

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

Modelo de Heisenberg Diluído: Nova Teoria de Campo Efetivo

José Carlos Nascimento Carvalho

Orientador: Dr. José Ricardo de Sousa

Dissertação apresentada ao Departamento de Física da Universidade Federal do Amazonas, como parte dos requisitos básicos para obtenção do grau de Mestre em Física

Manaus - 2010

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Breve histórico do magnetismo	1
1.2	Origem do Magnetismo	5
1.3	Hamiltoniano de Interação entre Spins	10
1.3.1	Modelo de Ising	15
1.3.2	Modelo XY	17
1.3.3	Modelo de Heisenberg	17
1.4	Transição de Fase e Fenômenos Críticos	19
1.4.1	Expoentes Críticos	20
1.5	Organização da dissertação	24
	Referências Bibliográficas	25
2	Métodos aproximativos em aglomerados finitos	29
2.1	Introdução	29
2.2	Considerações iniciais	31
2.3	Teoria de Campo Efetivo	33
2.3.1	Teorias de campo efetivo no modelo de Ising	34
2.3.2	Teoria de campo efetivo no modelo de Heisenberg	42
	Referências Bibliográficas	46

3	Modelo de spin diluído: Nova teoria de campo efetivo	50
3.1	Novas Teorias de campo efetivo	50
3.2	Noções básicas de desordem	54
3.3	Modelo de Heisenberg diluído	63
3.4	Resultados	66
	Referências Bibliográficas	71
4	Conclusão e Perspectivas Futuras	76
A	Construção dos primeiros coeficientes	78

Lista de Tabelas

1.1	<i>Valores de expoentes críticos para diversos modelos de spin e materiais ferromagnéticos.</i>	21
2.1	<i>Valores da temperatura crítica reduzida $K_B T_c / J$ para várias redes 2d e 3d no modelo de Ising -1/2</i>	41
3.1	<i>Valores teóricos das concentrações de percolação por sítio e ligação em diversas topologias de redes</i>	59
3.2	<i>Valores da temperatura crítica reduzida $K_b T_c / J$ para os Modelos de Heisenberg via técnicas</i>	67
3.3	<i>Valores da temperatura crítica reduzida $K_b T_c / J$ para o modelo de Heisenberg e modelo de Ising via técnicas aproximativas onde, os termos entre parênteses () representam o caso AF e, sem parênteses para o caso F</i>	71

Lista de Figuras

1.1	<i>Comportamento da magnetização espontânea em função da temperatura para alguns materiais ferromagnéticos, onde as curvas teóricas são obtidas pela teoria de Weiss [2].</i>	3
1.2	<i>a) Capacidade térmica molar isobárica C_p do níquel (Ni) como função da temperatura obtida experimentalmente por Conelly, Loomis e Mapother (1971) [2]. b) Gráfico log-log de $\frac{dC_p}{dT}$ em função de $T - T_c$. A inclinação da reta ajustada aos dados vale -0.90 que representa um valor do expoente $\alpha = -0.10$</i>	22
2.1	<i>Figura esquemática na representação de um sistema com N partículas</i>	32
2.2	<i>aglomerado com $N = 1$ (a) e $N = 2$ (b) spins</i>	34
2.3	<i>Agglomerado com $N = 2$ spins em topologias de redes diferentes</i>	37
3.1	<i>Esquema ilustrativo de uma desordem por ligação</i>	56
3.2	<i>Esquema ilustrativo de uma desordem por remoção</i>	57
3.3	<i>Esquema ilustrativo do aglomerado considerado para o modelo de Heisenberg</i>	63
3.4	<i>Diagrama no plano T-p para o modelo de Ising com correlações (maior) e sem correlações (ao fundo)</i>	68
3.5	<i>Diagrama no plano T-p para o modelo de Heisenberg F com correlações (maior) e sem correlações (ao fundo)</i>	69
3.6	<i>Diagrama no plano T-p para o modelo de Heisenberg AF com correlações (maior) e sem correlações (ao fundo)</i>	70

3.7	<i>Diagrama no plano T-p para o modelo de Ising-1/2 correlacionado, em comparação com dados experimentais</i>	72
3.8	<i>Diagrama no plano T-p para o modelo de Heisenberg-1/2 correlacionado, em comparação com dados experimentais</i>	73
A.1	<i>Esquema ilustrativo de três possíveis possibilidades para 3 spins, onde a cor azul representa a possível possibilidade de combinação</i>	79
A.2	<i>Esquema ilustrativo de três possíveis possibilidades para 5 spins, onde a cor azul representa a possível possibilidade de combinação</i>	80
A.3	<i>Esquema ilustrativo de três possíveis possibilidades para 7 spins, onde a cor azul representa a possível possibilidade de combinação</i>	81
A.4	<i>Esquema ilustrativo de configuração para 9 spins, onde a cor azul representa possíveis possibilidades de combinação</i>	81

Agradecimentos

Em primeiro lugar agradeço a Deus, pela força e disposição para vencer na vida.

Agradeço também à minha família, minha mãe Magaly Bezerra do Nascimento, meu pai Admilson dos Santos Carvalho, minha avó paterna Maria Santos de Carvalho, minha avó materna Rosa Bezerra do Nascimento, todos os tios e tias, meus irmãos Lidiane, Lucicléia, Diego, Leilane e Luana pelo convívio harmonioso e sempre presentes na minha vida.

Agradeço ao meu orientador Prof. Dr. José Ricardo de Sousa, pela paciência e instrução (até paternalícia) na via acadêmica, valeu Mestre! E ao meu coorientador, Dr. Minos Adão Neto pela grande ajuda no decorrer deste trabalho.

A minha namorada Silvia pela paciência, amor, carinho e companheirismo

Aos meus amigos, Griffith, Sabrina, Rodrigo, Paula, Lúcio, Marco Aurélio, Dinóla, Igor, Isabel, Flávio, José Maurício, Efraim, Karen, Gleyton e André Ricardo pela grande amizade e amor fraterno durante toda a minha vida estudantil e acadêmica.

À Universidade Federal do Amazonas UFAM.

Ao CNPq por financiar o primeiro ano do meu curso de mestrado.

Abstract

The critical properties of quantum spin systems is one of the most fascinating subjects in solid physics. Especially, extensive studies have been made in the spin-1/2 Heisenberg antiferromagnetic model (HAM) because the undoped cuprates contain two-dimensional Cu-O planes antiferromagnetic (AF) interactions. Anderson's original suggestion that novel quantum spin fluctuations in the CuO_2 planes, common in all these doped cuprates, may be responsible for the superconductivity has received significant attention. Most studies on the HAM have focused by analysing the properties on ground state ($T=0$) on a square lattice, where conclusion has been that the isotropic HAM is in an ordered state, with a nonzero staggered magnetization, corresponding to a spontaneously broken symmetry. On the other hand, the phase transition of the spin-1/2 anisotropic Heisenberg ferromagnetic Model (HFM), that obtain direct information about the critical exponents and critical temperature, has been globally analyzed by many methods. For a not frustrated classical system and some quantum system (e.g., the XY model), there is a unitary operator in which the F case is simply mapped into the AF case by redefining the spin direction on one sublattice (J display by $-J$, where J is the exchange coupling), in lattices that are decomposed into two sublattices, to which we limit ourselves presently, but for the general quantum Heisenberg model no such symmetry exists. Recently, the effective field theory (EFT) method have been applied successfully to study a large variety of problems, in particular quantum models in arbitrary dimension and it is able to study frustrated models. The starting point for the EFT calculation is the choice of a finite cluster and obtain average of spin operators by using the Callen and Suzuki generalized relation. The EFT provides a hierarchy of approximations to

obtain thermodynamic properties of magnetic models. One can continue this series of approximations to consider larger and larger clusters and as a consequence, better results are obtained. The exact solution would be obtained by considering an infinite cluster. However, by using relatively small clusters that contain the topology of the lattice, one can obtain a reasonable description of thermodynamic properties. Here we use EFT in finite cluster to treat the Heisenberg antiferromagnet with dilution bond and obtain the phase diagram in the T - p plane (p is probability of bond). We developed a new decoupling in the correlation equations generated by formalism.

Resumo

As propriedades críticas dos sistemas quânticos de spin é um dos temas mais fascinantes da física dos sólidos. Especialmente, extensivos estudos têm sido realizados no modelo de Heisenberg antiferromagnético de spin-1/2 (HAM), pois o cupratos não puros contém interações entre planos 2-dimensional Cu-O antiferromagnético (AF). Anderson sugere que a interação quântica de flutuações de spin nos planos *textit}(CuO)_2*, comum em todos esses cupratos dopados, podem ser responsáveis pela supercondutividade e tem recebido atenção significativa. A maioria dos estudos sobre o HAM se concentraram em analisar as propriedades no estado fundamental ($T = 0$) em uma rede quadrada, cuja conclusão foi que HAM isotrópico é um estado ordenado, com uma magnetização diferente de zero escalonada, correspondendo a uma simetria de quebra espontânea. Por outro lado, a transição de fase do spin-1 / 2 Modelo de Heisenberg ferromagnético anisotrópico (HFM), que obtêm informações diretas sobre os expoentes críticos e temperatura crítica, tem sido globalmente analisados por vários métodos. Para sistemas sem frustração clássicos e alguns sistemas quânticos (por exemplo, o modelo XY), existe um operador unitário em que o caso é F simplesmente mapeada para o caso de AF, redefinem o sentido do spin de uma subrede (visualização por J-J, onde J é o acoplamento de interação de troca), em redes que são decompostos em dois subredes, a que nós nos limitamos hoje, mas para o caso geral de simetria do modelo quântico de Heisenberg não existe. Recentemente, o método da teoria de campo efetivo (EFT) tem sido aplicado com sucesso para estudar uma grande variedade de problemas, em particular os modelos quânticos de dimensão arbitrária e é capaz de estudar os modelos frustrados. O ponto de partida para o cálculo EFT é a escolha de um aglomerado finito e obter média dos operado-

res de spin usando a relação generalizada de Callen e Suzuki. A EFT fornece uma hierarquia de aproximações para obter propriedades termodinâmicas de modelos magnéticos. Na continuação dessa série de aproximações para considerar aglomerados cada vez maiores tem, como consequência, melhores resultados são obtidos. A solução exata seria obtida pela análise de um aglomerado infinito. No entanto, usando clusters relativamente pequenos que contêm a topologia da estrutura, pode-se obter uma descrição razoável de propriedades termodinâmicas. Aqui usamos em aglomerado finito EFT para tratar a antiferromagneto de Heisenberg com vínculo de diluição e obter o diagrama de fases no plano T-p (onde p é a probabilidade de vínculo). Tratando-se aqui, um novo desenvolvimento nas equações de correlação gerada pelo formalismo.

Capítulo 1

Introdução

1.1 Breve histórico do magnetismo

O magnetismo é um dos mais fascinantes ramos da física e cujo o estudo é um dos mais antigos da ciência. Desde a antiguidade que materiais magnéticos vem atraído a atenção do homem. Um dos primeiros relatos do magnetismo são de 800 a.C. Onde, um minério, encontrado na região da Grécia, a Magnésia, tinha a propriedade de atrair ou repelir pedaços de ferro. Há muito antes dos gregos, os chineses já conheciam o fenômeno e aplicaram tecnologicamente, inventando a bússola.

A primeira publicação sobre o estudo do magnetismo ocorreu em 1269 d.C. por Pierre Pélgrin de Maricount, onde se comentava sobre as propriedades dos magnetos. Nos anos seguintes observou-se o surgimento de vários documentos[1] relatando o estudo em bússolas como utilização tecnológica para orientação geográfica nas navegações. Com base nisso, Willian Gilbert de Colchester publicou o livro *De magnetete*, resumindo todos os conhecimentos sobre o magnetismo daquela época, onde estudou sobre as linhas de campo magnético que chamou de "alma da Terra", como parte do magnetismo terrestre na bússola.

Somente no século XIX, com a descoberta de Oersted e Àmpere (1820), de que a corrente elétrica gera uma força magnética e também, com a descoberta de Faraday e Henry (1840) do fenômeno de indução magnética, que os fenômenos magnéticos ganharam status. Em 1873, Maxwell sintetizou as equações do eletromagnetismo no livro *Treatise on Electricity and Magnetism* unificando a eletricidade com o magnetismo. No final do século XIX, Pierre Curie obteve medidas da magnetização em função da temperatura, determinando que a mesma diminui com a temperatura, indo à zero num valor crítico, a temperatura de Curie.

Porém, só a partir do início do século XX, que o magnetismo foi interpretado de maneira qualitativa por Pierre Weiss, apresentando uma teoria fenomenológica capaz de explicar do ponto de vista qualitativo o comportamento da magnetização e outras propriedades de materiais ferromagnéticos. A idéia de Weiss (teoria do campo molecular) era de que um único momento magnético, associado a um dado íon do material, interage com o restante do cristal através de um campo, que ele chamou de campo molecular, que é proporcional a magnetização do material, apresentando assim um ponto de partida para o estudo da origem do magnetismo e de sistemas magnéticos interagentes.

Na figura 1.1, mostramos o comportamento da magnetização em função da temperatura para diversos materiais (*Fe*, *Ni*, *Co*). Existe então, magnetização espontânea abaixo de uma temperatura crítica T_c característica do material e, para temperaturas maiores que $T > T_c$ a magnetização é zero tornando-se um material paramagnético.

Apesar da teoria de Weiss explicar qualitativamente muito bem o comportamento da magnetização de algumas substâncias levando em conta aspectos microscópicos da matéria, ela não se baseia na mecânica quântica iniciada com os estudos de Bohr, sendo assim propícia a inconsistências físicas. Essas inconsistências são devido a consideração apenas da contribuição da energia de interação dos momentos de dipolo magnéticos dos íons do material para a formação da ordem magnética.

O estudo das propriedades ferromagnéticas a nível microscópico só foi bem ex-

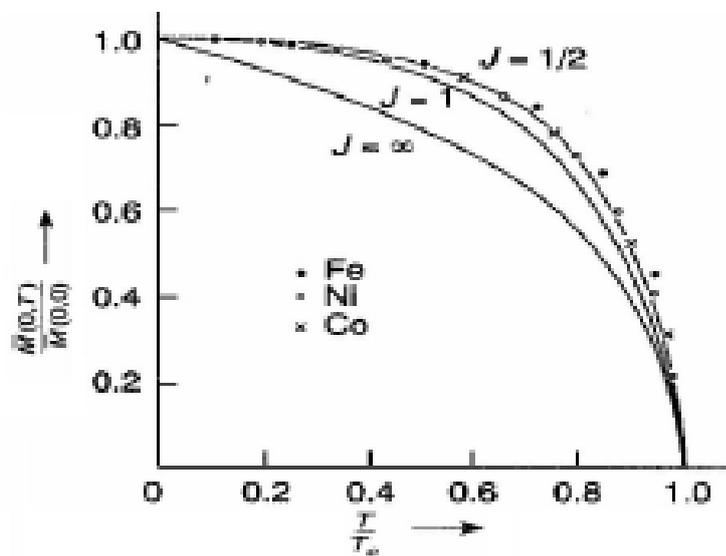


Figura 1.1: *Comportamento da magnetização espontânea em função da temperatura para alguns materiais ferromagnéticos, onde as curvas teóricas são obtidas pela teoria de Weiss [2].*

plorado no início do século passado (séc. XX), com a formulação da mecânica quântica. O século XX foi marcado pelo surgimento da mecânica quântica possibilitando o entendimento moderno do magnetismo. Este entendimento foi intimamente ligado, também ao desenvolvimento da mecânica estatística. Com a teoria quântica foi possível explicar a origem microscópica da magnetização nos ferromagnetos, que está associado aos momentos magnéticos intrínsecos dos elétrons (spin) localizados nos íons que compõem a rede cristalina do material. O teorema de Van Leeuwen [3] diz que classicamente a qualquer temperatura, a magnetização total de um conjunto de elétrons em equilíbrio térmico é identicamente nula, demonstrado utilizando-se as equações de Maxwell e a estatística de Boltzmann. Tomando outras palavras, o magnetismo das substâncias não pode ser explicado pela física clássica, é intrinsecamente de origem quântica.

Apesar do magnetismo ser um tema de pesquisa muito antigo, ainda representa uma linha de pesquisa da Física da Matéria Condensada que mais aglutina pesquisadores e movimenta bilhões de dólares de investimento, tanto na área da física básica como aplicada. Podemos perceber quão ativo é este ramo da ciência, quando listamos o número de dispositivos e equipamentos que nos cercam no cotidiano, que vai do ímã de uma geladeira, cartão magnético, eletroímã, etc. Por outro lado, no caso da física básica, o primeiro objetivo é entender as diversas propriedades magnéticas nos materiais sintetizados nos laboratórios, tendo como ponto de partida modelos formulados a partir dos constituintes microscópicos. Os novos compostos supercondutores em altas temperaturas formados por planos de CuO_2 , por exemplo, $\text{La}_{2-x}(\text{Ba,Sr})_x\text{CuO}_4$, têm em comum o magnetismo na sua fase isolante [4], que deve persistir com ordem de curto-alcance na fase supercondutora, onde os pares de Cooper devem ser mediados de alguma forma, ainda não solucionada, através de interação presente no ordenamento magnético. Assim sendo, estudar teoricamente modelos magnéticos representa uma grande motivação, não somente pelo aspecto geral dos resultados, mas por causa destes estudos paralelos poderem elucidar fenômenos experimentais não compreendidos microscopicamente.

1.2 Origem do Magnetismo

Para explicar o magnetismo dos materiais, é preciso realizar um breve estudo sobre o comportamento magnético dos materiais para chegarmos até a explicação microscópica do magnetismo de alguns materiais. Os principais comportamentos magnéticos da matéria são: diamagnetismo, paramagnetismo, ferromagnetismo, antiferromagnetismo, Ferrimagnetismo, etc.

Para falar sobre o comportamento magnético dos materiais devemos introduzir uma função que define esse comportamento chamada de susceptibilidade magnética que pode ser entendida como uma função "resposta" do material com interação à um fraco campo magnético externo. De forma simples a magnetização é dada por:

$$M = \chi H, \quad (1.1)$$

onde χ é a *susceptibilidade magnética* e H é o campo magnético aplicado.

A magnetização é definida como o *momento magnético por unidade de volume*, onde o momento magnético é definido por:

$$\vec{\mu}(\vec{r}) = (1/2) \int_{V'} \vec{r}' \times \vec{j}(\vec{r}') d\vec{r}', \quad (1.2)$$

para uma distribuição de correntes de densidade $\vec{j}(\vec{r}')$, confinada a um volume V' , no centro \vec{r} .

Considerando que a magnetização M tem uma relação linear com H , neste caso, definem-se as componentes da *susceptibilidade inicial* como

$$\chi_{\alpha\beta} = \left. \frac{\partial M_{\alpha}(H)}{\partial H_{\beta}} \right|_{H=0}, \quad (1.3)$$

sendo uma definição mais apropriada para um sistema com ordem magnética espontânea, ou seja, quando a magnetização é nula mesmo em campo nulo. Assim podemos classificar a ordem magnética de um determinado material através de sua susceptibilidade.

Materiais *Diamagnéticos*, não possuem magnetização a campo nulo, apresentam uma magnetização contrária ao campo aplicado, ou seja, uma susceptibilidade

magnética negativa. Por outro lado, substâncias que, embora não apresentando magnetização espontânea (a campo nulo), magnetizam-se no mesmo sentido do campo aplicado, isto é, têm susceptibilidade positiva e, para esses materiais, dizemos que têm "ordem" *paramagnética*.

De forma simplificada, a existência de cargas elétricas microscópicas numa substância (embora globalmente neutra), aliada à Lei de Lenz, são ingredientes necessários para justificar o diamagnetismo. A situação é mais complexa, pois a resposta diamagnética é observada mesmo para campos magnéticos estáticos. Por outro lado, o *diamagnetismo* só pode ser explicado se considerarmos a existência de **momentos magnéticos microscópicos permanentes**, embora a substância não apresente uma magnetização global. Sabe do magnetismo clássico que, um dipolo magnético minimiza a sua energia potencial na presença de um campo magnético aplicado quando se orienta paralelamente ao campo.

Substâncias que apresentam magnetização espontânea são denominadas *ferromagnéticas*, com exemplo mais conhecido, temos o ferro. Porém mesmo substâncias ferromagnéticas não apresentam sempre uma magnetização não nula, mas permanecem magnetizadas após aplicação e remoção de um campo magnético suficientemente intenso. O comportamento de outro tipo de substância só pode ser entendido se considerarmos que elas apresentam magnetizações locais não nulas, mas variando de forma alternada no volume do sistema, de forma que a magnetização global é nula. Tais substâncias são chamadas de *Antiferromagnéticas*. As magnetizações locais decrescem com o aumento da temperatura até uma temperatura crítica T_N (temperatura de *Neël*) de transição.

Outros tipos de ordem magnética são também observados, como por exemplo o *ferrimagnetismo* (similar ao antiferromagnetismo, mas com momentos opostos não equivalentes), o *helimagnetismo* (ordem ferromagnética por "camadas", com um ângulo não nulo entre as magnetizações de camadas sucessivas), etc.

A origem do magnetismo é devido a existência de momentos de dipolos magnéticos no material, onde o campo produzido por esses momentos magnéticos da rede cris-

talina que interage com cada momento nos sítios da rede orientado-os numa direção bem definida é dada por:

$$\vec{B}_i = \frac{\mu_0}{4\pi} \left[\frac{3(\vec{\mu}_i \cdot \vec{r})\vec{r}}{r^5} - \frac{\vec{\mu}_i}{r^3} \right] \quad (1.4)$$

Na equação acima o campo \vec{B}_i é produzido pelo momento magnético $\vec{\mu}_i$ a uma distância \vec{r} do momento. Colocando um dipolo $\vec{\mu}_j$ a uma posição \vec{r} do dipolo $\vec{\mu}_i$ a energia de interação entre os momentos magnéticos será dada por

$$E_{dip} = -\vec{\mu}_j \cdot \vec{B}_i \quad (1.5)$$

Considerando somente a interação dipolar (sem considerar o sinal) para dois dipolos de intensidade $\sim \mu_B$, separados por uma distância do espaçamento interatômico $a \sim 3\text{\AA}$ obtemos que a energia da interação é da ordem de 10^{-24} Joules. Embora a existência de momentos magnéticos atômicos permanentes tenha sido entendida como um efeito essencialmente quântico, podemos, como primeira hipótese, que a ordem magnética seja devido a esse tipo de interação.

