



**UFAM**

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

**ESTUDO DO COMPORTAMENTO ANÔMALO DA  
SUSCEPTIBILIDADE MAGNÉTICA EM FILMES FINOS**

**Francisco Felipe Gomes de Sousa**

Fevereiro - 2007

**UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS  
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS - I.C.E.  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

**ESTUDO DO COMPORTAMENTO ANÔMALO DA  
SUSCEPTIBILIDADE MAGNÉTICA EM FILMES FINOS**

**Francisco Felipe Gomes de Sousa**

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação  
em Física da Universidade Federal do  
Amazonas-UFAM como parte dos requisitos para  
a obtenção do título de Mestre em Física.

**Orientador: Prof. Dr. José Ricardo de Sousa**

**Có-orientador: Prof. Dr. João dos Santos Cabral Neto**

**Manaus – Amazonas**

**2007**

## Agradecimentos

À Deus, que sempre foi maravilhoso comigo.

À minha Família pelo apoio, principalmente meu pai **Luis Gonzaga de Sousa** pela iniciativa de migrar para o Amazonas, terra abençoada e cheias de oportunidades.

À **Janáina Bezerra Pacheco** minha melhor amiga, alguém que sempre acreditou em minha capacidade e me encorajou a continuar esta empreitada, desde a graduação.

A todos os professores do Departamento de Física da Universidade Federal do Amazonas-UFAM em especial a o prof. **Dr. José Ricardo de Sousa** pela orientação. Um verdadeiro exemplo de competencia a ser seguido.

Ao professor do Centro Técnico Federal do Amazonas -CEFETAM. **Dr. João dos Santos Cabral Neto** meu coorientador, alguém cujo auxilio foi de grande valor.

Aos colegas da pós-graduação Vanusa Bezerra Pacheco, Marcos Luis, Ao Casal de namorados Deniz e Andreia Baima, Jonatas, Dinola, Igor Padilha, Otoniel, Dilson Teixeira, Rosana, Edvan, Marcelo Ribeiro, Jose Roberto Viana pela presença amiga e momentos compartilhados.

No decorrer deste trabalho tive o prazer de me tornar professor desta Instituição no Município de Humaitá-Am, onde fui apresentado por Deus ao conhecer minha futura esposa **Tatiana Tavares**, a quem deixo minha gratidão pelo exemplo de companheirismo conquistado em tão pouco tempo.

Ao Casal **Janeide e Alexandre Alecrim**, amigos desde a graduação e que atualmente tenho o prazer de conviver no município de Humaitá.

Agradeço a todos os amigos e colegas de trabalho conquistados no decorrer deste percurso.

# Índice

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>8</b>
1.1	Descrição dos Fenômenos Magnéticos . . . . .	8
1.2	Motivação . . . . .	13
<b>2</b>	<b>Técnica do Operador diferencial</b>	<b>15</b>
2.1	Considerações Gerais . . . . .	15
2.2	Aplicações . . . . .	18
<b>3</b>	<b>Filme Fino Heisenberg antiferromagnético numa estrutura de filme fino</b>	<b>26</b>
3.1	Considerações Gerais . . . . .	26
3.2	Modelo e formalismo . . . . .	27
3.3	Discussão dos Resultados . . . . .	31
3.3.1	a) Caso ferromagnético . . . . .	31
3.3.2	b) Caso antiferromagnético . . . . .	39
<b>4</b>	<b>Conclusão</b>	<b>59</b>

# Lista de Figuras

1.1	Comportamento de um material ferromagnético ( $J_{ij} > 0$ ). (a) Spins alinhados em uma mesma direção na ausência de um campo externo. (b) Um novo arranjo na presença de um campo externo $H$ . . . . .	11
1.2	Comportamento de um material antiferromagnético ( $J_{ij} < 0$ ). (a) Spins alinhados de forma antiparelela na ausência de um campo externo. (b) Um novo arranjo na presença de um campo externo $H$ . . . . .	12
1.3	Comportamento anômalo da suscetibilidade magnética obtida experimentalmente[7] para o composto de $La_2CuO_4$ na presença de um campo magnético externo $H = 3.0T$ . . . . .	14
2.1	Aglomerado finito $\Omega$ e restante do sistema $\Omega'$ . . . . .	16
2.2	Magnetização $m$ como função da temperatura reduzida para vários valores de $z$ ( $z = 2, 4, 6, 12$ ) obtidos via MFT-1 e MFA, indicados na figura. . . . .	20
2.3	Topologia das redes (a) Kagomé (b) quadrada (c) triangular e (d) cúbica simples para um aglomerado com dois spins. . . . .	24
3.1	$n$ -ésima camada de um filme fino antiferromagnético. A região tracejada indica o aglomerado com dois spins a ser usada na (EFT-2) . . . . .	27
3.2:	Magnetização do filme fino Heisenberg ferromagnético em função da temperatura reduzida para diferentes valores de campo externo $H$ indicados na figura. . . . .	34
3.3:	Suscetibilidade em função da temperatura reduzida para diferentes valores de campo externo $H$ indicados na figura. . . . .	34

3.4: Magnetização $m$ do filme fino Heisenberg ferromagnético em função da camada ocupada $n$ para diferentes valores de temperatura reduzida indicados na figura. . . . .	35
3.5: Magnetização $m$ do filme fino Heisenberg ferromagnético em função da camada $n$ para diferentes valores de temperatura reduzida indicado na figura com $(J_s = 0.2)e(J = 1.0)$ . . . . .	36
3.6: Magnetização $m$ em função da camada $n$ para diferentes valores de temperatura reduzida indicado na figura com $(J_s = 2.0)e(J = 1.0)$ . . . . .	37
3.7: Magnetização por camada em função da temperatura reduzida com $(J_s = J = 1)$ . . . . .	37
3.8: Magnetização por camada em função da temperatura reduzida com $(J_s = 1.0)e(J = 0.5)$ . . . . .	38
3.9: Magnetizações total e staggered na ausência de campo externo. . . . .	41
3.10 Magnetizações total e staggered para um dado valor de campo externo $H$ . . . . .	42
3.11 Influência do campo externo $H$ nas magnetizações das subredes A e B . . . . .	43
3.12 Influência do campo externo $H$ na magnetização staggered $m_s$ . . . . .	44
3.13 Influência do campo externo $H$ na magnetização total $m$ . . . . .	44
3.14 Magnetização stagged total para diferentes número de camadas. . . . .	45
3.15 Magnetização total $m$ para diferentes numero de camadas. . . . .	46
3.16 Magnetização staggered por camada para um dado valor de campo externo $H=2.4$ . . . . .	47
3.17 Magnetização staggered por camada com interação de superfície maior que a interação de bulk $(J_s > J)$ . . . . .	48
3.18: Magnétização staggered por camada com interação de superfície menor que a interação de bulk $(J_s < J)$ . . . . .	48
3.19 Magnetização por camada para um dado valor de campo externo $H$ . . . . .	49
3.20 Magnétização total por camada com interação de superfície maior que a interação de bulk $(J_s > J)$ . . . . .	49
3.21 Magnetização total por camada com interação de superfície menor que a interação de bulk $(J_s < J)$ . . . . .	50
3.22 Desordenamento dos spins na superfície em baixas temperaturas para $(J_s = 0.2)$ . . . . .	51
3.23 Pico na magnetização total da superfície em baixas temperaturas para $(J_s = 0.2)$ . . . . .	51

3.24 Desordenamento dos spins no bulk do material em baixas temperaturas para ( $J=0.2$ ). . . . .	52
3.25 Pico na magnetização total do bulk do material em baixas temperaturas para ( $J=0.2$ ). . . . .	53
3.26 Magnetização staggered no bulk em função da interação de troca $J$ para diferentes valores de $H$ . . . . .	54
3.27: Magnetização staggered no bulk em função da interação de troca $J$ para filme com diferentes numero de camada $L$ . . . . .	55
3.28 Susceptibilidade Staggered para diferentes valores de campo externo $H$ . . . . .	56
3.29 Influência do campo externo $H$ na suscetibilidade total . . . . .	56
3.30 Suscetibilidade total em função da temperatura reduzida para diferentes inter- ações de troca no bulk. . . . .	57
3.31 Comportamento anômalo para suscetibilidade total em um filme fino antiferro- magnético no modelo de Heisenberg. . . . .	57
3.2 Figura 3.31: Comportamento anômalo para susceptibilidade total em um filme fino antiferromagnético no modelo de Heisenberg. . . . .	58

# Lista de Tabelas

2.1	Valores da temperatura crítica para várias redes 2d e 3d do modelo de Ising 1/2 obtidos via EFT-1 e EFT-2. Os resultados são comparados com solução exata (2d) e Monte Carlo (3d). . . . .	25
-----	--	----



# Resumo

Neste trabalho estudaremos as propriedades magnéticas tal como magnetização e suscetibilidade em filmes finos no modelo de Heisenberg, em uma rede cúbica simples, através da técnica do operador diferencial aliada a teoria de campo efetivo. Esses sistemas são constituídos de superfícies (camadas) formadas por átomos cujas posições definem o tipo de interação de troca,  $J_s$  para as superfícies delimitadoras e  $J$  para o interior do material (*bulk*).

Inicialmente faremos uma breve descrição das teorias propostas para explicar a natureza dos fenômenos magnéticos e apresentaremos alguns resultados de pesquisas desenvolvidas na área.

Apresentaremos a teoria de campo efetivo e a técnica do operador diferencial, ferramentas utilizadas em nosso trabalho para o estudo de materiais ferro (**F**) e antiferromagnéticos (**AF**) para o modelo de Heisenberg.

A influência das interações de troca  $J$  e  $J_s$ , campo magnético externo  $H$  e número de camadas  $L$  presentes em nosso filme fino magnético foram visualizadas após solução numérica das respectivas equações para magnetização e suscetibilidade. Estas ofereceram subsídios para uma descrição de fenômenos como a anomalia na suscetibilidade total e uma possível transição de fase quântica para a magnetização *staggered* no caso **AF**.

# Abstract

In this work we will study the magnetic properties like magnetization and susceptibility of thin film using the Heisenberg model for a simple cubic lattice. We will use the differential operator technique along with the theory of effective field.

These systems are constituted of surface (layer) formed for atoms whose respective positions define the type of exchange interaction:  $J_s$  for delimited surface and  $J$  for the interior of the material (bulk).

Initially we will describe briefly the theory proposed to explain the nature of the magnetic phenomena and present some results already obtained in the area.

We will present the theory of effective field and the differential operator technique and tool used in our work for the study of ferromagnetic (**F**) and antiferromagnetic (**AF**) materials, within Heisenberg model.

The effects of exchange interaction  $J$  and  $J_s$ , external magnetic field  $H$  and number of layer  $L$  present in our thin magnetic films have been observed through the numerical solution of the respective equations for magnetizations and susceptibility. The observations help in the phenomena like the anomalous behavior of total susceptibility, a possible quantum phase transition for the staggered magnetization of AF material. .

# Capítulo 1

## Introdução

### 1.1 Descrição dos Fenômenos Magnéticos

Os fenômenos magnéticos há muito tempo despertam interesses da comunidade científica em geral. Apresentamos neste capítulo uma breve descrição das teorias propostas para explicar a natureza do comportamento magnético e alguns resultados de pesquisa envolvendo tais fenômenos.

Em 1907, o físico francês Pierre Ernst Weiss [1] apresentou a primeira teoria, fenomenológica, para explicar o ferromagnetismo. Na sua explicação, Weiss considerou uma substância ferromagnética como sendo constituída de pequenos dipolos magnéticos, submetidos a um intenso campo magnético interno - **campo molecular**  $H_m = qM$ , onde  $q$  é uma constante de proporcionalidade e  $M$  a magnetização do sistema. Utilizando a teoria de Langevin do paramagnetismo, Weiss foi capaz de explicar corretamente o resultado de Curie, em especial conseguiu obter teoricamente a lei de Curie para a susceptibilidade, estimando assim a constante  $C = \frac{N\mu^2}{3k_B}$  e a temperatura  $T_c = q\frac{N\mu^2}{3k_B}$ . Observou também que para magnetizar uma substância ferromagnética, um campo externo deve ser aplicado para que todos os domínios fiquem orientados numa mesma direção (eixo de fácil magnetização).

Qualitativamente, os resultados experimentais de Curie conseguiram ter um fim feliz, mas o entendimento microscópico do fator  $q$ , e os respectivos resultados numéricos encontrados para  $T_c$  iniciaram uma nova página na história do magnetismo.

Este problema só foi resolvido com o advento da mecânica quântica, através da proposta do

físico alemão Werner Karl Heisenberg [2], em 1928, que desenvolveu um modelo no qual explicava a origem do **campo molecular de Weiss**, como sendo de natureza eletrostática, usando, para isso, uma combinação do **princípio de exclusão de Pauli** e a superposição das funções de onda eletrônicas. Segundo o princípio de Pauli, elétrons com os mesmos números quânticos de spins tenderiam a permanecer afastados, minimizando a sua energia com uma baixa repulsão eletrostática (coulombiana), enquanto, elétrons de spins diferentes poderiam se aproximar mais e teriam uma energia potencial mais elevada. Segundo esse modelo de Heisenberg, o forte alinhamento dos spins num ferromagnético decorria de uma energia de troca (*exchange*) entre o spin de um íon e seus vizinhos mais próximos. Na primeira vista, parece muito estranho como uma energia de origem eletrostática faz com que os momentos magnéticos nos sólidos cristalinos (ou até amorfos) fiquem configurado numa dada direção específica. Deve-se ressaltar, que no sólido temos a presença dos dois tipos de interação (eletrostática e dipolar), mas para os compostos com magnetismo forte a explicação física da existência de ordem magnética é basicamente atribuída a eletrostática.

A energia de troca tem a propriedade de decrescer rapidamente com a distância entre os íons (exponencialmente), a razão é que  $J$  contém o produto de funções de onda de elétrons ligados em diferentes núcleos, portanto,  $J$  dependerá do envolvimento (*overlap*) das funções de onda, e este overlap decresce exponencialmente com a distância ( $r$ ), o que tornará a interação de troca uma interação de curto alcance.

Para descrever um sistema magnético com  $N$  partículas (elétrons) interagentes usa-se um Hamiltoniano, nesse caso, através de uma combinação de pares de ligação distintas, em um cristal, envolvendo acoplamento spin-spin (vizinhos mais próximos) descrito por

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \cdot \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (1.1)$$

onde a energia de troca é aqui denominada por  $J_{ij}$  e o somatório é feito sobre todos os pares ( $i$  e  $j$ ) da rede e  $\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$  indica o operador spin no sítio  $i$ . A Eq. (1.1) é conhecida como modelo de Heisenberg isotrópico pois as três direções apresentam a mesma probabilidade de orientação ( $\langle S_i^x \rangle = \langle S_i^y \rangle = \langle S_i^z \rangle$ ).

Em alguns casos torna-se necessário a inclusão de outros tipos de interações. Por exemplo,

ao tratarmos o caso em que temos spins ordenados sempre orientados numa dada direção (eixo de fácil magnetização), definida com respeito ao eixo cristalino. Podemos dizer que num cristal existem campos magnéticos efetivos internos que tendem a orientar os momentos magnéticos em uma dada direção privilegiada.

Um outro tipo importante é a interação spin-órbita descrita pelo seguinte Hamiltoniano

$$\mathcal{H}_{\mathbf{LS}} = \sum_i A(r_i) \cdot \mathbf{L}_i \cdot \mathbf{S}_i, \quad (1.2)$$

sendo

$$A(r_i) = \frac{1}{2m^2 r_i} \cdot \frac{d\Phi(r_i)}{dr_i},$$

onde  $\Phi(r_i)$  é a energia potencial elétrica (núcleo-elétron),  $\mathbf{L}_i$  e  $\mathbf{S}_i$  são os operadores momento angular e spin, respectivamente no sítio  $i$ .

Utilizando teoria da perturbação de 2ª ordem para a energia de interação spin-órbita, a Eq. (1.2) poderá ser reescrita na forma

$$\mathcal{H}_{\mathbf{LS}} = \sum_{i,(\alpha,\beta)} \Lambda_{\alpha\beta}^i \cdot S_i^\alpha \cdot S_i^\beta,$$

sendo

$$\Lambda_{\alpha\beta}^i = 2A^2 \sum_{l \neq p} \frac{\langle p | L_i^\alpha | l \rangle \langle l | L_i^\beta | p \rangle}{E_p^0 - E_l^0}.$$

Levando em consideração este tipo de interação podemos reescrever a Eq. (1.1) de uma forma generalizada

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \cdot S_i^\alpha \cdot S_j^\alpha + \sum_{i,(\alpha,\beta)} \Lambda_{\alpha\beta}^i \cdot S_i^\alpha \cdot S_i^\beta,$$

onde o segundo termo pode privilegiar um dada direção, nos permitindo estudar casos particulares de modelos como Ising, XY e Heisenberg anisotrópico.

