhos, que introduz no sistema interações competitivas, o diagrama de fases  $T - H$  para o metamagneto de Ising apresenta um estado de Néel (**AF**) caracterizado por ter configurações de spins antiparalelos em baixos campos e um estado desordenado (paramagnético - **P**) em altos campos com presença de uma magnetização induzida pelo campo externo, sendo que a linha crítica  $T_N(H)$  que separa as fases **AF** e **P** é de segunda ordem. No estado fundamental ( $T = 0$ ) existe um ponto crítico  $H_C = zJ$  ( $z$  é o número de primeiros vizinhos), onde para  $H < H_C$  e  $H > H_C$  estamos nas fases **AF** e **P**, respectivamente. Com a inclusão de segundos vizinhos ( $J'$ ) no modelo de Ising **AF**, dependendo do valor do parâmetro competitivo  $\alpha = \frac{J'}{J}$  vários pontos multicríticos (*tricrítico*, *bicrítico* e *bicrítico terminal*) são observados no diagrama de fases (GALAM; YOKOI; SALINAS, 1998; MOREIRA; FIGUEIREDO; HENRIQUES, 2002). Acima de um certo valor crítico  $\alpha_c$  o ponto tricrítico desaparece dando lugar no diagrama de fases a um ponto bicrítico terminal.

Os compostos  $FeCl_2$  e  $FeBr_2$  do ponto de vista experimental, são exemplos canônicos de metamagnetos de Ising, onde as medidas das propriedades termodinâmicas indicam a presença de um ponto tricrítico no composto  $FeCl_2$  (STRYLEWSKI; GIORDANO, 1977; SCHMIDT; FRIEDBERG, 1970), enquanto espalhamento de neutrôns tem indicado a presença de um ponto bicrítico no diagrama de fase  $T$  versus  $H$  no composto  $FeBr_2$  (KATSUMATA et al., 1997; BINK et al., 2000). A decomposição do ponto tricrítico no ponto bicrítico terminal no metamagneto de Ising tem explicação teórica na associação ao valor da interação de segundos vizinhos ( $J'$ ), que sendo ferromagnética

( $J' > 0$ ), cálculos de campo médio (GALAM, YOKOI, SALINAS, 1998; MOREIRA, FIGUEIREDO, HENRIQUES, 2002) mostram que para  $\alpha > \alpha_c$  observa-se a decomposição para o ponto bicrítico no diagrama de fase  $T$  versus  $H$ . Resultados de simulação Monte Carlo neste modelo não prevê tal decomposição (SELKE, 1996; PLEIMLING; SELK, 1997; ZUKOVIC; IDOGAKI, 2000).

A transição de fase quântica induzida por campo externo vem sendo investigada a algum tempo. A cadeia de Heisenberg em  $T = 0$  tem mostrado vários tipos de comportamentos não usuais nos processos de magnetização, tais como a forma quadrática associada ao GAP das excitações (SAKAI, TAKAHASHI, 1998; OKUMISH; HIEIDA; AKUTSU, 1999), as estruturas de escadas (*Plateaux*) que se deve essencialmente a cadeias dimerizadas, frustação, anisotropia de íon único, campos magnéticos periódicos entre outros (OSHIKAWA; YAMANAKA; AFFLECK, 1984; TOTSUKA, 1997; LITAIFF, et al., 2008), e singularidade tipo cusp (OKUNISHI; HIEIDA; AKUTSU, 1999). Foi mostrado por Langari (1998), usando grupo de renormalização via matriz densidade (DMRG), que para este modelo existe uma transição de fase contínua antiferromagnética (**AF**) para uma fase desordenada (**P**) no ponto crítico  $H = H_C = 1.883J$ , que difere do valor clássico  $H = H_C = zJ = 2J$ . Usando a teoria de campo efetivo em aglomerado com dois spins (**EFT-2**), Bublitz e de Sousa (2004) estudaram o modelo de Heisenberg numa rede cúbica simples ( $z = 6$ ) e encontraram o valor do campo crítico  $H_C = 6.224J$  diferindo mais uma vez do ponto crítico clássico  $H_C = zJ = 6J$ . NETO et al. (2009) estudaram o mesmo modelo utilizando **EFT-2** e **EFT-4** para as redes **SC** e **BCC**.

O modelo de Ising **AF** na presença de campo transversal ( $\Omega$ ) e longitudinal ( $H$ ) é um outro exemplo deste tipo de transição de fase quântica, em baixa dimensionalidade (fortes flutuações). O diagrama de fase no plano  $H - \Omega$ , utilizando **DMRG** numa cadeia em  $T = 0$  foi discutido (OVCHINNIKOV et al., 2003) e mostrado que o campo crítico  $\Omega_C(H = 0) = J$  é diferente do obtido através da aproximação de campo médio (**MFA**)  $\Omega_C = 2J$ . O diagrama de fase  $H - \Omega$  obtido por **MFA** apresentou um comportamento espúrio ao redor de  $H_C = H(\Omega = 0) = 2J$ , que está associado à presença de reentrância

(dois valores de  $\Omega$  para um certo valor de  $H > 2J$ ) não observado através do método mais rigoroso **DMRG**. O modelo quântico em duas dimensões foi analisado recentemente por Neto e Sousa (2004), onde utilizaram **EFT-1**, e Pacobahyba, Neto e Sousa (2009) utilizando percolação, verificaram a ausência do comportamento reentrante no diagrama de fase  $H - \Omega$  prevista pelo método **MFA**. Transição de fase quântica em modelos desordenados (vidro de spin) também foi explorada (VIANA; NOGUEIRA; SOUSA, 2003), onde a presença do ponto tricrítico (**PTC**), no diagrama de fase  $H - \Omega$  ( $T = 0$ ) depende do tipo de distribuição de probabilidade para o campo aleatório (bimodal ou gaussiana), ou seja, observamos **PTC** para o caso de distribuição bimodal com presença da transição de fase de 1ª e 2ª ordem.

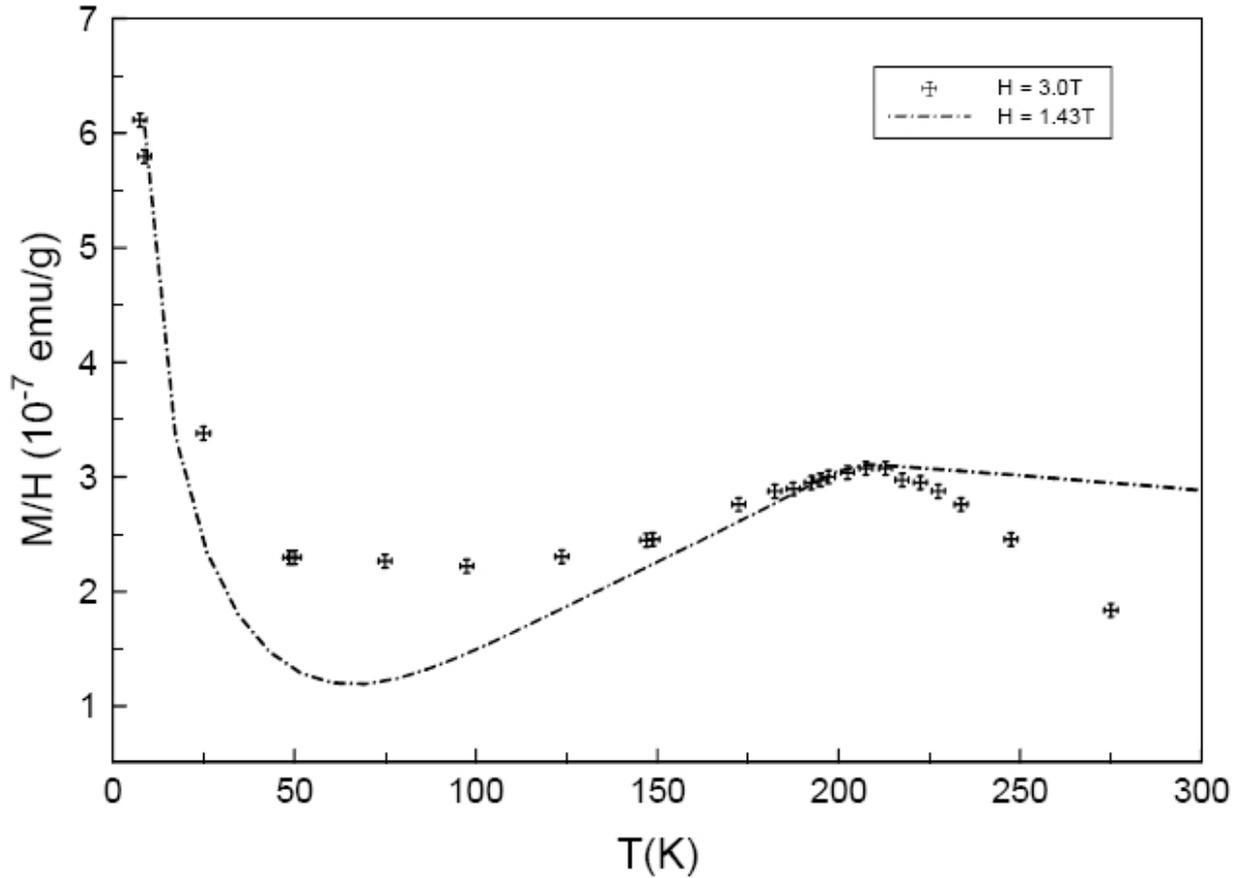
O diagrama de fase no plano  $T$  versus  $H$  para o modelo de Heisenberg quântico de spin- $\frac{1}{2}$  numa rede **3d AF** foi preliminarmente discutido nas regiões de altos (baixos) e baixos (altos) campos (temperaturas) usando ondas de spins (FALK, 1964) e expansão em série (PAN, 1998, 2000), respectivamente e somente recentemente foi analisada a curva crítica  $T_N(H)$  em todo o intervalo do campo magnético ( $0 \leq H \leq H_C$ ) usando **EFT-2** (BUBLITZ; SOUSA, 2004).

Um exemplo do metamagneto quântico é o composto antiferromagnético  $La_2CuO_4$  (SHIRANE, et al., 1987; ENDOH, et al., 1988), que teoricamente é descrito por um modelo de Heisenberg **AF** de spin- $\frac{1}{2}$  com interação entre os planos de  $CuO_2$   $\lambda J$  ( $\lambda \simeq 10^{-4}$ ), sendo  $J$  a interação de troca entre os íons de cobre ( $Cu^{+2}$ ) no plano  $XY$  ( $CuO_2$ ). O comportamento da susceptibilidade obtido através da técnica de espalhamento de nêutrons (COLLINS, et al., 1988), apresenta para altos campos magnéticos um comportamento anômalo, caracterizada por um ponto de mínimo e depois um ponto de máximo na temperatura de transição  $T_N(H)$ .