Baseando-se nessa energia de interação podemos estimar a temperatura crítica de transição através do seguinte raciocínio: consideramos que essa energia de interação (energia necessária para manter o ordenamento estável) seja da ordem da energia térmica na transição da ordem de $\sim K_b T_c$, assim, obtemos um valor estimado da temperatura com $T_c = 10^{-1}K$ que, para esse valor, não relata a realidade, uma vez que para materiais tipo *Fe*, *Ni* e *Co* apresentam temperatura crítica muito mais elevadas ($T_c(Fe) = 543K$, $T_c(Ni) = 5731K$ e $T_c(Co) = 1395K$), ou seja, somente a interação dipolar não explica o ordenamento magnético observado nos sólidos

Com o desenvolvimento da teoria quântica e um entendimento melhor sobre a estrutura de camadas eletrônicas dos átomos, o estudo das propriedades dos ferromagnetos pôde ser mais aprofundado e verificou-se que era necessário considerar outras interações fortes o suficiente entre momentos magnéticos microscópicos que favorecem um alinhamento paralelo dos mesmos. Como a interação de campo molecular proposta por Weiss não apresentou resultados quantitativos satisfatórios, era

necessário considerar um outro de tipo de interação entre os momentos magnéticos, que foram chamadas de interações de troca (*exchange*) [6], que existem entre os elétrons do material. Essa interação de troca é um efeito combinado da interação coulombiana dos elétrons e anti-simetria de troca da função de onda. Consideremos um sistema de dois elétrons[20], o Hamiltoniano do sistema dos dois elétrons pode ser escrito na forma

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + V(1, 2), \quad (1.6)$$

onde \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 contêm apenas as coordenadas do elétron 1 e 2, respectivamente, e $V(1, 2)$ é o termo de interação (incluindo a repulsão Coulombiana entre eles) entre os dois elétrons e contém as coordenadas de ambos.

Considerando a interação entre os elétrons como uma perturbação, podemos calcular a energia dessa interação usando métodos perturbativos não degenerados. Para isso devemos definir as autofunções dos Hamiltonianos dos elétrons, que devem ser anti-simétricas satisfazendo o princípio de exclusão de Pauli. A função de onda de spin dos elétrons pode ter duas configurações, pois o spin total do sistema $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$ de dois elétrons pode assumir valores $S = 0$ ou $S = 1$. Para o caso $S = 0$, que chamamos de estado singlete cuja função de onda deve ser anti-simétrica

$$\chi^A(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle). \quad (1.7)$$

O caso $S = 1$ é conhecido como estado tripleto e a função de onda associada a este estado deve ser simétrica :

$$\chi^A(1, 2) = \begin{cases} |\uparrow\uparrow\rangle, M = 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle), M = 0 \\ |\downarrow\downarrow\rangle, M = -1 \end{cases} \quad (1.8)$$

Os estados tripleto e o singlete de spin correspondem a um singlete e um tripleto para as funções de onda orbital respectivamente, que incluem as funções de onda

com dependência espacial dos elétrons. As funções completas também devem ser anti-simétricas, então podemos escrever estas funções completas na forma

$$\begin{aligned}\Psi_{trip}(1, 2) &= \Phi_A(1, 2)\chi_S(1, 2) \\ , \Psi_{trip}(1, 2) &= \Phi_S(1, 2)\chi_A(1, 2),\end{aligned}\tag{1.9}$$

onde $\Phi_S(1, 2)$ e $\Phi_A(1, 2)$ são funções simétricas e anti-simétricas, respectivamente, garantindo assim que a função de onda total seja anti-simétrica. Uma escolha simples e mais adequada para estas funções que corresponde a tratar $V(1, 2)$ em primeira ordem de perturbação pode ser [21]

$$\begin{aligned}\Phi_S(1, 2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_a(1)\phi_b(2) + \phi_a(2)\phi_b(1)] \\ \Phi_A(1, 2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_a(1)\phi_b(2) - \phi_a(2)\phi_b(1)]\end{aligned}\tag{1.10}$$

onde ϕ_a e ϕ_b são autofunções de \mathcal{H}_1 ou \mathcal{H}_2 , sendo a escolha arbitrária. Sendo assim, podemos escrever as energias dos estados singleto e tripleto como

$$\begin{aligned}E_S &= \frac{\langle \Phi_S | \mathcal{H} | \Phi_S \rangle}{\langle \Phi_S | \Phi_S \rangle} \\ E_A &= \frac{\langle \Phi_A | \mathcal{H} | \Phi_A \rangle}{\langle \Phi_A | \Phi_A \rangle}\end{aligned}\tag{1.11}$$

A interação de troca J é a diferença entre as energias do estado singleto e o estado tripleto como foi proposta por Frenkel [22] e Dorfman [23] podendo esta ser negativa ou positiva, definindo assim um tipo específico de ordenamento dos spins da rede cristalina. Quando $J > 0$ temos ordenamento ferromagnético, por outro lado, quando $J < 0$ o ordenamento do sistema será antiferromagnético. A interação de troca é definida por

$$J_{ab} = \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 \varphi_a^*(1) \varphi_b^*(2) V(1, 2) \varphi_a(2) \varphi_b(1),\tag{1.12}$$

onde $V(1, 2) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}$ (interação Coulombiana).

Então essa interação eletrostática entre os elétrons das camadas externas de íons adjacentes, tratada via teoria de perturbação, produz uma separação dos níveis de energia eletrônicos, que pode ser entendida como a quantidade de energia necessária para trocar os elétrons do átomo. A energia de troca tem a propriedade de decrescer rapidamente com a distância entre os íons (exponencialmente) ao contrário da energia coulombiana que decai mais devagar com $\Delta E_c = 1/r$, sendo essa energia de troca um resultado de um entrelaçamento das funções de onda (*Overlap*) de elétrons, sendo assim uma energia de curto alcance.

Essa interação microscópica é o principal responsável pelo forte magnetismo da matéria. Através de estimativas temos que $J \approx e^2/a$ ($e = 1,6 \cdot 10^{-19}C$ é a carga do elétron) e que comparada a energia térmica do $K_B T_c$ temos $T_c \sim 10^3 K$, em concordância com os resultados experimentais nos compostos ferromagnéticos.

1.3 Hamiltoniano de Interação entre Spins

Como vimos anteriormente, o magnetismo dos materiais ferromagnéticos está ligado diretamente aos momentos magnéticos localizados dos íons na rede cristalina do material, que por sua vez depende da configuração dos elétrons nas camadas atômicas.

Consideremos a interação de dois elétrons, onde o spin total é dado por $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$ e $\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \frac{1}{2} (\vec{S}^2 - \vec{S}_1^2 - \vec{S}_2^2)$, onde temos usado $\hbar = 1$.

Sejam $\phi^{(1)}$ e $\phi^{(2)}$ as autofunções dos elétrons (1) e (2) dos operadores \vec{S}_1^2 e \vec{S}_2^2 com autovalores $\frac{3}{4}\hbar^2$. Para o caso de spins antiparalelos, a função de onda Φ_A do sistema dos dois elétrons será anti-simétrica e corresponde a $S = 0$, portanto,

$$\langle \Phi_S | \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 | \Phi_S \rangle_{S=0} = -\frac{3}{4} \quad (1.13)$$

No caso de spins orientados paralelamente, a função de onda do sistema é

simétrica Φ_S e corresponde a $S = 1$, portanto.

$$\langle \Phi_A | \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 | \Phi_A \rangle_{S=1} = \frac{1}{4}. \quad (1.14)$$

Logo, o Hamiltoniano de spins satisfaz a relação

$$\hat{\mathcal{H}} | \Phi_{S,A} \rangle = E_{S,A} | \Phi_{S,A} \rangle \quad (1.15)$$

Definindo a energia de troca J como a diferença entre as energias do estado singlete $S = 0$ e do estado tripleto $S = 1$, E_A e E_S , respectivamente, temos

$$\hat{\mathcal{H}}^{spin} = \frac{1}{4}(E_S + 3E_A) - (E_S - E_A)\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \quad (1.16)$$

Redefinindo o zero da energia, ou seja, o último termo do Hamiltoniano como o termo dominante, o Hamiltoniano fica escrito como

$$\hat{\mathcal{H}}^{spin} = -J\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \quad (1.17)$$

Para o caso de um cristal com N íons nos sítios da rede, o Hamiltoniano acima pode ser generalizado na forma

$$\hat{\mathcal{H}}^{spin} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (1.18)$$

onde a soma acima é feita sobre todos os pares i e j dos N íons da rede cristalina interagindo com energia de troca J_{ij} por par de dipolos e $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ é operador de spin no sítio i . O Hamiltoniano acima é mais conhecido como modelo de Heisenberg [24], e é um modelo muito empregado para estudar propriedades termodinâmicas de materiais magnéticos.

Dependendo do sinal na interação J_{ij} no Hamiltoniano (1.18) podemos ter dois tipos de ordenamento magnético, o ferromagnético (F) $J_{ij} > 0$, onde o estado fundamental corresponde a todos os spins na rede cristalina estarem ordenados paralelamente. No antiferromagnético (AF) $J_{ij} < 0$, o estado fundamental (clássico,

chamado Nèel) corresponde a spins antiparalelos. No caso do modelo de Heisenberg quântico, o estado Nèel não é auto-estado do Hamiltoniano, existe uma infinidade de estados de spin (componente z) total nulo (i.e., $S^z = 0$), que devem ser combinados para formar o estado fundamental quântico do sistema AF. A dificuldade em estabelecer o estado fundamental é o maior problema teórico que surge no estudo do modelo de Heisenberg AF. Os materiais magnéticos são, com raras exceções, antiferromagnéticos.

A interação de troca se caracteriza por ser independente da orientação dos spins, ou seja, o Hamiltoniano de Heisenberg apresenta simetria rotacional. Desta maneira implica que o Hamiltoniano de Heisenberg deve conter apenas pares de operadores S_i^μ ($\mu = x, y, z$), onde o Hamiltoniano (1.18) representa o termo bilinear. Vários outros termos de interação (coulombiana) podem ser deduzidos via teoria de perturbação de ordem superior, como, por exemplo, o termo biquadrático dado pelo seguinte Hamiltoniano

$$\hat{\mathcal{H}}_B = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij}^{(B)} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)^2, \quad (1.19)$$

ou interação entre quatro spins

$$\hat{\mathcal{H}}_4 = - \sum_{\langle i,j,l,k \rangle} J_{ij}^{(4)} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) (\vec{S}_l \cdot \vec{S}_k), \quad (1.20)$$

etc.

O tipo de estrutura cristalina é determinado pela natureza e magnitude das interações entre os momentos magnéticos dos íons que formam o cristal. A interação de troca, de origem eletrostática mais o princípio de exclusão de Pauli, é a responsável pelo ordenamento magnético na matéria, sendo de natureza isotrópica incapaz de definir alguma orientação dos momentos magnéticos com respeito aos eixos cristalográficos, mas ela produz um ordenamento mútuo dos spins em vários sítios da rede. O fato de que a distribuição de spins ordenados é sempre orientada numa dada direção (eixo de fácil magnetização), definida com respeito ao eixo cristalino, devemos assim ter algum outro tipo de interação que torne o Hamiltoniano de Heisenberg

anisotrópico. Fisicamente, as interações magnéticas (dipolar, quadrupolar, etc.) são responsáveis pela existência da anisotropia magnetocristalina, que se manifesta com a dependência da energia do cristal nas orientações dos momentos magnéticos dos íons com relação ao eixo cristalino.

Desta maneira, dizemos que no cristal existem campos magnéticos efetivos intensos sobre os íons que tendem a orientar os momentos magnéticos numa dada direção privilegiada. Este campo pode alterar algumas vezes as orientações mútuas dos momentos magnéticos dos íons, desta forma distorcendo assim a estrutura magnetocristalina. Um primeiro tipo de anisotropia adicional na equação (1.18) é a interação dipolar, de longo alcance e pequena intensidade, muito importante na descrição de filmes finos e compostos formados por terras-raras dado por:

$$\hat{\mathcal{H}} = -4\mu_B \sum_{\langle i,j \rangle} \left\{ \frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - 3(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{S}_i)(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{S}_j)}{r_{ij}^3} \right\} \quad (1.21)$$

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 μ_B é o magneton de Bohr. O somatório acima é feito sobre todos os pares i e j de spins sobre a rede cristalina. Devido a simetria rotacional do Hamiltoniano de Heisenberg, Eq(1.18), foi mostrado que numa rede bidimensional as interações (*exchange*) bilineares entre os primeiros vizinhos não são capazes de ordenar os momentos magnéticos em temperatura finita, ou seja, a magnetização espontânea é nula[12].

O magnetismo dos elementos de transição do grupo Ferro é sempre associado ao momento magnético dos spins. Isso ocorre porque nos cristais, formados por estes elementos, o campo cristalino geralmente remove a degenerescência orbital do estado eletrônico responsável pelo magnetismo. Como o valor esperado do momento orbital de um estado não degenerado é zero (*quenching*), isto é, numa primeira aproximação a susceptibilidade estática não recebe contribuição do momento orbital. Esta contribuição apenas aparece se levarmos em consideração a interação spin-órbita, que é descrita pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\hat{\mathcal{H}}_{LS} = \sum_i \xi_i(\vec{r}_i) (\vec{L}_i \cdot \vec{S}_i), \quad (1.22)$$

sendo

$$\xi_i(\vec{r}_i) = \frac{1}{2m^2 r_i} \frac{dV}{dr_i}, \quad (1.23)$$

onde $V(\vec{r}_i)$ é a energia eletrostática (núcleo-elétron), \vec{L}_i e \vec{S}_i são os operadores momento angular e spin, respectivamente no sítio i . Usando teoria de perturbação de 2ª ordem no Hamiltoniano (1.22), obtemos

$$\hat{\mathcal{H}}_{LS} = \sum_i \sum_{\alpha, \beta} \Lambda_i^{\alpha\beta} S_i^\alpha S_i^\beta \quad (1.24)$$

sendo

$$\Lambda_i^{\alpha\beta} = 2\xi_i^2 \sum_l \frac{\langle \rho | L_i^\alpha | l \rangle \langle l | L_i^\beta | \rho \rangle}{E_0^p - E_0^l} \quad (1.25)$$

o tensor de anisotropia spin-órbita, $\xi_i^2 = \langle \xi_i^2(\vec{r}_i) \rangle$ e E_0^n é a auto-energia do Hamiltoniano não perturbado. O Hamiltoniano usado habitualmente para descrever a anisotropia ortorrômbica leva em conta apenas os termos da diagonal na Eq.(1.23), podendo ser escrita por

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = D \sum_i (S_i^z)^2 + E \sum_i [(S_i^x)^2 - (S_i^y)^2] \quad (1.26)$$

onde para $E = 0$ reduz-se ao caso da anisotropia uniaxial. Note que o Hamiltoniano (1.26), anisotropia, representa a auto-interação do íon i , no qual é denominado na literatura de anisotropia de íon-único.

A interação spin-órbita também pode induzir anisotropia no exchange. Segundo van Vleck [13], a anisotropia uniaxial deste tipo tem origem no acoplamento dos momentos orbitais dos íons adjacentes, que depende não só da orientação relativa dos dois momentos, mas também da orientação destes com relação ao eixo que une os dois íons na rede cristalina. Em termos dos spins, esse acoplamento pode ser simulado por uma interação dipolar, cujo coeficiente é inteiramente disposto do coeficiente da interação magnética real. Neste caso, a perturbação é do tipo

$W_{ij} = \xi(\vec{r}_i)\vec{L}_i \cdot \vec{S}_i + \lambda\vec{L}_i \cdot \vec{S}_j$, desta maneira escrevemos o Hamiltoniano efetivo na seguinte forma

$$\hat{\mathcal{H}} = - \sum_{\alpha, \beta} \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij}^{\alpha\beta} S_i^\alpha S_j^\beta \quad (1.27)$$

onde $J_{ij}^{\alpha\beta}$ é a interação de troca entre os sítios i e j associados as direções α e β dos spins. O Hamiltoniano generalizado contém a parte simétrica $J_{ij}^{\alpha\beta} = J_{ij}^\alpha \delta_{\alpha\beta}$ e a parte antisimétrica $J_{ji}^{\alpha\beta} \neq J_{ij}^{\alpha\beta}$. O termo anti-simétrico surge em redes com baixa simetria [14], sendo responsável em alguns compostos antiferromagnéticos (ex. La_2CuO_4) pela existência de um pequeno valor de magnetização (pequeno ferromagnetismo).

Dependendo dos valores das interações $J_{ij}^{\alpha\beta}$ que aparecem no Hamiltoniano (1.27) podemos ter alguns limites.

1.3.1 Modelo de Ising

O modelo de Ising é um caso limite do modelo de Heisenberg onde as interações predominantes são na direção z , ou seja, $J_{ij}^z \gg J_{ij}^{x,y}$. Nesse limite, o Hamiltoniano descrito pela equação (1.27) pode ser escrito como

$$\hat{\mathcal{H}}^{Ising} = - \sum_{i,j}^N J_{ij}^z S_i^z S_j^z \quad (1.28)$$

O modelo dado pela Eq. (1.28) é o sistema mais simples da mecânica estatística e foi proposto inicialmente por Wilhelm Lenz em 1920 [15] como parte da tese de doutoramento para seu estudante Ernest Ising, na tentativa de simular o comportamento de uma substância ferromagnética. O modelo apresenta solução exata para o caso unidimensional [15] e bidimensional sem campo externo [16, 17]. Somente recentemente uma possível solução (conjectura) exata para o modelo de Ising em três dimensões tem sido apresentada [18].

No artigo curto publicado em 1925 [15], Ising calculou a função de partição exata para o modelo descrito pela equação acima, para o caso especial de uma rede uni-

dimensional. Sua análise mostrou que não havia transição de fase para um estado ferromagnético em qualquer temperatura. Este resultado pode ser entendido por um argumento qualitativo: suponha que temos um estado ordenado em que todos os spins estivessem alinhados para cima \uparrow . Então se alguma flutuação térmica aleatória no meio da estrutura fizesse com que os spins virassem para baixo \downarrow , a ordem poderia ser destruída, porque não haveria nada para impedir que os spins se invertissem simultaneamente. Em outras palavras, o estado ordenado é instável a qualquer temperatura, porque a *comunicação* entre quaisquer partes da rede pode ser quebrada por um único defeito. Ising ainda fez cálculos aproximativos na tentativa de mostrar que seu modelo não poderia exibir uma transição de fase em três dimensões. Os resultados de Ising não puderam explicar, teoricamente, o magnetismo observado experimentalmente como mostrado na figura (1.1).

O primeiro resultado quantitativo exato da temperatura crítica T_c para o caso de modelo de Ising bidimensional foi obtido por Kramers e Wannier em 1941 [19]. Alguns outros resultados porém incompletos foram obtidos por outros pesquisadores. Zernike [20], Ashkin e Lamb [21] e Kubo [22] também contribuíram com um artigo, onde mostraram como é possível a existência de uma transição de fase em sistemas bidimensionais ou tridimensionais. Em 1952 Yang [23] apresentou o cálculo para a magnetização espontânea (sem campo externo) do modelo de Ising bidimensional de um ferromagneto. Porém, este resultado foi apresentado anteriormente em 28 de Fevereiro de 1942, pelo químico norueguês-norte-americano Onsager na Academia de Ciência de Nova Iorque, que representa a solução do problema de Ising com ausência de campo magnético externo [15]. Esta data representou um marco significativo na história da mecânica estatística, em especial no estudo de transições de fase e fenômenos críticos. Temos ainda que, na ausência de campo externo, as propriedades termodinâmicas do modelo de Ising antiferromagnético são equivalentes ao caso ferromagnético, devido a invariância da função de partição, isto é, $Z(-J_{ij}) = Z(J_{ij})$.

O modelo de Ising descreve muito bem sistemas magnéticos com simetria axial

(forte anisotropia), como, por exemplo, os compostos DyAlO_3 , DyPO_4 , FeCl_2 , FeBr_2 , RbCoF_4 , e também útil para simular as transições gás-líquido para fluidos de uma componente e para ligas binárias.

Contrário ao caso do modelo de Heisenberg antiferromagnético, o estado Néel, representado por spins dispostos em direções alternadas sobre a rede cristalina, é um autoestado do Hamiltoniano de Ising antiferromagnético. A inclusão do campo magnético no modelo quebra a invariância da função de partição, ou seja, $Z_{AF}(-J_{ij}) \neq Z_F(J_{ij})$. Para uma verificação da grande gama de aplicações do modelo de Ising ver trabalho de Wolf [24].

1.3.2 Modelo XY

No caso limite em que $J_{ij}^{x,y} \gg J_{ij}^z$, a Eq. (1.27) reduz-se a um modelo conhecido como modelo XY, onde somente as interações entre os spins na direção X e Y são relevantes e descrito pelo Hamiltoniano:

$$\hat{\mathcal{H}}_{XY} = - \sum_{\langle ij \rangle} \left(J_{ij}^x S_i^x S_j^x + J_{ij}^y S_i^y S_j^y \right) \quad (1.29)$$

O modelo XY ou planar foi introduzido na literatura por Matsubara e Matsuda [25] apresentando solução exata no caso unidimensional. No caso bidimensional o modelo XY não apresenta ordem magnética de longo alcance em temperatura não nula. Um outro tipo de transição de fase para o modelo XY foi proposto por Kosterlitz Thouless [26], que está associada a formação de vórtice e representa na realidade uma transição de fase topológica, não apresentando ordem de longo-alcance.