Tais modelos vêm sendo aplicados no estudo de vários sistemas magnéticos. Como é o caso do modelo XY introduzido por Matusabara e Matsuda [3] com o Hamiltoniano dado por

$$\mathcal{H} = - \sum_{ij} \left( J_{ij}^x \cdot S_i^x \cdot S_j^x + J_{ij}^y \cdot S_i^y \cdot S_j^y \right),$$

usado na descrição de compostos magnéticos  $CoBr_2$ ,  $CoCl_2$  [4] e para explicar as configurações de vórtices na superfluidade no filme fino  $H_e^4$  [5].

O modelo de Ising representado pelo Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = - \sum_{ij} J_{ij} \cdot S_i^z \cdot S_j^z$$

que descreve muito bem sistemas magnéticos com anisotropia uniaxial tipo  $DyAlO_3DyPO_4$ ,  $FeCl_2Br_2$ ,  $Rb_2CoF_4$  e também é útil para estudar transição gás - líquido para fluidos de uma componente e para ligas binárias.

Portanto, indiferente da escolha do modelo, aqui descrito, para representar o sistema magnético sua principal origem está na interação entre elétrons, ou mais exatamente, entre os spins de elétrons associada ao termo  $J_{ij}$ . A forma como os spins interagem determina o comportamento magnético do material.

Se  $J_{ij} > 0$ , a configuração de energia mínima é a de spins alinhados paralelamente. Isso dá origem a um acoplamento ferromagnético (ex.: MnSb, CrTe, CrO2, CrBr3, EuO, EuS). Num material ferromagnético, os spins estão completamente alinhados dentro de pequenas regiões conhecidas como domínios.

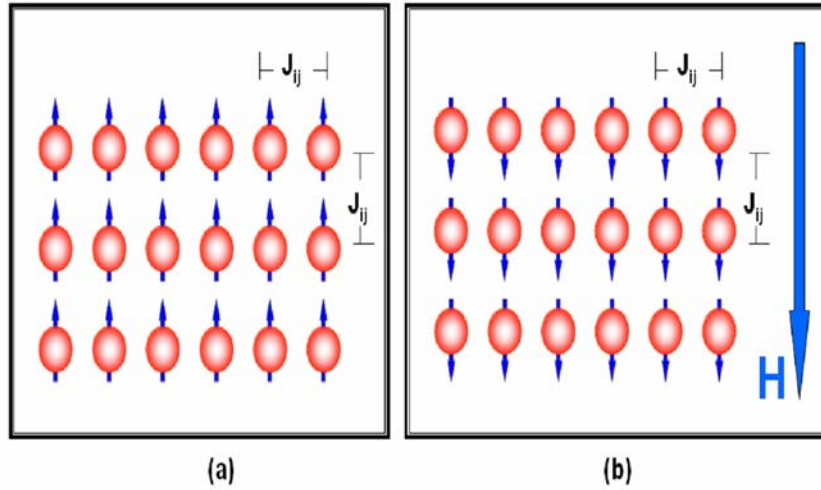


Figura 1.1: Comportamento de um material ferromagnético ( $J_{ij} > 0$ ). (a) Spins alinhados em uma mesma direção na ausência de um campo externo. (b) Um novo arranjo na presença de um campo externo  $H$ .

Aplicando-se um campo externo, os momentos magnéticos dos diversos domínios podem ser alinhados, produzindo um momento magnético total significativo. Esse fato confere uma importância tecnológica para os materiais ferromagnéticos.

Se  $J_{ij} < 0$ , temos um material chamado antiferromagnético (AF) cujo ordenamento é dado abaixo de uma dada temperatura característica, conhecida como temperatura de Néel ( $T_N$ ). Para temperaturas altas ( $T > T_N$ ), os dipolos apontam em direções aleatórias destruindo assim a ordem magnética AF. No estado AF, os dipolos magnéticos na rede cristalina interagem de tal maneira a se orientarem (mínimo de energia) antiparalelamente. Os compostos antiferromagnéticos mais simples são os fluoretos  $\text{FeF}_2[T_N = 90\text{K}]$  e  $\text{MnF}_2[T_N = 75\text{K}]$  que apresentam uma estrutura cristalina de corpo centrado, e os compostos com  $\text{F}_3$ :  $\text{KMnF}_3[T_N = 95\text{K}]$ ,  $\text{KNiF}_3[T_N = 275\text{K}]$  e  $\text{RbMnF}_3[T_N = 82\text{K}]$  com estrutura de perovskita numa rede cúbica simples. A estrutura cristalina desses materiais é constituída por uma rede magnética que se divide em apenas duas subredes equivalentes (A e B) e interpenetrantes. Na ausência de campo externo temos  $m_B = -m_A$  ( $m_A$  e  $m_B$  são as magnetizações das subredes A-up e B-down, respectivamente).

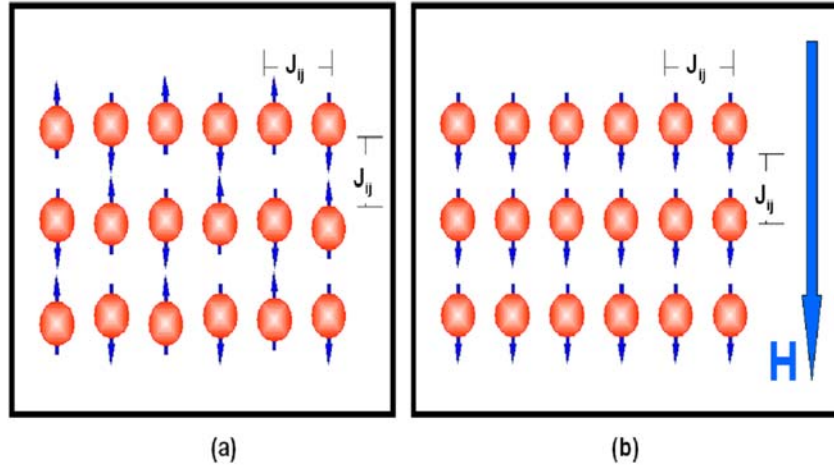


Figura 1.2: Comportamento de um material antiferromagnético ( $J_{ij} < 0$ ). (a) Spins alinhados de forma antiparalela na ausência de um campo externo. (b) Um novo arranjo na presença de um campo externo  $H$ .

Por possuírem diferentes propriedades, os materiais magnéticos possuem várias aplicações,

desde geração de energias a distribuição de energia, sistemas eletrônicos, telecomunicações, sensoriamento, informática, armazenamentos de informações.

Esses materiais veem sendo estudados em diferentes dimensionalidades e escalas, que de acordo com a espessura podem ser classificados como: filme ultrafino ( $< 5\mu m$ ), filme fino ( $> 5\mu m$ ), filme ( $10 - 100\mu m$ ), folha ( $0.1 - 1mm$ ) e lâmina ( $> 1mm$ ).

## 1.2 Motivação

Os filmes finos possuem grande importância em termos tecnológicos, no que se refere a gravações de informações, criação de estruturas microeletrônicas, estudo de impurezas magnéticas e até mesmo no desenvolvimento da física teórica, por se tratar de situações envolvendo ordem magnética e fenômenos de transição de fase.

Atualmente no Brasil e no mundo vários estudos sobre filmes finos estão sendo feitos, desde sua criação (física experimental) até sua descrição teórica, como é o caso do CBPF [6] que produz vários tipos de filmes na forma de ligas em mono e multicamadas, utilizando a técnica de evaporação em ultra-vácuo e deposição por *magnetron sputtering*

Apesar de existir vários trabalhos desenvolvidos nesta área utilizando os modelos magnéticos existente, pouco se sabe a respeito da aplicação do modelo de Heisenberg em filmes antiferromagnéticos utilizando a técnica do operador diferencial, algo que nos propomos a desenvolver a partir do capítulo 2 desta dissertação.

Outro fato curioso é a expansão de resultados experimentais em outros sistemas que pode ser aplicada aos filmes finos, como é o caso do comportamento anômalo da susceptibilidade obtida através da técnica de espalhamento de neutrons [7], reproduzida também por Cabral Neto [13] de forma teórica considerando um sistema Heisenberg antiferromagnético em três dimensões com spin  $\frac{1}{2}$ , cujo valor de interação de troca  $J = 474,5cm^{-1}$  e campo externo  $H = 1,43T$ , foram estimados.

Na figura (1.3) apresentamos os resultados experimentais da susceptibilidade em função da temperatura para um composto  $La_2CuO_4$  na presença de um campo externo  $H = 3.0T$  [7]. O comportamento da susceptibilidade obtido apresenta, para altos campos magnéticos, um comportamento anômalo, caracterizado por um ponto de mínimo e depois um ponto de



máximo na temperatura de transição  $T_N(H)$ . Tal anomalia foi comprovada por vários métodos experimentais [8, 9, 10, 11].

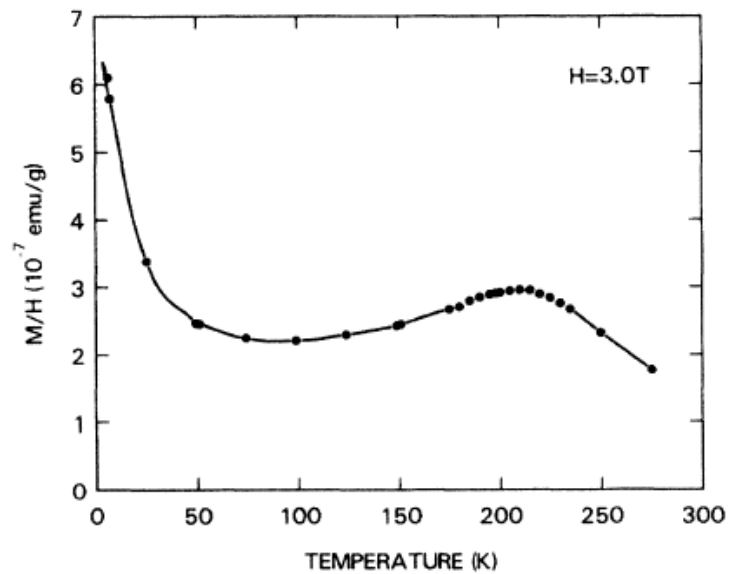


Figura 1.3: Comportamento anômalo da suscetibilidade magnética obtida experimentalmente[7] para o composto de  $La_2CuO_4$  na presença de um campo magnético externo  $H = 3.0T$ .

Neste trabalho propomos analisar esta anomalia do ponto de vista teórico, verificando os parâmetros relevantes para o caso de um filme fino magnético utilizando o modelo de Heisenberg isotrópico com spin  $\frac{1}{2}$  e a técnica do operador diferencial aliada a teoria de campo efetivo.

## Capítulo 2

# Técnica do Operador diferencial

### 2.1 Considerações Gerais

A descrição dos fenômenos magnéticos utilizando modelos como Ising, Heisenberg torna necessário a utilização de técnicas ou até mesmo aproximações, por se tratarem de problemas envolvendo muitos corpos interagentes.

Do ponto de vista teórico, para descrever as propriedades dos sistemas reais, inicialmente um Hamiltoniano deve ser proposto a fim de representar as diversas formas microscópicas de interações dos constituintes destes sistemas. Usando a mecânica estatística, o ponto de partida consiste em calcular a função de partição definida por

$$Z = Tr \left[ e^{-\beta \mathcal{H}} \right]$$

onde  $Tr$  representa o traço da função,  $\mathcal{H}$  o Hamiltoniano que descreve o sistema e  $\beta = \frac{1}{k_B T}$  ( $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $T$  temperatura).

Conhecido o Hamiltoniano  $\mathcal{H}$ , representado por uma matriz de ordem  $n$ , temos após sua diagonalização uma nova expressão para  $Z$

$$Z = \sum_{i=1}^n e^{-\beta \lambda_i}$$

onde  $\{\lambda_i\}$  são os autovalores do Hamiltoniano  $\mathcal{H}$ .

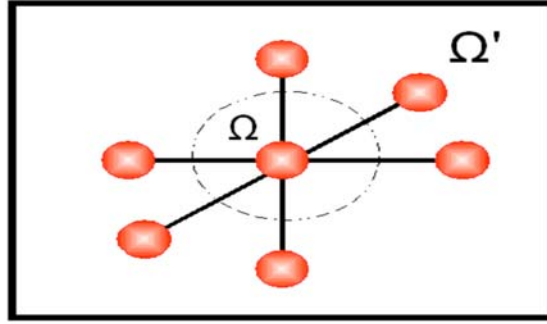


Figura 2.1: Aglomerado finito  $\Omega$  e restante do sistema  $\Omega'$ .

A dificuldade apresenta-se ao tratarmos a somatória que descreve  $Z$ , devido ao fato de que no limite termodinâmico  $n$  é infinito, pois trata-se de um problema envolvendo muitos corpos cujas presenças de interações dificultam ainda mais.

Para contornar tais dificuldades vários métodos aproximativos são propostos em literaturas, um desses métodos é a teoria de campo efetivo (EFT) aliada à técnica do operador diferencial (OPD) proposta por Honmura e Kaneyoshi [12].

Ao tratarmos sistemas magnéticos, grandezas macroscópicas como magnetização  $m$ , susceptibilidade  $\chi$  podem ser calculadas utilizando a mecânica estatística do equilíbrio, através de uma expressão que define seu valor médio no *ensemble canônico*, por

$$\langle A \rangle = \frac{\text{Tr} [\hat{A} e^{-\beta \mathcal{H}}]}{\text{Tr} [e^{-\beta \mathcal{H}}]} \quad (2.1)$$

,onde  $\hat{A}$  é o operador que representa o observável. A que se deseja medir.

A fim de elucidar a dificuldade presente no Hamiltoniano para o caso de um número muito grande de partículas interagentes, aplica-se a teoria de campo efetivo. Separando o sistema em duas partes: uma representando um aglomerado  $\Omega$  finito com  $n < N$  spins que descrevem as interações dentro do aglomerado e com sua vizinhança, e a parte restante  $\Omega'$  não possuindo spins do aglomerado  $\Omega$ , conforme está esquematizado na figura (2.1).

Assim sendo, podemos reescrever o Hamiltoniano total  $\mathcal{H}$  na forma fatorada

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_\Omega + \mathcal{H}_{\Omega'}, \quad (2.2)$$

onde  $\mathcal{H}_\Omega$  representa o Hamiltoniano do aglomerado finito  $\Omega$  e  $\mathcal{H}_{\Omega'}$  representa a parte restante  $\Omega'$  que não possui spins do aglomerado  $\Omega'$ .

Seja  $A(\Omega)$  um operador de variáveis pertencente ao aglomerado  $\Omega$  e  $[\widehat{\mathcal{H}}_\Omega, \widehat{\mathcal{H}}_{\Omega'}] = 0$ , então é possível fatorar o traço na Eq. (2.1) por  $Tr \equiv Tr' Tr_\Omega$ , onde  $Tr_\Omega$  é realizado no sub-espço de  $n < N$  spins ( $\Omega$ ) e  $Tr'$  no sub-espço restante de  $n' = N - n$  spins. Desta maneira, o valor médio da grandeza  $A(\Omega)$  será reescrito, segundo a definição da Eq. (2.1), por

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

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

$$\langle A(\Omega) \rangle = \frac{Tr' e^{-\beta\widehat{\mathcal{H}}_{\Omega'}} Tr_\Omega A(\Omega) e^{-\beta\widehat{\mathcal{H}}_\Omega}}{Tr' e^{-\beta\widehat{\mathcal{H}}_{\Omega'}} Tr_\Omega A(\Omega) e^{-\beta\widehat{\mathcal{H}}_\Omega}}. \quad (2.3)$$

Multiplicando a Eq. (2.3) pelo fator unitário  $1 \equiv \frac{Tr e^{-\beta\widehat{\mathcal{H}}_\Omega}}{Tr e^{-\beta\widehat{\mathcal{H}}_\Omega}}$  e combinando adequadamente com as propriedades de separação do traço e do Hamiltoniano, ficaremos

$$\langle A(\Omega) \rangle = \frac{Tr \left\{ \left[ \frac{Tr_\Omega A(\Omega) e^{-\beta\widehat{\mathcal{H}}_\Omega}}{Tr_\Omega e^{-\beta\widehat{\mathcal{H}}_\Omega}} \right] e^{-\beta\widehat{\mathcal{H}}_{\Omega'}} \right\}}{Tr \left\{ e^{-\beta\widehat{\mathcal{H}}_{\Omega'}} \right\}}. \quad (2.4)$$

Comparando a Eq. (2.4) com a definição da média, Eq. (2.1), temos que o valor médio de  $A(\Omega)$  fica reduzido ao cálculo do traço parcial no aglomerado finito, ou seja,

$$\langle A(\Omega) \rangle = \left\langle \frac{Tr_\Omega \left\{ A(\Omega) e^{-\beta\widehat{\mathcal{H}}_\Omega} \right\}}{Tr_\Omega \left\{ e^{-\beta\widehat{\mathcal{H}}_\Omega} \right\}} \right\rangle. \quad (2.5)$$

Para casos em que  $[\mathcal{H}_\Omega, \mathcal{H}_{\Omega'}] \neq 0$ , temos os modelos descritos por Hamiltonianos quânticos, portanto, a Eq.(2.5) não é exata. No entanto Sá Barreto e Fittipaldi [14] usaram esta identidade

de forma aproximada para estudar a termodinâmica do modelo de Ising com campo transversal, obtendo resultados qualitativos e quantitativos satisfatórios quando comparados com resultados mais rigorosos (expansão em série, por exemplo).