Na Fig. (4.1) apresentamos os resultados experimentais da susceptibilidade em função da temperatura para o composto  $La_2CuO_4$  na presença de um campo externo  $H = 3.0T$  (COLLINS, et al., 1988), verificando assim o comportamento anômalo. Na ausência de campo externo (ou pequenos valores do campo  $H$ ) esta anomalia na susceptibilidade não



é verificada. Analisando o comportamento da susceptibilidade em função da temperatura para vários campos  $H$ , a curva crítica  $T_N(H)$  para o composto  $La_2CuO_4$  é obtida, e na Fig. (4.2) apresentamos estes resultados experimentais.



Comportamento experimental da susceptibilidade magnética em função da temperatura para o composto  $La_2CuO_4$  na presença de um campo magnético externo  $H = 3.0T$  (COLLINS, et al., 1988).

Na Fig. (4.2) mostramos, também, o comportamento da magnetização ao longo da linha crítica  $T_N(H)$ , que ao redor de  $T_N(0)$  a magnetização vai a zero segundo a lei de potência  $M_S \simeq (T_N - T)^\beta$  com  $\beta = 0.5 \pm 0.02$  (valor médio). A notação **WFM** na Fig. (4.2) significa um fraco ferromagnetismo (*weak ferromagnetism*) no sistema, caracterizado pela presença da anisotropia anti-simétrica **DM**.

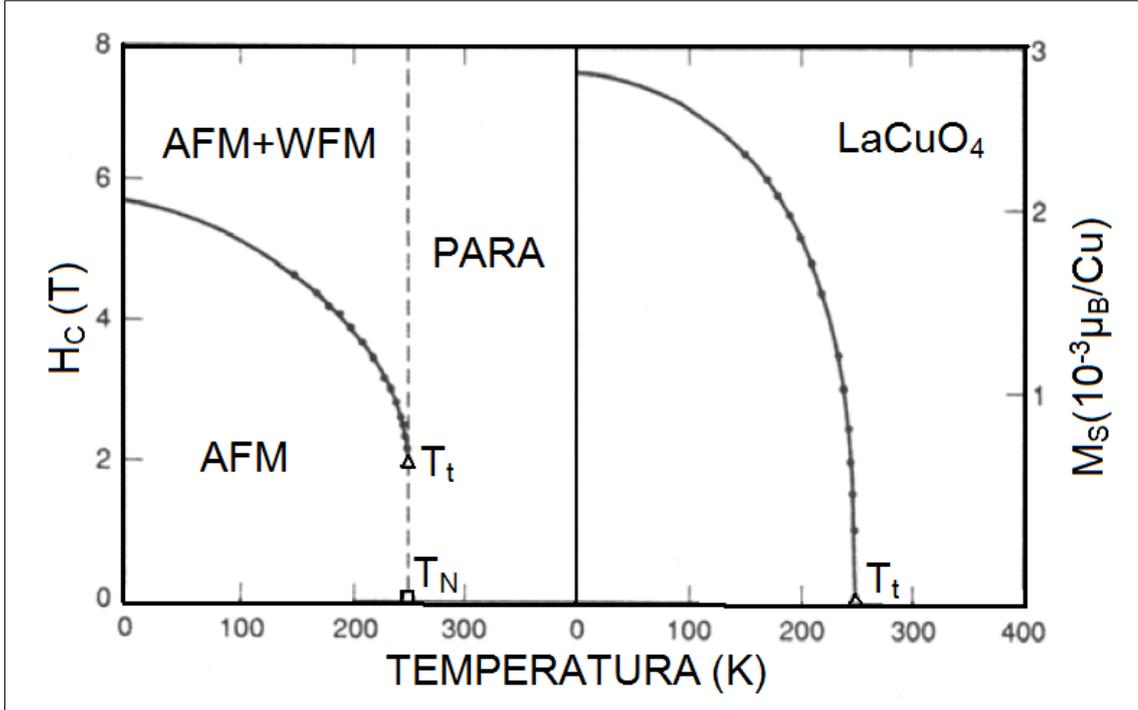


Figura 4.1: Diagrama de fase para o composto  $La_2CuO_4$ . No lado esquerdo temos o diagrama no plano  $T - H$  obtido através de medidas de magnetização ( $T_N = 253 \pm 0.5 K$ ,  $T_t = 251.5 \pm 0.5 K$ ). No lado direito temos o comportamento da magnetização em função da temperatura obtida ao longo da linha crítica  $T_N(H)$  (SHIRANE, et al., 1987).

Não existem cálculos teóricos, usando como ponto de partida o modelo de Heisenberg -  $1/2 \mathbf{AF}$  quase- $2d$ , capaz de reproduzir, pelo menos qualitativamente, os resultados experimentais das Figs. (4.1) e (4.2). Motivados pelos resultados da Fig. (4.2) resolvemos estender os resultados de Bublitz et. al., (2004), usando **EFT-2** no modelo de Heisenberg -  $1/2 \mathbf{AF}$  numa rede cúbica simples ( $z = 6$ ), onde estenderemos os cálculos para acrescentar a interação DM.

Neste capítulo desenvolveremos a técnica **EFT-2** para obter o diagrama de fase e as magnetizações total e alternada do modelo de Heisenberg Antiferromagnético de spin  $1/2$  com anisotropia Dzyaloshinski-Moriya (**DM**) e submetido a um campo magnético externo ( $H$ ), descrito pelo Hamiltoniano (3.1).

Escrevendo o Hamiltoniano (3.1) para um aglomerado com dois spins na aproximação axial (IDOGAKI; URYŪ, 1992; BOBAK; MOCKVICAK; SIVULKA, 1993), ficamos

$$-\beta\mathcal{H}_2 = -K [(1 - \Delta) (S_{1A}^x S_{2B}^x + S_{1A}^y S_{2B}^y) + S_{1A}^z S_{2B}^z] + (L + a_{1B}) S_{1A}^z + (L + a_{2A}) S_{2B}^z + (S_{1A}^x S_{2B}^y - S_{1A}^y S_{2B}^x) d. \quad (4.1)$$

onde  $K = \beta J$ ,  $L = \beta H$ ,  $d = \beta D$ ,  $a_{1B} = -\sum_{\vec{\delta}}^{z-1} K_{i\vec{\delta}} S_{1+\vec{\delta}_A}^z$  e  $a_{2A} = -\sum_{\vec{\delta}}^{z-1} K_{i\vec{\delta}} S_{2+\vec{\delta}_B}^z$ .

Na ausência da interação **DM** ( $D_{ij} = 0$ ) o modelo (4.1) em três dimensões foi estudado pela teoria de campo efetivo (SOUSA; ARAÚJO; NETO, 1998; BUBLITZ; SOUSA, 2003), onde foi analisado o diagrama de fase.

Com o uso da base  $\{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\}$  podemos escrever a forma matricial do operador (4.1) de forma análoga como foi feita no Cap. 3 desta dissertação (ver seção 3.2), obtemos os autovalores após a diagonalização da matriz que são:  $\lambda_1 = -K + a_{1B} + a_{2A} + 2L$ ,  $\lambda_2 = -K - a_{1B} - a_{2A} - 2L$ ,  $\lambda_3 = K + \sqrt{(a_{1B} - a_{2A})^2 + 4K^2(1 - \Delta)^2 + 4d^2}$  e  $\lambda_4 = K - \sqrt{(a_{1B} - a_{2A})^2 + 4K^2(1 - \Delta)^2 + 4d^2}$ . Logo, a função de partição fica

$$\mathcal{Z}_2 = 2e^{-K} \cosh \Omega + 2e^K \cosh W, \quad (4.2)$$

com  $\Omega = a_{1B} + a_{2A} + 2L$  e  $W = \sqrt{(a_{1B} - a_{2A})^2 + 4K^2(1 - \Delta)^2 + 4d^2}$ . A magnetização da sub-rede  $A$ ,  $m_{2A} = \langle S_{2A}^z \rangle = \frac{\partial \ln \mathcal{Z}_2}{\partial a_{1B}}$ , é obtida derivando a Eq.(4.2) e é dada por

$$m_A = \left\langle \frac{\sinh \Omega + e^{2K} \chi \sinh W}{\cosh \Omega + e^{2K} \cosh W} \right\rangle, \quad (4.3)$$

onde  $\chi = \frac{(a_{1B} - a_{2A})}{W}$ .

Aplicando a propriedade do operador diferencial  $e^{\vec{\alpha} \cdot \vec{D}} g(x, y) |_{x,y=0} = f(\vec{\alpha})$ ,  $\vec{\alpha} = (a_{1B}, a_{2A})$  e  $\vec{D} = \left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y} \right)$ , podemos reescrever a Eq.(4.3) como

$$m_A = \langle e^{a_{1B} D_x} e^{a_{2A} D_y} \rangle g(x, y) |_{x,y=0}, \quad (4.4)$$

com

$$g(x, y) |_{x,y=0} = \frac{\sinh \Omega + e^{2K} \chi \sinh W}{\cosh \Omega + e^{2K} \cosh W}, \quad (4.5)$$

onde devemos lembrar que a presença do campo magnético faz com que a função  $g(x, y)$  não tenha mais uma paridade bem definida conforme temos discutido no Cap. 2 desta dissertação.

Substituindo os valores de  $a_{1B}$  e  $a_{2B}$  a Eq.(4.4) pode ser reescrita como

$$m_A = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^{z-1} e^{-K_{i\delta} S_{1+\vec{\delta}}^z D_x} \prod_{\vec{\delta}}^{z-1} e^{-K_{i\delta} S_{2+\vec{\delta}}^z D_y} \right\rangle g(x, y) |_{x,y=0}. \quad (4.6)$$

Utilizando a identidade de van der Waerden para spin  $\frac{1}{2}$ , que é dada por  $e^{\lambda S_i} = \cosh \lambda + S_i \sinh \lambda$  a Eq.(4.6) fica

$$m_A = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^{z-1} (\alpha_x - S_{1+\vec{\delta}}^z \beta_x) \prod_{\vec{\delta}}^{z-1} (\alpha_y - S_{2+\vec{\delta}}^z \beta_y) \right\rangle g(x, y) |_{x,y=0}. \quad (4.7)$$

onde  $\alpha_x = \cosh K_{i\vec{\delta}} D_x$ ,  $\alpha_y = \cosh K_{i\vec{\delta}} D_y$ ,  $\beta_x = \sinh K_{i\vec{\delta}} D_x$  e  $\beta_y = \sinh K_{i\vec{\delta}} D_y$ .