1.3.3 Modelo de Heisenberg

Neste caso, o Hamiltoniano anisotrópico (1.27) reduz-se ao modelo de Heisenberg (1.18). O estado fundamental ($T = 0$) e algumas excitações elementares do Hamiltoniano (1.18) numa rede unidimensional com spin $S = 1/2$ foram resolvidos extatamente por Bethe [27] e Hulthín [28].

A generalização para incluir anisotropia do tipo: $J_{ij}^x = J_{ij}^y = \eta J$ e $J_{ij}^z = J$ foi feita anos mais tarde por Wlaker[29], cuja a energia no estado fundamental numa rede 1d é dada por:

$$E_o(\eta) = \frac{J}{2} \left\{ \frac{1}{2} - \tanh(a) \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{4}{1 + e^{2\eta a}} \right] \right\} \quad (1.30)$$

onde $\text{sech}(a) = \eta$

Outro resultado exato para o modelo de Heisenberg numa rede d -dimensional ($d = 1, 2$) é o teorema de Mermim e Wagner [30], que afirma que este sistema não apresentava ordem de longo alcance a $T > 0$ no limite isotrópico, que podemos resumidamente expressar pelas seguintes desigualdades

$$|M(T, H)| = \begin{cases} \left[\frac{\Pi^2 \beta^2 w}{\tanh^{-1} \left[\sqrt{\frac{\Pi^2 S(S+1)w}{|M(T, H)|}} \right]} \right]^{1/3} & S(S+1)H^{1/3}, d = 1 \\ \left[\frac{4\Pi\beta w}{\log \left[1 + \frac{\Pi^2 S(S+1)W}{H|M(T, H)|} \right]} \right]^{1/2} & S(S+1), d = 2 \end{cases}$$

onde $w = \sum_{(i,j)} J_{ij} |\vec{r}_i - \vec{r}_j|^2 < \infty$, S é a magnitude do spin, H o campo externo e $\beta = \frac{1}{K_b T}$.

No limite de campo nulo ($H = 0$), a partir das desigualdades acima, temos que a única solução possível é $M(T, H) = 0$ ($T \neq 0$), mostrando, assim, que o modelo de Heisenberg em redes $d = 1, 2$ não apresenta ordenamento magnético espontâneo em $T > 0$. Presença de anisotropia no hamiltoniano, induz em $d = 2$ uma ordem magnética para $T < T_c(\eta)$, sendo que para $\eta \rightarrow 1$ temos o comportamento assintótico $T_c(\eta) \approx [\ln(1 - \eta)]^{-1}$.

1.4 Transição de Fase e Fenômenos Críticos

O estudo da transição de fase e fenômenos críticos originalmente falando de-se com o fenômeno da opalescência crítica no século XIX. No ponto crítico dos fluidos (V_c, P_c, T_c) , por exemplo, monóxido de carbono, observamos que, devido às fortes flutuações, o comprimento de correlação ξ , que mede o tamanho médio dos aglomerados correlacionados, diverge. Isto explica o forte espalhamento da luz (opalescência crítica) dos fluidos no ponto crítico, ou na região crítica. Foi somente na década de 60, que os conceitos básicos de classe de universalidade e escala de funções termodinâmicas foram introduzidas, sobretudo, após a solução exata do modelo de Ising por Onsager, com a hipótese de escala por Widom (1965) [31] e coroando estes estudos com a formulação das idéias de grupo de renormalização (GR) por Wilson [32] e Kadanoff [33].

A ordem de uma transição de fase é classificada através da descontinuidade da energia livre $g(T, H)$. Quando a magnetização ou entropia, que são as primeiras derivadas do potencial, apresentam descontinuidade classificamos como uma transição de fase de primeira ordem. Por outro lado, quando as segundas derivadas apresentam descontinuidade, no caso o calor específico e a susceptibilidade, classificamos como uma transição de fase de segunda ordem (ou contínua). Ainda que o sistema sofra uma transição de fase de primeira ordem, este pode vir a apresentar divergência na susceptibilidade, por exemplo, quando o sistema atinge uma certa temperatura crítica. Em contrapartida, no caso de uma substância ferromagnética, a magnetização vai a zero quando atingida a temperatura crítica numa transição de segunda ordem. A denominação ponto crítico está intimamente relacionada com as transições de fase de segunda ordem. A medida que a temperatura do sistema se aproxima da temperatura crítica, as flutuações térmicas começam a surgir e se tornam muito grandes nas proximidades do ponto crítico. Por exemplo, a susceptibilidade está relacionada à flutuação da magnetização e o calor específico à flutuação da energia interna do sistema.

Numa transição contínua para um ferromagneto, o ponto crítico corresponde a $H = 0$ e $T = T_c$, segundo o teorema de Yang e Lee [34], para $T < T_c$ o sistema apresenta magnetização não nula, que é atribuída à competição entre a energia de troca responsável pelo alinhamento paralelo dos spins e a energia térmica que tem a função de destruir a ordem magnética de longo alcance. No limite de baixas temperaturas, a interação de troca é predominante, o que faz com que os spins se correlacionem a curtas distâncias, no entanto quando a energia térmica se aproxima do valor da energia de troca $K_B T \simeq J_{ij}$, há uma correlação entre todos os spins da rede e o sistema sofre uma transição de fase. Isto explica o comportamento singular das funções termodinâmicas nas vizinhanças do ponto crítico.

1.4.1 Expoentes Críticos

Nas proximidades de um ponto crítico, as grandezas termodinâmicas possuem comportamento singular. A susceptibilidade χ possui comportamento divergente e a magnetização espontânea se anula para $T \rightarrow T_c$ a campo nulo. Os resultados obtidos pela teoria de Weiss [2], descrevem a transição de fase ferromagnética-paramagnética e em particular preveem a ocorrência dessas singularidades.

Para descrever adequadamente o comportamento nas proximidades do ponto crítico, admitimos que a magnetização espontânea se anula na forma

$$m \simeq (T_c - T)^\beta \quad (1.31)$$

e a susceptibilidade a campo nulo possui comportamento do tipo

$$\chi \simeq |T - T_c|^{-\gamma} \quad (1.32)$$

e ainda, ao longo da isoterma crítica $T = T_c$, a magnetização e o campo estejam ligados pela relação

$$H \simeq m^{1/\delta} \quad (1.33)$$

onde β, γ e δ são os expoentes críticos associados às respectivas grandezas. A partir da teoria de Weiss, os expoentes críticos são : $\beta = 1/2, \gamma = 1$ e $\delta = 3$. Dados

Modelo	β	γ	δ	α	ν	η
<i>Ising</i> -2d	1/8	7/4	15	0(log)	1	1/4
<i>Ising</i> -3d	0.33	1.24	4.8	0.10	0.63	0.04
<i>XY</i> -3d	0.34	1.30	4.8	0.01	0.66	0.04
<i>Heisenberg</i> -3d	0.36	1.39	4.8	-0.12	0.71	0.04
Campo médio	1/2	1	3	0(<i>disc</i>)	1/2	0
<i>Fe</i>	0.39	1.33	4.35	-0.11	-	-
<i>Co</i>	0.44	1.23	3.35	-0.095	-	-
<i>Ni</i>	0.38	1.34	4.58	-0.10	-	-
<i>Fe</i> _{0.90} <i>Al</i> _{0.10}	0.41	1.33	4.28	-0.16	-	-
<i>Fe</i> _{0.80} <i>Al</i> _{0.20}	0.42	1.35	4.26	-0.20	-	-
<i>Gd</i> ₆₇ <i>Co</i> ₃₃	0.41	1.16	3.60	0.02	-	-
<i>Gd</i> ₈₀ <i>Au</i> ₂₀	0.44	1.29	3.96	-0.17	-	-

Tabela 1.1: Valores de expoentes críticos para diversos modelos de spin e materiais ferromagnéticos.

experimentais fornecem valores distintos para os mesmo expoentes críticos como pode ser visto na tabela (1.2) [35].

Experimentalmente, também observou-se que a capacidade térmica molar a campo nulo c_H possui comportamento singular, conforme mostra a figura (1.2). Essa grandeza pode divergir de acordo com a expressão abaixo,

$$c_H \simeq |T - T_c|^{-\alpha} \quad (1.34)$$

onde α pode ser positivo, negativo ou nulo. É possível que c_H não divirja, embora continue com comportamento singular. Nesse caso, para caracterizar de forma apropriada a sua singularidade admitimos o seguinte comportamento

$$c_C - c_H \simeq |T - T_c|^{-\alpha} \quad (1.35)$$

com α negativo, em que c_C é o valor finito de c_H no ponto crítico.

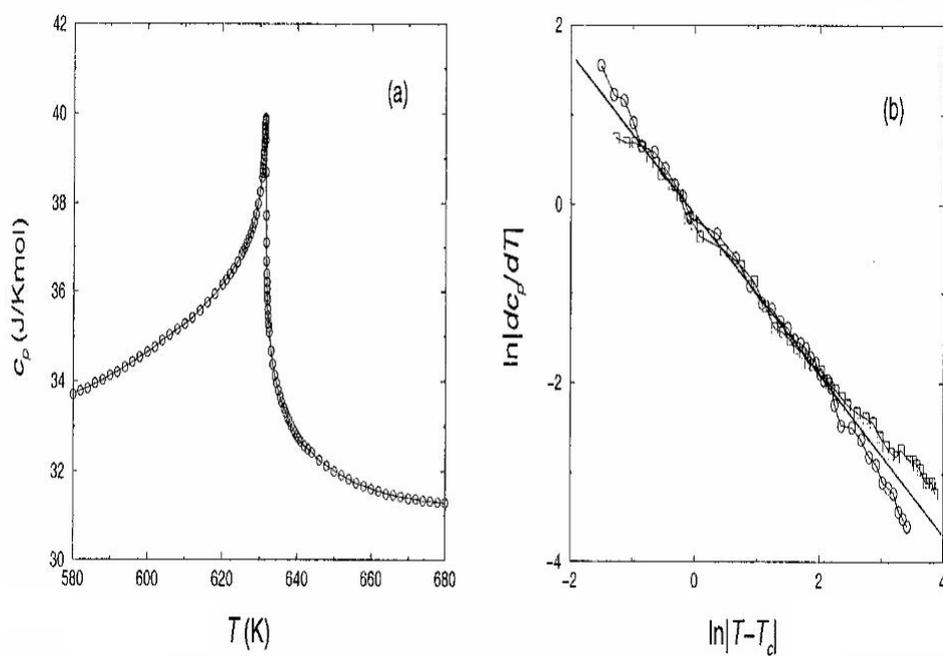


Figura 1.2: a) Capacidade térmica molar isobárica C_p do níquel (Ni) como função da temperatura obtida experimentalmente por Conelly, Loomis e Mapother (1971) [2]. b) Gráfico log-log de $\frac{dC_p}{dT}$ em função de $|T - T_c|$. A inclinação da reta ajustada aos dados vale -0.90 que representa um valor do expoente $\alpha = -0.10$

Os expoentes críticos $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ não são independentes entre si, mas guardam certas relações tais como, por exemplo, a relação de Rush-Brooke

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad (1.36)$$

a relação de Griffiths

$$\alpha + \beta(\delta + 1) = 2 \quad (1.37)$$

e a relação de Widom

$$\gamma = \beta(\delta - 1) \quad (1.38)$$

Temos ainda mais dois expoentes críticos (η e ν) associados ao comportamento assintótico da função de correlação definida por

$$G_c(\vec{r}) = \langle \vec{\sigma}(0) \cdot \vec{\sigma}(\vec{r}) \rangle - \langle \vec{\sigma}(0) \rangle \cdot \langle \vec{\sigma}(\vec{r}) \rangle \quad (1.39)$$

ou seja, no limite $r \rightarrow \infty$ temos

$$G_c(\vec{r}) \simeq \frac{e^{-r/\xi}}{r^{d-2+\eta}} \quad (r \rightarrow \infty), \quad (1.40)$$

sendo $\xi \simeq |t|^{-\nu}$ ($t = \frac{T-T_c}{T_c}$) o comprimento de correlação que mede o tamanho médio dos aglomerados correlacionados. Estes dois expoentes críticos η e ν estão relacionados através da relação de Fisher $\gamma = \nu(2-\eta)$ e da relação de Josephson (hiper-escala) $2 - \alpha = d\nu$, onde d é a dimensionalidade.

A determinação experimental dos expoentes críticos depende da escolha do intervalo da variável $t = \frac{T-T_c}{T_c}$ (região crítica). O intervalo considerado pequeno é uma escolha delicada que fortemente é influenciada pelo tipo de material analisado, uma vez que na região crítica temos fortes flutuações térmicas. Por exemplo, para sistemas magnéticos de uma maneira geral escolhe-se para região crítica $|t| \simeq 10^{-3}$, enquanto que para os compostos supercondutores temos $|t| \simeq 10^{-10}$, transição lambda (He^4) $|t| \simeq 10^{-7}$, e assim por diante. O expoente crítico de uma dada grandeza $f(t)$ é obtida através da inclinação da curva $\ln|f(t)|$ versus $\ln|t|$, analisando o aspecto da invariância da medida pela escolha da região crítica.

Podemos ter para o calor específico $\alpha = 0$ com singularidade logaritmica, como no caso do modelo de Ising 2d, ou descontinuidade, como no caso da solução de teorias de campo efetivo. Para o modelo de Ising 2d temos os seguintes expoentes críticos: $\beta = 1/8$, $\gamma = 7/4$, $\delta = 15$, $\alpha = 0(\log)$, $\nu = 1$, $\eta = 1/4$ que satisfazem as relações de escala entre os expoentes críticos apresentados anteriormente. Quando $\alpha \geq 0$, o calor específico tem uma singularidade em $T = T_c$, por exemplo, o metamagneto uniaxial (Ising 3d) FeF_2 que tem $\alpha \simeq 0.14$. Quando $\alpha < 0$, por exemplo, o metamagneto Heisenberg RbMnF_3 que tem $\alpha \simeq -0.10$, e o calor específico não singular, mas apresenta uma descontinuidade. Recentemente, Zhang apresentou uma conjectura como uma possível solução exata do modelo de Ising 3d, obtendo assim os seguintes expoentes críticos: $\beta = 3/8$, $\gamma = 5/4$, $\alpha = 0$, $\nu = 2/3$, $\delta = 13/3$, $\eta = 1/8$, que são comparadas com os resultados precisos de simulação de Monte Carlo [36]: $\beta = 0.3265(3)$, $\gamma = 1.2372(5)$, $\alpha = 0.110(1)$, $\nu = 0.6301(4)$, $\delta = 4.789(2)$, $\eta = 0.0364(5)$. Os resultados exatos (conjectura) estão mais próximos dos valores experimentais obtidos para alguns magnetos uniaxiais, por exemplo, CrBr_3 : $\{\beta = 0.364 \pm 0.005, \delta = 4.32 \pm 0.10, \gamma = 1.21\}$; Gd : $\{\beta = 0.370 \pm 0.010, \delta = 4.39 \pm 0.10, \nu = 1.25\}$; Ni : $\beta = 0.373 \pm 0.016$, $\delta = 4.44 \pm 0.18$, $\gamma = 1.28$, onde o γ foi determinado pela relação $\gamma = \beta(\delta - 1)$.

Durante quase 50 anos os expoentes críticos: $\beta = 5/16$, $\gamma = 5/4$, $\alpha = 1/8$, $\nu = 5/8$, $\delta = 5$, $\eta = 0$ derivados de expansão em série por Fisher [37] e Domb [38] têm sido aceito como a conjectura da solução exata, mas com o aumento da performance computacional, simulações de Monte Carlo, mostraram inconsistências de alguns destes expoentes críticos, e credita os resultados recentes de Zhang [18] como o possível candidato para solução exata.

1.5 Organização da dissertação

Várias são as formas alternativas para melhoria da temperatura crítica que po-

dem ser implementadas com a utilização da técnica do operador diferencial, onde o caminho escolhido tem sido o crescimento do tamanho do aglomerado e também maneiras diferentes de desacoplar a equação auto-consistente para a magnetização da rede. Neste trabalho de dissertação no capítulo 2 vamos apresentar, primeiramente, uma introdução sobre algumas teorias de campo efetivo com base em aplicações no modelo de Ising (Clássico) e modelo de Heisenberg quântico em aglomerados finitos. Para esses modelos introduz-se a técnica do operador diferencial juntamente com alguns aspectos de sua aplicação e também consequências, sendo este um dos principais instrumentos para a solução de modelos de muitos corpos na mecânica estatística.

No capítulo 3, discutiremos o efeito da desordem nos modelos de Ising e Heisenberg numa rede cúbica simples, onde abordaremos via teorias de campo efetivo. Desenvolveremos uma nova teoria de campo efetivo, onde levaremos em consideração o efeito da correlação entre dois spins. Uma comparação do diagrama de fase no plano T-p para os modelos de Heisenberg e Ising serão utilizados como comparação com os resultados experimentais de compostos ferromagnetos diluídos. Finalmente, no capítulo 4, apresentaremos as conclusões e perspectivas futuras.

Referências Bibliográficas

- [1] Rafael Lopes Valverde, *história del Electromagnetismom* (comunicação privada)
- [2] P. Weiss, J. Phys. Radium **4**, 661 (1907)
- [3] Charles Kittel *Introdução a Física do estado sólido* **8** edição, LTC editora
- [4] J. G. Bednorz e K. Müller, Z. Phys. **64**, 188 (1986)
- [5] P. J. von Ranke, A. Caldas e L. Palermo, Revista Brasileira de Ensino de Física, vol.16 (1994)
- [6] Physical Review, vol. 85 n^0 6 (1952)
- [7] D. C. Malttis, The Theory of Magnetism I - Springer-Verlag, New York (1985)
- [8] M.A. Gusmão. Notas de Aula - IF-UFRGS - 2007
- [9] Y. Frenkel, Z. Phys., **49**, 619 (1928)
- [10] Y. Dorfman, Nature, **119**, 353 (1928)
- [11] W. K. Heisenberg, Z. Phys., **49**, 619 (1928)
- [12] N. D. Mermim e H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.*22, 1133 (1966)
- [13] J. H. van Vleck, *J. Phys. Rad.*12, 262 (1931);*Phys. Rev.* 52, 1178 (1937) ,
- [14] T. Moryia, *Magnetism*, Ed. G.T. Rado e H. Suhl, (Academic Press, 1963) vol

- [15] W. Lenz *Physik. Z.* **21**, 613 (1920), E. Ising, *Z. Physik* **31**, 253 (1925)
- [16] L. Onsager, *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944)
- [17] R.J.Baxter, *Exactly solved models in statistical mechanics* (Academic Press, New York, 1982)
- [18] Z. D. ZHANG, *Philosophical Magazine*, Vol. 87, No. 34, 1 December 2007, 5309-5419
- [19] H. A. Kramers and G. H. Wannier, *Phys. Rev.* **60**, 252, 263 (1941)
- [20] F. Zernike, *Physica* **7**, 565 (1940)
- [21] J. Ashkin and W. E. Lamb, Jr., *Phys. Rev.* **64**, 159 (1943)
- [22] R. Kubo, *Busseiron-kenkyu* **1**, 1 (1943) - Tradução em para Inglês: UCRL - Trans., 1030(L), Lawrence Radiation Laboratory, Livermore California
- [23] C. N. Yang, *Phys. Rev.* **85**, 5 (1952)
- [24] W. P. Wolf, *The Ising Model and Real Materials*, **Braz. J. Phys.**, 30, 794 (2000)
- [25] T. Matsubara e H. Matsuda, *Prog. Theor. Phys.* **16**, 416 (1956)
- [26] J. M. Kosterlitz e D. J. Thouless, *J. Phys. C* 6, 1181 (1973)
- [27] H. Bethe, *Z. Phys* 71, 205 (1931)
- [28] H. Hulthén, *Archiv. Nat. Astron, Fys* 26.A, 11 (1938)
- [29] P. Walker, *Phys. Rev.* 116, 1089 (1959)
- [30] N.D.Mermim e H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.*, 22, 1133 (1966)
- [31] B. Windom, *J. Chem. Phys.* **43**, 3892 (1965)

- [32] K. G. Wilson, Phys. Rev. B 4, 3174 (1971)
- [33] L. P. Kadanoff, Physics 2, 263 (1966)
- [34] Paulo Cupertino Lima - Conferência apresentada na III Reunião Regional da Sociedade Brasileira de Matemática na UFMG (1993)
- [35] Mário José de Oliveira - Termodinâmica - Editora Livraria da Física, São Paulo SP (2005)
- [36] A. Pelissetto e E. Vicari, Phys. Rep. 368, 549 (2002)
- [37] M. E. Fisher, Rep. Prog. Phys. 30, 615 (1967)
- [38] C. Domb, in Phase Transitions and Critical Phenomena, editado por C. Domb. e M. S. Green, vol.3 (Academic Press, London, 1974)

Capítulo 2

Métodos aproximativos em aglomerados finitos

2.1 Introdução

Pela grande dificuldade de se adquirir solução exata para vários modelos de spins[1], o primeiro passo na descrição das propriedades magnéticas dos mais variados modelos teóricos estatísticos é usualmente a aplicação de uma aproximação[2].

O comportamento crítico das quantidades termodinâmicas relevantes nos sistemas quânticos é de grande interesse de estudo da mecânica estatística. Na Física, a procura de uma solução exata para sistemas de muitos corpos interagentes é intensa, porém é grande a dificuldade para se obter tal solução para um sistema que tem em seu constituinte um número de partículas N da ordem 10^{23} (número de Avogadro). Por isso é crescente na literatura o desenvolvimento de métodos aproximativos como alternativa para obtermos informações quantitativas e qualitativas do modelo a ser tratado.