## 2.2 Aplicações

Para elucidar a técnica do operador diferencial, vamos considerar por simplicidade o modelo de Ising de spin 1/2 descrito pelo seguinte Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad (2.6)$$

onde  $J$  ( $J > 0$  e  $J < 0$  correspondem aos sistemas ferromagnético e antiferromagnético, respectivamente) é o parâmetro de interação de troca,  $\sigma_i = \pm 1$  denota a variável de spin no sítio  $i$  da rede cristalina e  $\langle i, j \rangle$  representa a soma sobre os primeiros vizinhos ( $z$ ).

Apenas para ilustrar inicialmente, vamos considerar um aglomerado com um spin, então o Hamiltoniano (2.6) será escrito por

$$\mathcal{H} = -J \sigma_1 \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}}, \quad (2.7)$$

onde  $\vec{\delta}$  denota o vetor primeiros vizinhos ao redor do sítio central  $\sigma_1$  do aglomerado  $\Omega$ .

Usando  $A(\Omega) = \sigma_1$  na Eq.(2.5), obtemos a magnetização  $m = \langle \sigma_1 \rangle$  por spin dada por

$$m = \left\langle \tanh \left( J \beta \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}} \right) \right\rangle, \quad (2.8)$$

onde esta expressão é conhecida como identidade (exata) de Callen [15] e Suzuki [16], e foi deduzida usando o formalismo da função de Green.

Seja  $F(x)$  uma função analítica e  $D_x = \frac{d}{dx}$  o operador diferencial, então temos a identidade  $e^{\lambda D_x} F(x) = F(x + \lambda)$ . Definindo  $F(x) = \tanh(x)$ , podemos reescrever a Eq.(2.8) na forma

$$m = \left\langle e^{\left[ K \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}} \right] D_x} F(x) \right\rangle_{x=0},$$

ou expandindo a somatória

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^z e^{[K\sigma_{1+\vec{\delta}}]D_x} \right\rangle F(x)|_{x=0}$$

onde  $z$  é o numero de coordenação da rede, e  $K = \beta J$ .

Agora usando a identidade  $\exp(\lambda\sigma_1) = \cosh(\lambda) + \sigma_1 \sinh(\lambda)$  ( $\sigma_1 = \pm 1$ ), ficaremos

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^z (\alpha_x + \sigma_{1+\vec{\delta}}\beta_x) \right\rangle F(x)|_{x=0} \quad (2.9)$$

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

A Eq.(2.9) é exata mas de difícil manipulação algébrica, pois o segundo membro envolvem funções de correlações que ao calcularmos geramos um conjunto infinito de equações acopladas. Assim sendo, algum tipo de desacoplamento deve ser usada a fim de obtermos as grandezas termodinâmicas de interesse de forma aproximada.

Em primeira ordem, a aproximação mais usada despreza as correlações entre spins, i.e,

$$\langle \sigma_i \sigma_j \dots \sigma_l \rangle \simeq \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \dots \langle \sigma_l \rangle \quad (2.10)$$

com  $i \neq j \neq \dots \neq l$ . Desta maneira, a Eq.(2.9) ficará escrita nesta aproximação (2.10) por

$$m = (\alpha_x + m\beta_x)^z F(x)|_{x=0} \quad (2.11)$$

onde usamos a propriedade de simetria translacional  $\langle \sigma_i \rangle = m \forall i$ .

Dado o número de coordenação  $z$ , da Eq(2.11) geramos um polinômio de potências ímpares de  $m$ , pois sendo  $F(x)$  uma função ímpar [ $F(-x) = -F(x)$ ], qualquer operador par  $\Theta_{Par}(D_x)$  aplicado em  $F(x)$  no limite  $x \rightarrow 0$  será nulo. Os coeficientes desta expansão são determinados analiticamente com recursos desenvolvidos no software MAPLE, onde usamos a propriedade  $\exp(\lambda D_x) F(x) = F(x + \lambda)$ . A aproximação de campo médio (**MFA**) consiste em reescrever a média da tangente hiperbólica de variáveis de spins na Eq.(2.8) pela tangente da média deste

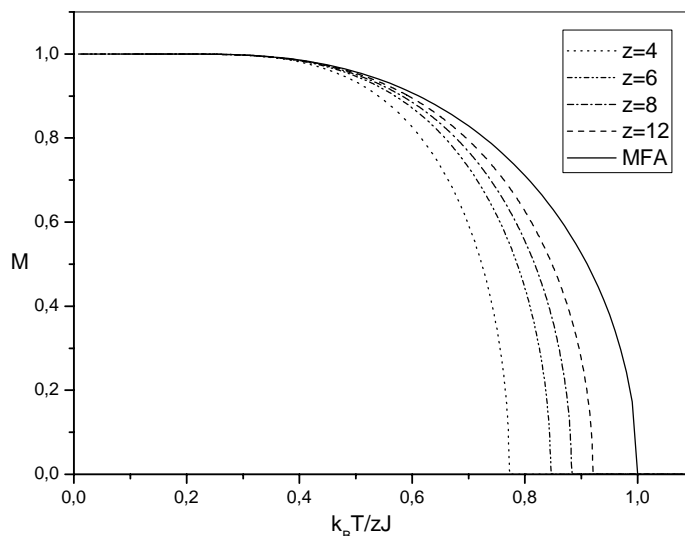


Figura 2.2: Magnetização  $m$  como função da temperatura reduzida para vários valores de  $z$  ( $z = 2, 4, 6, 12$ ) obtidos via MFT-1 e MFA, indicados na figura.

argumento, obtendo assim a expressão da **MFA** por

$$m = \tanh(zKm). \quad (2.12)$$

Note que contrário a MFA, a teoria de campo efetivo em aglomerado com um spin (EFT-1) tratou as auto-correlações de forma exata ( $\langle\langle\sigma_1^2\rangle\rangle = 1$ , por exemplo) quando a identidade  $\exp(\lambda\sigma_1) = \cosh(\lambda) + \sigma_1 \sinh(\lambda)$  foi utilizada.

Portanto, numa rede linear ( $z = 2$ ) MFA obtém erroneamente um valor não nulo para a temperatura crítica ( $m \rightarrow 0$ ) que é  $T_C = K_C^{-1} = z = 2$ , enquanto EFT-1 encontra a solução exata  $T_C = 0$ . À medida que número de coordenação cresce ( $z$ ), o resultado de EFT-1 tende para a solução MFA, de tal forma que  $\lim_{z \rightarrow \infty} \left\{ \frac{T_C^{EFT-1}}{z} \right\} = 1$  correspondendo ao valor de MFA. A fim de ilustrar esta convergência de EFT-1 para a solução de MFA, na figura (2.2) apresentamos o comportamento da magnetização  $m$  como uma função da temperatura reduzida  $\frac{T}{z} \equiv t$  para diversos valores de  $z$  ( $z = 3, 4, 6, 8, 12$ ). Observe que da Eq.(2.12) a curva obtida por MFA para o comportamento da magnetização fica universal (independente do valor de  $z$ ).

No limite  $m \rightarrow 0$  (transição de fase de segunda ordem), da Eq.(2.11) encontramos a temperatura crítica  $T_C$  resolvendo numericamente a expressão dada por

$$A_1^z(K_C) = z\alpha_x^{z-1}\beta_x F(x)|_{x=0} = 1. \quad (2.13)$$

Para a rede quadrada ( $z = 4$ ) encontra-se  $T_C = 3.09$  ( $= 4.0$ , MFA) que pode ser comparada com a solução exata. No caso da rede cúbica simples ( $z = 6$ ) obtemos  $T_C = 5.07$  ( $= 6.0$ , MFA) que é confrontada com resultados de simulação de Monte Carlo  $T_C = 4.51$ . Certamente, os resultados obtidos por EFT são superiores a MFA, mas ambos são metodologias de campo efetivo que apresentam expoentes críticos universais de campo médio ( $\beta = \frac{1}{2}, \alpha = 0, \nu = 1, n = 0, \delta = 3$ ). Para encontrarmos melhores resultados quantitativos em comparação as soluções rigorosas, usando o formalismo do operador diferencial (teoria de campo efetivo), algumas alternativas têm sido propostas na literatura.

Mantendo a simplicidade do aglomerado com um sitio, Kaneyoshi e colaboradores[18] propuseram um novo desacoplamento em que se leva em consideração as flutuações dos spins ao redor do spin central  $\sigma_1$  na forma

$$\sigma_p = \langle \sigma_p \rangle + \lambda (\sigma_1 + \langle \sigma_1 \rangle), \quad (2.14)$$

onde  $\lambda$  representa uma reação (chamada de campo de reação de Onsager) de um spin no sítio  $p \neq 1$  devido a presença dos vizinhos. Usando esta nova aproximação, a temperatura crítica é equivalente ao resultado de Bethe-Peierls, isto é,

$$T_C = \frac{2}{\ln\left(\frac{z}{z-2}\right)}. \quad (2.15)$$

Outras aproximações foram propostas, como, por exemplo, a de Taggart e Fittipaldi[19] que tem como ponto de partida a identidade de Callen-Suzuki inversa dada por

$$\left\langle \sigma_1 \coth \left( K \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}} \right) \right\rangle = 1. \quad (2.16)$$

Aplicando a técnica do operador diferencial e a aproximação de Zernike (primeira ordem),



numa rede quadrada encontraram  $T_C = 2.680$ . Taggart[20] usou a mesma estratégia acima em conjunto com o desacoplamento de campo de reação de Onsager, Eq. (2.14), obtendo para a rede quadrada  $T_C = 2.490$  que aproxima-se mais da solução exata  $T_C = 2.270$ .

Uma segunda estratégia de melhorar os resultados quantitativos através da técnica do operador diferencial é aumentando o tamanho do aglomerado no esquema de *finite-size scaling*. Usando o aglomerado com dois spins, o Hamiltoniano de Ising ficará

$$\mathcal{H}_2 = -J\sigma_1\sigma_2 - J\sigma_1 \sum_{\vec{\delta}_1}^{z-1} \sigma_{1+\vec{\delta}_1} - J\sigma_2 \sum_{\vec{\delta}_2}^{z-1} \sigma_{2+\vec{\delta}_2}. \quad (2.17)$$

Portanto, definindo  $m = \langle \frac{1}{2} (\sigma_1 + \sigma_2) \rangle$  e usando a identidade (2.5) obtemos

$$m = \left\langle \frac{\sinh(a_1 + a_2)}{\cosh(a_1 + a_2) + e^{-2K} \cosh(a_1 - a_2)} \right\rangle \quad (2.18)$$

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

Definindo a função  $g(x, y)$  por

$$g(x, y) = \frac{\sinh(x + y)}{\cosh(x + y) + e^{-2K} \cosh(x - y)} \quad (2.19)$$

e generalizando a identidade do operador diferencial para duas variáveis ( $D_\mu = \frac{\partial}{\partial \mu}$ ,  $\mu = x, y$ )

$$e^{aD_x + bD_y} g(x, y) = g(x + a, y + b) \quad (2.20)$$

a Eq.(2.20) ficará reescrita na forma

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}_1}^{z-1} e^{KD_x \sigma_{1+\vec{\delta}_1}} \prod_{\vec{\delta}_2}^{z-1} e^{KD_y \sigma_{2+\vec{\delta}_2}} \right\rangle g(x, y)|_{x,y=0}. \quad (2.21)$$

Uma análise mais cuidadosa na Eq.(2.18) evidencia logo a presença de dois tipos de vizinhos, expressos através dos produtórios  $\prod_{\vec{\delta}_1}^{z-1}$  e  $\prod_{\vec{\delta}_2}^{z-1}$ . Dependendo da topologia da rede, os spins  $\sigma_1$  e  $\sigma_2$

podem admitir vizinhos comuns ( $z'$ ). Desta maneira podemos expandir a Eq. (2.21) resultando

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}_1}^{z-1-z'} (\alpha_x + \sigma_{1+\vec{\delta}_1} \beta_x) \prod_{\vec{\delta}_2}^{z-1-z'} (\alpha_y + \sigma_{2+\vec{\delta}_2} \beta_y) \prod_{\vec{\delta}}^{z'} (\alpha_{x+y} + \sigma_{1+\vec{\delta}} \beta_{x+y}) \right\rangle \quad (2.22)$$

onde  $\alpha_\nu = \cosh(KD_\nu)$ ,  $\beta_\nu = \sinh(KD_\nu)$  ( $\nu = x, y$ ),  $\alpha_{x+y} = \cosh[K(D_x + D_y)]$ , e  $\beta_{x+y} = \sinh[K(D_x + D_y)]$ . Na obtenção da Eq.(2.22) temos utilizado a identidade de spin  $\exp(\lambda\sigma_1) = \cosh(\lambda) + \sigma_1 \sinh(\lambda)$ , que após utilizarmos a aproximação de Zernike ficamos com

$$m = (\alpha_x + m\beta_x)^{z-1-z'} (\alpha_y + m\beta_y)^{z-1-z'} (\alpha_{x+y} + m\beta_{x+y})^{z'} g(x, y)|_{x,y=0}. \quad (2.23)$$

Claramente, a forma explícita de vizinhos comuns ou não aos sítios 1 e 2, no aglomerado com dois spins centrais assegura a distinção da topologia da rede. Para ilustrar a topologia neste aglomerado, na fig.(2.3) apresentamos a rede kagomé ( $z = 4, z' = 1$ ), quadrada ( $z = 4, z' = 0$ ), triangular ( $z = 6, z' = 2$ ) e cúbica simples ( $z = 6, z' = 0$ ). No limite  $m \rightarrow 0$ , da Eq.(2.23) encontramos  $T_C$  resolvendo numericamente a seguinte expressão:

$$A_1^{z,z'}(K_C) = 1 \quad (2.24)$$

sendo

$$\begin{aligned} A_1^{z,z'}(K_C) = & [2(z - z' - 1) \alpha_x^{z-z'-2} \alpha_y^{z-z'-1} \beta_x \\ & + z' \alpha_x^{z-z'-1} \alpha_y^{z-z'-1} \alpha_{x+y}^{z'-1} \beta_{x+y}] g(x, y)|_{x,y=0}. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Na Tabela 2.1 apresentamos os resultados de  $T_C$  para diversas topologias de redes ( $z, z'$ ) obtidos usando EFT-1 e EFT-2, que são comparados com soluções exatas em redes  $2d$  e simulações de Monte Carlo em rede  $3d$ . Observamos a superioridade, qualitativamente e quantitativamente, de EFT-2 sobre EFT-1, o que encoraja a aplicar este novo formalismo a sistemas mais complexos. O presente formalismo pode ser desenvolvido para aglomerados maiores ( $N > 2$ ), mas a convergência dos resultados é lenta o suficiente em contrapartida ao aumento do tempo computacional, que não justifica desenvolver neste trabalho.

Após os trabalhos de Honmura e Kaneyoshi, várias aplicações têm sido feitas na literatura,

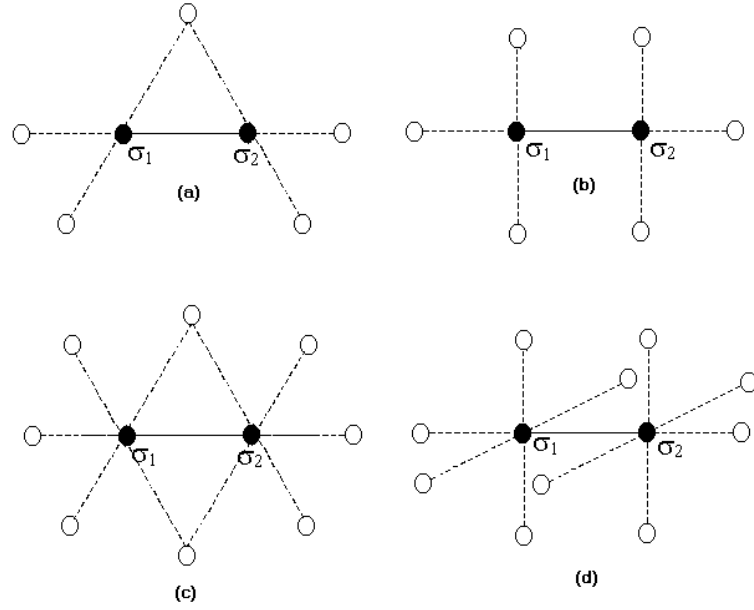


Figura 2.3: Topologia das redes (a) Kagomé (b) quadrada (c) triangular e (d) cúbica simples para um aglomerado com dois spins.

tais como, modelo de Ising anisotrópico [21], vidro de spin Ising [22], Ising desordenado [28], efeitos de superfícies [23], sistemas amorfos [24], modelo de Potts [25], Blume-Capel [26], Blume-Emery-Griffiths [27], ambos estes resultados exemplificados usaram aglomerados com um spin. No início da década de noventa EFT-2 foi proposto por Bobak e Jascur [29] EFT-2 e aplicado no modelo de Ising, posteriormente esta técnica foi aplicada no modelo de Heisenberg ferromagnético [30], antiferromagnético [31], efeito de superfície [32], interação Dzyolshinski e Moriya (DM) [33] e mais recentemente foi usada no modelo  $J_1 - J_2$  para estudar o estado spin-líquido [34].