A Eq. (4.7) é exata mas de difícil manipulação matemática, pois envolve um conjunto de equações acopladas de funções de correlação. A média térmica que aparece no lado direito desta equação é apenas sobre os spins ligados, e desta forma é particularmente aceitável fazermos uma aproximação a qual os efeitos de correlação de ordens superiores a primeira sejam desconsiderados, ou seja,

$$\langle S_i S_j \dots S_n \rangle \simeq \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle \dots \langle S_n \rangle, \quad (4.8)$$

com  $i \neq j \dots \neq n$ . A aproximação (4.8) desconsidera a correlação entre diferentes spins, porém as relações do tipo  $\langle (S_i^A)^2 \rangle = \langle (\sigma_i)^2 \rangle = 1$  são tomadas exatamente na contagem, enquanto a aproximação de campo médio usual despreza todo tipo de correlação.

Usando a Eq.(4.8) a Eq.(4.7) ficará



$$m_A = \left[ \prod_{\vec{\delta}}^{z-1} (\alpha_x - \beta_x \langle S_{1+\vec{\delta}_B}^z \rangle) \prod_{\vec{\delta}}^{z-1} (\alpha_y - \beta_y \langle S_{2+\vec{\delta}_A}^z \rangle) \right] g(x, y) |_{x,y=0} . \quad (4.9)$$

Logo,

$$m_A = (\alpha_x - \beta_x m_B)^{z-1} (\alpha_y - \beta_y m_A)^{z-1} g(x, y) |_{x,y=0} . \quad (4.10)$$

De maneira análoga obtemos a magnetização da sub-rede  $B$  dada por

$$m_B = (\alpha_x - \beta_x m_A)^{z-1} (\alpha_y - \beta_y m_B)^{z-1} g(x, y) |_{x,y=0} . \quad (4.11)$$

Expandindo em séries de potências de  $m_A$  e  $m_B$ , a Eq.(4.10) ficará reescrita na forma

$$m_A = \sum_{p=0}^{z-1} \sum_{q=0}^{z-1} B_{pq} m_A^p m_B^q, \quad (4.12)$$

com

$$B_{pq} = \binom{z-1}{p} \binom{z-1}{q} \alpha_x^{z-1-p} \beta_x^p \alpha_y^{z-1-q} \beta_y^q g(x, y) |_{x,y=0} , \quad (4.13)$$

onde os coeficientes  $B_{pq}$  são obtidos analiticamente através da relação  $e^{aD_x} e^{bD_y} g(x, y) |_{x,y=0} = g(x+a, y+b)$ , porém omitiremos por serem demasiadamente grandes.

De maneira análoga obtemos a magnetização da sub-rede  $B$  dada por

$$m_B = \sum_{p=0}^{z-1} \sum_{q=0}^{z-1} B_{pq} m_B^p m_A^q, \quad (4.14)$$

onde a Eq.(4.14) é facilmente obtida a partir da Eq.(4.12) fazendo a permuta  $m_A \longleftrightarrow m_B$ .

## 4.2 LIMITE DE ESTABILIDADE DA FASE ANTIFERROMAGNÉTICA

Como estamos interessados em analisar a criticalidade (i. e., obter  $T_N$ ), então podemos substituir  $m_A = m + m_S$  e  $m_B = m - m_S$  nas Eqs.(4.12) e (4.14). Na criticalidade

a magnetização alternada,  $m_S$  (parâmetro de ordem do sistema), tende a zero com a aproximação da temperatura crítica, permitindo considerar apenas os termos lineares de  $m_S$  nas Eqs.(4.12) e (4.14). Este processo gera um conjunto de duas equações acopladas que resolvidas simultaneamente obtêm-se o diagrama de fase, obtidos por

$$A_0(T, \Delta, H, D, m_0) = m_0, \quad (4.15)$$

e

$$A_1(T, \Delta, H, D, m_0) = 1, \quad (4.16)$$

com

$$A_0(T, \Delta, H, D, m_0) = \sum_{p=0}^{z-1} \sum_{q=0}^{z-1} B_{pq} m_0^{p+q}, \quad (4.17)$$

e

$$A_1(T, \Delta, H, D, m_0) = \sum_{p=0}^{z-1} \sum_{q=0}^{z-1} (p+q) B_{pq} m_0^{p+q-1}, \quad (4.18)$$

onde  $m_0$  é o valor da magnetização total na temperatura crítica ( $m_S = 0$ ).

#### 4.2.1 ESTADO FUNDAMENTAL ( $T \approx 0$ )

Analizaremos agora o sistema no estado fundamental, ou seja,  $T \simeq 0$ , onde obtemos a dependência do campo crítico  $H_C(\Delta, D)$ . Para o estado geral, as Eqs. (4.15) e (4.16) são resolvidas numericamente obtendo a temperatura de Néel  $T_N(\Delta, D)$  em função do campo magnético  $H$  e dos parâmetros  $(\Delta, D)$ .

Na figura (4.3) apresentamos  $H_C(\Delta, D)$  em função de  $D$  para o modelo de Heisenberg e o modelo de Ising. O gráfico para  $\Delta = 0$ , possui um ponto de máximo em  $d = 1.999$  e começa a decrescer até um valor de  $d = 2.089$ . A partir desse ponto volta a crescer e atinge outro ponto de máximo em  $d = 2.221$ , onde começa novamente a decrescer.



O gráfico para  $\Delta = 1$ , possui um comportamento semelhante ao do gráfico de  $\Delta = 0$ , porém possui o valor do primeiro ponto de máximo em  $d = 2.235$  onde começa a decrescer até o valor de  $d = 2.319$ , e volta a crescer até atingir o segundo ponto de máximo em  $d = 2.424$  onde começa novamente a decrescer. Estes pontos de máximo aparecem no comportamento das magnetizações.

O comportamento de máximo também é repetido para valores próximos de  $d = 1$ , tanto no modelo de Heisenberg, quanto no modelo de Ising. Este comportamento também é observado nos diagramas de fases e nos gráficos das magnetizações.

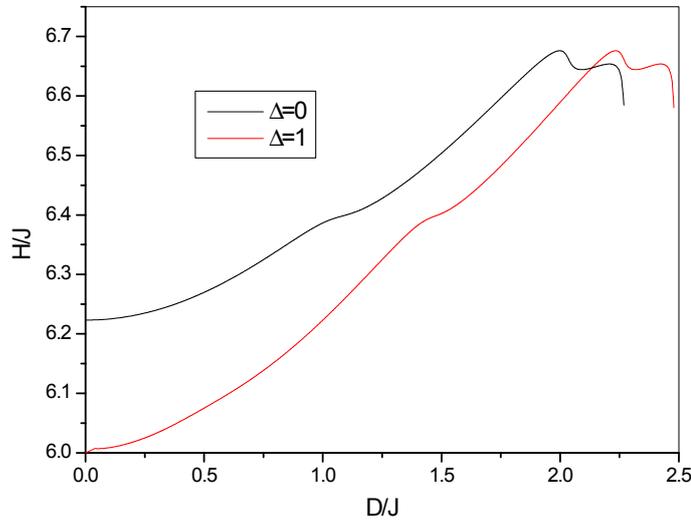


Figura 4.2: Diagrama de fase do estado fundamental no plano  $H - D$  obtido por **EFT-2**.

Nas Figs. (4.4) e (4.5) apresentamos os diagramas de fases nos planos  $H - \Delta$  e  $D - \Delta$ , respectivamente.

Na Fig. (4.4) podemos notar que à medida em que o valor da anisotropia  $\Delta$  passa do modelo de Heisenberg ( $\Delta = 0$ ) para o modelo de Ising ( $\Delta = 1$ ), o campo magnético diminui o seu valor, como esperado fisicamente. À medida em que aumentamos a anisotropia  $d$ , há uma diminuição nos  $H_C$ 's. Somente quando os valores da anisotropia

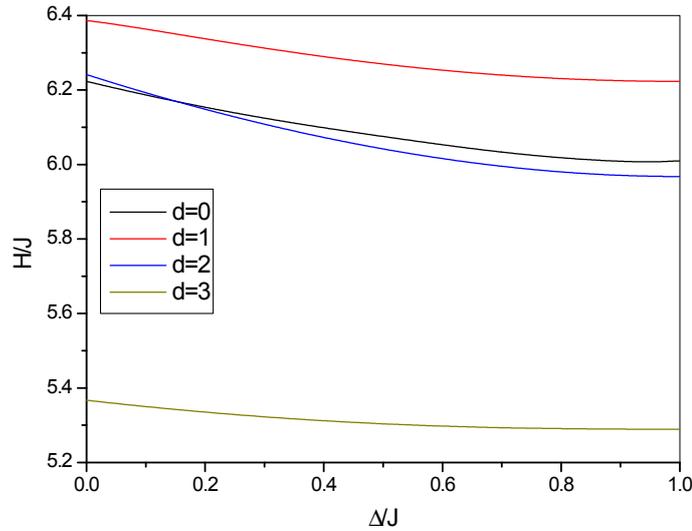


Figura 4.3: Diagrama de fase do estado fundamental no plano  $H - \Delta$  obtido por **EFT-2**.

são  $d = 1$  e  $2$ , temos um comportamento diferenciado, o que é refletido na Fig. (4.3).

Na Fig. (4.5) podemos notar que à medida em que aumentamos a anisotropia  $\Delta$ , passando do modelo de Heisenberg ( $\Delta = 0$ ) para o modelo de Ising ( $\Delta = 1$ ), a anisotropia  $d$  tem o seu valor aumentado, e a medida em que aumentamos o campo externo  $h$ , os valores dos  $d_C$ 's diminuem.

#### 4.2.2 DIAGRAMAS DE FASE

Nesta seção iremos mostrar os resultados dos diagramas de fases para o modelo anteriormente estudado aplicando **EFT-2**, fazendo o mesmo processo utilizado na seção 3.4 para a análise dos gráficos. Resolvendo numericamente as Eqs. (4.15) e (4.16) construiremos os diagramas de fases nos planos  $(T_N, H)$  para diferentes valores de  $\Delta$  e  $d$  e  $(T_N, D)$  para vários valores de  $h$  e  $\Delta$ .