Na mecânica estatística, a dificuldade está em obter a função de partição $Z =$

$Tr e^{-\beta H}$, sendo Tr o traço (funcional) representando sobre a soma em $(2S + 1)^N$ configurações possíveis de spin (\mathbf{S}), sendo o cálculo analítico da função de partição, para 10^{23} muito difícil de ser realizada, na sua grande maioria, impossível. São poucos os modelos que apresentam solução analítica, dentre eles, temos o modelo de Ising 1D e 2D. Por essa dificuldade matemática de se obter a função de partição, as grandezas termodinâmicas também não são determinadas. Assim, vários métodos aproximativos têm sido propostos onde, as técnicas de simulação computacional (Monte Carlo, Diagonalização numérica...) e expansão em série são consideradas "exatas".

Estes métodos computacionais se delimitam ao tratamento de problemas simples, sendo de difícil manipulação em modelos complexos, por isso dentre os novos métodos que foram propostos na literatura, escolhemos tratar neste capítulo a Teoria de Campo Efetivo baseada na técnica do operador diferencial ou de projeção, que foi introduzida na literatura por Honmura e Kaneyoshi em 1979[3]. A técnica do operador diferencial tem sido aplicada numa série de sistemas magnéticos, na qual inicialmente foram utilizados aglomerados de um spin. Até a década de 90 esta técnica era aplicada somente em modelos de Ising, mas com a generalização em aglomerados maiores, a técnica também foi aplicada para o modelo de Heisenberg de spin-1/2 ferromagnético[4] e antiferromagnético[5], os quais foram tratados com sucesso em redes tridimensionais.

A *teoria de campo efetivo* (effective field theory - EFT) em aglomerados com $N = 2$ spins foi aplicada para estudar o comportamento crítico do antiferromagneto (AF) de Heisenberg quântico e clássico em três dimensões. A temperatura de Néel (T_N) e a magnetização de subrede foram calculadas numericamente e comparadas com os resultados desses modelos com interação ferromagnética (F). Resultados obtidos para o modelo quântico indicam que T_N é maior que T_C (temperatura de Curie, para o sistema F).

O modelo de Heisenberg de spin-1/2 tem despertado muito a atenção recentemente, pois foi sugerido por Anderson[6] que flutuações quânticas nos planos de

CuO_2 , comum em todos os cuprados dopados, podem ser responsáveis pelas correntes supercondutoras de altas temperaturas (ex: $La_{2-x}Ba_xCuO_4$).

As propriedades críticas do modelo de Heisenberg de spin-1/2 antiferromagnético em três dimensões têm sido tratadas na literatura por uma variedade de métodos da mecânica estatística, tais como: expansão em série de altas temperaturas (*series expansion* -SE)[20], simulação de Monte Carlo (MC)[21]-[22], teoria de ondas de spin (*spin wave*-SW)[23]-[24], método da função de Green[12], métodos de grupo de renormalização (*renormalization group* - RG)[13]- [15], entre outros. Em todos esses estudos [20]-[15] foram observados que a temperatura de transição de fase para o modelo de Heisenberg de spin-1/2 ferromagnético tridimensional, T_c , e antiferromagnético, T_N , são diferentes da forma $T_N > T_c$, já para o modelo de Ising $T_N = T_c$.

2.2 Considerações iniciais

O ponto de partida da mecânica estatística do equilíbrio está em calcular a função de partição do sistema considerado, dada por:

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta\mathcal{H}}, \quad (2.1)$$

onde \mathcal{H} representa o Hamiltoniano para o modelo teórico considerado e Tr o funcional traço no espaço de todos os spins.

O cálculo do valor médio de uma quantidade física A no *ensemble canônico* é definido por,

$$\langle A \rangle = \frac{\text{Tr} [Ae^{-\beta\mathcal{H}}]}{Z}. \quad (2.2)$$

Seja \mathcal{H} o Hamiltoniano de um sistema qualquer com N partículas interagentes, então é sempre possível separar o sistema em duas partes: uma parte que representa um aglomerado finito (*cluster*) denotada por Ω com $n < N$ spins que descreve

as interações dentro do aglomerado e com sua vizinhança, e a outra denotada por Ω' , representando os spins que não pertencem ao aglomerado Ω . Assim, sendo, $\mathcal{H}(\Sigma = \Omega \cup \Omega')$ poderá ser decomposto da forma

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_\Omega + \mathcal{H}_{\Omega'}, \quad (2.3)$$

onde \mathcal{H}_Ω representa o Hamiltoniano do aglomerado Ω e $\mathcal{H}_{\Omega'}$ representa o Hamiltoniano restante Ω' .

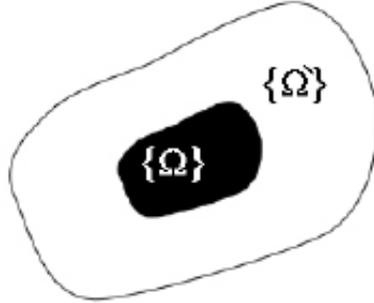


Figura 2.1: *Figura esquemática na representação de um sistema com N partículas*

Agora, seja $O(\Omega)$ uma função de variáveis de spin dentro do aglomerado Ω . Se \mathcal{H}_Ω e $\mathcal{H}_{\Omega'}$ comutam então $[\mathcal{H}_\Omega, \mathcal{H}_{\Omega'}] = 0$,¹ e decorre que o traço na equação (2.2) é desenvolvido em dois passos: primeiro o traço sobre o aglomerado finito Tr_Ω e em seguida sobre os spins da vizinhança que não pertencem ao aglomerado Ω , que é denotado por Tr' , então o valor da grandeza $O(\Omega)$ será reescrita, utilizando a Eq.(2.2), por

$$\langle O(\Omega) \rangle = \frac{Tr' Tr_\Omega \{ O(\Omega) e^{-\beta(\mathcal{H}_\Omega + \mathcal{H}_{\Omega'})} \}}{Tr' Tr_\Omega \{ e^{-\beta(\mathcal{H}_\Omega + \mathcal{H}_{\Omega'})} \}} \quad (2.4)$$

¹apesar de estarmos tratando um sistema quântico, assim fazemos, em primeira aproximação, a comutação entre os Hamiltonianos com resultado nulo, em primeira aproximação $e^{-\beta H} \approx e^{-\beta H_\Omega} e^{-\beta H_{\Omega'}}$, ou seja, uma aproximação clássica

considerando que $[\mathcal{H}_\Omega, \mathcal{H}_{\Omega'}] = 0$, a expressão acima ficará na forma

$$\langle O(\Omega) \rangle = \frac{\text{Tr}' e^{-\beta \mathcal{H}_{\Omega'}} \text{Tr}_\Omega \{ O(\Omega) e^{-\beta \mathcal{H}_\Omega} \}}{\text{Tr}' e^{\mathcal{H}_{\Omega'}} \text{Tr}_\Omega \{ e^{-\beta \mathcal{H}_\Omega} \}} \quad (2.5)$$

Multiplicando a equação (2.5) pelo fator unitário $\frac{\text{Tr}_\Omega \{ e^{-\beta \mathcal{H}_\Omega} \}}{\text{Tr}_\Omega \{ e^{-\beta \mathcal{H}_\Omega} \}}$, e depois combinando adequadamente junto com as propriedades de separação do traço e do hamiltoniano (2.3), ficaremos

$$\langle O(\Omega) \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left\{ \frac{\text{Tr}_\Omega [O(\Omega) e^{-\beta \mathcal{H}_\Omega}]}{\text{Tr}_\Omega [e^{-\beta \mathcal{H}_\Omega}]} e^{-\beta \mathcal{H}} \right\} \quad (2.6)$$

Comparando a equação(2.6) com a equação (2.2) temos que o valor médio de $O(\Omega)$ é reduzido ao cálculo parcial no cluster finito, ou seja,

$$\langle O(\Omega) \rangle = \left\langle \frac{\text{Tr}_\Omega [O(\Omega) e^{-\beta \mathcal{H}_\Omega}]}{\text{Tr}_\Omega [e^{-\beta \mathcal{H}_\Omega}]} \right\rangle \quad (2.7)$$

A Eq.(2.7) é exata para sistemas clássicos, porque neste limite as variáveis de spins presentes no hamiltoniano comutam, de acordo com a consideração que foi utilizada para dedução da equação anterior, assim para modelos quânticos vale a seguinte desigualdade aproximada

$$\langle O(\Omega) \rangle \approx \left\langle \frac{\text{Tr}_\Omega [O(\Omega) e^{-\beta \mathcal{H}_\Omega}]}{\text{Tr}_\Omega [e^{-\beta \mathcal{H}_\Omega}]} \right\rangle \quad (2.8)$$

2.3 Teoria de Campo Efetivo

Para uma melhor contextualização, vamos abordar a EFT via a técnica do operador diferencial para aglomerados finitos. Primeiramente será mostrada a teoria de campo efetivo no modelo de Ising para aglomerados com 1 e 2 spins. Depois será abordado a EFT para o modelo de Heisenberg quântico isotrópico.

2.3.1 Teorias de campo efetivo no modelo de Ising

Para o modelo de Ising será feita a implementação da técnica do operador diferencial para dois tipos de aglomerados com $N = 1$ e $N = 2$ spins, e aplicar EFT no modelo de Ising de spin-1/2.

O Hamiltoniano no sistema é dado por:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (2.9)$$

onde J_{ij} é a interação de troca entre os spins e vamos considerar $J_{ij} = J$ como sendo a interação entre os spins primeiros vizinhos e, $\sigma_i = \pm 1$ a variável de spin 1/2 na direção axial.

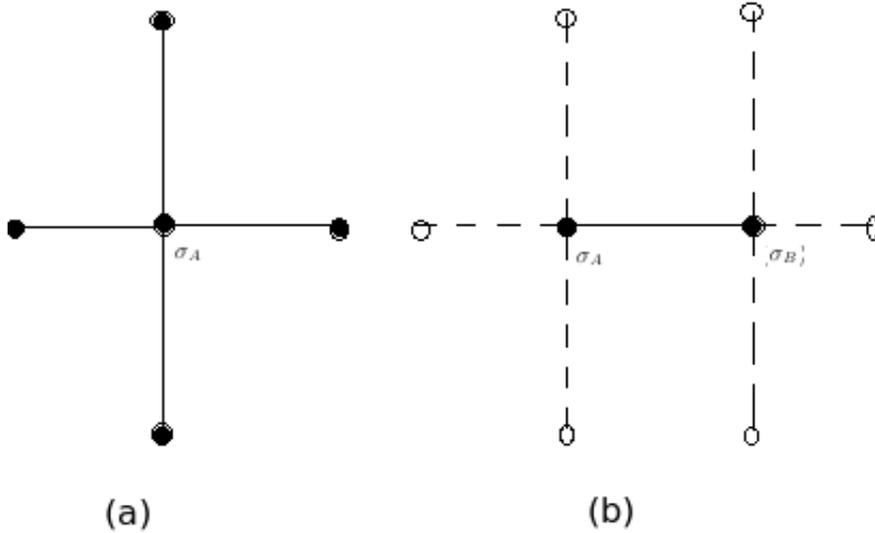


Figura 2.2: *aglomerado com $N = 1$ (a) e $N = 2$ (b) spins*

Para o aglomerado com apenas um spin ($N = 1$), o hamiltoniano pode ser reescrito em termos da soma dos spins primeiros vizinhos, $\sum_{\vec{\delta}} \sigma_{i+\vec{\delta}}$, onde z é o número de coordenação da rede hipercúbica e $\vec{\delta}$ é o vetor primeiro vizinho. Então o Hamiltoniano este aglomerado é dado por

$$\mathcal{H}_1 = -J\sigma_o \sum_{\vec{\delta}}^z \sigma_{0+\vec{\delta}} \quad (2.10)$$

e no caso para o aglomerado com dois spins

$$\mathcal{H}_2 = -J\sigma_1 \sum_{\vec{\delta}}^{z-1} \sigma_{1+\vec{\delta}} - J\sigma_2 \sum_{\vec{\delta}}^{z-1} \sigma_{2+\vec{\delta}} - J\sigma_1\sigma_2, \quad (2.11)$$

onde $\sigma_1 = \sigma_A$ e $\sigma_2 = \sigma_B$ conforme a figura(2.2).

Tomando a média nas variáveis de spin em cada aglomerado, definida pela Eq.(2.7) temos as expressões para as magnetizações por spin m_1 e m_2 :

$$m_1 = \langle \sigma_1 \rangle = \left\langle \frac{1}{Z_1} Tr_{\sigma_1} \left[\sigma_1 e^{\left(K\sigma_1 \sum_{\vec{\delta}}^z \sigma_{i+\vec{\delta}} \right)} \right] \right\rangle \quad (2.12)$$

e

$$m_2 = \left\langle \frac{1}{Z_2} Tr_{(\sigma_1, \sigma_2)} \left[\frac{1}{2} (\sigma_1 + \sigma_2) e^{-\beta \mathcal{H}_2} \right] \right\rangle, \quad (2.13)$$

Efetuando o traço sobre todas as configurações de spin, obtemos:

$$m_1 = \langle \tanh(a) \rangle \quad (2.14)$$

onde a identidade acima é conhecida como identidade de Callen-Suzuki[16], e

$$m_2 = \left\langle \frac{\sinh(a+b) + e^{-2K} \sinh(a-b)}{\cosh(a+b) + e^{-2K} \cosh(a-b)} \right\rangle \quad (2.15)$$

onde $a \equiv K \sum_{\vec{\delta}}^z \sigma_{(1+\vec{\delta}_1)}$, $b \equiv K \sum_{\vec{\delta}}^z \sigma_{(2+\vec{\delta}_2)}$ e $K = \beta J$.

Diversos autores, tais como Matsudaira[17], Frank e Mitran[18], Zhang e colaboradores[19], Tanaka e Uryû [20] e Mattis[21] têm usado a identidade de Callen e Suzuki, Eq.(2.14), para obter as propriedades críticas do modelo de Ising-1/2. A identidade de Callen-Suzuki para spin S geral foi anos atrás generalizada por Balcerzak[22].

As Eqs.(2.14) e (2.15) são exatas mas de difícil manipulações por envolverem as variáveis de spin presentes nas funções hiperbólicas, por isto, é necessário conseguir uma alternativa para prosseguir com o desenvolvimento. Anos atrás, Honmura e Kaneyoshi[3] desenvolveram a técnica do operador diferencial (operador de projeção), que é expresso pela identidade:

$$e^{aD_x} f(x) = f(x + a) \quad (2.16)$$

para uma variável e

$$e^{aD_x + bD_y} g(x, y) = g(x + a, y + b), \quad (2.17)$$

para duas variáveis, sendo $D_\nu(\nu = x, y) = \frac{\partial}{\partial \nu}$ o operador diferencial. Assim, aplicando as relações acima nas Eqs.(2.14) e (2.15), as médias sobre as variáveis de spin serão reescritas nas formas:

$$m_1 = \langle e^{a_1 D_x} \rangle f(x)|_{x=0}, \quad (2.18)$$

e

$$m_2 = \langle e^{a_2 D_x + b_2 D_y} \rangle g(x, y)|_{x,y=0}, \quad (2.19)$$

onde $a_1 = K \sum_{\vec{\delta}_1}^z \sigma_{(1+\vec{\delta}_1)}$, $a_2 = K \sum_{\vec{\delta}_2}^{z-1} \sigma_{(1+\vec{\delta}_2)}$, $b_2 = K \sum_{\vec{\delta}_2}^{z-1} \sigma_{(2+\vec{\delta}_2)}$, $f(x) = \tanh(x)$ e $g(x, y) = \frac{\sinh(x+y) + e^{-2K} \sinh(x-y)}{\cosh(x+y) + e^{-2K} \cosh(x-y)}$. Aplicando a propriedade de exponenciação, ficaremos:

$$m_1 = \langle \prod_{\vec{\delta}}^z e^{(K\sigma_{i+\vec{\delta}})D_x} \rangle f(x)|_{x=0} \quad (2.20)$$

e

$$m_2 = \langle \prod_{\vec{\delta}_1}^{z-1} e^{(K\sigma_{i+\vec{\delta}_1})D_x} \prod_{\vec{\delta}_2}^{z-1} e^{(K\sigma_{i+\vec{\delta}_2})D_y} \rangle g(x, y)|_{x,y=0}. \quad (2.21)$$

Para o aglomerado com $N = 2$ spins, inicialmente observa-se que os produtórios Π 's na Eq.(2.21), referem-se a todos os vizinhos dos spins σ_1 e σ_2 externos ao aglomerado. Contudo, quando existe coincidência (i.e., $i + \vec{\delta}_1 \equiv i + \vec{\delta}_2$), ou seja, quando

os dois sítios do aglomerado admitem vizinhos comuns, a Eq.(2.21) será reescrita por:

$$m_2 = \left\langle \prod_{\vec{\delta}_1}^{z-z'-1} e^{(K\sigma_{i+\vec{\delta}_1})D_x} \prod_{\vec{\delta}_2}^{z-z'-1} e^{(K\sigma_{i+\vec{\delta}_2})D_y} \prod_k^{z'} e^{K(D_x+D_y)\sigma_k} \right\rangle g(x, y)|_{x,y=0}, \quad (2.22)$$

onde os produtórios $\prod_{\vec{\delta}_1}$ e $\prod_{\vec{\delta}_2}$ referem-se somente sobre os vizinhos isolados e \prod_k refere-se aos sítios que são, simultaneamente, primeiros vizinhos dos dois sítios do aglomerado. Para ilustrar, na figura 2.3 apresentamos redes topologicamente diferentes mas que apresentam mesmo número de coordenação. Vejamos os casos das redes Kagomé e quadrada que têm $z = 4$ mas vizinhos comuns $z' = 1$ e $z' = 0$, respectivamente. No caso das redes triangular e cúbica simples temos que $z = 6$, mas com $z' = 2$ e $z' = 0$, respectivamente. Desta maneira este formalismo em aglomerados com $N = 2$ spins incorpora no formalismo uma possibilidade de distinção da topologia da rede, mantendo a simplicidade dos cálculos.

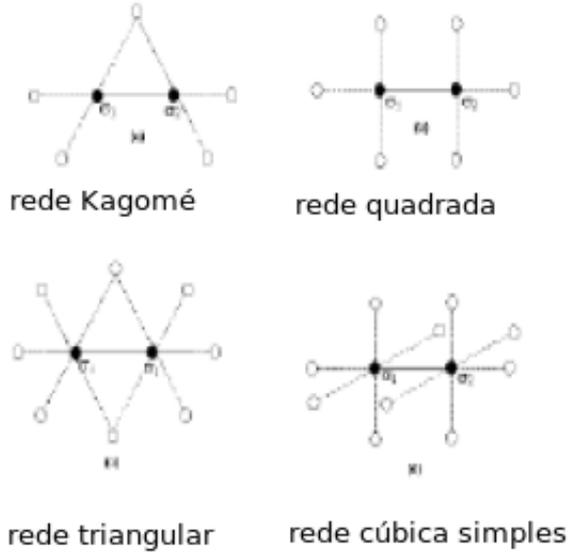


Figura 2.3: Aglomerado com $N = 2$ spins em topologias de redes diferentes

No caso em que $\sigma_i = \pm 1$, usando a identidade de Van der Waerden

$$e^{\alpha\sigma_1} = \cosh(\alpha) + \sigma_1 \sinh(\alpha) \quad (2.23)$$

as Eqs (2.20) e (2.21) serão reescritas por

$$m_1 = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^z (\alpha_x + \sigma_{i+\vec{\delta}} \beta_x) \right\rangle f(x)|_{x=0}, \quad (2.24)$$

e

$$m_2 = \left\langle \prod_{\vec{\delta}_1}^{z-z'-1} (\alpha_x + \sigma_{(i+\vec{\delta}_1)} \beta_x) \prod_{\vec{\delta}_2}^{z-z'-1} (\alpha_y + \sigma_{(i+\vec{\delta}_2)} \beta_y) \prod_{\vec{\delta}}^{z'} (\alpha_{x+y} + \sigma_{\vec{\delta}} \beta_{x+y}) \right\rangle g(x, y)|_{x,y=0} \quad (2.25)$$

onde $\alpha_\nu = \cosh(KD_\nu)$, $\beta_\nu = \sinh(KD_\nu)$, $\alpha_{x+y} = \cosh(K(D_x + D_y))$ e $\beta_{x+y} = \sinh(K(D_x + D_y))$

Para cada tipo de rede, as Eqs.(2.24) e (2.25) envolvem todas as correlações de múltiplos spins, sendo assim, de difícil manipulação matemática (exceto para a cadeia linear) para tratar essas correlações, pois precisamos resolver um conjunto infinito de equações acopladas, deparando-se assim com um problema de **muitos corpos**, que depende de alguma aproximação para o desacoplamento. Em teoria de campo este acoplamento de funções de correlação é conhecida como equações de Dobrushim-Lanford-Ruelle[23]. A aproximação de **ordem zero** (Zernike, *Random phase approximation* - RPA) é expressa por

$$\langle \sigma_i \sigma_j \sigma_k \dots \rangle \simeq \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \langle \sigma_k \rangle \dots \quad (2.26)$$

com $i \neq j \neq k \neq \dots$, é a mais utilizada na literatura, onde despreza-se as correlações de multi-spin em sítios diferentes, mas em compensação com um tratamento rigoroso devido a identidade de Van der Waerden que trata exatamente as auto-correlações através das médias $\langle \sigma_1^{2n+1} \rangle = \sigma_1$ e $\langle \sigma_1^{2n} \rangle = 1$, ao contrário da teoria de campo médio que além da aproximação (2.26) aproxima $\langle \sigma_1^p \rangle \simeq \langle \sigma_1 \rangle^p$.

Assim, aplicando a aproximação (2.26) nas Eqs.(2.24) e (2.25), ficaremos

$$m_1 = (\alpha_x + m_1 \beta_x)^z f(x)|_{x=0} \quad (2.27)$$

e

$$m_2 = (\alpha_x + m_2\beta_x)^{z-z'-1}(\alpha_y + m_2\beta_y)^{z-z'-1}(\alpha_{x+y} + m_2\beta_{x+y})^{z'}g(x, y)|_{x,y=0} \quad (2.28)$$

É importante notar que, a função $f(x)$ é ímpar sendo o mesmo para a função $g(x, y)$, portanto, vale a propriedade $f(-x) = -f(x)$ e $g(-x, -y) = -g(x, y)$. Então, para qualquer combinação de operadores diferenciais envolvidos nas Eqs.(2.25) e (2.24), ficam apenas as contribuições ímpares.