A seguir iremos aplicar EFT-2 no filme fino de Heisenberg antiferromagnéticoanisotropico para investigar o comportamento anômalo da susceptibilidade em baixa temperatura como uma função do tamanho do filme  $L$ , efeito de superfície.

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

Tabela 2.1: Valores da temperatura crítica para várias redes 2d e 3d do modelo de Ising 1/2 obtidos via EFT-1 e EFT-2. Os resultados são comparados com solução exata (2d) e Monte Carlo (3d).

## Capítulo 3

# Filme Fino Heisenberg antiferromagnético numa estrutura de filme fino

### 3.1 Considerações Gerais

O modelo de Heisenberg consiste em expressar a dependência do Hamiltoniano de um dado sistema de dois ou mais elétrons com o spin.

Para explicar o fenômeno do magnetismo, do ponto de vista microscópico, Heisenberg[2] propôs que o forte alinhamento dos spins no ferromagnetismo decorria de seus vizinhos mais próximos, caracterizando uma energia de troca entre spins responsável pelo magnetismo.

A grande motivação de se estudar o modelo de Heisenberg quântico de spin 1/2 está no fato de ser um importante modelo na descrição de materiais ferro e antiferromagnéticos.

Destaca-se também sua aplicação no estudo de materiais supercondutores em altas temperatura, como, por exemplo, o composto  $La_{2-x}Ba_xCuO_4$ , que na fase isolante ( $x < x_C \simeq 0.025$ ) é descrito por um antiferromagneto Heisenberg quase bidimensional. O composto  $La_{2-x}Ba_xCuO_4$  foi estudado por Cabral Neto [13] utilizando o modelo de Heisenberg anisotrópico via EFT-2 para uma rede cúbica simples com interação entre planos  $\lambda$ . Em seu trabalho, Neto verificou o resultado anômalo da susceptibilidade, comprovado anteriormente por Collin utilizando espal-

hamento de neutrons [7], onde foi utilizado o modelo de Heisenberg para tratar super-redes magnética compostas por camadas do tipo **F** e **AF**.

### 3.2 Modelo e formalismo

Para estudar o Modelo de Heisenberg numa estrutura de fino fino, partiremos do seguinte Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle ij \rangle} -J_{ij} \left[ (n_x S_i^x S_j^x + n_y S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z \right] - H \sum_i S_i^z \quad (3.1)$$

onde  $J_{ij}$  é a energia de interação entre os spins,  $H$  o campo externo,  $n_x$  e  $n_y$  os termos de anisotropia. Tomamos uma rede cúbica simples formada por  $L$  planos, constituídos por duas subredes (A e B), indexando os planos pelo índice  $n$  conforme sugere a figura (3.1) podemos reescrever o Hamiltoniano da Eq.(3.1) para um aglomerado com dois spins na forma

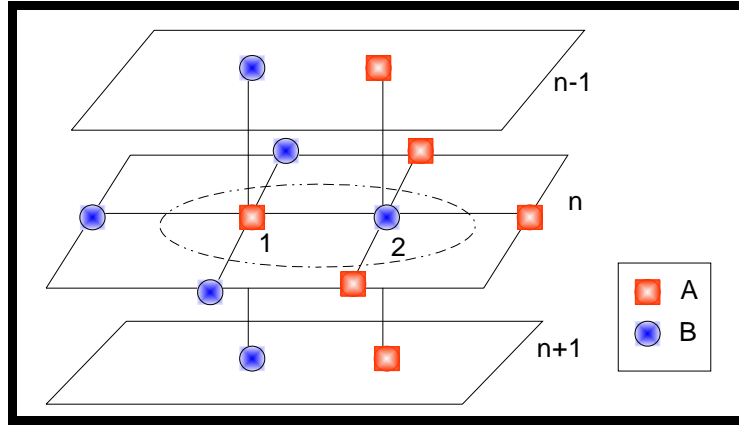


Figura 3.1:  $n$ -ésima camada de um filme fino antiferromagnético. A região tracejada indica o aglomerado com dois spins a ser usada na (EFT-2)

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_2 = & -J_n \left[ \left( n_x S_{1,n}^{xA} S_{2,n}^{xB} + n_y S_{1,n}^{yA} S_{2,n}^{yB} \right) + S_{1,n}^{zA} S_{2,n}^{zB} \right] - H S_{1,n}^{zA} - H S_{2,n}^{zB} \\
& - J_n \left[ \left( n_x S_{1,n}^{xA} \sum_{\vec{\delta}}^3 S_{1+\vec{\delta},n}^{xB} + n_y S_{1,n}^{yA} \sum_{\vec{\delta}}^3 S_{1+\vec{\delta},n}^{yB} \right) + S_{1,n}^{zA} \sum_{\vec{\delta}}^3 S_{1+\vec{\delta},n}^{zB} \right] \\
& - J_n \left[ \left( n_x S_{2,n}^{xB} \sum_{\vec{\delta}}^3 S_{2+\vec{\delta},n}^{xA} + n_y S_{2,n}^{yB} \sum_{\vec{\delta}}^3 S_{2+\vec{\delta},n}^{yA} \right) + S_{2,n}^{zB} \sum_{\vec{\delta}}^3 S_{2+\vec{\delta},n}^{zA} \right] \\
& - J_{n-1} \left[ \left( n_x S_{1,n}^{xA} \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{1+\vec{\delta},n-1}^{xB} + n_y S_{1,n}^{yA} \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{1+\vec{\delta},n-1}^{yB} \right) + S_{1,n}^{zA} \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{1+\vec{\delta},n-1}^{zB} \right] \\
& - J_{n-1} \left[ \left( n_x S_{2,n}^{xB} \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{2+\vec{\delta},n-1}^{xA} + n_y S_{2,n}^{yB} \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{2+\vec{\delta},n-1}^{yA} \right) + S_{2,n}^{zB} \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{2+\vec{\delta},n-1}^{zA} \right] \\
& - J_{n+1} \left[ \left( n_x S_{1,n}^{xA} \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{1+\vec{\delta},n+1}^{xB} + n_y S_{1,n}^{yA} \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{1+\vec{\delta},n+1}^{yB} \right) + S_{1,n}^{zA} \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{1+\vec{\delta},n+1}^{zB} \right] \\
& - J_{n+1} \left[ \left( n_x S_{2,n}^{xB} \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{2+\vec{\delta},n+1}^{xA} + n_y S_{2,n}^{yB} \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{2+\vec{\delta},n+1}^{yA} \right) + S_{2,n}^{zB} \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{2+\vec{\delta},n+1}^{zA} \right].
\end{aligned}$$

Aplicando a aproximação axial, ou seja, considerando que o sistema tenha uma direção preferencial (eixo  $\vec{Oz}$ ), ficaremos com o seguinte Hamiltonino reduzido para a  $n$ -ésima camada

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_2 = & -J_n \left[ \left( n_x S_{1,n}^{xA} S_{2,n}^{xB} + n_y S_{1,n}^{yA} S_{2,n}^{yB} \right) + S_{1,n}^{zA} S_{2,n}^{zB} \right] \\
& - \left( J_n \sum_{\vec{\delta}}^3 S_{2+\vec{\delta},n}^{zB} + J_{n+1} \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{2+\vec{\delta},n+1}^{zB} + J_{n-1} \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{2+\vec{\delta},n-1}^{zB} + H \right) S_{1,n}^{zA} \\
& - \left( J_n \sum_{\vec{\delta}}^3 S_{1+\vec{\delta},n}^{zA} + J_{n+1} \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{1+\vec{\delta},n+1}^{zA} + J_{n-1} \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{1+\vec{\delta},n-1}^{zA} + H \right) S_{2,n}^{zB}.
\end{aligned}$$

Por se tratar de um sistema quântico, torna-se necessário a diagonalização de  $\mathcal{H}_2$ , para o cálculo da função de partição

$$Z_n = \sum_{i=1}^4 e^{-\beta \lambda_i} \quad (3.2)$$

onde  $\lambda_i$  são os autovalores da matriz  $\mathcal{H}_2$ , escrita na base dos dois spins  $|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle$ .

Após o cálculo dos autovalores  $\lambda_i$ , e substituídos na Eq.(3.2) temos a seguinte expressão para a função de partição

$$Z_n = 2e^{-J_n\beta} \cosh(W_n^+) + 2e^{J_n\beta} \cosh(W_n^-)$$

sendo

$$W_n^\pm(a_{1n}, a_{2n}) = \sqrt{(a_{2n} \mp a_{1n})^2 + (J_n\beta)^2 (n_x \pm n_y)^2}$$

e

$$\begin{aligned} a_{2n} &= J_n\beta \sum_{\vec{\delta}}^3 S_{2+\vec{\delta},n}^{zB} + J_{n+1}\beta \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{2+\vec{\delta},n+1}^{zB} + J_{n-1}\beta \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{2+\vec{\delta},n-1}^{zB} + H\beta \\ a_{1n} &= J_n\beta \sum_{\vec{\delta}}^3 S_{1+\vec{\delta},n}^{zA} + J_{n+1}\beta \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{1+\vec{\delta},n+1}^{zA} + J_{n-1}\beta \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{1+\vec{\delta},n-1}^{zA} + H\beta. \end{aligned}$$

Definindo as magnetizações das subredes A e B na n-ésima camada por  $m_{nA} = \langle S_{1n}^{zA} \rangle$  e  $m_{nB} = \langle S_{2n}^{zB} \rangle$ , podemos então expressá-los como uma função de  $Z_n$  por

$$m_{nA} = \left( \frac{\partial \ln Z_n}{\partial a_{2n}} \right)$$

e

$$m_{nB} = \left( \frac{\partial \ln Z_n}{\partial a_{1n}} \right)$$

que após algumas manipulações algébricas ficamos com

$$m_{nA} = \left\langle \frac{\Omega_n^-(a_{2n}, a_{1n}) \sinh[W_n^+(a_{2n}, a_{1n})] + e^{-2K_n} \Omega_n^+(a_{2n}, a_{1n}) \sinh[W_n^-(a_{2n}, a_{1n})]}{\cosh[W_n^+(a_{2n}, a_{1n})] + e^{-2K_n} \cosh[W_n^-(a_{2n}, a_{1n})]} \right\rangle \quad (3.3)$$

e

$$m_{nB} = \left\langle \frac{\Omega_n^-(a_{2n}, a_{1n}) \sinh[W_n^+(a_{2n}, a_{1n})] - e^{-2K_n} \Omega_n^+(a_{2n}, a_{1n}) \sinh[W_n^-(a_{2n}, a_{1n})]}{\cosh[W_n^+(a_{2n}, a_{1n})] + e^{-2K_n} \cosh[W_n^-(a_{2n}, a_{1n})]} \right\rangle \quad (3.4)$$

sendo

$$\Omega_n^\pm(a_{2n}, a_{1n}) = \frac{a_{2n} \mp a_{1n}}{W_n^\pm(a_{2n}, a_{1n})}.$$



Definindo a função generalizada  $f_{n\mu}(x, y)$  com  $x = a_{2n}$  e  $y = a_{1n}$

$$f_{n\mu}(x, y) = \frac{\Omega_n^-(x, y) \operatorname{senh}[W_n^-(x, y)] \pm e^{-2K_n} \Omega_n^+(x, y) \operatorname{senh}[W_n^+(x, y)]}{\cosh[W_n^-(x, y)] + e^{-2K_n} \cosh[W_n^+(x, y)]}$$

onde  $\mu = A$  corresponde o sinal (+) e  $\mu = B$  o sinal (-),

$$\Omega_n^\pm(x, y) = \frac{x \mp y}{W_n^\pm(x, y)} \quad (3.5)$$

e

$$W_n^\pm(x, y) = \sqrt{(x \mp y)^2 + K_n^2(n_x \pm n_y)^2}. \quad (3.6)$$

Usando a técnica do operador diferencial e a aproximação de Zernike, encontramos as magnetizações na sub-rede  $\mu = (A, B)$  em cada camada  $n = 1, 2, 3, \dots, L$  por

$$\begin{aligned} m_{1,(A,B)} &= (\alpha_{sx} + m_{1,(B,A)}\beta_{sx})^3 (\alpha_x + m_{2,(B,A)}\beta_x) \\ &(\alpha_{sy} + m_{1,(B,A)}\beta_{sy})^3 (\alpha_y + m_{2,(B,A)}\beta_y) \\ &f_{1,(B,A)}(x, y)|_{x=y=0} \end{aligned} \quad (3.7)$$

para a primeira superfície ( $n = 1$ ),

$$\begin{aligned} m_{n,(A,B)} &= (\alpha_x + m_{n,(B,A)}\beta_x)^3 (\alpha_x + m_{n-1,(B,A)}\beta_x) (\alpha_x + m_{n+1,(B,A)}\beta_x) \\ &(\alpha_y + m_{n,(B,A)}\beta_y)^3 (\alpha_y + m_{n-1,(B,A)}\beta_y) (\alpha_y + m_{n+1,(B,A)}\beta_y) \\ &f_{n,(B,A)}(x, y)|_{x=y=0} \end{aligned} \quad (3.8)$$

para  $n$ -ésima superfície (*bulk*)

$$\begin{aligned} m_{L,(A,B)} &= (\alpha_{sx} + m_{L,(B,A)}\beta_{sx})^3 (\alpha_x + m_{L-1,(B,A)}\beta_x) \\ &(\alpha_{sy} + m_{L,(B,A)}\beta_{sy})^3 (\alpha_y + m_{L-1,(B,A)}\beta_y) \\ &f_{L,(B,A)}(x, y)|_{x=y=0} \end{aligned} \quad (3.9)$$

para a  $L$ -ésima superfície ( $n = L$ ), onde  $\alpha_{\nu s} = \cosh(J_s \beta D_\nu)$ ,  $\beta_{\nu s} = \operatorname{senh}(J_s \beta D_\nu)$ ,  $\alpha_\nu =$

$\cosh(J\beta D_\nu)$ , e  $\beta_\nu = \sinh(J\beta D_\nu)$ .

As Eqs. (3.7), (3.8) e (3.9) permitem tratar vários modelos, para diferentes anisotropias como Ising ( $n_x = n_y = 0$ ), XY ( $n_x = 0$  ou  $n_y = 0$ ) e Heisenberg isotrópico ( $n_x = n_y = 1$ ), e representa um conjunto de  $L$  e  $2L$  equações acopladas para os sistemas ferromagnéticos ( $J > 0$ ) e antiferromagnético ( $J < 0$ ), respectivamente.

### 3.3 Discussão dos Resultados

#### 3.3.1 a) Caso ferromagnético

Aplicando a condição de contorno  $m_A = m_B = m$  para as subredes e expandindo as Eqs. (3.7) – (3.9), temos as seguintes expressões

$$m_1 = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 [A_{1,1kq}(H, T, J_s, J) + A_{2,1kq}(H, T, J_s, J) m_2 + A_{3,1kq}(H, T, J_s, J) m_2^2] m_1^{k+q} \quad (3.10)$$

$$m_n = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 [A_{1,nkq}(H, T, J_s, J) + A_{2,nkq}(H, T, J_s, J) (m_{n-1} + m_{n+1}) + A_{3,nkq}(H, T, J_s, J) m_{n-1} m_{n+1} + A_{4,nkq}(H, T, J_s, J) (m_{n-1} + m_{n+1})^2 + A_{5,nkq}(H, T, J_s, J) m_{n-1}^2 m_{n+1}^2 + A_{6,nkq}(H, T, J_s, J) (m_{n-1}^2 m_{n+1} + m_{n-1} m_{n+1}^2)] m_n^{k+q} \quad (3.11)$$

$$m_L = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 [A_{1,Lkq}(H, T, J_s, J) + A_{2,Lkq}(H, T, J_s, J) m_{L-1} + A_{3,Lkq}(H, T, J_s, J) m_{L-1}^2] m_L^{k+q} \quad (3.12)$$

onde os coeficientes  $A_{1,1kq}(H, T, J_s, J)$ ,  $A_{2,1kq}(H, T, J_s, J)$ ,  $A_{3,1kq}(H, T, J_s, J)$ ,  $A_{1,nkq}(H, T, J_s, J)$ ,  $A_{2,nkq}(H, T, J_s, J)$ ,  $A_{3,nkq}(H, T, J_s, J)$ ,  $A_{4,nkq}(H, T, J_s, J)$ ,  $A_{5,nkq}(H, T, J_s, J)$ ,  $A_{6,nkq}(H, T, J_s, J)$ ,  $A_{1,Lkq}(H, T, J_s, J)$ ,  $A_{2,Lkq}(H, T, J_s, J)$ ,  $A_{3,Lkq}(H, T, J_s, J)$  são descritos por meio de uma expansão binomial dependente de  $\alpha_{sx}$ ,  $\beta_{sx}$ ,  $\alpha_x$ ,  $\beta_x$ ,  $\alpha_{sy}$ ,  $\beta_{sy}$ ,  $\alpha_y$ ,  $\beta_y$ . Os coeficientes  $A_{i,jq}(H, T, J_s, J)$  foram gerados usando o software MAPLE e resultaram grandes e suficientes ao ponto de não serem expressos por inteiro em nosso trabalho, no entanto tal falta não causa prejuízos, uma vez que, sua ausência não afeta nossa análise dos resultados.