Nas Figs.(4.6) e (4.7) mostramos os diagramas de fases do modelo de Heisenberg e Ising anisotrópico de spin- $\frac{1}{2}$  no plano  $T - D$  para alguns valores de campo externo ( $h$ ) e

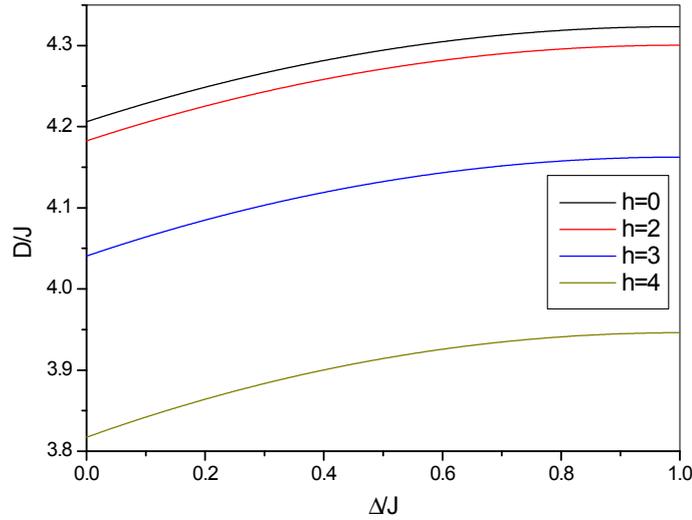


Figura 4.4: Diagrama de fase do estado fundamental no plano  $D - \Delta$  obtido por **EFT-2**.

para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ). Obtemos linhas críticas de transição de segunda ordem que dividem a fase antiferromagnética (**AF**), com parâmetro de ordem  $m_S \neq 0$ , da fase paramagnética (**P**) onde  $m_S = 0$ . Nossos resultados mostram um comportamento diferente daquele obtido pela aproximação de campo médio (**MFA-2**) vista na seção 3.4. Utilizando **EFT-2** os valores dos  $d_C$ 's diminuem à medida que aumentamos o campo externo aplicado, não convergindo para um valor único, como acontece quando utilizamos **MFA-2**. As temperaturas de transição ( $T_N$ ) têm os seus valores diminuídos daquelas obtidas com **MFA-2**. O modelo de Ising ( $\Delta = 1$ ) diferencia do modelo de Heisenberg ( $\Delta = 0$ ) por possuir maiores  $d_C$ 's e  $T_N$ 's.

Nas Fig.(4.8) e (4.9) temos os diagramas de fases do mesmo modelo no plano  $H - T$  com  $\Delta = 0$  e  $\Delta = 1$  respectivamente e alguns valores de anisotropia **DM**. Podemos observar que os valores de  $H_C$  decrescem à medida em que aumentamos a anisotropia **DM**, como acontece com **MFA-2**, havendo apenas dois valores ( $d = 1$  e  $d = 2$ ) que nas figuras (4.8) e (4.9) não se comportam da mesma maneira dos outros valores de  $d$ , isto é

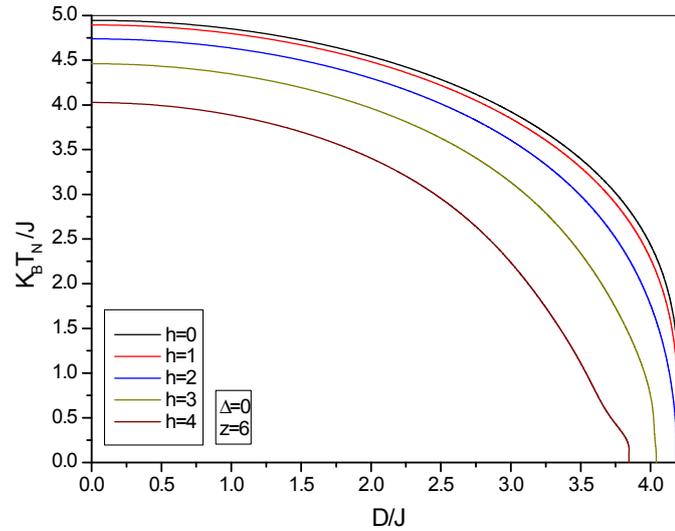


Figura 4.5: Diagrama de fase no plano  $D - T$  para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) com diferentes valores de  $h$ , para o modelo de Heisenberg, obtido por **EFT-2**.

refletido na Fig.(4.3) com os pontos de máximos.

Podemos notar um comportamento diferente quando temos os valores de ( $d = 1$  e  $d = 2$ ) nos gráficos (4.8) e (4.9), o que não aconteceu nos resultados de **MFA-2**.

Em ambos os gráficos temos um comportamento regular para  $T_N$ , que decresce monotonicamente com o aumento do campo crítico, exceto para os valores  $d = 1$  e  $d = 2$ .

Na Fig. (4.9) temos que para o valor de  $d = 0$  há uma reentrância na região de altos (baixas) campos (temperaturas) entre  $0 < k_B T_N < 2.0$ . Este resultado foi obtido anteriormente por Bublitz (2003).

Agora, faremos uma análise dos resultados dos diagramas de fases obtidos através de **EFT-2** e **MFA-2**.

A melhora nos resultados obtidos por **EFT-2** é visto nas Figs. (4.10) – (4.13), onde temos temperaturas críticas menores, observamos que nas Figs. (4.10) e (4.11) temos um comportamento diferente para as linhas críticas e temos os valores de  $H_C$ 's maiores,

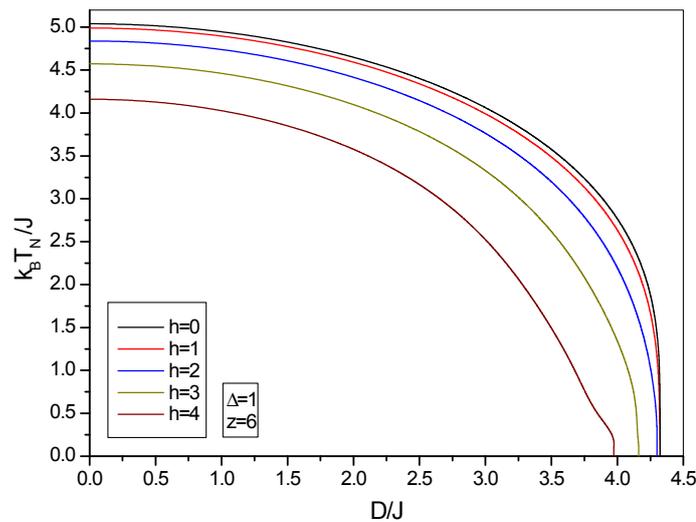


Figura 4.6: Diagrama de fase no plano  $D - T$  para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) com diferentes valores de  $h$ , para o modelo de Ising, obtido por **EFT-2**.

e nas Figs. (4.12) e (4.13) observamos que a anisotropia  $d$  tem seus valores reduzidos.

### 4.3 MAGNETIZAÇÃO TOTALE ALTERNADA

Resolvendo numericamente o conjunto de Eqs. (4.12) e (4.14) para  $T$ ,  $\Delta$ ,  $h$ ,  $d$  fixos obtemos as dependências de  $m(T)$  e  $m_S(T)$  em função da temperatura.

Nas figuras (4.14) - (4.16) mostramos a magnetização total em função da temperatura para diferentes valores do campo externo aplicado, fixando o valor da anisotropia **DM** em 0, 2 e 3, respectivamente. Na ausência de campo externo ( $H = 0$ ), esperamos fisicamente que as magnetizações das sub-redes  $A$  e  $B$  sejam opostas (i.e.,  $m_A = -m_B$ ) e diferentes de zero para  $T < T_N(0)$ , portanto, como resultado das Eqs. (4.12) e (4.14), temos que a magnetização induzida  $m$  é nula e  $m_S$  decrescerá gradualmente a zero com o aumento da temperatura  $T$ . O comportamento assintótico para o parâmetro de ordem  $m_S$  quando se aproxima de  $T = T_N(0)$  segue uma lei de potência com expoente crítico  $\beta = \frac{1}{2}$ , sendo

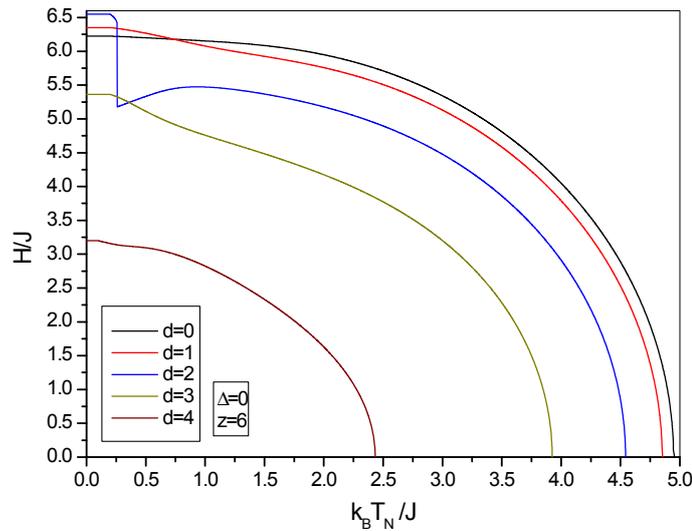


Figura 4.7: Diagrama de fase no plano  $H - T$  para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ), variando o valor da anisotropia  $d$  e  $\Delta = 0$ .

igual ao resultado clássico (campo médio). Por outro lado, à medida em que aumentamos o valor da anisotropia  $D$  e do campo externo  $H$ , mais spins a sub-rede  $B$  ( $\downarrow$ ) são flipados para cima, crescendo a magnetização  $m_A$  e conseqüentemente teremos um aumento da magnetização total  $m = \frac{(m_A + m_B)}{2} \simeq \chi_0 H$  (pequeno  $H$ ), onde  $\chi_0$  é a susceptibilidade a campo nulo o que apresenta um comportamento similar a  $m(T)$ . A temperatura nula ( $T = 0$ ), temos que  $m$  cresce linearmente com  $H$  (região de baixos campos) e para  $H > H_C$  a magnetização sofre uma saturação, correspondendo a um valor finito  $m_0$  na fase paramagnética.

Nas figuras (4.17) - (4.19) iremos fixar os valores do campo externo  $h$  e variar os valores de  $d$ . Diferente dos resultados obtidos através de **MFA-2**, os respectivos gráficos não apresentam valores das magnetizações iguais até chegar na temperatura crítica (caso **MFA-2**). Em todos os casos a temperatura de transição diminui com o aumento do campo externo e da anisotropia **DM**.

Nas figuras para  $d = 2$  e  $h = 5$  e também nas figuras para  $d = 3$  e  $h = 4$  em

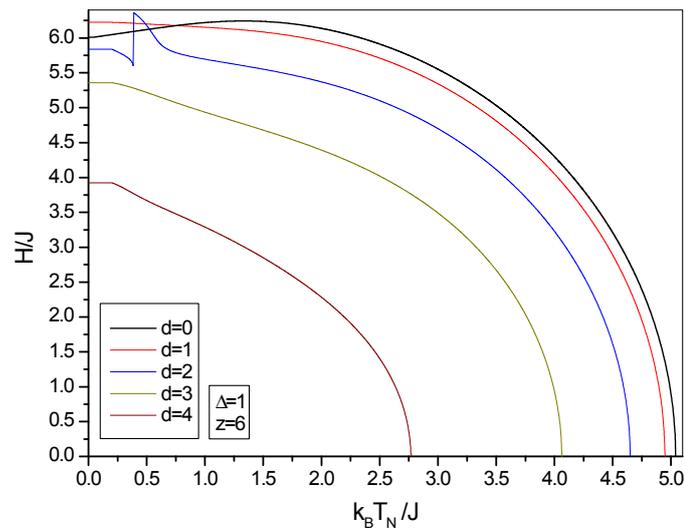


Figura 4.8: Diagrama de fase no plano  $H - T$  para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ), variando o valor da anisotropia  $d$  e  $\Delta = 1$ .

baixas temperaturas encontramos um ponto de mínimo aparecendo um comportamento reentrante com a presença de duas temperaturas críticas.