Para efeito de ilustração do método, iremos desenvolver para o caso de uma rede quadrada ($z = 4$ número de coordenação) para o aglomerado com um spin e, representar por $\sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \sigma_5$ os spins externos ao aglomerado. Sendo $f(x)$ uma função ímpar e usando a propriedade do operador projeção (representado aqui por $\hat{\varphi}$), dada por $\hat{\varphi}_{par}f(x)|_{x=0} = 0$, temos a Eq.(2.24) expandida na forma:

$$m = A_1(K)m + A_3(K)m^3 \quad (2.29)$$

sendo

$$A_1 = 4\alpha_x\beta_x^3f(x)|_{x=0} = \frac{1}{2}[f(4K) + 2f(2K)] \quad (2.30)$$

e

$$A_3 = 4\alpha_x^3\beta_xf(x)|_{x=0} = \frac{1}{2}[f(4K) - 2f(2K)]. \quad (2.31)$$

Podemos, ainda, reescrever a Eq.(2.29) na forma

$$m = \sqrt{\frac{1 - A_1(K)}{A_3(K)}} \quad (2.32)$$

Nesta aproximação em que a magnetização é obtida de modo autoconsistente pela expressão $m = \psi(m, T)$, os expoentes críticos são todos clássicos. A temperatura crítica ($m > 0$) é obtida resolvendo-se através de métodos numéricos para $A_1(T_c) = 1$, cujo valor encontrado foi $\frac{k_b T_c}{J} \simeq 3.087$. De forma geral, outras redes podem ser tratadas no esquema EFT usada aqui, assim temos para a Eq.(2.24) a forma

$$A_1 = z\alpha_x^{z-1}\beta_x f(x)|_{x=0} = 1, \quad (2.33)$$

onde para cada estrutura, de rede, especificada nesta aproximação com apenas o valor da variável z , obtemos o valor da temperatura crítica, que nesta abordagem não é capaz de distinguir a topologia da rede, isto é, temos $\frac{K_B T_c}{J} \simeq 3.087$ para redes quadrada e Kagomé, sendo assim, uma deficiência do método (EFT-1).

À medida que o número de coordenação z aumenta, o sistema fica mais correlacionado e, portanto, necessitamos de mais energia térmica ($K_B T_c$) para destruir a ordem magnética, conseqüentemente T_c cresce monotonicamente. No limite de coordenação infinita ($z \rightarrow \infty$) teremos um dado sítio da rede cristalina interagindo, em média com mesma energia, com infinitos sítios da rede, o que equivale ao modelo de Ising com interação de longo-alcance (campo-médio), desta maneira espera-se o limite $\frac{k_b T_c}{zJ} \rightarrow 1$ quando $z \rightarrow \infty$. Na Tabela 2.1, observamos o aumento de T_c gradualmente com o crescimento do valor do número de coordenação (z).

Um problema de EFT em aglomerados com $N = 1$ spin é não distinguir a topologia da rede, apresentando resultados discrepantes para a temperatura crítica T_c , pois a equação $A_1(T_c) = 1$ depende apenas do número de coordenação z . Por exemplo, para a rede quadrada temos $\frac{k_b T_c}{J} \simeq 2.269$ e para a rede kagomé $\frac{k_b T_c}{J} \simeq 2.143$, sendo que ambas têm número de coordenação $z = 4$. Para mais resultados para T_c no modelo de Ising 2d para diversas topologias são encontrados na Ref[1].

No limite $m_2 \rightarrow 0$, da Eq.(2.28) obtemos

$$A_1^{z,z'}(K_c) = 1 \quad (2.34)$$

sendo

$$A_{1z,z'}(K) = \left[2(z - z' - 1)\alpha_x^{z-z'-2}\alpha_y^{z-z'-1}\beta_x + z'\alpha_y^{z-z'-1}\alpha_{xy}^{z'-1}\beta_{xy} \right] g(x, y)|_{x,y=0} \quad (2.35)$$

Resolvendo numericamente a Eq.(2.35), fixando os valores de z e z' , obtemos as temperaturas críticas reduzidas K_c^{-1} para diversas topologias de redes, e que estão

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	1	5.073	5.039	4.511

Tabela 2.1: Valores da temperatura crítica reduzida $K_B T_c / J$ para várias redes 2d e 3d no modelo de Ising -1/2

esquematizadas na Figura (2.3). Na Tabela 2.1 apresentamos os resultados de K_c^{-1} obtidos por EFT-1 e EFT-2 (teorias de campo efetivo para um aglomerado com um ou dois spins respectivamente), que foram comparadas com as soluções exatas em redes 2d e simulação de Monte Carlo para a rede cúbica simples (3d). Observamos claramente a superioridade de EFT-2, do ponto de vista qualitativo, quando deparamos com análise da topologia da rede. Porém, os resultados quantitativos não estão em boa concordância com os valores rigorosos. Desejando, ainda, aprimorar os resultados de K_c^{-1} na abordagem de EFT, aglomerados maiores devem ser utilizados, mas a principal dificuldade inerente ao método está associada aos critérios de escolha dos aglomerados com mais de dois spins, de forma a garantir a convergência do método. Como regra geral, procura-se escolher a geometria dos aglomerados de modo a refletir a simetria da rede em análise, o que de alguma forma, introduz certo grau de arbitrariedade na escolha. A escolha da geometria dos aglomerados maiores não garante, a priori, a convergência do método. A fim de explicação, escolhemos um aglomerado com $N = 4$ spins com uma geometria quadrática para analisar a criticalidade do modelo de Ising-1/2 na rede quadrática. O cálculo do parâmetro de ordem a partir da Eq.(2.7) é feita utilizando $O(\Omega) = \frac{1}{4}(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4)$, e realizando os mesmos procedimentos anteriores para aglomerados com $N = 1$ e $N = 2$ spins. Como resultado desta análise obtém-se $K_c^{-1} \simeq 2.904$, mostrando, em comparação com os valores obtidos usando EFT-1 e EFT-2 apresentados na Tabela 2.1, uma

convergência lenta em direção ao valor exato $K_c^{-1} \simeq 2.269$, aumentando o tempo computacional.

Essas aproximações (EFT-1 e EFT-2) têm sido aplicadas de maneira sistemática em uma grande variedade de sistemas Ising, como, por exemplo, sistemas competitivos [24]; incluindo vidro de spin [25], sistemas desordenados[26], efeitos de superfície[27], sistemas amorfo[28], modelo Blume-Emery-Griffith (BEG)[29], modelo de Potts[30], etc.

Do ponto de vista fenomenológico, cada metodologia tem suas características próprias. Isso faz com que os obstáculos de cada uma sejam intrinsecamente relacionados a ela, as quais atingidas se revelam de difícil transposição. Nesse contexto, interpretamos como um método promissor, todo aquele que suporta um esquema de aplicação sistemática. Se além disso, o método pode ser aplicado a uma certa variedade de problemas, então estes métodos de aproximação sucessivas devem ser usados.

Nessa linha de abordagem algum progresso foi conseguido desde Kaneyoshi e colaboradores[31] com a introdução de campo de reação de Onsager até Taggart e Fittipaldi[32] com a aproximação do tripleto médio, obtendo, respectivamente, $K_c^{-1} = 2.885$ [$K_c^{-1} = \frac{2}{\ln(\frac{z}{z-2})}$ para número de coordenação arbitrário z , mesmo resultado da aproximação de Bethe-Peierls] e $K_c^{-1} = 2.490$ numa rede quadrada ($z = 4$), o que de certa forma temos uma ligeira melhoria dos resultados em comparação com a solução exata $K_c^{-1} = 2.269$. No próximo capítulo desenvolveremos uma nova teoria de campo efetivo, onde efeitos de correlações serão levados em consideração no uso de aglomerados com $N = 2$, e aplicaremos em modelos desordenados.

2.3.2 Teoria de campo efetivo no modelo de Heisenberg

Contrário ao modelo de Ising, onde os casos ferromagnéticos (F) e antiferromagnéticos (AF) são equivalentes, agora no modelo de Heisenberg quântico de spin-

1/2 os resultados do sinal da interação de J, ou seja, os casos F e AF não são equivalentes. Partimos do modelo ferromagnético descrito pelo seguinte Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = K_{ij} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j \quad (2.36)$$

onde $K_{ij} = \beta J_{ij}$, $\langle i,j \rangle$ denota a soma sobre os sítios primeiros vizinhos e $\vec{\sigma}_i$ é o operador spin de Pauli no sítio i .

O Hamiltoniano (2.36) para o caso do aglomerado com dois spins fica da forma utilizando a aproximação axial²

$$-\beta\mathcal{H}_{12} = K_{12}\sigma_{1A}^z \cdot \sigma_{2B}^z + a_{1B}\sigma_{1A}^z + a_{2A}\sigma_{2B}^z \quad (2.37)$$

onde $a_{n\nu} = K_{12} \sum_{\vec{\delta}}^{z-1} \sigma_{(n+\vec{\delta})\nu}^z$, z é o número de cordenação, $\sigma_{i\nu}^z$ é o operador de spin na subrede $\nu = A$ ou B no sítio i .

Para esse modelo estamos interessados, também, em obter a magnetização. Assim, de acordo com a identidade de Callen e Suzuki[16], a magnetização média da subrede A , $m_A = \langle \sigma_{1A}^z \rangle$ é dada por:

$$m_A = \left\langle \frac{Tr_{12} [\sigma_{1A}^z e^{(-\beta\mathcal{H}_{12})}]}{Tr_{12} [e^{-\beta(\mathcal{H}_{12})}]} \right\rangle \quad (2.38)$$

Substituindo (2.37) na Eq.(2.38), podemos reescrever a expressão da magnetização sa subrede A por

$$m_A = \left\langle \frac{\partial \ln Z}{\partial a_{1B}} \right\rangle \quad (2.39)$$

sendo a função de partição dada por

$$Z = Tr_{12} [e^{-\beta\mathcal{H}_{12}}] \quad (2.40)$$

²considera-se a direção privilegiada z para interações fora do aglomerado

Para obtermos a função de partição Z , temos que diagonalizar o Hamiltoniano (2.37). Com este propósito devemos obter o traço do operador $e^{-\beta\mathcal{H}_{12}}$ e, primeiramente, escolher uma base para escrever o hamiltoniano (2.37). Assim escolhemos a base formada pelos autovetores ($|++\rangle = |1\rangle$, $|+-\rangle = |2\rangle$, $| - + \rangle = |3\rangle$ e $|--\rangle = |4\rangle$). Definindo os elementos da matriz

$$\mathcal{H}_{ij} = \langle ij|\mathcal{H}_{12}|i'j'\rangle \quad (2.41)$$

para o Hamiltoniano

$$-\beta\mathcal{H}_{12} = K_{12}[(\sigma_A^x \cdot \sigma_B^x + \sigma_A^y \cdot \sigma_B^y + \sigma_A^z \cdot \sigma_B^z) + a_{1B}\sigma_{1A}^z + a_{2A}\sigma_{2B}^z] \quad (2.42)$$

Obtemos a forma matricial

$$-\beta\mathcal{H}_{12} = \begin{bmatrix} -K_{12} + a_{2A} + a_{1B} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -K_{12} + a_{2A} - a_{1B} & -2K_{12} & 0 \\ 0 & -2K_{12} & K_{12} - a_{2A} + a_{1B} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -K_{12} - a_{2A} - a_{1B} \end{bmatrix}$$

Diagonalizando a matriz acima obtemos a função de partição da forma:

$$Z = e^{-K_{12}} \cosh(a_{2A} + a_{1B}) + e^{K_{12}} \cosh(W(a_{2A}, a_{1B})) \quad (2.43)$$

onde $W(a_{2A}, a_{1B}) = \sqrt{4K_{12}^2 + (a_{2A} - a_{1B})^2}$.

Utilizando a equação (2.43) na (2.39), temos o valor da magnetização escrita da forma

$$m_A = \left\langle \frac{\sinh(a_{2A} + a_{1B}) + \Gamma(a_{2A}, a_{1B}) \sinh(W(a_{2A}, a_{1B}))}{\cosh(a_{2A} + a_{1B}) + \Gamma(a_{2A}, a_{1B}) \cosh(W(a_{2A}, a_{1B}))} \right\rangle \quad (2.44)$$

onde $\Gamma(a_{2A}, a_{1B}) = e^{2K_{12}} \frac{(a_{2A} - a_{1B})}{W(a_{2A}, a_{1B})}$.

Utilizando a técnica do operador diferencial da equação (2.19) e a identidade Van der Waerden, reescrevemos a Eq.(2.44) por

$$m_a = \left\langle \prod_{i \neq 1,2}^{z-1} (\alpha_x + \sigma_i^z \beta_x) \prod_{j \neq 1,2}^{z-1} (\alpha_y + \sigma_j^z \beta_y) \right\rangle g(x, y)|_{x,y=0} \quad (2.45)$$

sendo

$$g(x, y) = \frac{\sinh(x+y) + \Gamma(x, y) \sinh(W(x, y))}{\cosh(x+y) + \Gamma(x, y) \cosh(W(x, y))} \quad (2.46)$$

Usando a aproximação (2.26) na Eq.(2.45), ficaremos

$$m_a = (\alpha_x - m_B \beta_x)^{z-1} (\alpha_y - m_A \beta_y)^{z-1} g(x, y)|_{x,y=0} \quad (2.47)$$

A equação de estado (2.47) é geral para os casos F e AF. No caso F temos que usar a condição de contorno $m_A = m_B = m$, enquanto que para o caso AF $m_A = -m_b = m$ e devemos trocar K_{12} por $-K_{12}$ nas expressões. Para uma rede cúbica simples ($z = 6$) teremos a seguinte equação de estado:

$$m = A_1 m + A_3 m^3 + A_5 m^5 + A_7 m^7 + A_9 m^9 \quad (2.48)$$

sendo A_n expresso na forma

$$A_n = \frac{5!}{n!(5-n)!} [\alpha_x^{(5-n)} \beta_x^n \alpha_y^{(4+n)} - \alpha_y^{(5-n)} \beta_y^n \alpha_x^{(4+n)}] \quad (2.49)$$

No limite $m \rightarrow 0$ na Eq.(2.48) obtemos a temperatura crítica T_c (F) e T_N (AF) resolvendo numericamente a seguinte expressão:

$$A_1 = 5(\alpha_x^4 \beta_x \alpha_y^5 - \alpha_y^4 \beta_y \alpha_x^5) g(x, y)|_{x,y=0} = 1 \quad (2.50)$$

Apesar dessa técnica de campo efetivo ser adequada para tratar diagramas de fase, assim como outras técnicas de campo efetivo, apresenta expoente crítico clássico. Resolvendo a Eq.(2,51) obtemos o valor da temperatura crítica $T_N = 4.95$, enquanto que para a temperatura crítica T_c , encontra-se $T_c = 4.89$, concordando com a relação $T_N > T_c$ obtido por outros métodos mais sofisticados [[20],[21],[23],[15],[17],[18]].

Por exemplo, simulação de Monte Carlo obteve $T_c \simeq 3.360$ e $T_N \simeq 3.593$. Os resultados de EFT-2 para o caso F foi desenvolvida por Idogaki e Uryû[4], enquanto, o caso AF por Araújo, Neto e de Sousa[5], no próximo capítulo desenvolveremos uma nova metodologia.

Referências Bibliográficas

- [1] R.J. Baxter, *Exactly solved models in statistical mechanics* (Academic Press, New York, 1982)
- [2] J. Smart, *Effective Field Theories of Magnetism* (Sounders, Philadelphia, 1996)
- [3] R. Honmura e T. Kaneyoshi, *J. Phys, C* 12, 3979 (1979)
- [4] T. Idogaki e N. Uryu, *Physica A*, 181, 173 (1992)
- [5] I.G. Araújo, J.C. Neto e J.Ricardo de Sousa, *Physica A*, 260, 150 (1998)
- [6] P.W.Anderson, *Science*, 235, 1196 (1987)
- [7] G.S.Rushbrooke e P.J.Wood, *Mol. Phys.*, 11, 409 (1967)
- [8] He-Ping Ying e autores, *Phys. Lett. A* 183, 441 (1993)
- [9] M.S.Malkivic e H.Q.Ding, *Phys. Lett. B* 43, 3562 (1991)
- [10] M.Takahashi, *Phys. Rev B*, 40, 2494 (1989)
- [11] C.J.Hamer, Z.Weihong e P.Arndt, *Phys. Rev B*, 46, 6276 (1992)
- [12] G.Z.Wei e A.Du, *Phys. Status Solid B*, 175, 237 (1993)
- [13] S.Chacrabarty, B.I.Halperin e D.Nelson, *Phys. Rev Lett.*, 60, 1057 (1988)
- [14] J.Ricardo de Sousa e J.A.Plascak, *Phys. Rev. Lett. A*, 237, 66 (1997)

- [15] J.Ricardo de Sousa e Ijanilio G. Araujo, *J.Mag.Mag. Mat.*, 202, 231 (1997)
- [16] N.Suzuki, *Phys. Lett*, 19, 267 (1965),H.B.Callen, *Phys. Lett*, 4, 161 (1963)
- [17] N. Matsudaira, *J. Phys Soc. Jpn*, 35, 1493 (1973)
- [18] B. Frank e O. Mitran, *J. Phys C*, 10, 2641 (1977); Ibid, *J. Phys C*, 11, 2087 (1978); O. Mitran, *J. Phys C*, 13, L201 (1980); B. Frank , *J. Phys C*, 11, 2095 (1978)
- [19] H. I. Zhang e A. K. Rajagopal, *J. Phys C*, 12, L277 (1979); H. I. Zhang, *J. Phys C*, 14, 57 (1981); H. I. Zhang B.I. Min, *J. Phys C*, 14, 1769 (1981); B. I. Min e H.I.Zhang, *J. Phys C*, 14, 1779 (1981)
- [20] Y. Tanaka e N. Uryû, *Phys. Rev. B*, 21, 1994 (1980)
- [21] D. C. Mattis, *Phys. Rev. B*, 19, 4737 (1979)
- [22] T. Balcerzak, *J. Mag. Magn. Mat.*, 246, 213 (2002)
- [23] R,L. Dobrushin , *Theor. Prob. Appl.*, 13, 197 (1969); O.E. Lanford e D. Ruelle , *Comm. Math. Phys*, 13, 194 (1969)
- [24] D.F. de Albuquerque, *Tese de doutorado*, UFPE (1996)
- [25] J.R.L. de Almeida,I. P. Fittipaldi e F. C. Sá Barreto, *J. Phys C*, 14, 103 (1981); T. Kaneyoshi, *Phys Rev. B*, 24, 2693 (1981)
- [26] E. F. Sarmiento e C. Tisallis, *Phys Rev. B*, 27, 5784 (1983); T. Kaneyoshi, I. Tamura e R. Honmura *Phys Rev. B*, 29, 2769 (1984)
- [27] I. Tamura, E. F. Sarmiento, I. P. Fittipaldi e T. Kaneyoshi *Phys. Stat. Sol. B*, 118, 409 (1983)
- [28] T. Kaneyoshi e I. P. Fittipaldi, *Phys. Stat. Sol. B*, 105, 629 (1981)

- [29] A. F. Siqueira e I.P. Fittipaldi, *Phys. Rev. B*, 31, 6092 (1985); *Phys. Rev. B*, 119, K31 (1983)
- [30] R. Honmura, E. F. Sarmiento, C. Tsallis e I.P. Fittipaldi, *Phys. Rev. B*, 29, 2761 (1984)
- [31] T. Kaneyoshi, I.P. Fittipaldi, R. Honmura e T. Manabe, *Phys. Rev. B*, 24, 481 (1981)
- [32] G. B. Taggart e I.P. Fittipaldi, *Phys. Rev. B*, 25, 7026 (1982)

Capítulo 3

Modelo de spin diluído: Nova teoria de campo efetivo

3.1 Novas Teorias de campo efetivo

Muitas são as formas alternativas para melhoria da temperatura crítica com a implementação da técnica do operador diferencial (ou de projeção), onde o caminho escolhido tem sido o crescimento no tamanho do aglomerado e também maneiras diferentes de descoplar as funções de correlação. No caso de aglomerado com $N = 1$ spin, do capítulo anterior temos que a magnetização do modelo de Ising-1/2 é dado por

$$m_1 = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^z (\alpha_x + \sigma_{1+\vec{\delta}} \beta_x) \right\rangle \tanh(x)|_{x=0} \quad (3.1)$$

Uma possível generalização da Eq.(2.7) para o valor médio da grandeza tipo $\Omega' \mathcal{O}(\Omega)$, onde Ω' não contém a variável do aglomerado Ω , é dada por

$$\langle \Omega' \mathcal{O}(\Omega) \rangle = \left\langle \Omega' \frac{\text{Tr}_{\Omega} \{ \mathcal{O}(\Omega) e^{-\beta \mathcal{H}_{\Omega}} \}}{\text{Tr}_{\Omega} e^{-\beta \mathcal{H}_{\Omega}}} \right\rangle \quad (3.2)$$

Por exemplo, para o modelo de Ising-1/2 (2.9), para o aglomerado $N = 1$ spin

teremos

$$\langle \{i\} \sigma_i \rangle = \langle \{i\} \tanh K \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{i+\vec{\delta}} \rangle \quad (3.3)$$

onde $\{i\}$ representa qualquer função das variáveis de spin em sítios diferentes do sítio i e $\vec{\delta}$ é o vetor primeiro vizinho da rede cristalina.