As Eqs. (3.10) – (3.12) são resolvidas numericamente para diferentes valores de anisotropia ( $n_x$  e  $n_y$ ) e do campo externo  $H$ , permitindo obter o valor da magnetização por camada, e a magnetização total do filme definida por

$$m = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L m_i.$$

A resposta do sistema a perturbação externa provocada por um campo magnético é dada pela susceptibilidade, que para a  $n$ -ésima camada do filme é definida por

$$\chi_n = \left( \frac{\partial m_n}{\partial H} \right)_{H=0}. \quad (3.13)$$

O valor da susceptibilidade do filme é calculada seguindo o formalismo desenvolvido por Wang e colaboradores [35], onde cada camada do filme é tratada analogamente a um sistema constituído de  $L$  capacitores associados em série. Desta forma, a susceptibilidade total será obtida por

$$(1 + \chi)^{-1} = \frac{1}{L} \sum_{n=1}^L (1 + \chi_n)^{-1}$$

onde  $L$  é o número total de camadas (tamanho do filme).

Usando a definição Eq.(3.13) nas Eqs.(3.10) – (3.12) encontramos as susceptibilidades do filme fino por camadas

$$\begin{aligned} \chi_1 = & G_1(T, J, J_s, m_1, m_2) \chi_1 + G_2(T, J, J_s, m_1, m_2) \chi_2 + \\ & G'_3(T, J, J_s, m_2, m_3) \end{aligned} \quad (3.14)$$

para  $n = 1$

$$\begin{aligned} \chi_n = & G_{n-1}(T, J, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) \chi_{n-1} + G_n(T, J, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) \chi_n \\ & + G_{n+1}(T, J, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) \chi_{n+1} + G'_n(T, J, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) \end{aligned} \quad (3.15)$$

$n$ -ésima camada (bulk)

$$\begin{aligned} \chi_l = & G_l(T, J, J_s, m_L, m_{L-1}) \chi_L + G_{L-1}(T, J, J_s, m_L, m_{L-1}) \chi_{L-1} + \\ & G_L(T, J, J_s, m_L, m_{L-1}) \end{aligned} \quad (3.16)$$

para a  $L$ -ésima camada ( $n = L$ ).

Apresentamos a seguir os resultados obtidos para magnetização e susceptibilidade do filme fino Heisenberg ferromagnético, após a solução numérica da Eqs.(3.10) – (3.12) para a magnetização e (3.14) – (3.16) para a susceptibilidade onde utilizamos o método de Newton-Raphson, para cálculos de raízes.

Inicialmente temos nas figuras (3.2) – (3.3) os gráficos da magnetização e susceptibilidade em função da temperatura para um filme fino com dez camadas ( $L = 10$ ) à diferentes valores de campo. Na figura (3.2) a magnetização tem um desordenamento dos spins nos sítios apenas na ausência de campo, à medida que aumentamos o valor do campo torna-se cada vez mais difícil o desordenamento do sistema (apenas para  $T \rightarrow \infty$ ).

Na figura (3.3) temos o comportamento da susceptibilidade em função da temperatura reduzida para diferentes valores de  $H$ , onde é observado uma divergência em  $T_C$  na ausência de campo, caracterizando uma transição de fase de segunda ordem. À medida que acrescentamos valores para o campo magnético esta divergência é destruída, indicando a presença de ordem induzida no sistema.

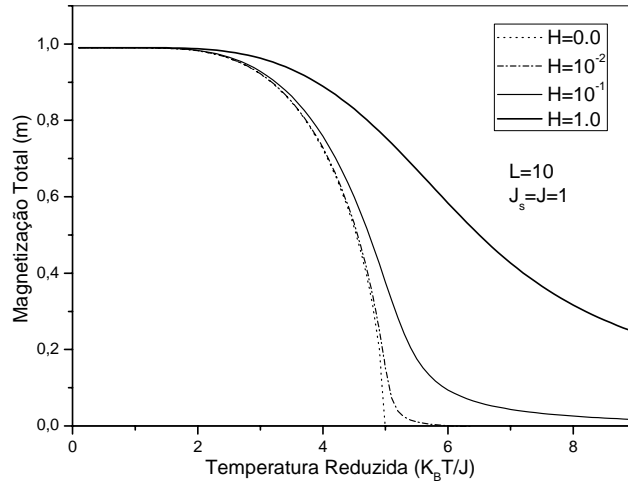


Figura 3.2: Magnetização do filme fino Heisenberg ferromagnético em função da temperatura reduzida para diferentes valores de campo externo  $H$  indicados na figura.

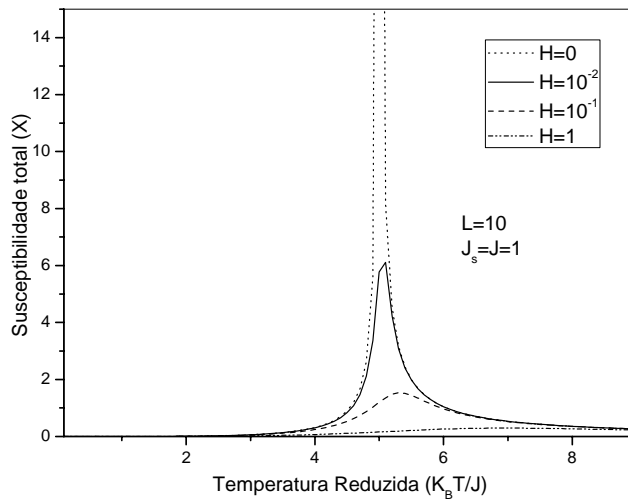


Figura 3.3: Suscetibilidade em função da temperatura reduzida para diferentes valores de campo externo  $H$  indicados na figura.

Nas figuras (3.4) – (3.6) podemos evidenciar claramente a influência da interação de troca na magnetização do filme fino por camada. Na figura (3.4) quando a interação de troca no *bulk* é igual a da superfície o desordenamento térmico se dá da superfície para o *bulk*. Caso a interação de troca na superfície se torne cada vez menor ( $\frac{J_s}{J} = 0.2$ ) esse desordenamento é dado de forma mais abrupta conforme ilustrado na figura (3.5). No entanto, podemos inverter a direção do desordenamento agora, no caso do *bulk* para a superfície fazendo  $J_s > J$  conforme mostra a figura (3.6).

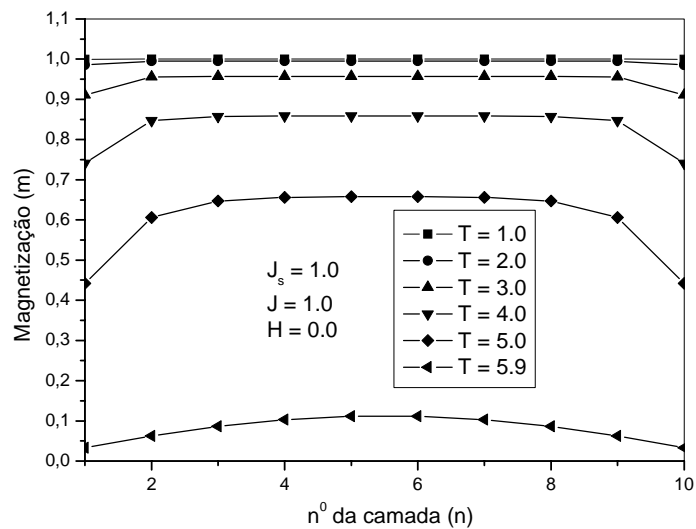


Figura 3.4: Magnetização  $m$  do filme fino Heisenberg ferromagnético em função da camada ocupada  $n$  para diferentes valores de temperatura reduzida indicados na figura.

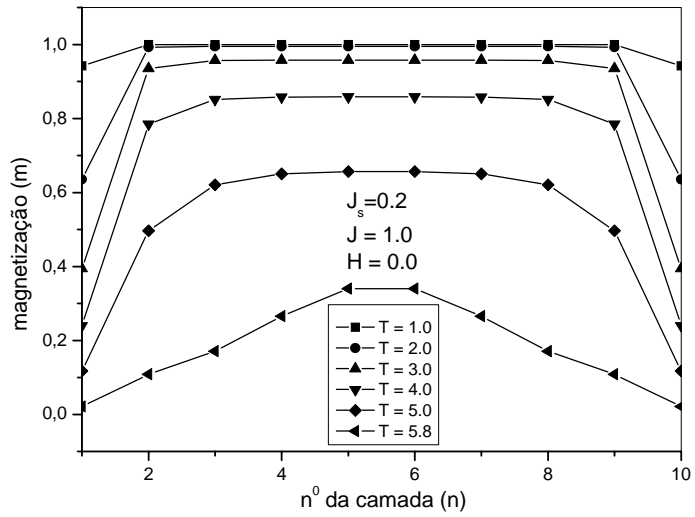


Figura 3.5: Magnetização  $m$  do filme fino Heisenberg ferromagnético em função da camada  $n$  para diferentes valores de temperatura reduzida indicado na figura com ( $J_s = 0.2$ ) e ( $J = 1.0$ ).

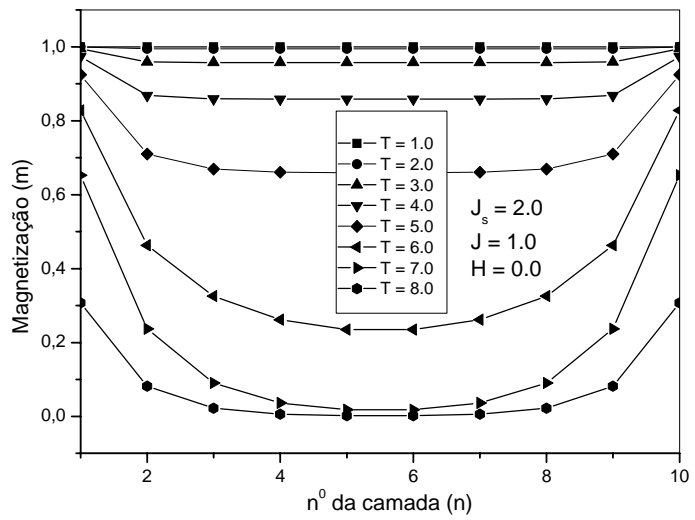


Figura 3.6: Magnetização  $m$  em função da camada  $n$  para diferentes valores de temperatura reduzida indicado na figura com ( $J_s = 2.0$ ) e ( $J = 1.0$ ).

Outro fato interessante, a simetria das magnetizações por camadas é independente dos valores adotados para  $J$  e  $J_s$ , visível nas figuras (3.7) – (3.8), resultado esse que deve ser estendido ao sistema AF, uma vez que, em ambos os casos o sistema é invariante por rotação.

Na ausência do campo, as magnetizações das camadas  $m_n(T)$  vai diminuindo gradualmente se anulando todas na mesma temperatura crítica  $T_C$ . Observamos que para ambas as figuras o efeito de superfície é evidenciado pela existência de maior ordem (valor de  $m_n$ ) das camadas externas. Por outro lado, quando  $J > J_s$  temos o efeito contrário, mas não expomos aqui por achar desnecessário.

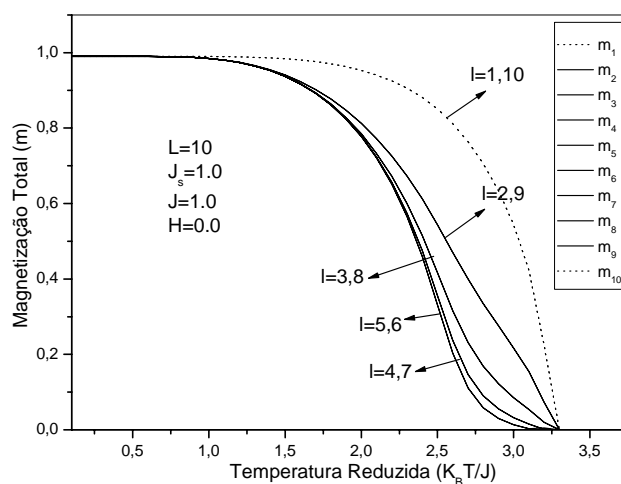


Figura 3.7: Magnetização por camada em função da temperatura reduzida com ( $J_s = J = 1$ ).



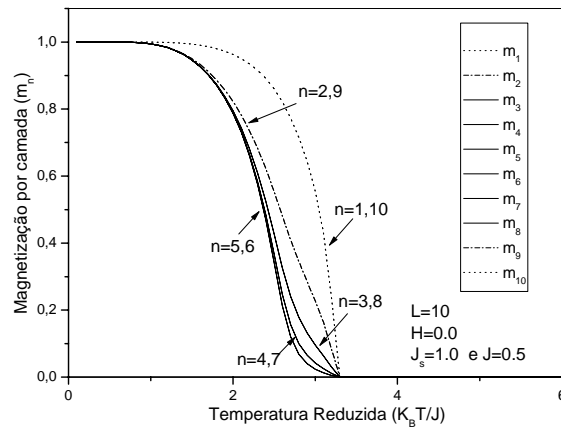


Figura 3.8: Magnetização por camada em função da temperatura reduzida com ( $J_s = 1.0$ ) e ( $J = 0.5$ ).

### 3.3.2 b) Caso antiferromagnético

Tomando novamente as Eqs (3.7),(3.8) e (3.9), com condições de contorno para o caso antiferromagnético  $m_A \neq m_B$ , temos as expressões para as magnetizações na forma expandida.

$$m_{1,(A,B)} = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 [A_{1,1kq}^{AF}(H, T, J_s, J) + A_{2,1kq}^{AF}(H, T, J_s, J) m_{2,(A,B)} + A_{3,1kq}^{AF}(H, T, J_s, J) m_{2,(A,B)}^2] m_{1,(A,B)}^{k+q} \quad (3.17)$$

$$m_{n,(A,B)} = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 [A_{1,nkq}^{AF}(H, T, J_s, J) + A_{2,nkq}^{AF}(H, T, J_s, J) (m_{n-1,(A,B)} + m_{n+1,(A,B)}) + A_{3,nkq}^{AF}(H, T, J_s, J) m_{n-1,(A,B)} m_{n+1,(A,B)} + A_{4,nkq}^{AF}(H, T, J_s, J) (m_{n-1,(A,B)} + m_{n+1,(A,B)})^2 + A_{5,nkq}^{AF}(H, T, J_s, J) m_{n-1,(A,B)}^2 m_{n+1,(A,B)}^2 + A_{6,nkq}^{AF}(H, T, J_s, J) (m_{n-1,(A,B)}^2 m_{n+1,(A,B)} + m_{n-1,(A,B)} m_{n+1,(A,B)}^2)] m_{n,(A,B)}^{k+q} \quad (3.18)$$

$$m_{L,(A,B)} = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 [A_{1,Lkq}^{AF}(H, T, J_s, J) + A_{2,Lkq}^{AF}(H, T, J_s, J) m_{L-1,(A,B)} + A_{3,Lkq}^{AF}(H, T, J_s, J) m_{L-1,(A,B)}^2] m_{L,(A,B)}^{k+q} \quad (3.19)$$

onde os coeficientes  $A_{1,1kq}^{AF}(H, T, J_s, J)$ ,  $A_{2,1kq}^{AF}(H, T, J_s, J)$ ,  $A_{3,1kq}^{AF}(H, T, J_s, J)$ ,  $A_{1,nkq}^{AF}(H, T, J_s, J)$ ,  $A_{2,nkq}^{AF}(H, T, J_s, J)$ ,  $A_{3,nkq}^{AF}(H, T, J_s, J)$ ,  $A_{4,nkq}^{AF}(H, T, J_s, J)$ ,  $A_{5,nkq}^{AF}(H, T, J_s, J)$ ,  $A_{6,nkq}^{AF}(H, T, J_s, J)$ ,  $A_{1,Lkq}^{AF}(H, T, J_s, J)$ ,  $A_{2,Lkq}^{AF}(H, T, J_s, J)$  e  $A_{3,Lkq}^{AF}(H, T, J_s, J)$  são descritos por meio de uma expansão binomial dependente de  $\alpha_{sx}$ ,  $\beta_{sx}$ ,  $\alpha_x$ ,  $\beta_x$ ,  $\alpha_{sy}$ ,  $\beta_{sy}$ ,  $\alpha_y$ ,  $\beta_y$ .