Nas figuras (4.20)-(4.22) mostramos a magnetização alternada  $m_S$  em função da temperatura para diferentes valores de campo externo aplicado e fixando o valor da anisotropia  $d$  de 0 [fig (4.20)], 2 [fig (4.21)] e 3 [fig (4.22)]. Nestes gráficos, à medida em que  $T$  cresce  $m_S$  decresce se anulando em  $T_N$ . O comportamento das magnetizações alternadas obtidas com **EFT-2** são diferentes dos obtidos por **MFA-2**, já que agora em  $T = 0$ , para altos campos, a magnetização alternada não possui o mesmo valor.

Nas figuras (4.23)-(4.26) temos o comportamento da magnetização alternada em função da temperatura para vários valores de anisotropia **DM** e com valores de campo fixo,  $H = 0$  [Fig. (4.23)],  $H = 2$  [Fig. (4.24)],  $H = 4$  [Fig. (4.25)] e  $H = 5$  [Fig. (4.26)]. Diferente do que acontece quando fixamos o valor de  $d$ , as magnetizações alternadas sentem mais o efeito do campo magnético diminuindo mais o seu valor em  $T = 0$ . Em todos os casos as temperaturas de transição possuem valores menores dos que as obtidas por

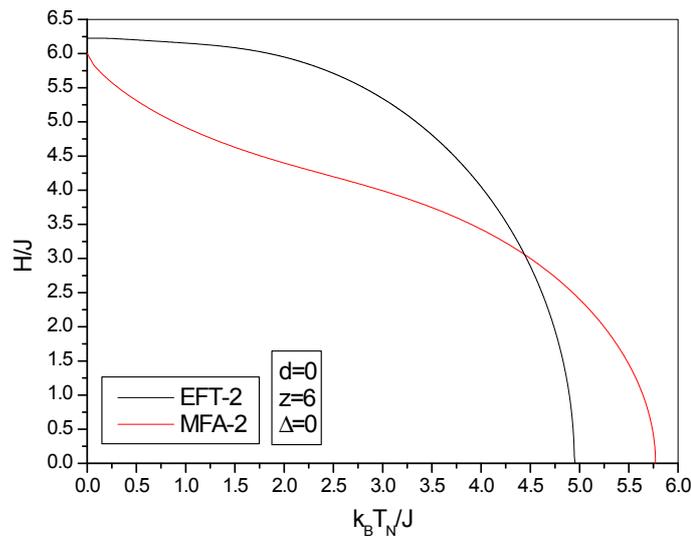


Figura 4.9: Diagrama de fase no plano  $H - T$  para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ), com  $d = 0$  e  $\Delta = 0$ , utilizando **EFT-2** e **MFA-2**.

### **MFA-2.**

Nas figuras (4.21), (4.22), (4.25) e (4.26) o valor da magnetização alternada em  $T = 0$ , cresce com o aumento do campo externo ou com a anisotropia, aparecendo um ponto de máximo com um comportamento reentrante.

Em todos os casos aqui estudados, os modelos de Ising ( $\Delta = 1$ ) e Heisenberg ( $\Delta = 0$ ) possuem os mesmos comportamentos para as magnetizações total e alternada, diferenciando apenas que no modelo de Ising há uma pequeno aumento nas temperaturas de transição, magnetização total e alternada em  $T = 0$ .

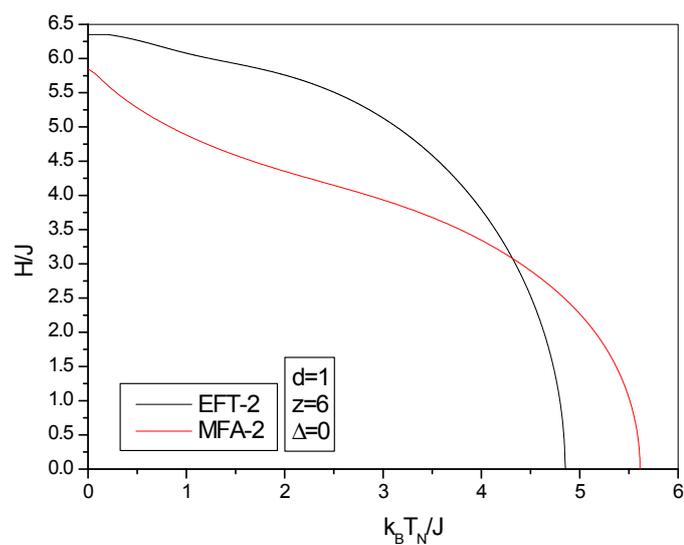


Figura 4.10: Diagrama de fase no plano  $H - T$  para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ), com  $d = 2$  e  $\Delta = 0$ , utilizando **EFT-2** e **MFA-2**.

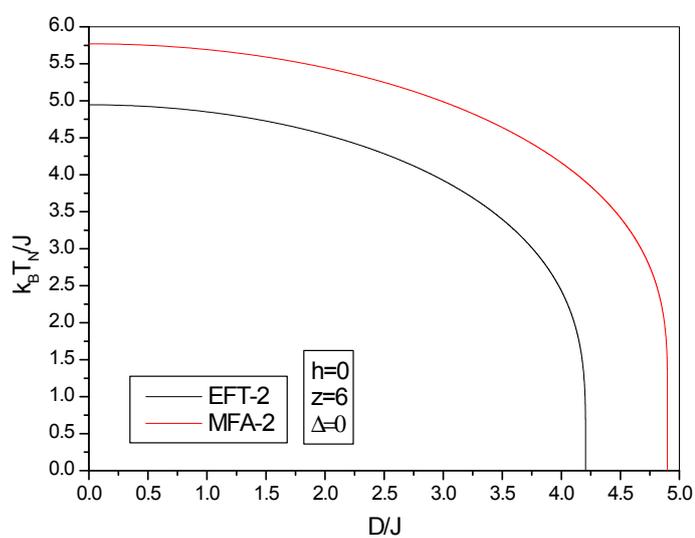


Figura 4.11: Diagrama de fase no plano  $H - T$  para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ), com  $h = 0$  e  $\Delta = 0$ , utilizando **EFT-2** e **MFA-2**.

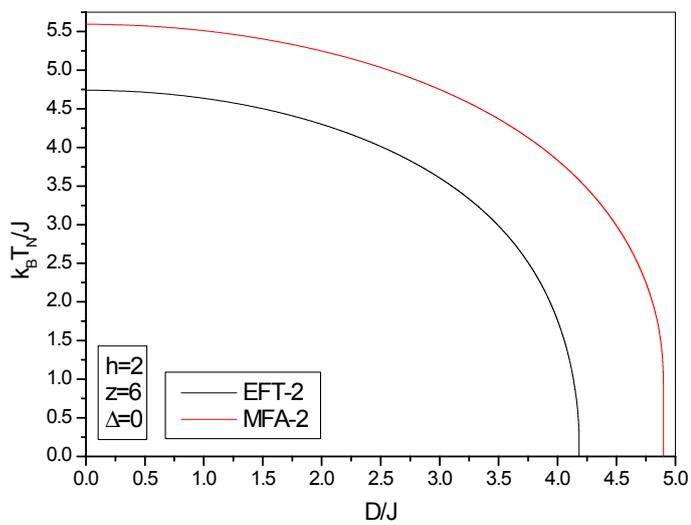


Figura 4.12: Diagrama de fase no plano  $H - T$  para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ), com  $h = 2$  e  $\Delta = 0$ , utilizando **EFT-2** e **MFA-2**.

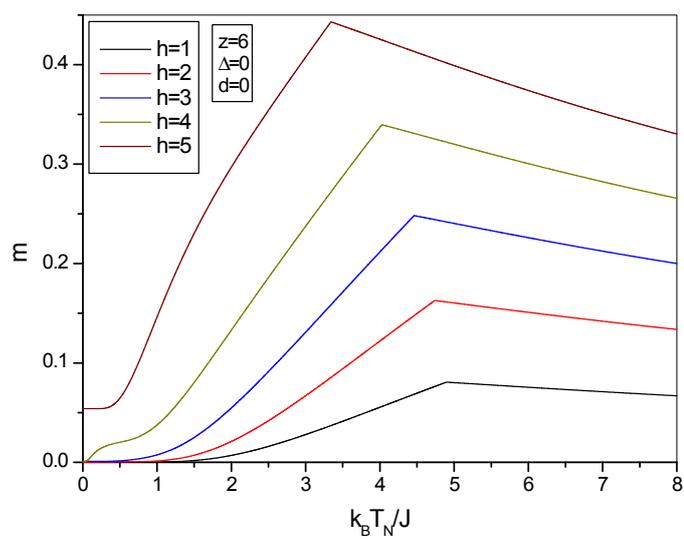


Figura 4.13: Comportamento da magnetização total em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores de campo externo ( $h$ ) e anisotropia DM ( $d = 0$ ).

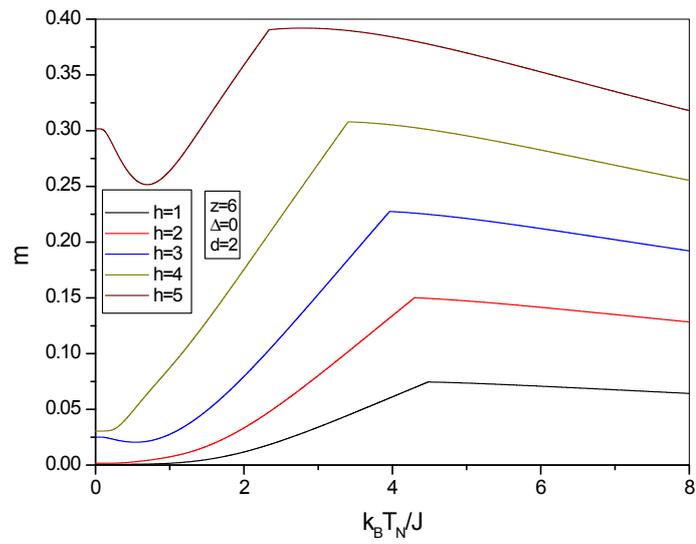


Figura 4.14: Comportamento da magnetização total em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores de campo externo ( $h$ ) e anisotropia **DM** ( $d = 2$ ).