Na utilização da técnica do operador diferencial (3.3) ficará reescrita por

$$\langle \{i\} \sigma_i \rangle = \langle \{i\} \prod_{\vec{\delta}}^z [\alpha_x + \sigma_{i+\vec{\delta}\beta_x}] \rangle \tanh(x)|_{x=0} \quad (3.4)$$

Vamos utilizar, sem perda de generalidade, um aglomerado com $N = 1$ spin na rede quadrada ($z = 4$). Nesta configuração o sítio denotado por i corresponde ao spin central σ_0 e de forma análoga, a equivalência para os sítios e spins externos primeiros vizinhos é da forma $\{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4\} \equiv \{i\}$. Utilizando a Eq.(3.4), e a técnica do operador diferencial, obtemos

$$\langle \{i\} \sigma_i \rangle = \frac{A_1(K)}{4} \langle \{i\} \sigma_i \rangle + A_3(K) \langle \frac{\{i\}}{4} (\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 + \sigma_1 \sigma_2 \sigma_4 + \sigma_3 \sigma_4 \sigma_1 + \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4) \rangle \quad (3.5)$$

onde $A_1 = \frac{1}{8}(\tanh(4K) + 2\tanh(2K))$ e $A_3 = 2(\tanh(4K) - \tanh(2K))$.

A Eq.(3.5)¹ é exata e gera um conjunto infinito de correlações entre variáveis de spin sendo, assim, de muito difícil de ser tratada exatamente.

Escolhendo $\{i\} = 1$ na Eq.(3.5), encontramos uma expressão para a equação de estado dada por

$$m = A_1(K)m + A_3(K)\tau \quad (3.6)$$

sendo $\tau \equiv \langle \sigma_i \sigma_j \sigma_n \rangle$ com $i \neq j \neq n = 1, 2, 3, 4$ onde usamos invariância translacional.

Escolhendo $\{i\} = \sigma_2$ na Eq.(3.5), obtemos

¹Na aproximação de campo médio fazemos $\sigma_i \simeq \langle \sigma_i \rangle$, ou seja, desprezamos as flutuações de spins. Mesmo utilizando a aproximação na técnica do operador diferencial, os resultados são superiores ao de campo médio. Para o caso unidimensional, obtemos $T_c = 0$ e para campo médio $T_c \neq 0$

$$\langle \sigma_0 \sigma_2 \rangle = \frac{A_1(K)}{4} \langle \sigma_2 \sigma_i \rangle + A_3(K) \langle \frac{\sigma_2}{4} (\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 + \sigma_1 \sigma_2 \sigma_4 + \sigma_3 \sigma_4 \sigma_1 + \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4) \rangle \quad (3.7)$$

usando a propriedade de cinemática de spin-1/2, i.e., $\sigma_i^2 = 1$, e a propriedade de invariância translacional, ficaremos

$$\langle \sigma_0 \sigma_2 \rangle = \frac{A_1(K)}{4} (3(\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle + 1)) + \frac{A_3(K)}{4} (3(\langle \sigma_0 \sigma_2 \rangle + \langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 \rangle)) \quad (3.8)$$

Para melhoria da temperatura crítica T_c , Kaneyoshi e colaboradores [1] propuseram uma nova aproximação, utilizando um fato já conhecido anteriormente[2] na qual as flutuações em um sítio são proporcionais às flutuações de um sítio vizinho. Considerando assim, que a flutuação na variável σ_j de spin no sítio j é $\sigma_j - \langle \sigma_j \rangle$, observa-se que esta flutuação será proporcional a flutuação na variável $\sigma_i (i \neq j)$, isto é, $\sigma_j - \langle \sigma_j \rangle = \lambda(\sigma_i - \langle \sigma_i \rangle)$, onde λ representa uma reação de um spin devido a presença do vizinho conhecido como campo de reação de Onsager.

Usando o fato que $\sigma_j = \lambda \sigma_o + (\lambda - 1)m$ ($m = \langle \sigma_o \rangle$) nas Eqs.(3.6) e (3.8) obtemos duas expressões autoconsistentes, para uma dada temperatura T , como funções de m e λ . Na criticalidade temos que $m \rightarrow 0$, assim, sendo resolvendo neste limite essas equações encontramos T_c e λ_c dados por

$$\frac{K_B T_c}{J} = \frac{2}{\ln \left(\frac{z}{z-2} \right)} \quad (3.9)$$

e

$$\lambda_c = \frac{1}{z-1} \quad (3.10)$$

onde λ_c equivale a flutuação da função de correlação de dois spins na temperatura crítica T_c . O resultado para T_c dada pela Eq.(3.9) é equivalente ao valor obtido na aproximação de Bethe-Pierls.

Taggart e Fittipaldi[4] sugeriram uma nova alternativa de tratar as funções de correlação na qual denomina-se de "aproximação de tripleto médio", onde, escolhe-

se $\{i\} = \text{coth}K \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{i+\vec{\delta}}$ na Eq.(3.3), de modo que o segundo termo se transforma na unidade, ou seja,

$$1 = \langle \sigma_i \text{coth} K \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{i+\vec{\delta}} \rangle \quad (3.11)$$

Usando os mesmos procedimentos da técnica do operador diferencial para obtenção da Eq.(3.6), podemos reescrever a Eq.(3.11) numa rede quadrada ($z = 4$) na forma

$$1 = 4\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle A'_1(K) + 4\langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 \rangle A'_3(K), \quad (3.12)$$

onde $A'_1(K) = \frac{1}{8}[\text{cotgh}(4K) + 2\text{cotgh}(2K)]$ e $A'_3(K) = \frac{1}{8}[\text{cotgh}(4K) - 2\text{cotgh}(2K)]$

Considerando o valor médio da variável σ_o , obtemos

$$m = \langle \sigma \rangle = 3\tau A'_1(K) + Q A'_3(K) \quad (3.13)$$

sendo σ_4 , $\tau \equiv \langle \sigma_0 \sigma_1 \sigma_4 \rangle$ e $Q \equiv \langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 \rangle$. Na aproximação do tripleto médio, Taggart e Fittipaldi, asumiram que próximo da criticalidade ($T \simeq T_c$) a função de correlação Q tende a zero mais rapidamente do que τ , portanto, usando Eqs.(3.6) e (3.13) obtemos a temperatura crítica resolvendo numericamente a expressão

$$A_3(K_c) = 3A'_1(K_c) [1 - 3A_1(K_c)] \quad (3.14)$$

que foi encontrado $T_c = K_c^{-1} = 2.680$.

A ponto de melhorar os resultados para T_c , tendo em vista que todos os resultados anteriores foram obtidos para um aglomerado com um spin no modelo de Ising, Siqueira[5] na sua tese de doutorado propôs uma nova teoria de campo efetivo, onde trabalhou com o aglomerado contendo dois spins.

Conforme foi discutido no capítulo 2. Nesta metodologia, a topologizada rede foi incorporada através da especificação do número de coordenação z e vizinhos comuns z' . Assim sendo, obteve-se as seguintes temperaturas críticas: rede Kagomé ($z = 4, z' = 1$) $T_c = 2.923$ (exato $T_c = 2.143$), Quadrada ($z = 4, z' = 0$) $T_c = 3.025$

(exato $T_c = 2.269$), Triangular ($z = 6, z' = 2$) $T_c = 4.950$ (exato $T_c = 3.641$) e Cúbica simples ($z = 6, z' = 0$) $T_c = 5.039$ (exato $T_c = 4.511$).

Na próxima seção iremos desenvolver uma nova teoria de campo efetivo, usando como ponto de partida a expressão da identidade de Callen-Suzuki em aglomerado com $N = 2$ spins. Aplicaremos este novo formalismo em modelos de spins com diluição por ligação, mas por enquanto faremos uma breve revisão de sistemas desordenados

3.2 Noções básicas de desordem

Vários sólidos, ou encontrados na natureza, ou sintetizados em laboratório, sempre apresentam um certo grau de impureza ou imperfeições quando comparados com uma estrutura cristalina perfeita, ou seja, presença de desordem na rede cristalina.

De maneira geral podemos estabelecer três tipos de desordem:

a) Desordem substitucional

Neste tipo de desordem, átomos do elemento A num cristal perfeito é substituído por um outro do tipo B, na hipótese de não haver nenhum distúrbio na rede cristalina, formando uma liga do tipo A_pB_{1-p} (onde p é a concentração de átomo A). Este fenômeno, o qual ocorre para muitos elementos diferentes em metais, semicondutores e cristais iônicos é de grande importância na metalurgia e em outros campos da ciência dos materiais. A mais simples suposição que se pode fazer quanto a distribuição dos átomos do tipo B é que ela seja aleatória nos sítios da rede cristalina. No entanto, tal suposição da independência estatística da ocupação dos sítios é não realística, por causa dos termos de interação na energia coesiva, isto é, a energia livre do sistema depende da distribuição dos átomos do tipo B em relação aos átomos do tipo A e vice-versa. A impureza substitucional pode também ser um ponto de defeito da rede, tal como uma vacância. Embora fisicamente não é possível colocar uma alta concentração de vacâncias ao acaso num sólido cristalino, tem-se usado

isto como um modelo rudimentar de uma fase fluida.

Desordem topológica

Neste caso, o arranjo atômico não é uma rede ordenada, no entanto algumas propriedades do material, tais como a distribuição da carga em cada sítio, satisfazem a relação $F(\vec{r} + \vec{R}_i) = F(\vec{r})$, onde \vec{R}_i refere-se à posição do núcleo do átomo i no espaço real.

Desordem contínua

Este é o caso mais alto de desordem, nela a distribuição dos potenciais atômicos é totalmente aleatória.

Dentre as desordem acima mencionadas, nos deteremos a estudar o caso da desordem substitucional em sistemas magnéticos, denotado na literatura por um material magnético diluído. Dependendo da concentração de átomos não-magnéticos, a mistura pode atingir um limite em que a impureza pode predominar e a ordem magnética do sistema diluído é destruída. Quanto a distribuição de átomos na rede cristalina podemos distinguir dois tipos: a) temperada (*quenched*), onde os átomos magnéticos e não magnéticos situam-se ao acaso nos sítios de uma rede cristalina, isto é, a probabilidade que um dado sítio esteja ocupado por um spin é independente de outras ocupações e permanece constante; b) recozida (*annealed*), no qual a probabilidade de distribuição dos átomos magnéticos é governando pela mecânica estatística e varia com a temperatura e o campo magnético (e outros parâmetros macroscópicos-vínculos), geralmente os sítios são ocupados de tal forma que a energia livre seja mínima.

A natureza da desordem pode também ser classificada em dois tipos: a desordem por **ligações** (*bond*), onde ligações magnéticas conectando sítios vizinhos são quebradas por introdução de algum tipo de íon diamagnético que neutraliza o *overlap* das funções da onda entre os sítios (destruição do *exchange*) (ver figura 3.1), por exemplo, o composto $\text{Co}(\text{S}_p\text{Se}_{1-p})_2$, no qual os átomos de cobalto (Co) interagem entre si via os átomos de enxofre (S) e selênio (Se) .

Outro tipo que temos é a desordem por **sítios** (*site*), onde átomos magnéticos

são substituídos por não magnéticos (ver figura 3.2), como exemplo temos vários compostos, tais como $Mn_pZn_{1-p}F_2$, $Rb_2Mn_pFe_{1-p}F_4$, $Fe_pMg_{1-p}Cl_2$, $Rb_2Co_pMg_{1-p}F_4$, $K_2Mn_pFe_{1-p}F_4$, etc.

A grande motivação de se estudar sistemas desordenados, reside no fato de ter se tornado possível controlar, de maneira adequada, as propriedades físicas dos materiais através de várias técnicas de dopagem de defeitos. No estudo das propriedades magnéticas de sistemas diluídos, o maior interesse tem sido dado ao estudo do comportamento da temperatura crítica como uma função da concentração de íon magnético. Fisicamente, esperamos que a medida que diminuimos a concentração, a ordem magnética é gradativamente enfraquecida com a introdução de cada vez mais íons não-magnéticos sobre a rede cristalina.

Estudos teóricos da magnetização em sistemas ferromagnéticos diluídos começaram no início da década de 60 com os trabalhos pioneiros de Sato, Arrott e Kikuchi[6], Elliott[7] e Smart[8]. Até então os resultados para estudar estes sistemas diluídos eram obtidos via aproximação de campo médio (MFA), onde foi obtido uma tempe-

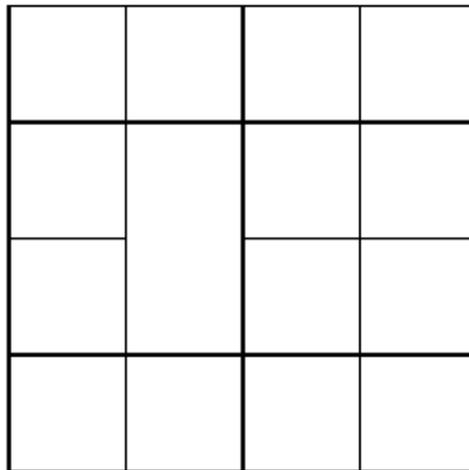


Figura 3.1: *Esquema ilustrativo de uma desordem por ligação*

ratura crítica proporcional à concentração p , isto é,

$$\frac{k_B T_c}{J} = zp, \quad (3.15)$$

onde z é o número de coordenação. O resultado obtido por MFA prediz, errôneamente, um valor para a temperatura crítica mesmo para pequenas concentrações de átomos magnéticos ($p \ll 1$), o que é contrário à intuição e aos resultados experimentais. Espera-se que para baixas concentrações a desordem é estabelecida e resultados experimentais indica que existe uma concentração crítica (p_c) na qual para $p \leq p_c$ temos $T_c(p) = 0$.

Teoricamente, usamos para estudar diluição por sítio em sistemas localizados (desordem temperada ou *quenched*) um Hamiltoniano, por simplicidade o modelo de Ising, que é dado por

$$\mathcal{H}_S = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \quad (3.16)$$

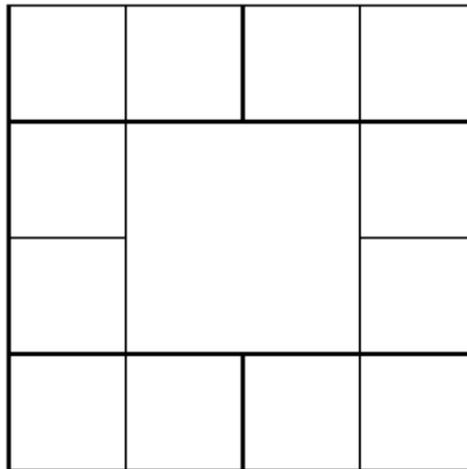


Figura 3.2: *Esquema ilustrativo de uma desordem por remoção*

onde S_i é a variável de spin do sítio i , e ϵ_i é a variável aleatória relacionada com a desordem no sítio i , que pode assumir valores 0 ou 1 implicando em

$$\langle \epsilon_i \rangle_c = p \quad (3.17)$$

onde $\langle \dots \rangle_c$ denota a média configuracional obtida através de uma certa distribuição de probabilidade $\mathcal{P}(\epsilon_i)$, p é a concentração de íon magnético e J a interação de troca.

Do ponto de vista teórico, resultados rigorosos de expansão em séries[9] mostram que a concentração crítica p_c independe da simetria do Hamiltoniano, ou seja, $p_c(\text{Ising}) = p_c(\text{Heisenberg})$, sendo, portanto, uma propriedade topológica da rede. No material diluído, a ocorrência de ordem magnética de longo alcance e transições de fase dependem da existência de um aglomerado (*cluster*) de tamanho infinito, e que a existência de tal *cluster* em função da concentração magnética é um problema puramente geométrico, e esperamos, assim, a dependência puramente topológica para o valor de p_c . Este aspecto geométrico na destruição do cluster infinito como uma função da concentração p (sítio ou ligação) é conhecido como **percolação**, e foi mostrado[10] que a concentração de percolação p_c corresponde exatamente ao mesmo valor da concentração crítica obtida em $T = 0$ do sistema diluído. Um resultado importante demonstrado na teoria de percolação[11] é que a concentração de ligações (p_c^b) não pode exceder à de sítios (p_c^s), isto é, $p_c^b \leq p_c^s$. Valores numéricos de p_c para percolação em várias redes estão especificados na Tabela 1-2 (ver Ref.[15]). Com exceção de um pequeno número de resultados exatos para redes bidimensionais, estes valores foram obtidos através de cálculos laboriosos de computação, tais como expansão em séries, simulação de Monte Carlo, etc.

Uma desordem por sítio tipo *quenched* acontece quando a média configuracional independe da média térmica que pode ser simulada (aproximação) pela distribuição de probabilidade $\mathcal{P}(\epsilon_i)$. Para o caso mostrado na Eq.(3.17) é comum definir a seguinte distribuição bimodal:

	Número de coordenação	Fração de agrupamento	p_c^b	p_c^s
Redes	z	n	p_c^b	p_c^s
hexagonal	3	0.61	0.653	0.70
quadrada	4	0.79	0.50	0.59
triangular	6	0.91	0.347	0.50
sc	6	0.52	0.25	0.31
bcc	8	0.68	0.18	0.24
fcc	12	0.74	0.12	0.20

Tabela 3.1: *Valores teóricos das concentrações de percolação por sítio e ligação em diversas topologias de redes*

$$\mathcal{P}(\in_i) = (1 - p)\delta(\in_i) + p\delta(\in_i - 1) \quad (3.18)$$

essa é a situação mais usual para magnetos diluídos reais.

Apesar da concentração crítica independe do modelo, a curva crítica $T_c(p)$ vai ser sensivelmente afetada pelo tipo de simetria do Hamiltoniano usada para descrever o sistema. Por exemplo, para concentração $p_c < p < 1$, devido a forte anisotropia do spin numa única direção, para uma rede 3d (por exemplo), o comportamento de $T_c(p)$ do modelo de Ising é maior do que o caso do modelo XY, e este por sua vez superior ao modelo de Heisenberg, isto é, $T_c^I(p) > T_c^{XY}(p) > T_c^H(p)$. Na região de baixas temperaturas (ou ao redor da concentração de percolação p_c), Stauffer[13] e Lubensky[14] mostraram que $T_c(p)$ para os modelos de Heisenberg e XY 3d decaem a zero segundo uma lei de potência na variável $p - p_c$, enquanto para o modelo de Ising temos uma lei logarítmica. Analisando o aspecto geométrico de uma rede 3d, temos que quando $p \rightarrow p_c$ o comprimento de correlação diverge segundo uma lei de potência ($T = 0$)

$$\xi_p \simeq (p - p_c)^{-\nu_p} \quad (3.19)$$

onde ν_p é o expoente crítico geométrico (independe do modelo de spins). Vamos

agora localizar-nos na concentração de percolação e diminuir gradativamente a temperatura à zero, segundo uma trajetória na fase desordenada. Para os modelos XY e Heisenberg, o comprimento de correlação térmico será expresso por ($P = P_c$)

$$\xi_{XY,H} \simeq T^{-\nu^{XY,H}} \quad (3.20)$$

onde $\nu^{XY,H}$ é o expoente crítico térmico. Por outro lado, em $p = p_c$ para o modelo de Ising, o comprimento de correlação tem um comportamento assintótico do caso de uma rede 1d, ou seja,

$$\xi_I \simeq \exp(-2J/k_B T) \quad (3.21)$$

No ponto crítico $p = p_c$ e $T = 0$ esperamos que ambos os comprimentos de correlações coincidam (i.e., $\xi_p = \xi$), justificando assim os comportamentos assintóticos, ou seja,

$$\begin{cases} T_c^{H,XY}(p) \approx (p - p_c)^{1/\phi_{H,XY}} \\ T_c^I(p) \approx \frac{1}{\ln(\frac{1}{p-p_c})}, \end{cases} \quad (3.22)$$

onde $\phi_{H,XY} = \frac{\nu^{XY,H}}{\nu_p} < 1$ é o expoente de *crossover* (para o modelo de Ising temos $\phi_I = \frac{\nu^I}{\nu_p} = 1$).

Devido as formas assintóticas diferentes, Eq.(3.23), temos que para os modelos XY e Heisenberg a declividade da curva $T_c(p)$ em $p = p_c$ é finita (i.e., $\left. \frac{dT_c(p)}{dp} \right|_{p=p_c} > 0$), enquanto para o modelo de Ising é infinita (i.e., $\left. \frac{dT_c(p)}{dp} \right|_{p=p_c} \rightarrow \infty$). A partir da linha crítica em torno de $p = 1$, podemos analisar como $T_c(p)$ varia com a introdução de pequenas quantidades de impurezas não magnéticas, definindo então a grandeza

$$S_1 = \frac{1}{T_c(1)} \left. \frac{dT_c(p)}{dp} \right|_{p=1}, \quad (3.23)$$

que depende do tipo de diluição e topologia da rede. Por exemplo, para o modelo de Ising numa rede quadrada[15] temos $S_1 = 1.349$ e 1.20 para os casos de diluição por ligação e sítio, respectivamente.

O expoente crítico $\nu(p)$ associado a divergência do comprimento de correlação ao longo da linha crítica $T_c(p)$ (i.e., $\xi(T, p) \simeq [T - T_c(p)]^{-\nu(p)}$) para um dado modelo

magnético não é em geral igual ao seu limite puro $\nu(1)$. O efeito da diluição pode afetar a classe de universalidade do sistema. Resultado exato no modelo de Ising numa rede quadrada (2d)[16, 17] tem indicado que $\nu(p) = \nu(1)$, mostrando que a aleatoriedade nas ligações não afeta a classe de universalidade. Para rede tridimensional não disponibilizamos de resultados exatos, mas argumentos fenomenológicos (conhecido como critério de Harris)[18] têm indicado que, se o expoente crítico do calor específico no limite puro de um modelo é negativo ($\alpha(1) < 0$) temos, para pequenas concentrações de defeitos ($p \simeq 1$), a igualdade entre os expoentes críticos $\nu(p) = \nu(1)$, que correspondem aos casos dos modelos XY e Heisenberg (ver Tabela 1-1). Para o modelo de Ising 3d, que segundo os resultados da tabela 3-1 $\alpha > 0$, a partir do critério de Harris teremos $\nu(p) \neq \nu(1)$. Watson[19] tem mostrado, ainda, que para este modelo de Ising 3d $\alpha(p) = \alpha(1) + 1$, $\beta(p) = \beta(1) + 1$ e $\gamma(p) = \gamma(1) + 1$.