Para resolvermos as Eqs. (3.17) – (3.19), procedemos de forma semelhante ao caso ferromagnético utilizando o método numérico de Newton-Raphson. Determinando os valores das magnetizações  $m_A$  e  $m_B$ . No entanto, para o estudo comportamental do sistema, adotamos as seguintes variáveis:

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

magnetização total,

$$m_s = \frac{1}{2} (m_A - m_B),$$

a magnetização *staggered* usada no estudo da criticalidade.

Para o cálculo da susceptibilidade tomamos a definição

$$\chi_{nt} = \left( \frac{\partial m_n}{\partial H} \right)_{H=0} \quad (3.20)$$

para a susceptibilidade da n-ésima camada, e

$$\chi_{n,s} = \left( \frac{\partial m_n}{\partial H_s} \right)_{H_s=0} \quad (3.21)$$

para a susceptibilidade *staggered* da n-ésima camada, onde  $H_s$  é o campo *staggered*<sup>1</sup>. Assim sendo, ficaremos

$$\begin{aligned} \chi_{1,\mu} &= G_1^{AF}(T, J_s, J, m_1, m_2) \chi_{1,\nu} + G_2^{AF}(T, J_s, J, m_1, m_2) \chi_{2\nu} \\ &\quad + G_3^{AF}(T, J_s, J, m_1, m_2) \end{aligned} \quad (3.22)$$

$$\begin{aligned} \chi_{n,\mu} &= G_{n-1}^{AF}(T, J_s, J, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) \chi_{n-1,\nu} + G_{n-1}^{AF}(T, J_s, J, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) \chi_{n,\nu} \\ &\quad + G_{n+1}^{AF}(T, J_s, J, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) \chi_{n+1,\nu} + G_{n-1}^{AF}(T, J_s, J, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) \end{aligned} \quad (3.23)$$

$$\begin{aligned} \chi_{L,\mu} &= G_L^{AF}(T, J_s, J, m_{L-1}, m_L) \chi_{L,\nu} + G_{L-1}^{AF}(T, J_s, J, m_{L-1}, m_L) \chi_{L-1,\nu} \\ &\quad + G_L^{AF}(T, J_s, J, m_{L-1}, m_L) \end{aligned} \quad (3.24)$$

onde  $\mu = s, t$ .

Resolvendo as Eqs. (3.22) – (3.24) numericamente encontramos as dependências de  $\chi_t$  e  $\chi_s$  com a temperatura.

Apresentamos a seguir o comportamento das grandezas relativas as propriedades magnéticas do filme fino Heisenberg antiferromagnético tratado na seção anterior: magnetização e susceptibilidade.

Estes foram obtidos numericamente utilizando o método de Newton-Raphson para solução de sistemas de equações não lineares (3.17) – (3.19) referentes as magnetizações por camadas e

---

<sup>1</sup>O campo *staggered*  $H_s$  corresponde o parâmetro conjugado ao parâmetro de ordem  $m_s$ , que tecnicamente é introduzido no Hamiltoniano o termo adicional  $\Delta H = -H_s \left( \sum_{i \in A} \sigma_i - \sum_{i \in B} \sigma_i \right)$

das Eqs.(3.22) – (3.24) relativas as susceptibilidades.

Nas figuras (3.9) – (3.10) temos a dependência da magnetização *staggered* e magnetização total em função da temperatura, em ambos os casos ocorrem transição de fase de 2<sup>a</sup> ordem onde a magnetização *staggered*, nosso parâmetro de ordem no sistema AF, vai a zero na temperatura crítica.

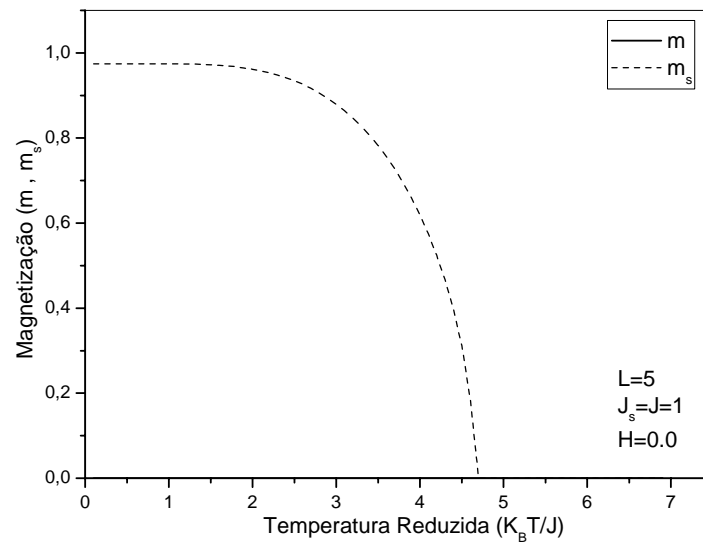


Figura 3.9: Magnetizações total e staggered na ausência de campo externo.

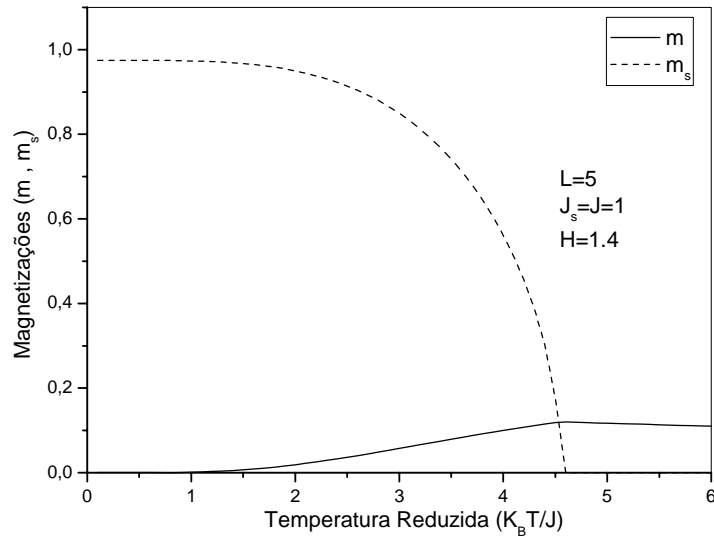


Figura 3.10: Magnetizações total e *staggered* para um dado valor de campo externo  $H$ .

Observamos na figura (3.11) que na ausência de campo externo ( $H = 0$ ) a magnetização total é nula, isto porque as magnetizações das subredes apresentam valores opostos ( $m_A = -m_B$ ) para qualquer temperatura. Por outro lado, a presença do campo externo ( $H > 0$ ) faz com que  $|m_A| > |m_B|$ . A influência do campo externo  $H$  pode ser vista na figura (3.11) que apresenta a magnetizações de cada uma das subredes A e B na presença e ausência de campo.

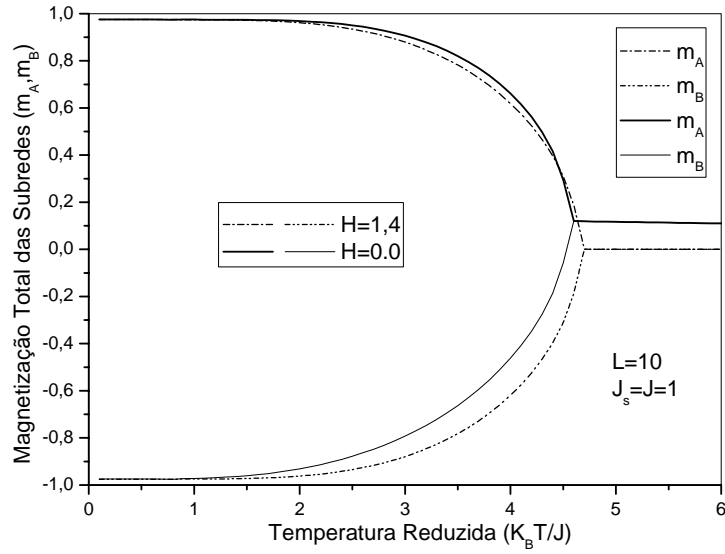


Figura 3.11: Influência do campo externo  $H$  nas magnetizações das subredes A e B .

A influência do campo magnético externo  $H$  na magnetização *staggered* e total podem ser evidenciadas nas figuras (3.12) – (3.13). Na temperatura crítica  $T_N(H)$ , a magnetização  $m_s$  vai a zero, à medida que o campo cresce  $T_N(H)$  decresce.

O aumento no valor de  $H$  faz crescer a magnetização total  $m$  do filme, enquanto a magnetização  $m_s$  diminui. A influência do campo se traduz no ordenamento dos spins: quando  $H$  aumenta mais spins são flipados na sua direção e a magnetização total aumenta.

Em  $T = T_N(H)$  temos que  $m_A = m_B \neq 0$  para  $H \neq 0$ , o que garante a validade do parâmetro de ordem  $m_s$ , conforme está mostrado na figura (3.12). A magnetização total  $m$ , figura (3.13), apresenta um ponto de máximo em  $T = T_N(H)$ .

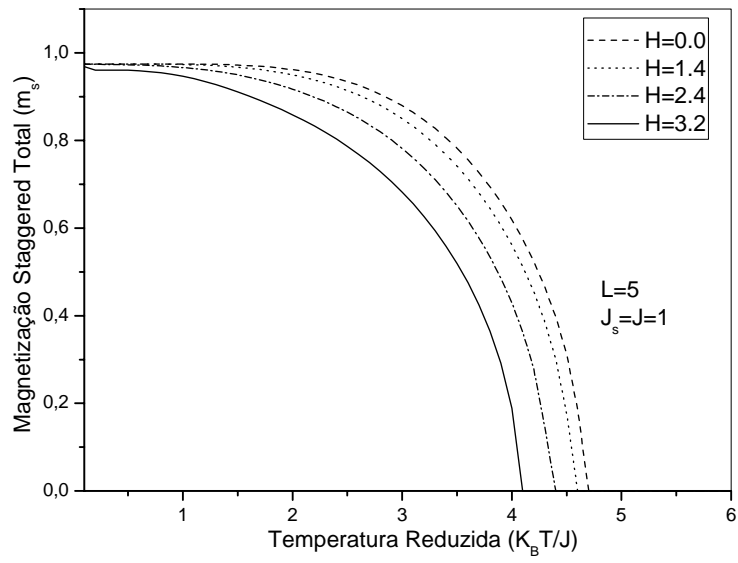


Figura 3.12: Influência do campo externo  $H$  na magnetização *staggered*  $m_s$ .

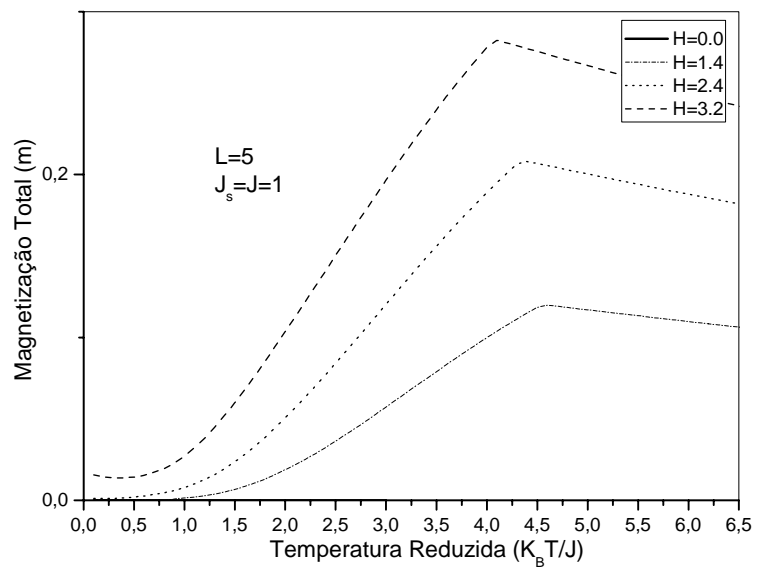


Figura 3.13: Influência do campo externo  $H$  na magnetização total  $m$ .

Nas figuras (3.14) – (3.15) temos as magnetizações em função da temperatura reduzida para diferentes número de camadas. Na figura (3.14) a influência do número de camadas mostra a necessidade de uma temperatura maior para que haja desordenamento à medida que cresce o filme, ou seja, à medida que  $L$  cresce teremos maior valor da temperatura de transição  $T_N$ . No caso da magnetização total, figura (3.15), observamos um ponto de máximo em  $T = T_N$  se deslocando para direita à medida que cresce o tamanho do filme  $L$ .

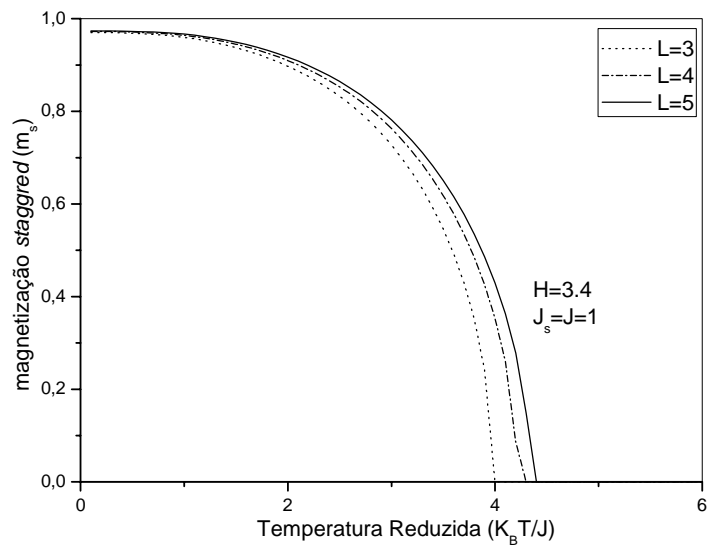


Figura 3.14: Magnetização *staggered* total para diferentes número de camadas.



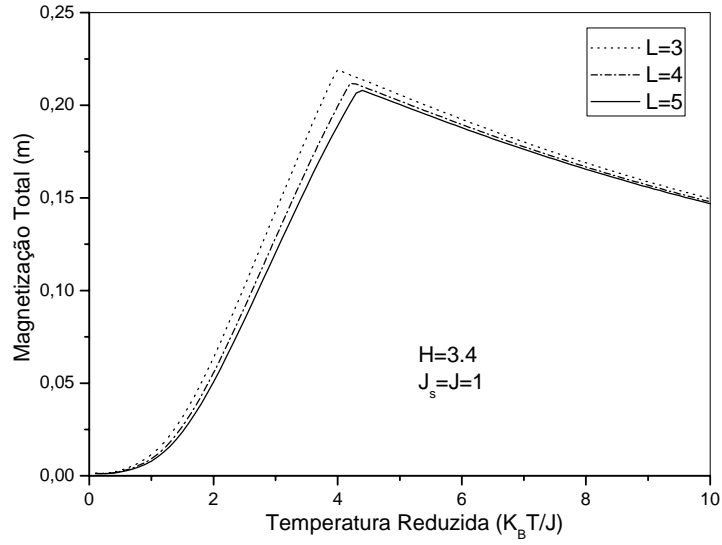


Figura 3.15: Magnetização total  $m$  para diferentes número de camadas.

Nas figuras (3.16) – (3.18) temos a magnetização *staggered* por camada para um filme fino constituído por cinco planos ( $L = 5$ ). Observa-se uma simetrização da função magnetização relativa à posição da camada ( $n$ ), ou seja,  $m_{s1} = m_{s5}$ ,  $m_{s2} = m_{s4}$ . O ordenamento dos spins por camadas é diretamente afetado pela interação de troca. Na figura (3.17) podemos notar a superfície fortalecida pelo valor  $J_s = 3.0$ , diferente do *bulk*, que rapidamente é desordenada pela temperatura, de forma contrária temos a figura (3.18) cuja a superfície desordena rapidamente devido a um  $J_s$  pequeno ( $J_s = 0.6$ ).