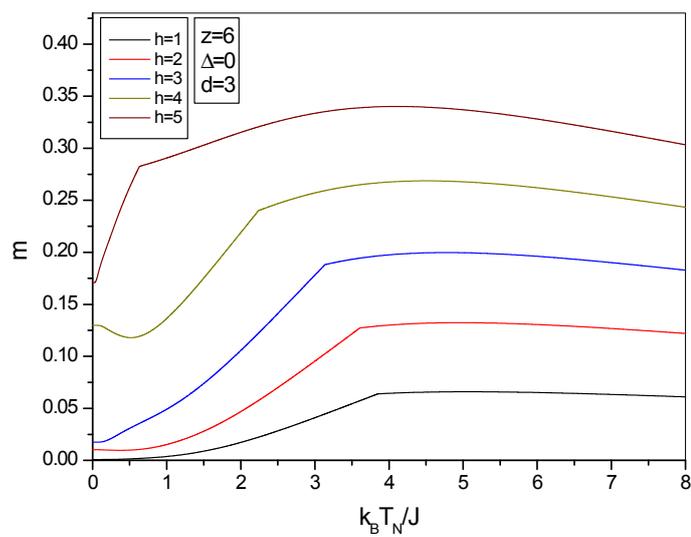


Figura 4.15: Comportamento da magnetização total em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores de campo externo ( $h$ ) e anisotropia  $\mathbf{DM}$  ( $d = 3$ ).

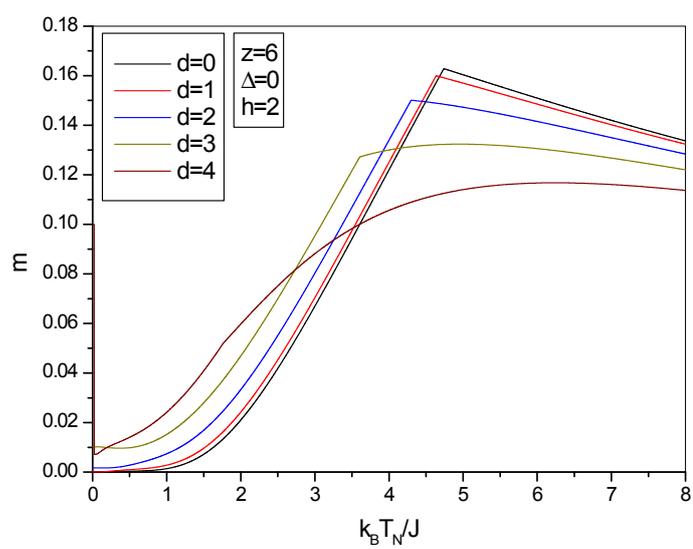


Figura 4.16: Comportamento da magnetização total em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores anisotropia  $\mathbf{DM}$  ( $d$ ) e campo externo fixo ( $h = 2$ ).

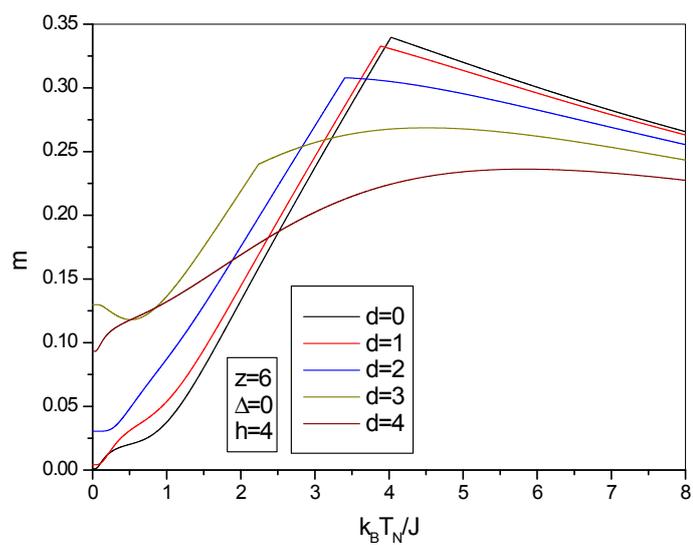


Figura 4.17: Comportamento da magnetização total em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores anisotropia  $\mathbf{DM}$  ( $d$ ) e campo externo fixo ( $h = 4$ ).

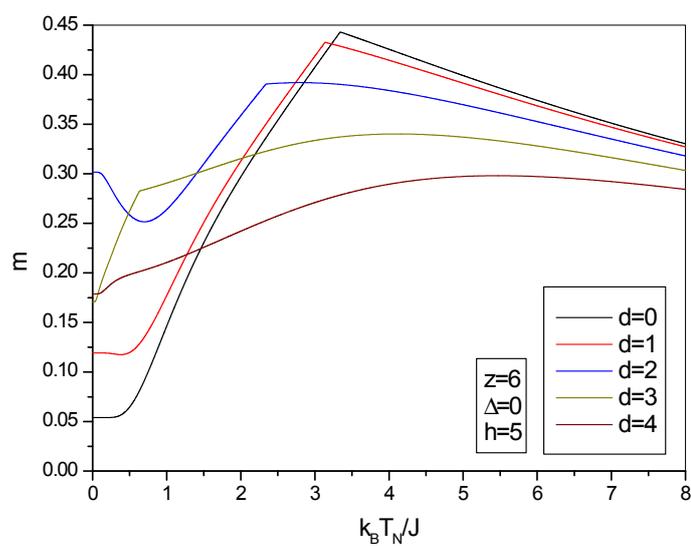


Figura 4.18: Comportamento da magnetização total em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores anisotropia **DM** ( $d$ ) e campo externo fixo  $h = 5$ .

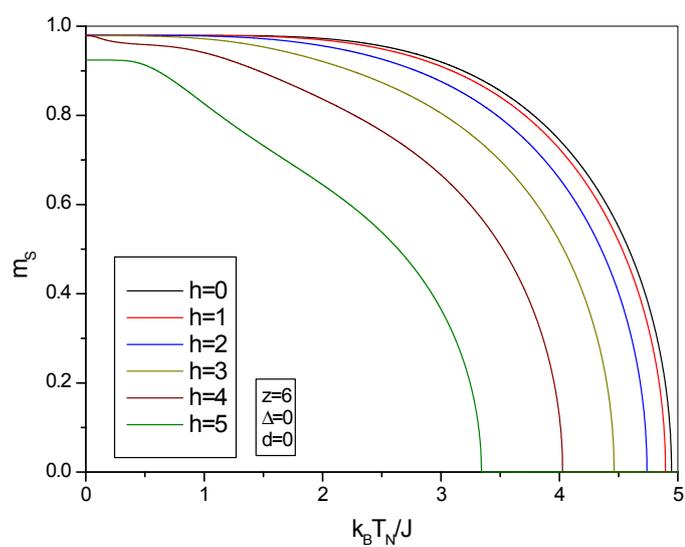


Figura 4.19: Comportamento da magnetização alternada em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores de campo externo ( $h$ ) e anisotropia **DM** fixa ( $d = 0$ ) .

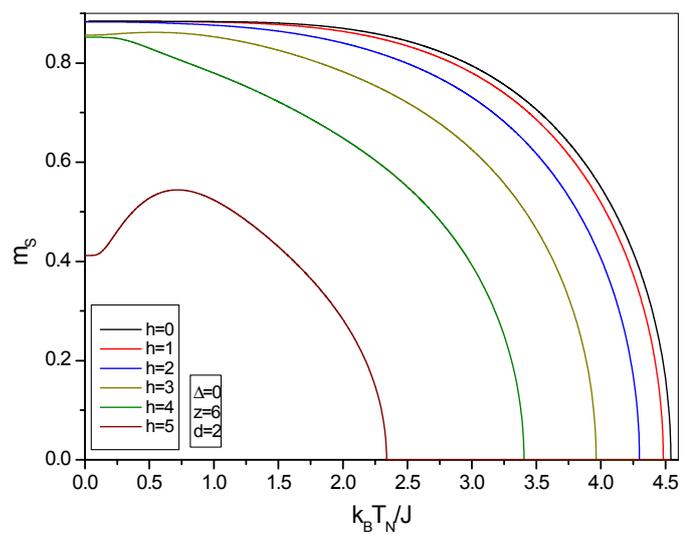


Figura 4.20: Comportamento da magnetização alternada em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores de campo externo ( $h$ ) e anisotropia DM fixa ( $d = 2$ ).

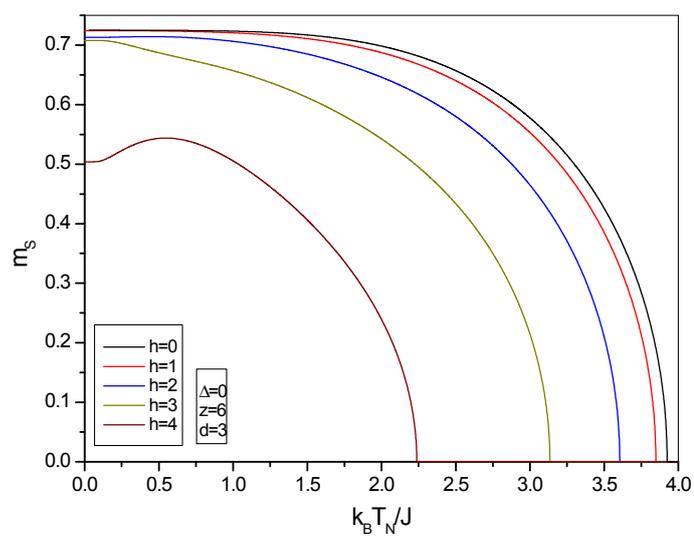


Figura 4.21: Comportamento da magnetização alternada em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores de campo externo ( $h$ ) e anisotropia DM fixa ( $d = 3$ ).

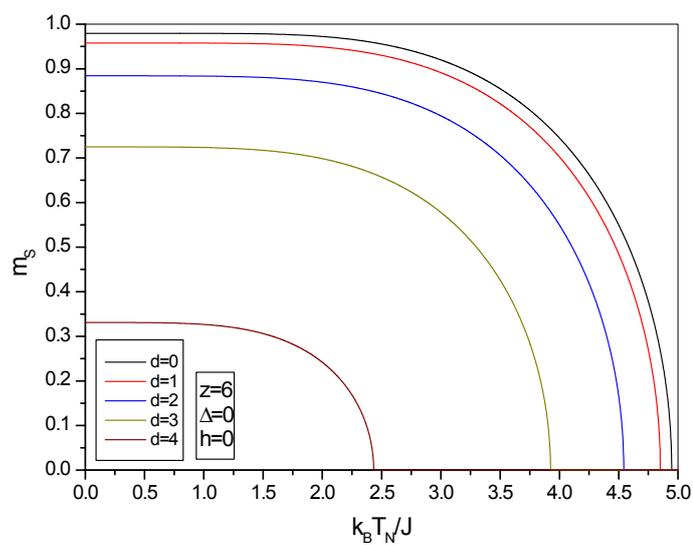


Figura 4.22: Comportamento da magnetização alternada em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores de anisotropia **DM** ( $d$ ) campo externo fixo ( $h = 0$ ).