Por outro lado, para o caso da desordem por sitio do tipo *annealed* acontece, quando calcula-se a média da variável de desordem $\{\epsilon_i\}$ da mesma forma que as das variáveis de spin $\{S_i\}$, isto é, obtém-se através do fator de Gibbs.

$$\rho \propto \exp \left[-\beta(\mathcal{H}_S - \mu \sum_i \epsilon_i) \right] \quad (3.24)$$

onde $\beta = \frac{1}{k_B T}$ e o potencial químico μ é a média de cada variável ϵ_i , ou seja, é a própria concentração p .

É também necessário distinguir entre desordem por sítio e por ligação (substituição), sendo possível, em princípio, que ambas as situações serem aplicadas para os casos *quenched* e *annealed*.

Para o caso da desordem magnética *quenched* por ligação, a forma típica do Hamiltoniano é dado por

$$\mathcal{H}_B = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \epsilon_{ij} S_i S_j \quad (3.25)$$

onde a variável de desordem ϵ_{ij} está agora associada com as ligações (de troca) e apresenta a seguinte distribuição de probabilidade

$$\mathcal{P}(\epsilon_{ij}) = (1 - p)\delta(\epsilon_{ij}) + p\delta(\epsilon_{ij} - 1) \quad (3.26)$$

sendo p a concentração da ligação.

Para o caso de diluição por ligação do tipo *annealed* o Hamiltoniano continua sendo dado pela Eq.(2.26), porém as médias tanto das variáveis de spin como as de desordem são dadas pelo fator de Gibbs.

$$\rho \propto \exp \left[-\beta(\mathcal{H}_B - \mu \sum_{\langle i,j \rangle} \epsilon_{ij}) \right] \quad (3.27)$$

Podemos ver claramente que a desordem do tipo *annealed* em diferentes sítios não são independentes. Sistemas que apresentam desordem do tipo *annealed* e *quenched* são bem diferentes partindo do ponto de análise quanto de propriedades, uma delas que vale a pena salientar é a seguinte: Desordem do tipo *annealed* não é comumente achada em sistemas magnéticos reais, desde que a energia magnética não seja um fator preponderante que determine a desordem configuracional. Tipicamente sistemas diluídos por sítio *annealed* não têm mostrado o efeito da percolação². Isto deve-se a desordem configuracional dada pela Eq.(3.25) ser energeticamente favorável para um valor não nulo da variável aleatória ϵ_i de um dado agregado, existindo sempre ilhas infinitas para $p > 0$ prevalecendo, assim, a ordem magnética. Para o caso da desordem *annealed* por ligação, temos a presença do efeito de percolação, onde soluções exatas foram obtidas para o modelo de Ising 2d, e corresponde teoricamente a tratar o caso de uma rede aleatoriamente decorada, e obtém valores de p_c diferentes do caso da diluição *quenched* por ligação, por exemplo, para a rede triangular *annealed* e *quenched* temos $p_c = 0.3522$ e 0.3473 , respectivamente.

²Existência de uma concentração crítica abaixo da qual a ordem magnética é destruída, ou seja, destruição de um aglomerado infinito ou equivalentemente no magnetismo pela destruição da ordem de longo-alcance.

3.3 Modelo de Heisenberg diluído

O modelo de Heisenberg via nova teoria de campo efetivo, considera um aglomerado de dois spins, ilustrado pela figura (3.3), centrais dado pelo hamiltoniano:

$$-\beta\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} K_{ij} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j \quad (3.28)$$

onde $K_{ij} = \beta J_{ij}$ e $\langle i,j \rangle$ denota a soma sobre os sítios primeiros vizinhos e $\vec{\sigma}_i$ é o operador spin de Pauli no sítio i .

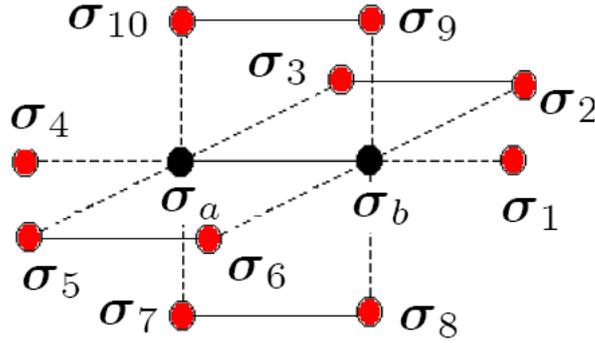


Figura 3.3: Esquema ilustrativo do aglomerado considerado para o modelo de Heisenberg

Utilizando a aproximação axial, temos:

$$-\beta\mathcal{H}_{12} = K_{12} \vec{\sigma}_{1a} \cdot \vec{\sigma}_{2b} + a_{1b} \sigma_{1a}^z + a_{2a} \sigma_{2b}^z \quad (3.29)$$

onde $a_{n\nu} = \sum_{\vec{\delta}}^{z-1} K_{n\vec{\delta}} \sigma_{(n+\vec{\delta})\nu}^z$, z é o número de coordenação, $\vec{\sigma}_{i\nu}$ é o operador de spin na subrede $\nu = a$ ou b no sítio i .

Cuja função de partição é obtida através de diagonalização do Hamiltoniano (3.29) é

$$Z = e^{-K_{12} \cosh(a_{2a} + a_{1a})} + e^{K_{12} \cosh(W(a_{2a}, a_{1b}))} \quad (3.30)$$

onde $W(a_{2a}, a_{1b}) = \sqrt{4K_{12}^2 + (a_{2a} - a_{1b})^2}$.

Consideraremos aqui um sistema magnético diluído para uma desordem tipo *quenched*, ou seja, quando a média configuracional independe da média térmica, como dito anteriormente, que pode ser simulada pela distribuição de probabilidade $\mathcal{P}(J_{i,j})$ mais usual para sistemas magnéticos diluídos reais, da forma

$$\mathcal{P}(J_{i,j}) = (1 - p)\delta(J_{i,j}) + p\delta(J_{i,j} - J) \quad (3.31)$$

Para obtermos então uma propriedade termodinâmica A do sistema devemos então, para uma desordem do tipo *quenched*, devemos fazer além da média térmica, a média configuracional

$$\langle A \rangle_c = \int A' \mathcal{P}(J_{i,j}) dJ_{ij}. \quad (3.32)$$

De tal forma que, a propriedade termodinâmica é obtida através de

$$\langle\langle A \rangle\rangle_c = \left\langle \frac{\text{Tr} [Ae^{-\mathcal{H}_{12}}]}{Z} \right\rangle_c. \quad (3.33)$$

Fixemos agora, na magnetização para um sítio da rede a obtida através da expressão

$$m_a = \langle\langle \sigma_i^z \rangle\rangle_c = \left\langle \left\langle \frac{\partial \ln Z}{\partial a_{1b}} \right\rangle \right\rangle_c \quad (3.34)$$

que pode ser reescrita da forma

$$m_a = \left\langle \left\langle \frac{\sinh(a_{2a} + a_{1b}) + \Gamma(a_{2a}, a_{1b}) \sinh(W(a_{2a}, a_{1b}))}{\cosh(a_{2a} + a_{1b}) + e^{K_{12}} \cosh(W(a_{2a}, a_{1b}))} \right\rangle \right\rangle_c \quad (3.35)$$

onde $\Gamma(a_{2a}, a_{1b}) = e^{2K_{12}} \frac{(a_{2a} - a_{1b})}{W(a_{2a}, a_{1b})}$.

Utilizando a técnica do operador diferencial da Eq.(2.19) obtemos a magnetização da subrede A que satisfaz as relações $\langle\langle \sigma_a \rangle\rangle_c = m_a = m$ e para a subrede B $\langle\langle \sigma_b \rangle\rangle_c = m_b = -m$

$$m_a = \left\langle \left\langle \prod_{i \neq 1,2}^{z-1} (\alpha_x + \sigma_i^z \beta_x)_a \prod_{j \neq 1,2}^{z-1} (\alpha_y + \sigma_j^z \beta_y)_b \right\rangle \right\rangle_c \langle\langle g(x, y) \rangle\rangle_c |_{x,y=0} \quad (3.36)$$

com

$$g(x, y) = \frac{\sinh(x + y) + \Gamma(x, y)\sinh(W(x, y))}{\cosh(x + y) + e^{K_{12}}\cosh(W(x, y))} \quad (3.37)$$

Ao contrário da aproximação RPA expressa pela Eq.(2.26), onde temos a descorrelação na média de uma variável quântica para o modelo de Heisenberg, levaremos em conta a correlação em segunda aproximação do tipo³

$$\langle \sigma_i^z \sigma_j^z \sigma_k^z \dots \rangle \simeq \langle \sigma_i^z \sigma_j^z \rangle \langle \sigma_k^z \rangle \dots \quad (3.38)$$

com $i \neq j$, $i \neq k$, $j \neq k \dots$, σ_i^z e σ_j^z pertencem ao aglomerado a e b , respectivamente. De tal forma que, $\langle \sigma_i^z \sigma_j^z \rangle = F$ é a função de correlação.

É fácil observar que podemos obter a função de correlação como

$$F = \langle \langle \sigma_i^z \sigma_j^z \rangle \rangle_c = \langle \langle \frac{\text{Tr} [\sigma_i^z \sigma_j^z A e^{-\mathcal{H}_{12}}]}{Z} \rangle \rangle_c. \quad (3.39)$$

⁴ para a forma

$$F = \langle \langle \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial a_{1b} \partial a_{2a}} \rangle \rangle_c \quad (3.40)$$

obtendo assim,

$$F = \langle \langle \frac{\sinh(a_{2a} + a_{1b})}{\cosh(a_{2a} + a_{1b}) + e^{2K_{12}}\cosh(W(a_{2a}, a_{1b}))} + \frac{\frac{e^{2K_{12}}\sinh(W(a_{2a}, a_{1b}))(a_{2a} - a_{1b})}{W(a_{2a}, a_{1b})}}{\cosh(a_{2a} + a_{1b}) + e^{2K_{12}}\cosh(W(a_{2a}, a_{1b}))} \rangle \rangle_c. \quad (3.41)$$

A equação (3.41) pode ser reescrita da forma

$$F = \langle \langle \prod_{i \neq 1,2}^{z-1} (\alpha_x + \sigma_i^z \beta_x)_a \prod_{j \neq 1,2}^{z-1} (\alpha_y + \sigma_j^z \beta_y)_b \rangle \rangle_c \langle \langle h(x, y) \rangle \rangle_c |_{x,y=0} \quad (3.42)$$

com

$$h(x, y) = \frac{\sinh(x + y)}{\cosh(x + y) + e^{2K_{12}}\cosh(W(x, y))} + \frac{\frac{e^{2K_{12}}\sinh(W(x, y))(x - y)}{W(x, y)}}{\cosh(x + y) + e^{2K_{12}}\cosh(W(x, y))} \quad (3.43)$$

³como estamos tratando um problema com diluição tipo *quenched*, tomamos aqui apenas a média temperada sobre a variável do sistema

⁴ por simetria translacional, da Figura (3.3), temos $\langle \sigma_3^z \sigma_2^z \rangle = \langle \sigma_{10}^z \sigma_9^z \rangle = \langle \sigma_5^z \sigma_6^z \rangle = \langle \sigma_7^z \sigma_8^z \rangle = F$

Observemos que a função g é ímpar (h é par), satisfazendo portanto a propriedade, $g(-x, -y) = -g(x, y)$ ($h(-x, -y) = h(x, y)$). Então para qualquer combinação de operadores diferenciais envolvidos nas Eq.(3.37) e (3.43)⁵ ficam da forma

$$m = A_1(K_{12}, F, p)m + A_3(K_{12}, F, p)m^3 + A_5(K_{12}, F, p)m^5 \quad (3.44)$$

e

$$F = B_0(K_{12}, F, p) + B_2(K_{12}, F, p)m^2 + B_4(K_{12}, F, p)m^4 + B_6(K_{12}, F, p)m^6 \quad (3.45)$$

onde usamos as relações de contorno para o modelo de Heisenberg antiferromagnético $m_a = m$ e $m_b = -m$.

Obtemos a temperatura crítica quando $m \rightarrow 0$ resolvendo as Eqs.(3.44) e (3.45) simultaneamente para

$$A_1(K_{12}, F, p) = 1 \quad (3.46)$$

e

$$F - B_0(K_{12}, F, p) = 0 \quad (3.47)$$

Obtendo assim, o diagrama de fase para T-p.

3.4 Resultados

A linha crítica caracterizando a estabilidade da fase (ferromagnética ou antiferromagnética), o diagrama de fase, é encontrada quando $m = 0$, por métodos numéricos, resolvendo então as Eqs.(3.46) e (3.47). Aqui, encontramos os diagramas de fase no plano T-p para os casos ferromagnético e antiferromagnético para o

⁵ Para um funcional $\Phi(D_x, D_y)$ par ou ímpar, vale $\Phi_{par}(D_x, D_y)f_{impar}(x, y)|_{x,y=0} = 0$ e $\Phi_{impar}(D_x, D_y)f_{par}(x, y)|_{x,y=0} = 0$

modelo	T_c	T_N
Heisenberg Clássico EFT-2[20]	5,031	5.031
Heisenberg Clássico Monte Carlo[21]	4,329	4,329
Heisenberg quântico EFT-2[22]	4,891	4,947
Heisenberg quântico Monte Carlo[23, 24]	3,340	3,784

Tabela 3.2: *Valores da temperatura crítica reduzida $K_b T_c / J$ para os Modelos de Heisenberg via técnicas*

modelo de Heisenberg diluído e para comparação, os diagramas de fase para o modelo de Ising. Para o modelo de Ising, resolveu-se também o sistema com ausência e presença de função de correlação, obtendo o diagrama (3.4)

Observamos que para o modelo de Ising, independente da existência de correlação ou não, não apresentou um melhor resultado para a temperatura crítica para um sistema puro, permanecendo no valor de $K_c^{-1} = 5,03$. Onde a concentração de percolação (concentração para a qual o sistema deixa de ter ordem magnética) está para $p_c = 0,2912$ para o caso correlacionado e, $p_c = 0,2901$ para o caso descorrelacionado.

Agora, considerando a nova teoria de campo efetivo para uma rede cúbica simples com dois spins no aglomerado, obtemos para o modelo de Heisenberg quântico para o caso F e AF os diagramas (3.6) e (3.7), respectivamente

apresentando uma concentração de percolação para o caso F em $p_c = 0,301$ com correlações e, $p_c = 0,2973$ sem correlações. Para o sistema puro ($p = 1$), a temperatura crítica reduzida tem seu valor em $T_c = 4,891$ para o caso descorrelacionado e, $T_c = 4,876$ para o caso correlacionado. E, para o caso AF, apresentou uma concentração de percolação em $p_c = 0,345$ para o caso correlacionado e, $p_c = 0,339$ para o caso sem correlações. Para um sistema puro verificou-se a temperatura crítica reduzida em $T_N = 4,947$ para o caso correlacionado e, $T_N = 4,946$ para o caso sem correlações, verificando o fato de $T_N > T_c$. Na Tabela 3.3, vemos os resultados obtidos para o modelo EFT-2, NEFT (nova teoria de campo efetivo) e aproximação

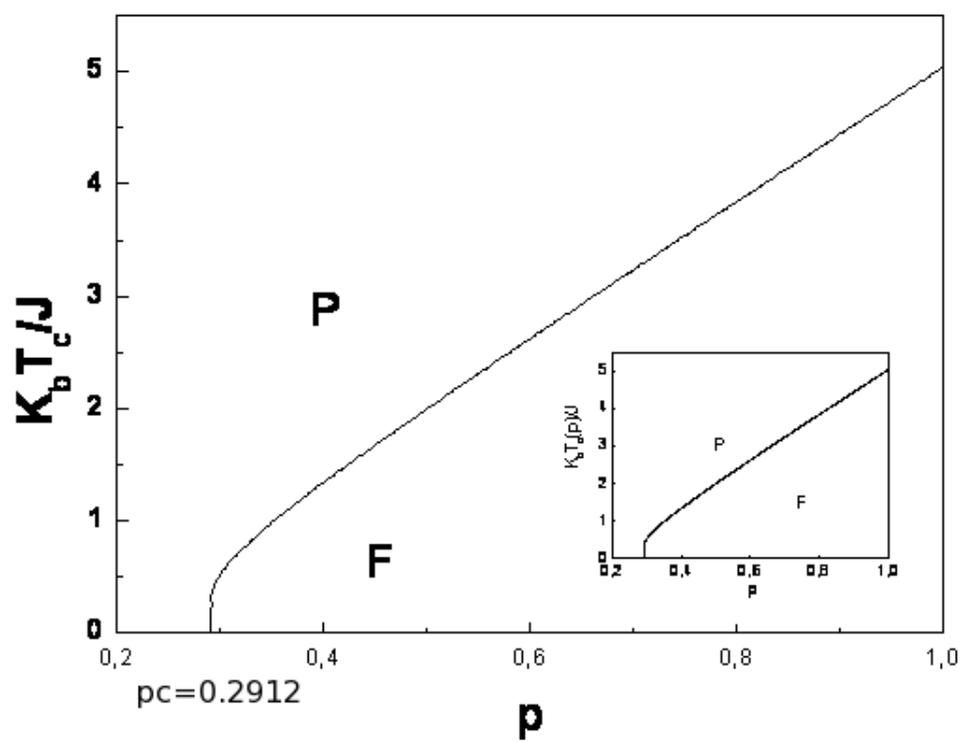


Figura 3.4: Diagrama no plano $T-p$ para o modelo de Ising com correlações (maior) e sem correlações (ao fundo)

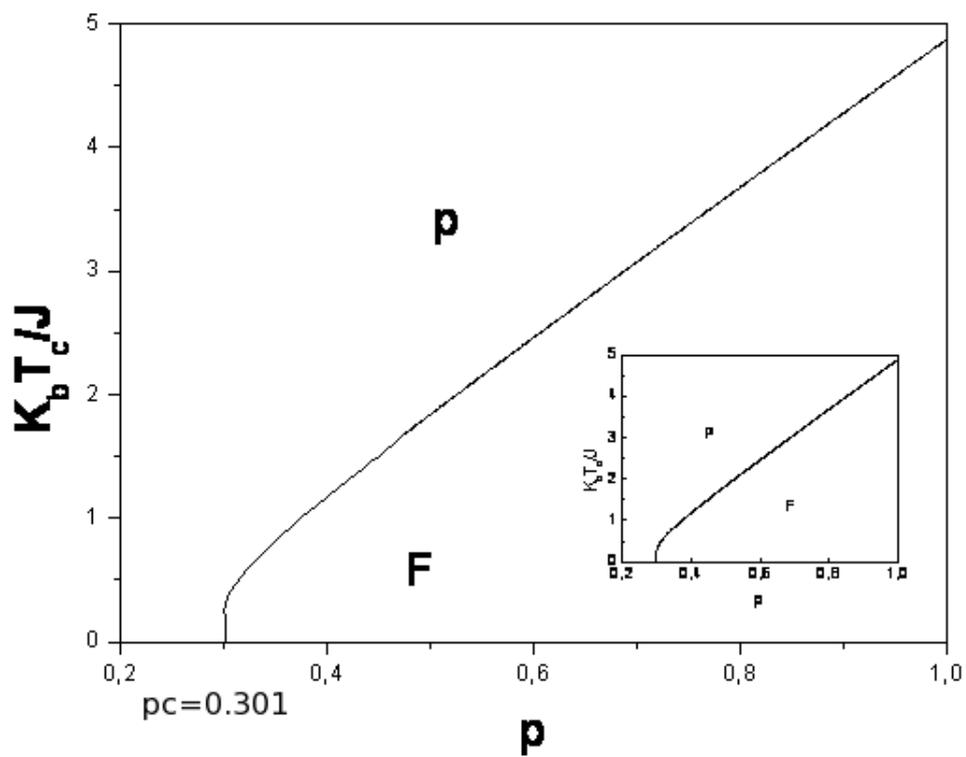


Figura 3.5: Diagrama no plano T - p para o modelo de Heisenberg F com correlações (maior) e sem correlações (ao fundo)

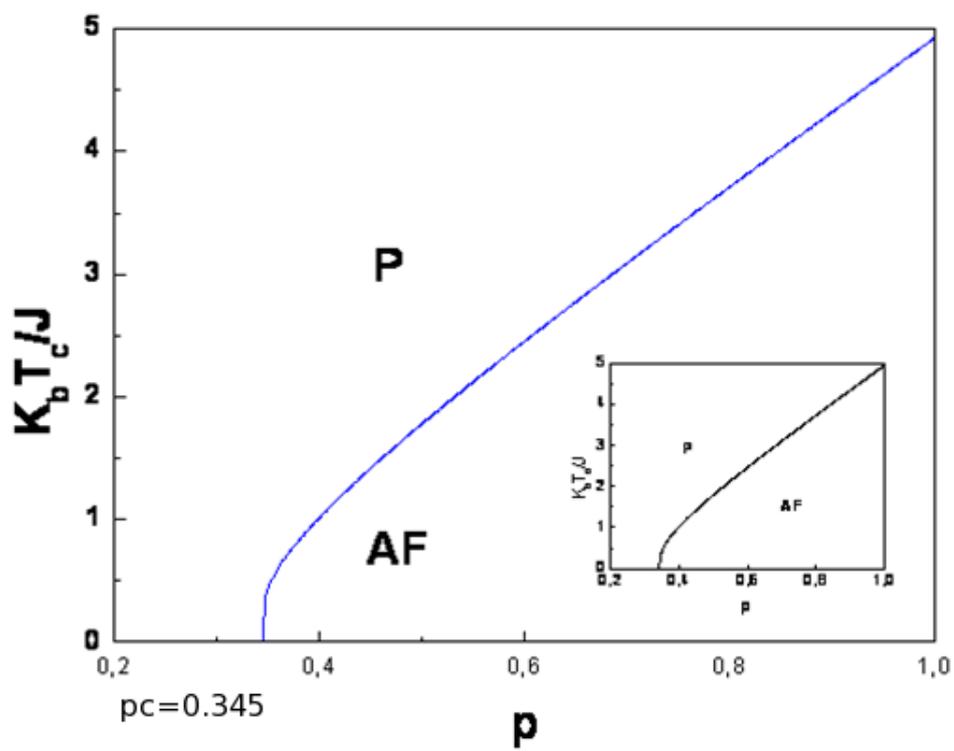


Figura 3.6: Diagrama no plano T - p para o modelo de Heisenberg AF com correlações (maior) e sem correlações (ao fundo)

Modelos		T_c	T_N	Δ	p_c
Heisenberg-1/2	EFT-2	4,891	4,946	1,22(1,162)	0,2973(0,339)
	NEFT	4,876	4,927	1,2205(1,221)	0,301(0,345)
	<i>Aproximação em série</i> [25]	3,36	3,59	1,3	0,25
Ising-1/2	EFT-2	5,033	5,039	1,182	0,2901
	NEFT	5,033	5,034	1,182	0,2912
	<i>Aproximação em série</i> [26]	4,51	4,51	1,12	0,25

Tabela 3.3: Valores da temperatura crítica reduzida $K_b T_c / J$ para o modelo de Heisenberg e modelo de Ising via técnicas aproximativas onde, os termos entre parênteses () representam o caso AF e, sem parênteses para o caso F

em série para temperaturas críticas reduzidas, concentração de percolação (p_c) e para a declividade relativa.