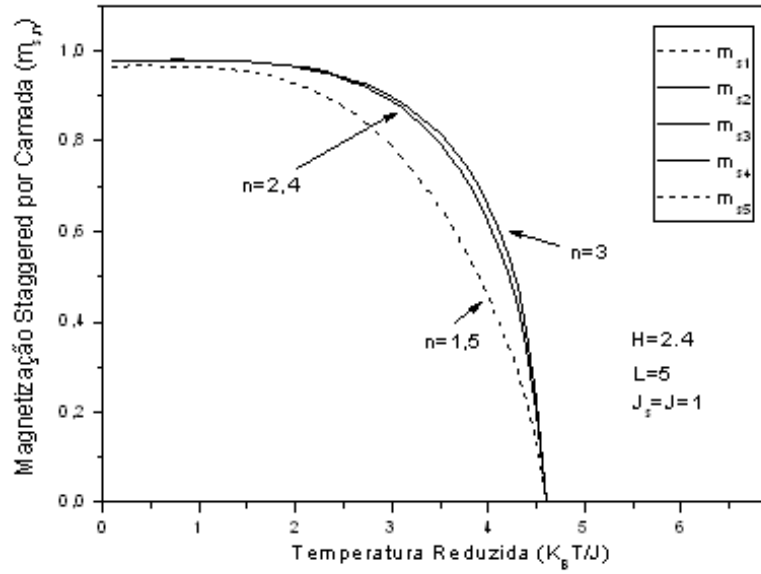


Figura 3.16: Magnetização *staggered* por camada para um dado valor de campo externo  $H = 2.4$ .

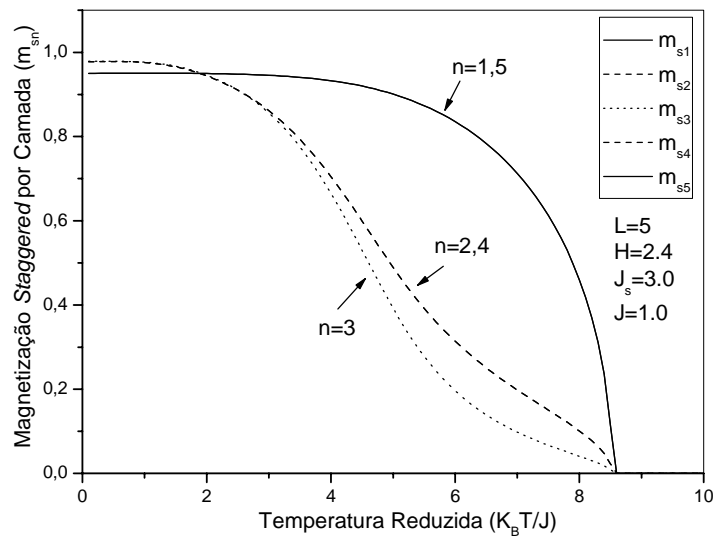


Figura 3.17: Magnetização *staggered* por camada com interação de superfície maior que a interação de bulk ( $J_s > J$ ).

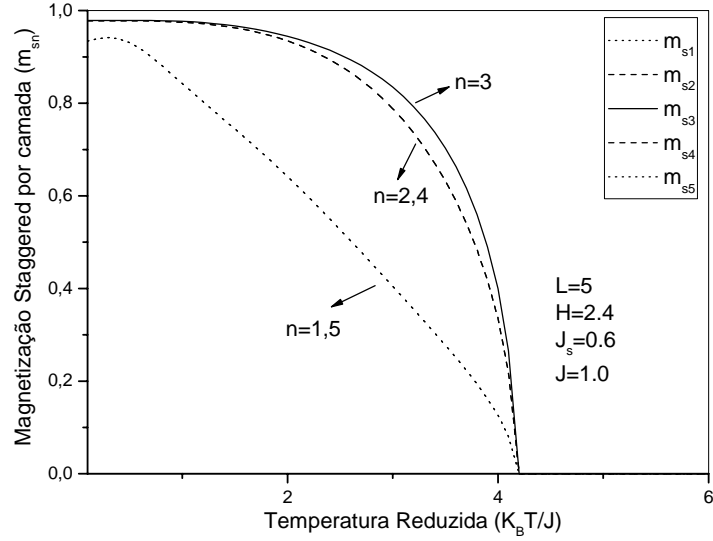


Figura 3.18: Magnetização staggered por camada com interação de superfície menor que a interação de bulk ( $J_s < J$ ).

Nas figuras (3.19)–(3.21) temos a magnetização total por camada em função da temperatura reduzida para diferentes valores de  $\frac{J_s}{J}$  fixando o tamanho do filme com  $L = 5$  e campo magnético  $H = 2.4$  (unidade de  $J$ ). para  $(\frac{J_s}{J}) > (\frac{J_s}{J})_C(H)$  (figuras 3.19 e 3.21) a superfície fica mais ordenada de modo que  $m_{1,5} > m_3 > m_{2,4}$ , resultado oposto ao comportamento do parâmetro de ordem (figura 3.16). No caso em que a energia de superfície predomina (i.e.,  $J_s > (J_s)_C(H)$ ) observamos  $m_{1,5} < m_3 < m_{2,4}$ , que também é o oposto na figura (3.17) para o caso de  $m_s$ .

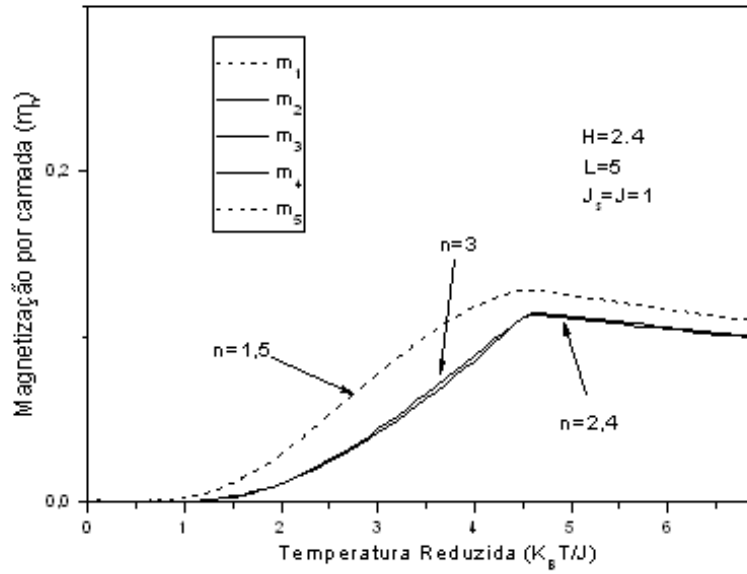


Figura 3.19: Magnetização total por camada para um dado valor de campo externo  $H$ .

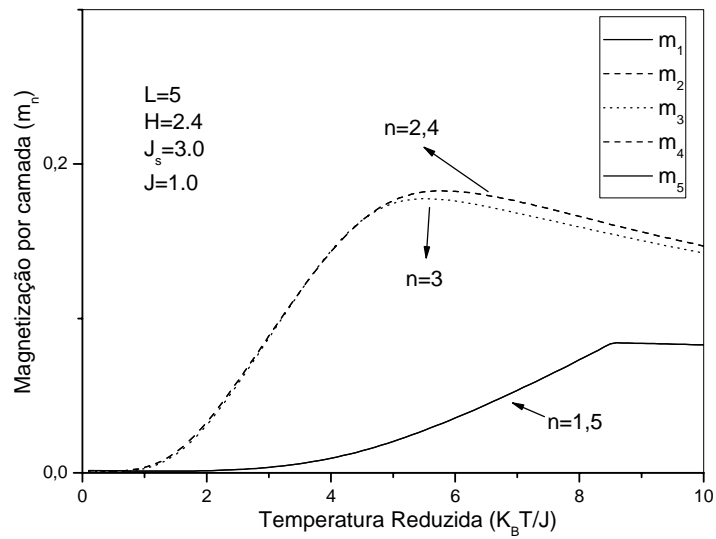


Figura 3.20: Magnétização total por camada com interação de superfície maior que a interação do bulk ( $J_s > J$ ).

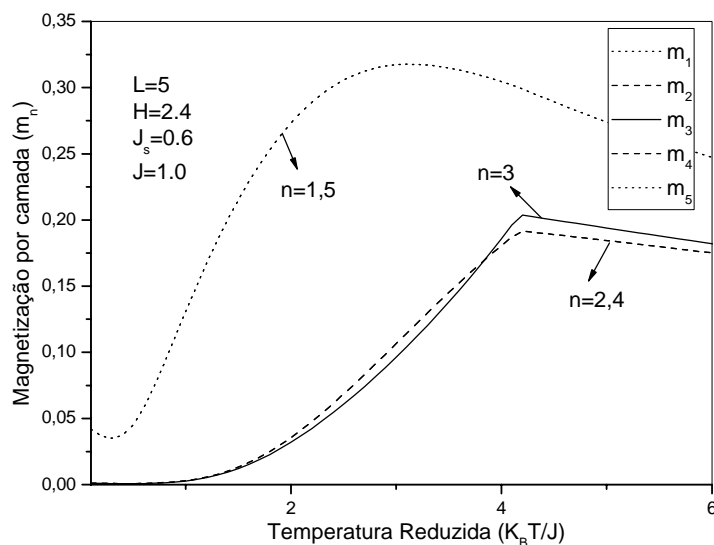


Figura 3.21: Magnetização total por camada com interação de superfície menor que a interação de bulk ( $J_s < J$ ).

Ao reduzirmos ainda mais o valor da interação de troca  $J_s$ , temos um estado inicial desordenado para a superfície, visível através da magnetização *staggered* (ver figura (3.22)), causando um ordenamento na magnetização total da superfície em baixas temperaturas de acordo com a figura (3.23). Ao reduzir o valor da interação de troca  $J$ , o equivalente ao tornar o sistema quase bidimensional, temos um efeito semelhante ao obtido anteriormente, agora fazendo  $J = 0.2$  nas figuras (3.24) – (3.25).

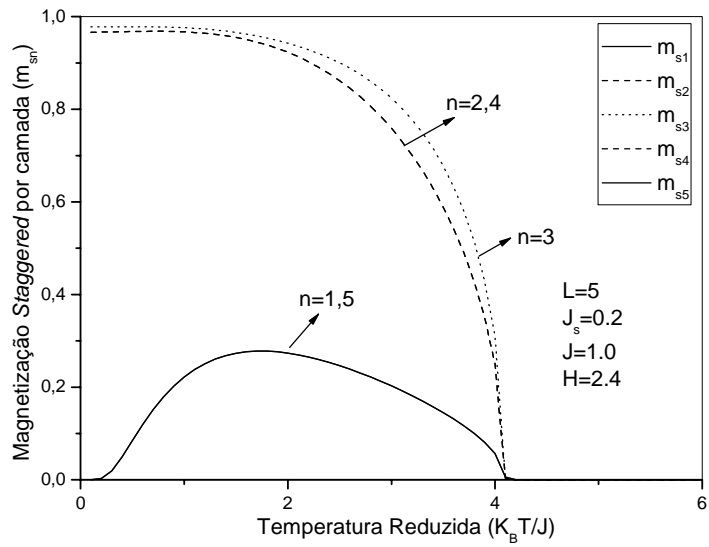


Figura 3.22: Desordenamento dos spins na superfície em baixas temperaturas para ( $J_s = 0.2$ ).

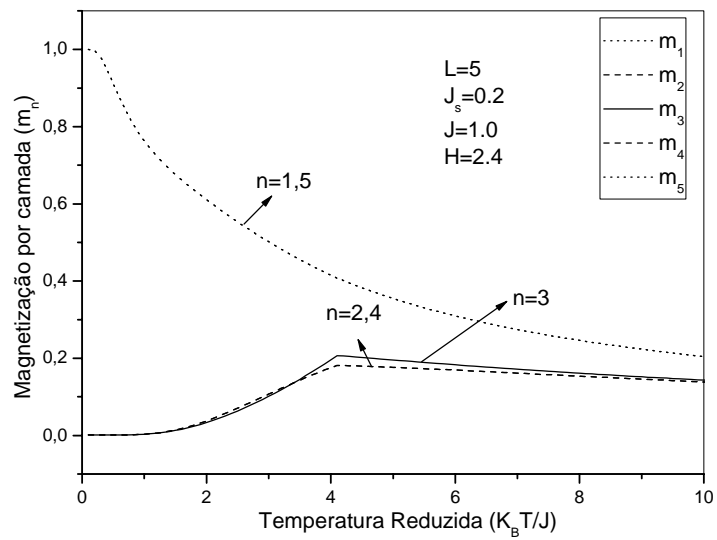


Figura 3.23: Pico na magnetização total da superfície em baixas temperaturas para ( $J_s = 0.2$ ).

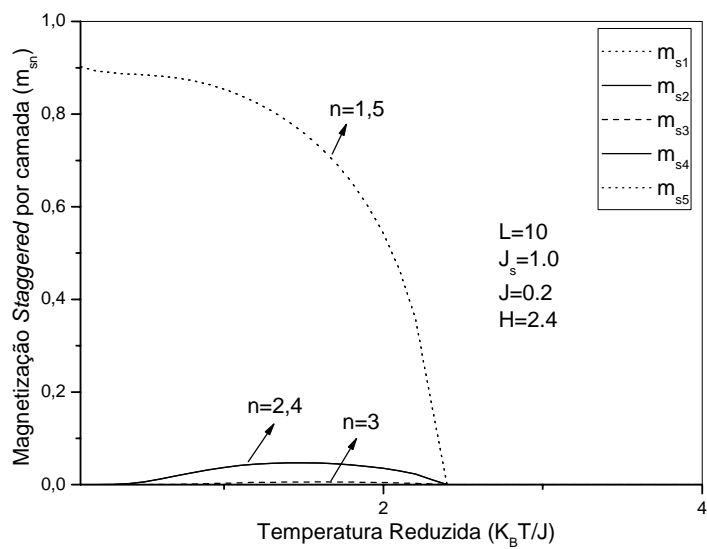


Figura 3.24: Desordenamento dos spins no bulk do material em baixas temperaturas para ( $J = 0.2$ ).

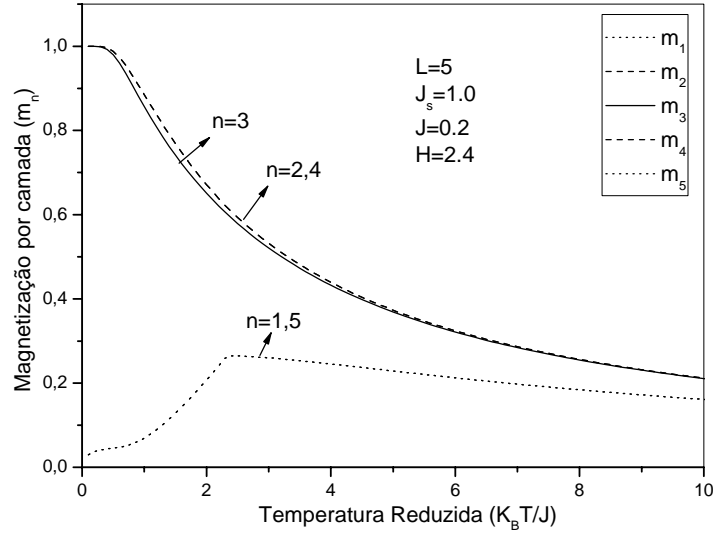


Figura 3.25: Pico na magnetização total do bulk do material em baixas temperaturas para ( $J = 0.2$ ).

O estado desordenado da magnetização *staggered* para baixas temperaturas sugere uma transição de fase quântica, cujo parâmetro de ordem no caso é a interação de troca  $J$  ou  $J_s$ . Na figura (3.26) temos a magnetização *staggered* para o *bulk*, em função da interação de troca  $J$ , para diferentes valores de campo magnético externo  $H$  em  $t = 0.1$ , correspondente a baixa temperatura. Na ausência de campo ( $H = 0$ ) mesmo para  $J = 0.2$  temos um sistema ordenado, assim como para  $H = 0.5$  também há ordem sugerindo um  $H$  crítico para tal transição.

Devido a problemas computacionais de divergência em  $t = 0$ , associamos o valor escolhido  $t = 0.1$  como o estado fundamental. Assim sendo, temos uma transição de fase quântica ( $T = 0$ ) ocasionada pela variação da interação e do campo magnético  $H$ . Para  $H \leq 1$  o sistema sempre é ordenado qualquer que seja o valor de  $J$ .

Quando  $H > 1$  observamos ordenamento magnético para  $J < J_C(H)$ , onde  $J_C(H)$  cresce com o aumento do valor do campo  $H$ , que fisicamente é o resultado esperado haja visto que, maior a intensidade do campo induzido mais desordem e para ativar a ordem AF devemos ter mais intensidade da interação, numa linguagem técnica, dizemos que  $J_C(H)$  corresponde a um ponto crítico quântico. No limite de  $J$  grande a magnetização  $m_s$  tende ao valor de *bulk*  $m_s(0)$ ,



que devido a flutuação quânticas temos um valor menor do que um.

A figura (3.27) mostra a magnetização *staggered* para o *bulk*, em função da interação de troca  $J$  para o filme com diferentes número de camadas  $L$ , o ordenamento dos spins ocorre no mesmo valor de  $J \simeq 0.48$ , sugerindo assim um filme cuja magnetização interna (*bulk*) pode ser controlada a partir da interação de troca  $J$ , e do campo externo aplicado  $H$  independente da espessura do filme.