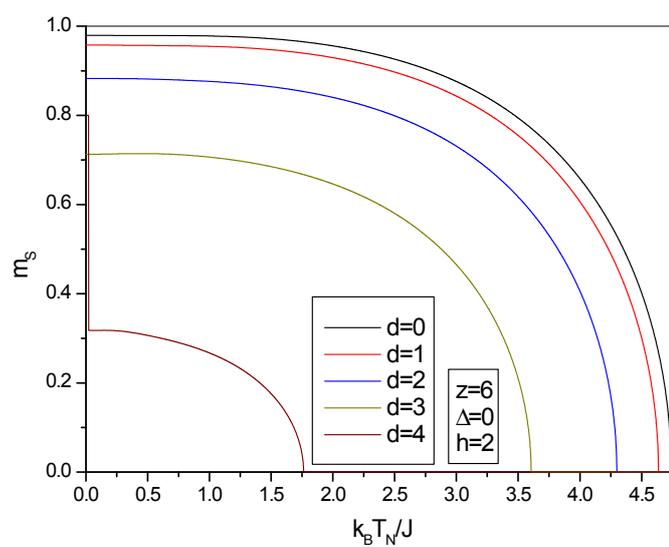


Figura 4.23: Comportamento da magnetização alternada em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores de anisotropia **DM** ( $d$ ) campo externo fixo ( $h = 2$ ).

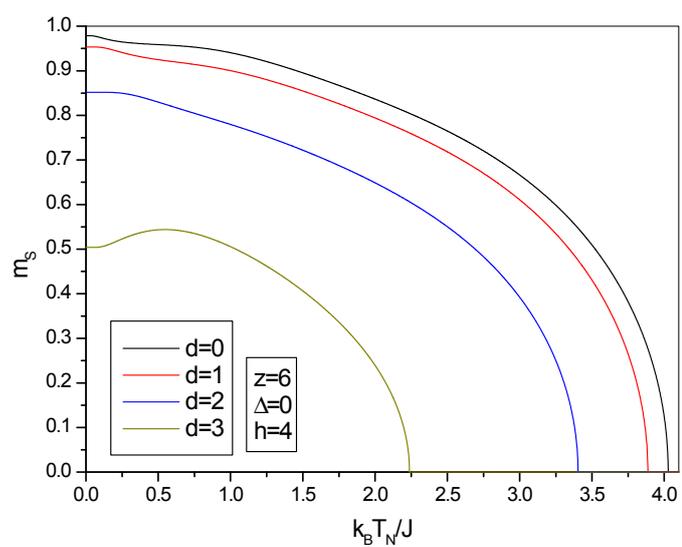


Figura 4.24: Comportamento da magnetização alternada em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores de anisotropia **DM** ( $d$ ) campo externo fixo ( $h = 4$ ).

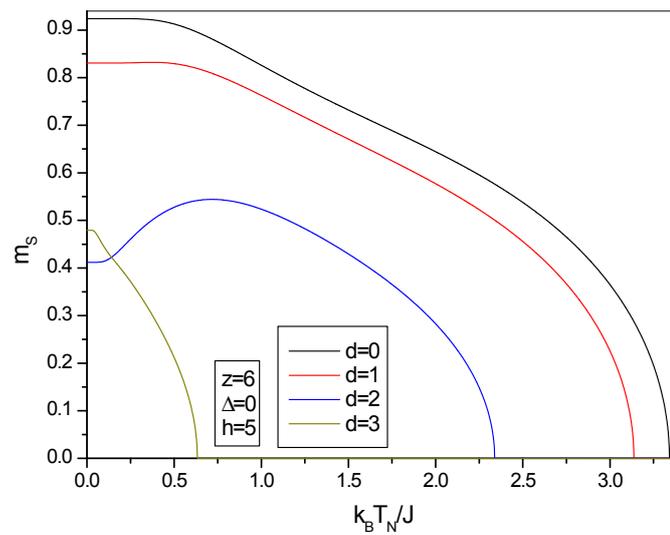


Figura 4.25: Comportamento da magnetização alternada em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para vários valores de anisotropia **DM** ( $d$ ) campo externo fixo ( $h = 5$ ).

## 5 CONCLUSÃO

Neste trabalho descrevemos os diagramas de fases e as magnetizações total e alternada do modelo de Heisenberg quântico de spin  $- 1/2$  anisotrópico antiferromagnético com interação Dzyaloshinski-Moriya para um rede cúbica simples e com um aglomerado de dois spins, utilizando dois métodos: campo médio (MFA-2) e operador diferencial (EFT-2). A variação da anisotropia  $\Delta$  (onde  $\Delta = 0$  temos o modelo de Heisenberg e  $\Delta = 1$  temos o modelo de Ising) também foi analisada.

No Cap. 2 apresentamos os métodos (MFA, EFT) que foram aplicados no nosso modelo, e para fins de ilustração aplicamos no modelo de Ising de spin-1/2. Concluímos que os resultados obtidos pela técnica do operador diferencial são melhores do que os obtidos através do campo médio, isto se deve as várias formas de aproximação aplicadas no desacoplamento das funções de correlação. Contudo, os expoentes críticos em ambos os métodos são clássicos. Fizemos esta primeira apresentação dos modelos para que o leitor tenha um primeiro contato com os métodos aproximativos que aplicamos no nosso modelo para descrever a criticalidade e as propriedades termodinâmicas.

No Cap. 3 aplicamos a teoria de campo médio, via desigualdade de Bogoliubov no nosso modelo. Obtivemos resultados das magnetizações total e alternada em função da temperatura variando o campo (anisotropia DM) e fixando a anisotropia DM (o campo). A temperatura e o campo produzem uma desordem no sistema, onde temos  $T_N(H > 0) < T_N(H = 0)$ , ou seja,  $T_N$  diminui com o aumento de H. No estado fundamental ( $T = 0$ ) fixando o valor da anisotropia DM, temos que a magnetização total é nula e a magnetização alternada possui o mesmo valor independentemente dos valores de campo aplicado. Com o aumento da anisotropia DM a magnetização alternada e a temperatura crítica diminuem. Se fixarmos o valor do campo aplicado e variarmos o valor da

anisotropia DM, as magnetizações alternadas não possuem os mesmos valores, sendo estes diminuídos à medida que aumentamos a anisotropia DM. O comportamento da magnetização total foi analisado fixando-se o campo e variando a anisotropia DM e fixando-se a anisotropia DM e variando o campo. Em ambos os casos a temperatura diminui com o aumento do campo (ou da anisotropia DM). Contudo, no primeiro caso (h fixo e d variando) temos que a magnetização total é a mesma para todas as anisotropias DM, independentemente do valor do campo aplicado, até chegar na temperatura crítica ( $T = T_N$ ). Esse comportamento não ocorre no segundo caso (d fixo e h variando).

Os diagramas de fases (H-T e T- D) para uma rede cúbica simples ( $z = 6$ ) e quadrada ( $z = 4$ ) foram analisados, onde tivemos menores  $T_C$ 's,  $H_C$ 's e  $D_C$ 's, resultado que já era esperado fisicamente.

Nos diagramas de fases H-T observamos uma mudança de concavidade (crossover) que é um resultado característico de **MFA**. Temos a diminuição dos  $H_C$ 's à medida que aumentamos d.

No Cap.4 a técnica do operador diferencial foi aplicada no nosso modelo onde obtivemos os diagramas de fases no estado fundamental para (H-D, H- $\Delta$  e D- $\Delta$ ), onde no caso H-D foram observados pontos de máximos nas linhas críticas para valores próximos de  $d = 1$  e  $d = 2$ , tanto no modelo de Heisenberg quanto no modelo de Ising. Estes pontos de máximo foram refletidos nos comportamentos das magnetizações. Um resultado semelhante foi obtido por Mahdavifar et. al. (2008) para o diagrama de fase no estado fundamental para o modelo de Heisenberg (1D) **AF** de spin  $1/2$  com interação **DM** e campo magnético externo uniforme. Esse diagrama baseia-se no líquido de Luttinger "gapless" e em uma fase ferromagnética aberta, em camada alternada aberta e na fase spin-flop. Essas fases são percebidas sempre no caso em que há interação DM ( $D > 0$ ). Essas fases são caracterizadas por possuir um tipo de ordem de longo alcance, onde o estado ferromagnético ao longo do eixo do campo magnético na fase **FM**; o estado de Néel ao longo do eixo "z" na fase spin-flop; e camada alternada aberta ao longo do eixo "y" na fase da camada alternada.

Fizemos, também, uma comparação entre os diagramas de fases H- T e T-D utilizando as duas técnicas (MFA-2 e EFT-2), onde obtivemos melhores resultados utilizando a técnica EFT-2, como já era esperado.

Partindo dos nossos resultados, algumas investigações ainda podem ser feitas em relação ao nosso modelo, tais como: interação entre segundos vizinhos, e o cálculo das

propriedades termodinâmicas, como por exemplo, a susceptibilidade, energia interna e calor específico.

**REFERÊNCIAS**

- ALLEN, P. S. *Contemp. Phys.* 17, 387 (1976).
- ARAÚJO, I. G.; NETO, J. C.; SOUSA, J. R. de; *Physica A* 260, 150, 1998.
- BINDER, K.; KINZEL, W.; *J. Phys. Soc. Journ.* 52, 5-209(1983); WALSTEDTE R. E.; WALKEU, L. R.; *Phys. Rev. Lett.* 47, 1624(1981); MORRIS B. W., et. al.; *J. Phys. C* 19, 1157 (1986).
- BARRETO, F. C. S., FITTIPALDI, I. P. *Rev. Bras. Fis.* 11, 745 ,1981.
- BARRETO, F. C. S.; FITTIPALDI, I. P. *Physica A*, 129, 360, 1985.
- BOBÁK, A., JASCUR, M. *Phys. Stat. Sol. B* 135, K9, 1986.
- BOBÁK, A.; KARABA, J. *Phys. Stat. Sol. B.* 142, 575, 1987.
- BOBÁK, A.; MOCKVICAK S.; SIVULKA J. *Phys. Stat. Sol. B.* 176, 477, 1993.
- BRUNO, P. *Phys. Rev. Lett.*, 87, 1372031, 2001.
- BUTERA, P.; COMI, M. *Phys. Rev. B.* 52, 6185, 1995.
- CALLEN, H. B. *Phys. Lett.*, 4, 161, 1963.
- CANNAS, S. A.; *Introducción a la Teoría de los Fenómenos Críticos; Notas de Aula, UNC (2004).*
- CHAKRAVARTY, S.; HALPERIN, B. I.; NELSO, D. *Phys Rev. Lett.* 60, 1057, 1988.
- CHEN, K.; FERRENBURG, A. M.; LANDAU, D. P. *Phys. Rev. B.* 48, 3249, 1993.
- COELHO, J. M.; *Modelo de Ising de Spins Mistos com Interação Aleatória de Campo Médio; Dissertação de Mestrado; UFMG (2007).*
- CORDEIRO, C. E., et. al, *Z. Phys. B.* 85, 307, 1991.
- CURIE, P. *Chim. Phys.*, 6, 661, 1907.
- DOBRUSHIN, R. L. *Theor. Prob. Appl.*, 13, 197, 1969; LANFORD, O. E.; RUELLE, D., *Comm. Math. Phys.* 13, 194, 1969.
- DORFMAN, Y. *Nature*, 119, 353, 1928.