Para efeito comparativo do método, é mostrado na Figura (3.7) a linha de coexistência para o modelo de Ising-1/2 em relação a pontos obtidos experimentalmente para o composto $Co_p Zn_{1-p} Cs_3 Cl_5$ com $S = 5/2$ [26] e, para o modelo de Heisenberg-1/2 AF, é mostrado na Figura (3.8) o comportamento do diagrama de fase T-p em relação a pontos obtidos experimentalmente para o composto $KMn_p Mg_{1-p} F_3$ com spin $S = 7/2$ [26].

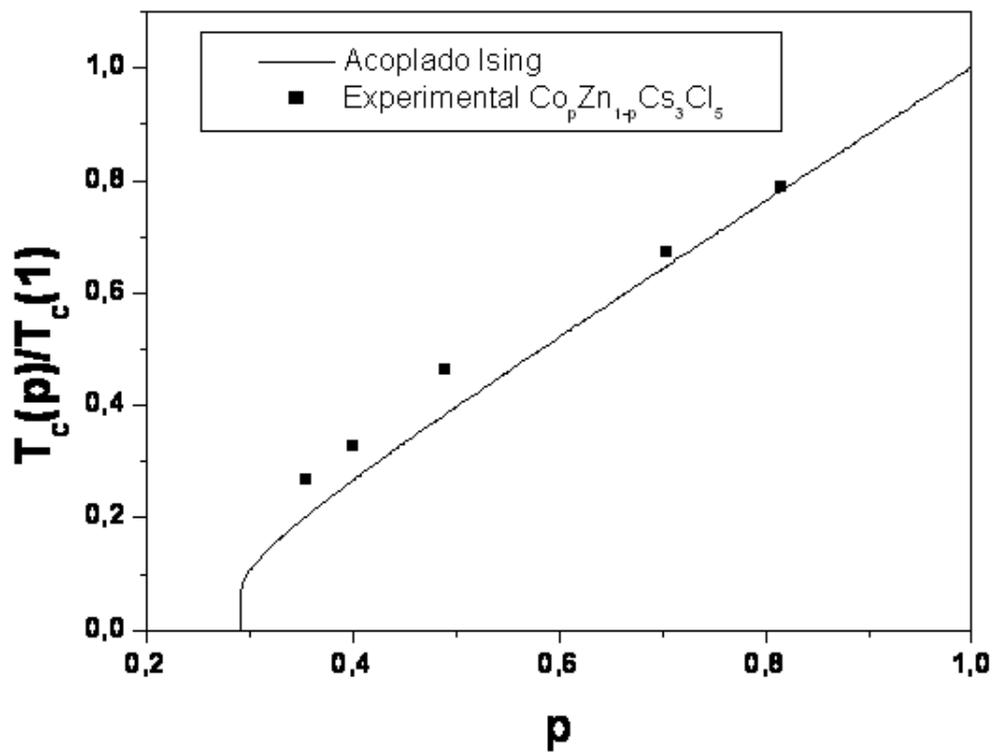


Figura 3.7: Diagrama no plano T - p para o modelo de Ising-1/2 correlacionado, em comparação com dados experimentais

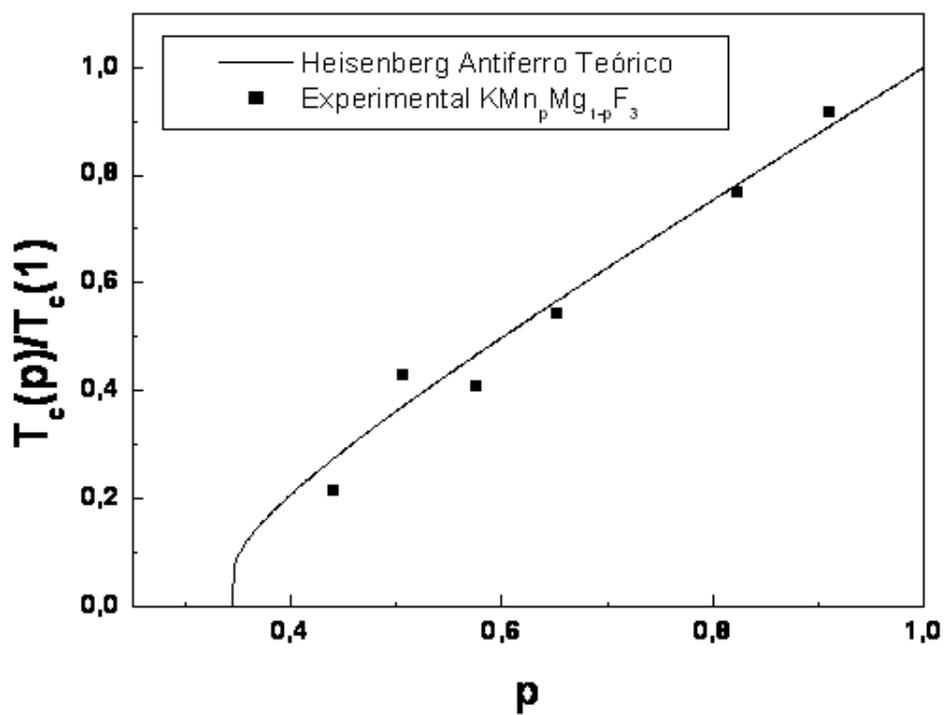


Figura 3.8: Diagrama no plano T - p para o modelo de Heisenberg-1/2 correlacionado, em comparação com dados experimentais

Referências Bibliográficas

- [1] R. Honmura e T. Kaneyoshi, *Prog. Theor. Phys. (Kyoto)*, **60**, 635 (1978).
- [2] N.L. Onsager, *J. Am. Chem. Soc.*, **58**, 1486 (1936); ver o trabalho de R. Borut e H. Thomas, *Physics* **3**, 317 (1967), para uma excelente revisão do campo de Onsager
- [3] T. Kaneyoshi, I.P.Fittipaldi, R.Honmura e T. Manabe, *Phys. Rev. Lett. B*, **24**, 481 (1981).
- [4] G. B. Taggart e I.P.Fittipladi, *Phys. Rev B*, **25**, 7026 (1982).
- [5] A.F. Siqueira, Tese de doutorado (UFPE), 1986; ver também A. Bobak e M. Jascur *Phys. Stat. Solids B*, 135, K9 (1986)
- [6] H. Sato, A. Anolt e R. Kikuchi, *J. Phys. Chem. Solids* , 10, 19 (1959).
- [7] R. J. Elliott, *J. Phys. Chem. Solids* 16, 165 (1960).
- [8] J. S. Smart, *J. Phys. Chem. Solids* 16, 169 (1960).
- [9] R. J. Elliott, B. R. Heap, D. J. Morgan e G. S. Rushbrooke, *Phys. Rev. Lett.* 5, 366 (1960); D. J. Morgan e G. S.Rushbrooke, *Molec. Phys.* 4, 291 (1963), *ibid* 6, 477 (1966); G. S. Rushbrooke e D. J. Morgan, *Molec. Phys.* 4, 1 (1961).
- [10] C. Domb e M. F. Sykes, *Phys. Rev.* 122, 77 (1961).
- [11] J. M. Hammersley, *J. Math. Phys.* 2, 728 (1961).

- [12] R. B. Stinchcombe, *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol. 7, Editado por C. Domb e J. L. Lebowitz, Academic Press, 1983.
- [13] D. Stauffer, *Z. Phys. B* 22, 161 (1975)
- [14] T. C. Lubensky, *Phys. Rev. B* 15, 311 (1977).
- [15] R. B. Stinchcombe, *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol. 7, Editado por C. Domb e J. L. Lebowitz, Academic Press, 1983.
- [16] H. Au-Yang, M. E. Fisher e A. E. Ferdinand, *Phys. Rev. B* 13, 1238 (1976).
- [17] L. Longa e J. Konior, *Acta Phys. Polonica A* 59, 223 (1981).
- [18] A. B. Harris, *J. Phys. C* 7, 1671 (1974).
- [19] P. G. Watson, *J. Phys. C* 1, 575 (1968).
- [20] J. Ricardo de Sousa e D. F. de Albuquerque, *Physica A* , **236**, 419 (1997).
- [21] K. Chen, A. M. Ferrenberg e D. P. Landau *Phys. Rev B* , **48**, 3249 (1993).
- [22] T. Ydogaki e N. Uryu, *Physica A* , **181**, 173 (1992).
- [23] A. K. Murtazaev e I. A. Favorskii, *Fiz. Nizk. Temp*, **18**, 144 (1999).
- [24] A. W. Sandvik, *Phys. Rev Lett*, **80**, 5196 (1998).
- [25] G.S. Rushbrooke e P.J. Wood, *Mol. Phys.*, **11**, 409 (1967).
- [26] C. Domb, in: *Phase Transitions and critical phenomena*, vol3, Academic Press, London (1974).

Capítulo 4

Conclusão e Perspectivas Futuras

Neste trabalho, foi apresentado um estudo do modelo de Heisenberg isotrópico quântico de spin $1/2$ antiferromagnético diluído numa rede cúbica. Utilizando a nova teoria de campo efetivo em aglomerados finitos de spin, em particular $N = 2$, com a técnica do operador diferencial, calculamos a função de partição para o aglomerado em cada estado (antiferromagnético e ferromagnético), onde foram utilizadas algumas aproximações, dentre elas a aproximação (3.38) para desacoplar a exponencial da soma de operadores. Conjuntos de equações não lineares foram obtidas e através de métodos numéricos estas equações foram resolvidas para o caso $m \rightarrow 0$, e possibilitaram a construção de um diagram de fase no plano $T - p$ para a caracterização das transições de fase (em $p = 1$ para T_c e T_N) do modelo abordado.

Ainda vemos uma convergência lenta, onde analisamos o fator da nova teoria de campo efetivo com a teoria de campo efetivo descorrelacionado, como vemos na Tabela (3.2)

As equações de estado, principalmente a obtenção dos coeficientes $A_1(K, p, F)$ e $B_0(K, p, F)$ para cada fase em estudo, foram muito trabalhosas. Utilizando recursos computacionais do software MAPLE 11, obtemos os coeficientes $A_1(K, p, F)$ e $B_0(K, p, F)$ e substituindo nas respectivas expressões de equações de estado, utilizamos o método de Newton-Raphson para o cálculo de raízes de equações não lineares. Devido ao programa gerado para obter a solução numérica ser razoavelmente com-

plexo e bastante grande, isto dificultou na compilação e na execução do programa. Por isto, uma análise numérica detalhada foi realizada.

Como perspectivas futuras deste trabalho de dissertação propomos:

a) Estudar as propriedades termodinâmicas do modelo abordado nesta dissertação, magnetização, calor específico e susceptibilidade magnética a campo nulo.

b) Investigar o digrama no plano T-p para outros tipos de rede (Kagomé, Hexagonal,...)

c) Introduzir o parâmetro de anisotropia na interação entre os spins do aglomerado e analisar o diagrama de fase T-p para sistemas frustrados e ainda analisar a influência desta anisotropia sobre a fase líquido de spin.

d) Fazer uma análise do tamanho finito na rede, aumentando assim o tamanho do aglomerado.

Apêndice A

Construção dos primeiros coeficientes

Vamos mostrar agora, por fator de ilustração para o desenvolvimento da Eq.(3.46) limitando-nos ao cálculo do primeiro coeficiente da magnetização $A_1(K, F, p)$. Temos o aglomerado ilustrado pela Figura (3.3). Então, como queremos os **termos de primeira ordem para a magnetização** teremos vários tipos de correlações do tipo

$$\langle \sigma_i \sigma_j \sigma_k \dots \rangle \approx \langle \sigma_i \sigma_j \rangle \langle \sigma_k \rangle \quad (\text{A.1})$$

onde para o aglomerado considerado teremos, para esse tipo de aproximação, os pares $(i, j) = (2, 3) = (10, 9) = (5, 6) = (7, 8)$ para $F = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle$.

Pela propriedade do funcional operador diferencial, para a magnetização, teremos apenas os termos em que podemos ter o número ímpar de spins dentro da média "térmica-configuracional" da Eq.(3.36) contendo os coeficientes $\alpha_\nu = \cosh(KD_\nu)$ e $\beta_\nu = \sinh(D_\nu)$ com $\nu = x, y$, para termos de ordem um da magnetização

Assim, tomando o sistema com três spins, podemos obter

$$(\sigma_i \sigma_j \sigma_l) \implies Fm \quad (\text{A.2})$$

Para o sistema com cinco spins, podemos obter

$$(\sigma_i \sigma_j \sigma_l \sigma_k \sigma_p) \implies F^2 m \quad (\text{A.3})$$

Para o sistema com sete spins, podemos obter

$$(\sigma_i \sigma_j \sigma_l \sigma_k \sigma_p \sigma_q \sigma_t) \implies F^3 m \quad (\text{A.4})$$

e para o sistema com nove spins, podemos obter

$$(\sigma_i \sigma_j \sigma_l \sigma_k \sigma_p \sigma_q \sigma_t \sigma_y \sigma_x) \implies F^4 m \quad (\text{A.5})$$

Assim, quase identicamente que para $A_1(K, p, F)$, obtemos o coeficiente $B_0(K, p, F)$, cuja diferença é, ao invés de incluirmos sistemas com números de spins ímpares, devido a propriedade do operador diferencial, incluimos sistemas com números pares de spin. Da forma

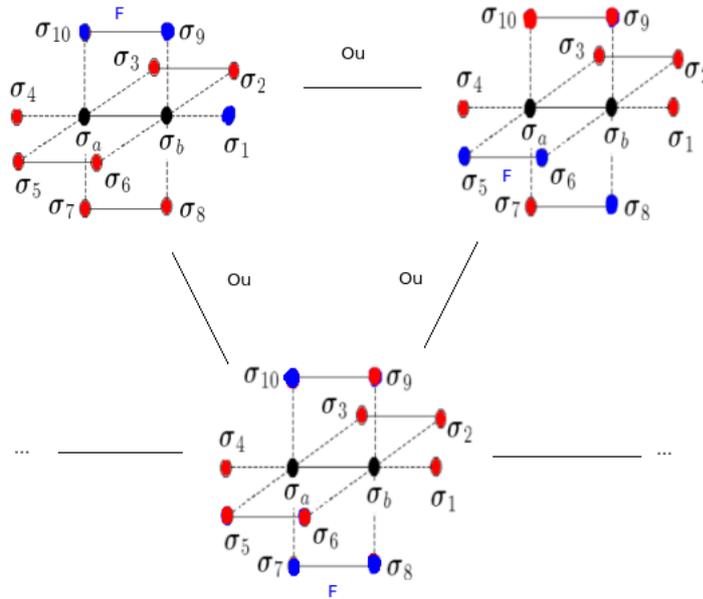


Figura A.1: Esquema ilustrativo de três possíveis possibilidades para 3 spins, onde a cor azul representa a possível possibilidade de combinação

$$\begin{aligned}
A_1(K, p, F) = & \left\{ 5(\alpha_x^4 \beta_x \alpha_y^5 - \alpha_y^4 \beta_y \alpha_x^5) + 16(\alpha_x^3 \beta_x^2 \alpha_y^4 \beta_y - \alpha_y^3 \beta_y^2 \alpha_x^4 \beta_x) F \right\} g(x, y)|_{x,y=0} + \\
& \left\{ 18(\alpha_x^2 \beta_x^3 \alpha_y^3 \beta_y^2 - \alpha_y^2 \beta_y^3 \alpha_x^3 \beta_x^2) F^2 + 8(\alpha_x \beta_x^4 \alpha_y^2 \beta_y^3 - \alpha_y \beta_y^4 \alpha_x^2 \beta_x^3) F^3 \right\} g(x, y)|_{x,y=0} + \\
& (\beta_x^5 \alpha_y \beta_y^4 - \beta_y^5 \alpha_x \beta_x^4) F^4 g(x, y)|_{x,y=0} \quad (\text{A.6})
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
B_0(K, p, F) = & \left\{ (\alpha_x^5 \alpha_y^5) + 4(\alpha_x^4 \beta_x \alpha_y^4 \beta_y) F + 6(\alpha_x^3 \beta_x^2 \alpha_y^3 \beta_y^2) F^2 \right\} h(x, y)|_{x,y=0} + \\
& \left\{ (\alpha_x^2 \beta_x^3 \alpha_y^2 \beta_y^3) F^3 + (\alpha_x \beta_x^4 \alpha_y \beta_y^4) F^4 \right\} h(x, y)|_{x,y=0} \quad (\text{A.7})
\end{aligned}$$

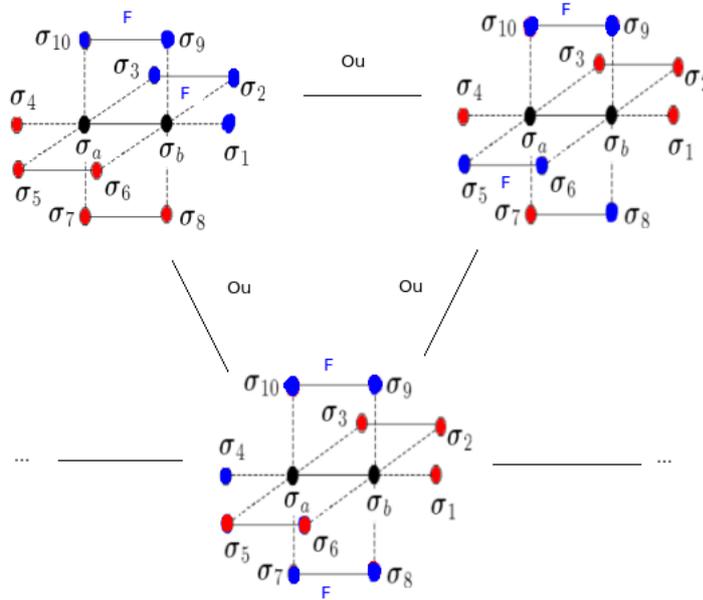


Figura A.2: Esquema ilustrativo de três possíveis possibilidades para 5 spins, onde a cor azul representa a possível possibilidade de combinação

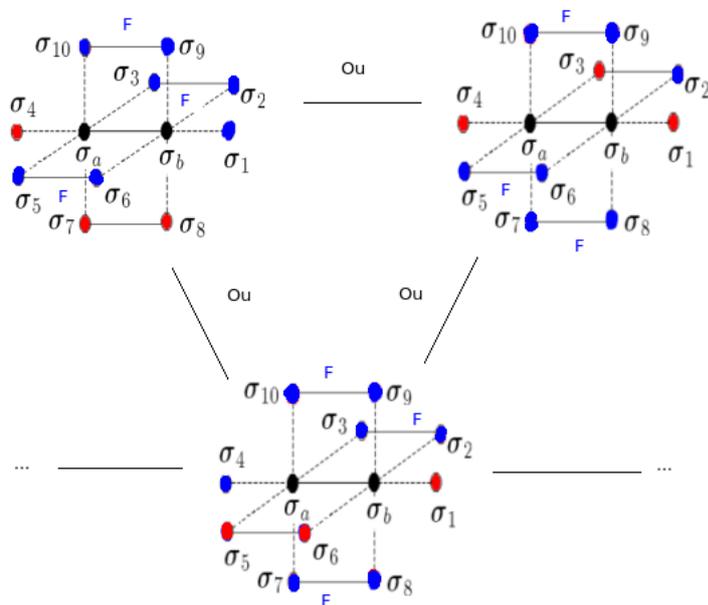


Figura A.3: Esquema ilustrativo de três possíveis possibilidades para 7 spins, onde a cor azul representa a possível possibilidade de combinação

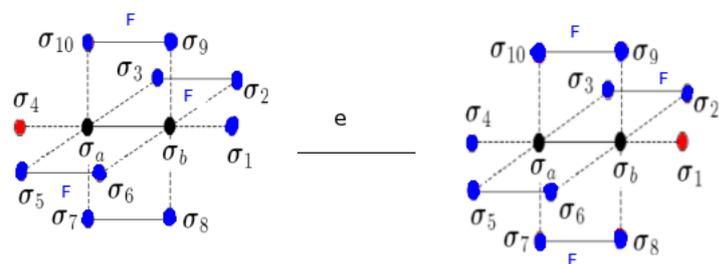


Figura A.4: Esquema ilustrativo de configuração para 9 spins, onde a cor azul representa possíveis possibilidades de combinação