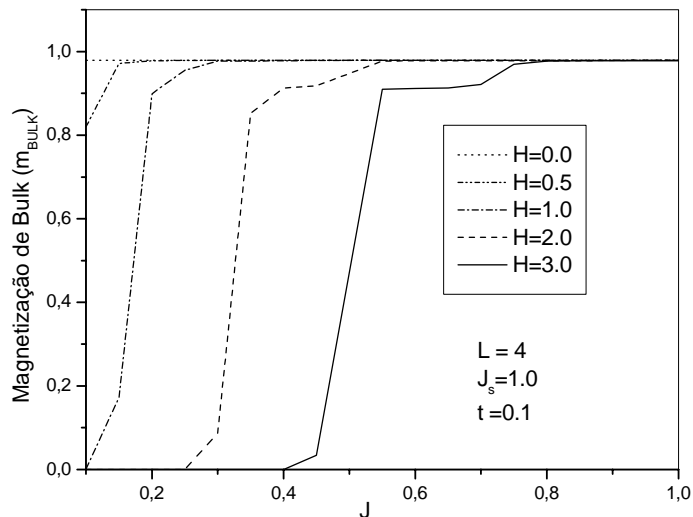


Figura 3.26: Magnetização *staggered* no bulk em função da interação de troca  $J$  para diferentes valores de  $H$ .

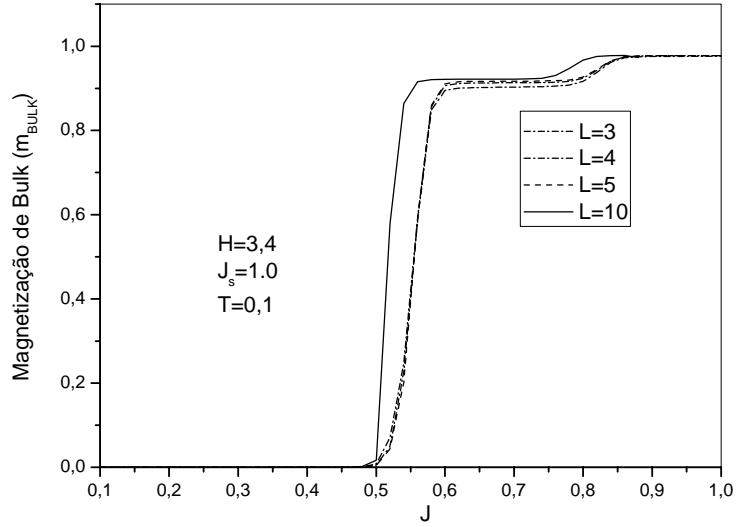


Figura 3.27: Magnetização *staggered* no bulk em função da interação de troca  $J$  para o filme com diferentes número de camadas  $L$ .

Nas figuras (3.28) – (3.29) temos os gráficos da susceptibilidade *staggered*  $\chi_s$  e total  $\chi$  em função da temperatura para diferentes valores de campo magnético  $H$ . A susceptibilidade *staggered*  $\chi_s$  ilustrada na figura (3.28) está relacionada com a flutuação do parâmetro de ordem  $m_s$ , apresentando uma divergência na temperatura crítica  $T = T_N(H)$ . Observamos que a divergência desloca-se para a esquerda à medida que o campo aumenta. A dependência da susceptibilidade total é apresentada na figura (3.29) para vários valores de campo externo, onde a susceptibilidade parte de zero, indicando um ordenamento para uma das subredes servindo de partida para a investigação da anomalia proposta por Collin[7]. Na temperatura crítica temos um valor máximo (descontinuidade) na susceptibilidade, indicando uma transição de fase, separando a fase ordenada (**AF**) para  $T < T_N$  da fase desordenada paramagnética (**P**) quando  $T > T_N$ .

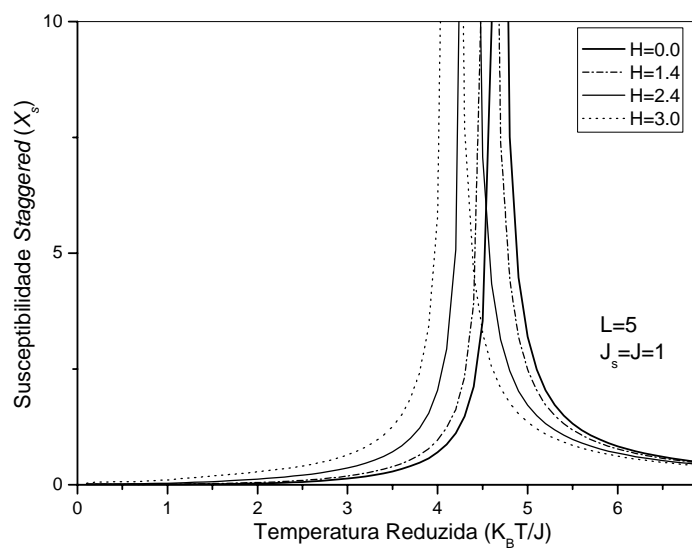


Figura 3.28: Susceptibilidade Staggered para diferentes valores de campo externo  $H$ .

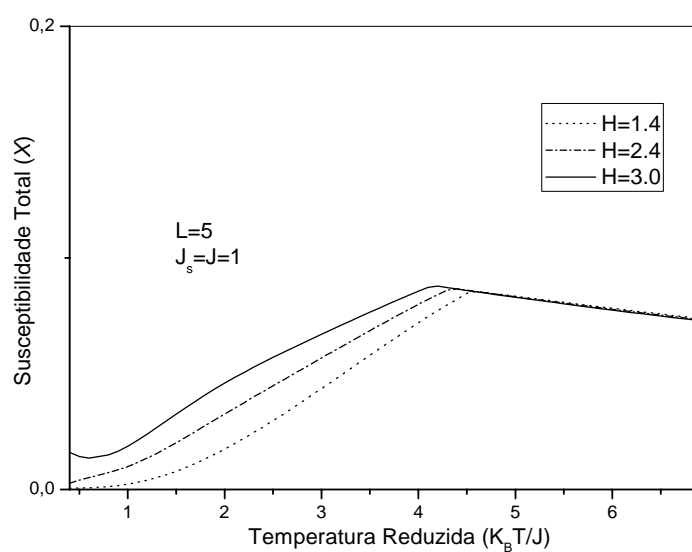


Figura 3.29: Influência do campo externo  $H$  na suscetibilidade total  $\chi$ .

Neto [13] explicou qualitativamente o comportamento anômalo da susceptibilidade do composto  $La_2CuO_4$  usando o modelo de Heisenberg AF com pequena interação entre planos. Nas figuras (3.30 e 3.31) este será investigado através de pequeno valor de  $L$  (escolhemos  $L = 3$ ) e alta intensidade do  $H$  (escolhendo  $H = 3$ ). Observamos que quando  $J_s \simeq J$  temos pouca influência da superfície, e o sistema comporta-se de forma tridimensional. Para pequena interação de *bulk* o caráter quase-2d é manifestado induzindo assim o comportamento anômalo.

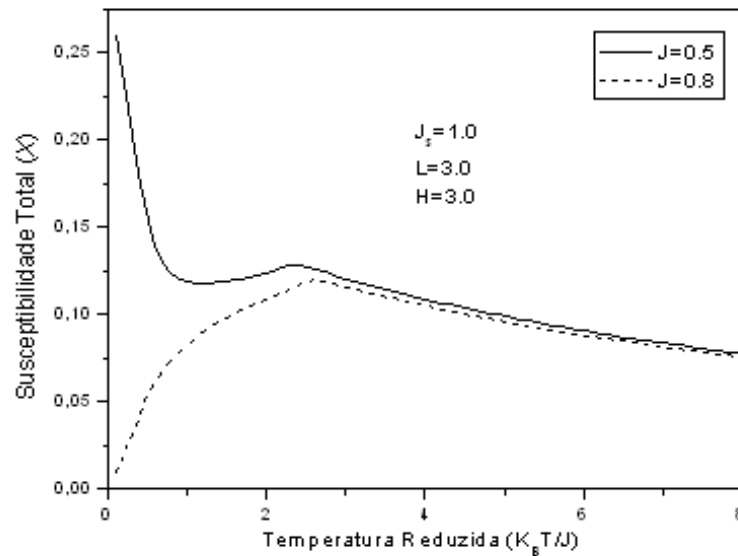


Figura 3.30: Suscetibilidade total em função da temperatura reduzida para diferentes interações de troca no *bulk*.

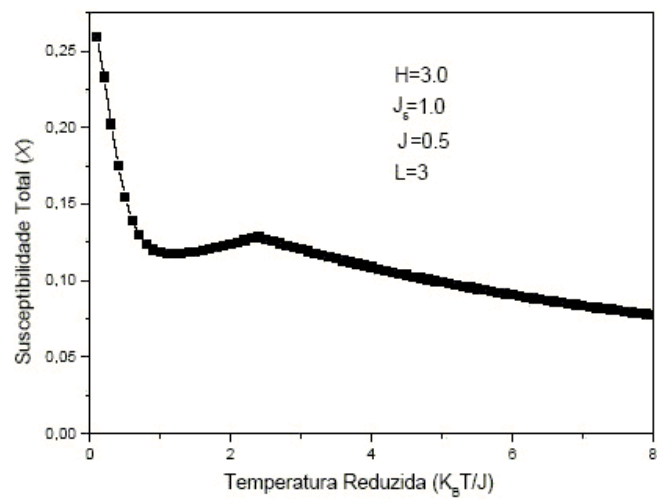


Figura 3.2: Figura 3.31: Comportamento anômalo para susceptibilidade total em um filme fino antiferromagnético no modelo de Heisenberg.

## Capítulo 4

# Conclusão

Neste trabalho estudamos o modelo de Heisenberg aplicado a filmes finos numa rede cúbica simples utilizando a técnica do operador diferencial aliada a teoria de campo efetivo. Após desenvolvimento das expressões de analíticas e utilizando o software MAPLE 9, recorremos ao método numérico de Newton Raphson para resolver os sistemas de equações para a magnetização e suscetibilidade para filmes em materiais ferro (F) e antiferromagnéticos (AF).

No capítulo 2 desenvolvemos a técnica do operador diferencial aplicando ao modelo de Ising-1/2 e mostramos a potencialidade do método indicando algumas propostas de desacoplamento das funções de correlações.

Apresentamos uma análise preliminar de *finite-size scaling* onde, aglomerado com dois spins foi utilizado mostrando a sua superioridade, qualitativamente e quantitativamente, em relação ao caso de aglomerado com um spin. Discutimos a extensão do método para diversos modelos (clássicos e quânticos).

No capítulo 3, a técnica do operador diferencial foi aplicada ao modelo de Heisenberg quântico de spin 1/2 numa estrutura de filme fino. Usando aproximação axial para diagonalizar o Hamiltoniano com aglomerado com dois spins de forma exata, expressões analíticas para magnetizações por camada em cada sub-rede A e B foram obtidas. Deduzimos também, expressões para as susceptibilidades por camadas. Para o caso ferromagnético ( $m_A = m_B = m$ ) o campo magnético destrói a transição de fase. Na ausência de campo ( $H = 0$ ), uma transição de fase, de segunda ordem ocorre em  $T = T_C$ , onde  $T_C$  é uma função de  $L$  (tamanho do filme) e razão  $\frac{J_s}{J}$ . Em  $T = T_C$ , a magnetização se anula continuamente. Por outro lado, no caso antiferro-

magnético temos transição de fase induzida pelo campo externo. Para altos campos e pequeno valor da interação de *bulk*  $J$  simulamos o sistema quase  $2d$  para  $L = 3$ , encontrando assim o comportamento anômalo na susceptibilidade observada experimental no composto isolante  $La_2CuO_4$ .

# REFERÊNCIAS

- [1] WEISS, P. E. *J. Phys* **6**, 661 (1907)
- [2] HEISENBERG, W.K. *Z. Phys.* **49**, 619 (1928)
- [3] MATSUBARA, T., MATSUDA, H., *Progr. Theor. Phys.* **16**, 416 (1956)
- [4] DE JONGH, L. J., MIEDEMA, A. R., *Adv. Phys.* **23**, 1 (1974)
- [5] BERKER, A. N., NELSON, D. R., *Phys. Rev. B.* **19**, 2488 (1979)
- [6] CBPF, *Revista de Divulgação Científica do CBPF.* **78**,1(2006)
- [7] COLLINS,R. T., SCHLESINGER, Z., SHAFER, M. W., McGUIRE, T. T., *Phys. Rev. B* **35**, 5817(1988).
- [8] SHIRANE, G., ENDOH, Y., BIRCENEAU, R. J., KASTNER, M.A.. HIDAKAN ODA. , M., SUZUKI, M., MURAKAMI, T., *Phys. Rev. Lett.* **59**, 1613 (1987)
- [9] LYONS, K. B., FLEURY, P. A., REMURA, J.P., NEGRAN, T. J., *Phys. Rev. B* **37**, 2353 (1988).
- [10] VAKNIN, D., et. al., *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2802(1987); YAMAGUCHI, Y., et. al., *Jpn. J. Appl. Phys.* **26**, L447 (1987)
- [11] MITSUDA, S., et. al., *Phys. Rev. B.* **36**, 822 (1987); FRELTOFT, T., et. al., *Ibid.* **36**, 826 (1987).
- [12] HONMURA, R, e KANEYOSHI, *Statistical Mechanics*, ed. Jonh Wiley & Sons, New Yourk, (1963).



- [13] CABRAL NETO, J. *Estudo Sistemático das Propriedades Termodinâmicas e Criticalidade de Filmes Finos e Super-Redes Magnéticas*, Tese de Doutorado, UFSCar (2004).
- [14] SÁ BARRETO, F. C. FITTIPALDI, I.P. *Physica. A.* **129**, 360 (1985).
- [15] CALLEN. H.B, *Phys. Lett.* **4**, 161 (1963).
- [16] SUZUKI, N., *Phys. Lett.* **19**,267 (1965).
- [17] Antônio Fernandes Siqueira, *Transições de fase e propriedades termodinâmicas de sistema de Ising anisotrópico exibindo interações de alta ordem*, Tese de doutorado,UFPE (1986).
- [18] T. Kaneyoshi, I. P. Fittipaldi, R. Honmura e T. Manabe, *Phys. Rev. B* **24**, 481 (1981).
- [19] G. P. Taggart e I. P. Fittipaldi, *Phys. Rev. B* **25**, 7026 (1982).
- [20] G. B. Taggart, *Physica A* **113**, 535 (1982).
- [21] T. Kaneyhoshi e I. Tamura, *Phys. Rev. B* **25**, 4679 (1982); M. A. Neto, R. A. dos Anjos e J. Ricardo de Sousa, *Phys. Rev. B* **73**, 214439 (2006).
- [22] J. R. L. de Almeida, I. P. Fittipaldi e F. C. Sá Barreto, *J. Phys. C* **14**, 103 (1981).to e C. Tsallis, *Phys. Rev. B* **27**, 5784 (1983).
- [23] I. Tamura, E. F. Sarmiento, I. P. Fittipaldi e T. Kaneyoshi, *Phys. St. Sol. B* **118**, 409 (1983).
- [24] T. Kaneyoshi e I. P. Fittipaldi, *Phys. St. Sol. B* **105**, 629 (1981).
- [25] R. Honmura, E. F. Sarmiento, C. Tsallis e I. P. Fittipaldi, *Phys. Rev. B* **29**, 2761 (1984).
- [26] A. F. Siqueira e I. P. Fittipaldi, *Phys. St. Sol. B* **119**, K31 (1983).
- [27] A. F. Siqueira e I. P. Fittipaldi, *Phys. Rev. B* **31**, 6092 (1985).
- [28] E. F. Sarmiento e C. Tsallis, *Phys. Rev. B* **27**, 5784 (1983).
- [29] A. Bobak e M. Jascur, *Phys.Stat. Sol. Sol. B* **135**, K9 (1986).
- [30] T. Idogaki e N. Uryû, *Physica A* **181**, 173 (1992).

- [31] J. Ricardo de Sousa, I. G. Araújo e J. Cabral Neto, *Physica A* **260**, 150 (1998).
- [32] J. Cabral Neto e J. Ricardo de Sousa, *Phys. St. Sol. B* **212**, 343 (1999); J. Cabral Neto, J. Ricardo de Sousa e J. A. Plaskcak. *Phys. Rev. B* **66**, 11330 (220).
- [33] J. Ricardo de Sousa, F. Lacerda e I. P. Fittipaldi, *J. Mag. Mag. Mater* **140-142**, 1501 (1995).
- [34] J. Roberto Viana e J. Ricardo de Sousa, *Phys. Rev. B* **17**, 052403 (2007).
- [35] WANG, C. L., SMITH, S. R. P., TILLEY, D. R., *J. Phys. Condens. Matter* **6**, 9633 (1994)