- DZYALOSHINSKI, L. E. *J. Phys. Chem. Sol.* 4, 241, 1958.
- ENDO, Y., et. al., *Phys. Rev. B.* 37, 7443, 1988.
- FAEZ, R., et al. *Polímeros: Ciência e Tecnologia*, 10, 130, 2000.
- FALK, H. *Am. J. Phys.*, 38, 858, 1970.
- FALK, H. *Phys. Rev. A.* 133, 1382, 1964.
- FILHO, E. B. *Transição de Fase Quântica Induzida por Campo Externo*. Manaus, 2003. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal do Amazonas.
- FRENKEL, Y. Z. *Phys.*, 49, 619, 1928.
- FROHLICH, J.; ISRAEL, R.; LIEB, E. H.; SIMON, B. *Commun. Math. Phys.*, 62, 1, 1978.
- GALAM, S.; YOKOI, C. S. O.; SALINAS, S. R. *Phys. Rev. B.* 57, 8370, 1998.
- GIL, J. X.; SOUSA, J. R. de, *Phys. Stat. Sol. B.* 213, R5, 1999.
- GOTTLOB, A. P.; HANSENUSCH, M. *Physica A* 201, 593, 1993.
- \_\_\_\_\_, *J. Stat. Phys.*, 919, 1994.
- GUENO, S. M.; CORRÊA, R. R.; FILHO, P. I. P. *Cerâmica*, 51, 139, 2005.
- HAMER, C. J.; WEIHONG, Z.; ARNDT, P. *Phys. Rev. B.* 46, 6276, 1992.
- HARMAN, P.; MITTON, S. *Cambridge Scientific Minds*. Cambridge University Press, 2002, p. 1-19.
- HEISENBERG, W. K. *Z. Phys.*, 57, 545, 1928.
- HEISENBERG, W.; *Zur Theorie des Ferromagnetismus*, *Z. F. Physik*, 49, 619, 1928.
- HERNÁNDEZ, H. T. D.; BERTRAND, D. *Phys. Rev. B.* 47, 2602, 1993; *Phys. Rev. B.* 48, 15772, 1993.
- HONMURA, R.; KANEYOSHI, T. *Progr. Theor. Phys.* 60, 635, 1978.
- IDOGAKI, T., URYÛ, N. *Physica A* 181, 173, 1992.
- IDOGAKI, T.; TANAKA A.; TUCKER, J. W. *J. Mag. Mat.* 177-1181, 157, 1998; ver também IDOGAKI; URYÛ (1992).
- IDOGAKY, T.; MIYOSHI, Y.; TUCKER, J. W. *J. Mag. Mat.* 154, 221, 1996.

- ISING, E. Z. Physik. 31, 253, 1925.
- JONGH, L. de; MIEDEMA, A. R. Adv. Phys. 23, 1, 1974.
- KANEYOSHI, T.; FITTIPALDI, I. P.; HONMURA, R.; MANABE, T. Phys. Rev. B, 24, 481, 1981.
- KASUMATA, K. et. al. Phys. Rev. B. 55, 11466, 1997.
- KATSUMATA, K.; KATORI, H. A.; SHAPIRO, S. M.; SHIRANE, G., Phys. Rev. B. 55, 11466, 1997.
- KINCARD, J. M.; COHEN, E. G. D. Phys. Rep. 22, 5, 1975.
- LACERDA, F.; SOUSA, J. R. de; FITTIPALDI, I. P. J. Appl. Phys. 75, 5829, 1994.
- LANDAU, D.P., BINDER, K. A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics, Cambridge University Press, 2000.
- LANGARI, A. Phys. Rev. B. 58, 14467, 1998.
- LEON, G. The Story of Electricity, Nova York: Dover, 1988.
- LI, M. S.; WALASEK K.; , M. Phys. Rev. B 56, 11715, 1997.
- LI, H.; CHENG, T. L. Phys. Rev. B. 52, 15979, 1995.
- MAHDAVIFAR, S.; SOLTANI, M. R.; MASOUDI, A. A.; Eur. Phys; 62, 215-220, 2008.
- MAKIVIC, M. S.; DING, H. Q. Phys. Rev. B. 43, 3562, 1991.
- MANO, H. J. Mag. Mag. Mat. 90-91, 281, 1990.
- MERMIN, N. D.; WAGNER, H. Phys. Rev. Lett., 22, 1133, 1966.
- MIYOSHI, Y.; TANAKA, A.; TUCKER, J. W. J. Mag. Mag. Mat. 295, 110, 1999.
- MOREIRA, A. F. S.; FIGUEIREDO, W.; HENRIQUES, V. B. Eur. Phys. J. B. 27, 153, 2002.
- MORIYA, T. Phys. Rev. Lett. 4, 288, 1960.
- MURTAZAE, A. K., FAVORSKII, A. Fiz. Nizk. Temp. 18, 144, 1999; KAMILO I. K.,
- MURTAZAEV, A. K., ALIEV, H. K. Phys. Uspekhi 42, 698, 1999.
- NÉEL, L. Ann. Phys. 17, 61, 1932.
- NÉEL, L. Ann. Physique, 18, 5, 1932.

- NETO, J. dos S. C. Estudo Sistemático das Propriedades Termodinâmicas e Criticalidade de Filmes Finos e Super-Redes Magnéticas, São Carlos, 2004. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal de São Carlos.
- ONSAGER, L. J. Am. Chem. Soc. 58, 1486, 1936.
- ONSAGER, L. Phys. Rev. 65, 261, 1944.
- PACOBAYHYBA, J. T. M.; NUNES, W.; DE SOUSA, J. R. Phys. Rev. B, 69, 92410, 2004.
- PARISI, G. Statistical Field Theory, Addison-Wesley, 1988.
- PAUTHENIT, R. Ann. Physique, 3, 424, 1958.
- RABIN, J. M. Phys. Rev. B, 22, 2027, 1980.
- \_\_\_\_\_. Phys. Rev. B. 22, 2429, 1980.
- REZENDE, S. M. Materiais e Dispositivos Eletrônicos. 2ª ed. São Paulo: Ed. Livraria da Física, 2004.
- RUNEHR, E. E.; FIGUEIREDO, W. Phys. Lett. A 244, 165, 1998.
- RUSHBROOKE, G. S.; WOOD, P. J. Mol. Phys, 11, 409, 1967.
- SALINAS, S. R. A.; Introdução à Física; EDUSP, 2ª ed, São Paulo (2005).
- SANDVIK, A. W. Phys. Rev. Lett. 80, 5196, 1998.
- SCHMIDT, V. A.; FRIEDBERG, S. A., Phys.Rev. B. 1, 2250, 1970.
- SELKE, W. Z. Phys. B. 101, 145, 1996.
- SHIRANE, G.; ENDOH, Y.; BIRGENEAU, R. J.; KASTNER, M. A.; HIDAKA, Y.;
- ODA, M.; SUZUKI, M.; MURAKAMI, T. Phys. Rev. Lett. 59, 1613, 1987.
- SIQUEIRA, A. F. Tese de Doutorado, DF-UFPE, 1986.
- SMART, J. S. Effective Field Theories of Magnetism, Saunders, Philadelphia, 1966.
- SOUSA, A. J. F. de, COSTA, U. M. S., LYRA, M. L. Phys. Rev. B. 62, 8909, 2000.
- SOUSA, J. R. de; ALBUQUERQUE, D. F.; FITTIPALDI, I. P. Phys. Lett. A 191, 275, 1994.
- SOUSA, J. R. de; ALBUQUERQUE, D. F.; Physica A. 236, 419, 1997.
- SOUSA, J. R. de; ARAÚJO, I. G. Phys. Rev. B. 1997.

- SOUSA, J. R. de; ARAÚJO, I. G.; NETO, J. C. *Physica A.* 260, 150, 1998.
- SOUSA, J. R. de; ARRUDA, A. S. (comunicação privada).
- SOUSA, J. R. de; BRANCO, N. S. *Phys. Rev. B*, 72, 13442, 2005.
- SOUSA, J. R. de; FITTIPALDI; E I. P. J. *Appl. Phys.* 75, 5835, 1994.
- SOUSA, J. R. de; GIL, J. X. *Phys. Stat. Solid. B*, 213, R5, 1999.
- SOUSA, J. R. de; LACERDA, F., FITTIPALDI, I. P. J. *Mag. Mat.* 140-144, 1501, 1995.
- SOUSA, J. R. de; *Physica A.* 256, 383, 1998.
- SOUSA, J. R. de; PLASCAK, J. A. *Phys. Let. A.* 1997.
- STRYLEWSKI, E.; GIORDANO, N., *Adv. Phys.* 26, 487, 1977.
- SUZUKI, M. *Coherent Anomaly Method, Mean Field, Fluctuations and Sistematics*, World Scientific, 1995.
- SUZUKI, M.; KATORI, M. *Phys. Soc. Jpn.*, 55, 1, 1986.
- SUZUKI, M.; MURAKAMI, T., *Phys. Rev. Lett.* 59, 1613, 1987.
- SUZUKI, N. *Phys. Lett.*, 19, 267, 1965.
- TAGGART, G. B. *Physica A*, 113, 535, 1982.
- TAGGART, G. B., FITTIPALDI, I. P. *Phys. Rev. B* 25, 7026, 1982.
- TAHIR-KHELI, R. A. *Phys. Rev.*, 188, 1142, 1969; TAGGART, G. B.; TAHIR-KHELI, R. A. *Physica*, 68, 93, 1973.
- TAKAHASHI, M.; *Phys. Rev. B.* 40, 2494, 1989.
- TOMCZAK, P.; SARMENTO, E. F.; SIQUEIRA, A. F.; FERCHMIN, A. R. *Phys. Stat. Sol. B.* 142, 551, 1987.
- TRUDEAU, Y.; PLUMER, M. L. Preprint.
- TUCJER, J. W. J. *Mag. Mat.* 87, 16, 1990.
- WEI, G. Z.; DU, A. *Phys. Stat. Sol.* 175, 237, 1993.
- WEISS, P. J. *Phys. Adium, Paris*, 6, 667, 1907.
- WEISS, P.; FORRER, R. *Ann. Phys.* 5, 153, 1926.

XU, C.; JIANG Q.; CAO, H. X.; LI, Y. Z. Sol. State Comm. 108, 177, 1998.

YING, H. P., et. al. Phys. Lett. A, 183, 441, 1993.

ZERNIKE, F. Physica 1, 56, 1940.

# 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](#)