



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA**

**Desenvolvimento de um Algoritmo Numérico
na Técnica do Operador Diferencial:
Aplicações em Modelos de Spins**

por

Márcio Andrei Sousa Amazonas

Manaus - 2012

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA**

Desenvolvimento de um Algoritmo Numérico
na Técnica do Operador Diferencial:
Aplicações em Modelos de Spins

por

Márcio Andrei Sousa Amazonas

Tese apresentada ao Departamento de Física
da Universidade Federal de São Carlos, como
parte dos pré-requisitos para a obtenção do
título de Doutor em Física.

Orientador:

Prof. Dr. José Ricardo de Sousa

Coorientador:

Prof. Dr. José Roberto Viana Azevedo

Apoio financeiro:
FAPEAM-AM-Brasil

Outubro de 2012

AGRADECIMENTOS

A Deus, pelo merecimento de viver.

A meus pais, pela educação exemplar e dedicação.

A minha esposa e filhos, Cláudia, Luana e Geovane pelo amor, carinho e apoio nos momentos difíceis.

A José Ricardo de Sousa, pela orientação recebida e importantes sugestões em todas os momentos deste trabalho.

A José Roberto Viana, pelo trabalho de coorientação de importância fundamental para a conclusão desta tese.

A Denilson Borges pelo importante trabalho de estruturação do laboratório de Física Computacional.

Ao grupo de amigos: João Neto, Rita de Cássia e Elie Badr que de alguma forma contribuíram neste trabalho.

Em memória ao Professor Abraham Moysés Cohen pelo pioneirismo em implantar o PPGF na UFAM.

À Coordenação do PPGF-UFSCar pelo convênio de longa data UFAM-UFSCar.

À FAPEAM pelo apoio financeiro dado durante a elaboração deste trabalho.

RESUMO

Apresentamos nesta tese os resultados obtidos para os modelos de Ising e Heisenberg de spin $1/2$, nos casos bi e tridimensional, com desordem ou frustração. Aplicamos a teoria de campo efetivo associada à Técnica do Operador Diferencial - TOD. Uma nova formulação desta técnica permitiu o desenvolvimento de um algoritmo onde os coeficientes são agora construídos de forma totalmente automática. Isso possibilitou crescermos o número N de spins do aglomerado e assim observar o comportamento do sistema quando tende para o caso real ($N \rightarrow \infty$), tendo como limite o tempo computacional necessário para efetivar todas as operações.

Aplicamos esta metodologia no estudo do modelo de Ising com campo aleatório - *RFIM*, onde utilizamos três distribuições de probabilidade para o campo: bimodal, gaussiana e gaussiana duplo-pico. Os diagramas de fase no plano $t - h$ foram obtidos para os casos Ferromagnético-F e Antiferromagnético-AF com auxílio do procedimento da construção de Maxwell (igualdade das energias livres na linha de transição de fase), identificando o ponto tricrítico - PTC em cada caso. Apresentamos duas propostas para obtenção da energia livre, sendo que em uma delas foi possível o estudo do comportamento das propriedades termodinâmicas nas regiões de 1ª e 2ª ordem.

Para uma segunda aplicação dessa implementação numérica, utilizamos o modelo de Heisenberg quântico de spin $1/2$ anisotrópico (com parâmetro de anisotropia Δ), que recai nos casos particulares importantes que são: Ising unidimensional ($\Delta=1$) e Heisenberg isotrópico ($\Delta=0$), sendo aplicado no estudo de filmes finos magnéticos formados por monocamadas onde a presença de superfícies livres altera consideravelmente o comportamento do sistema. Simulamos nesse caso, a frustração dos spins considerando interações entre primeiros (J_1) e segundos (J_2) vizinhos com interações F e AF respectivamente, estando relacionados através do parâmetro $\alpha=J_1/J_2$. Estudamos a influência do aumento da dimensionalidade do sistema, feito através do acréscimo no número de camadas (L) do filme, no comportamento do diagrama de fases $t - \alpha$.

Para finalizar, aplicamos as relações do Grupo de Renormalização no Hamiltoniano Heisenberg para um filme fino para o estudo do comportamento dos expoentes críticos em função de parâmetros como a temperatura e número de camadas.

ABSTRACT

In this work, we present the results obtained for Ising models and Heisenberg spin 1/2, where two and three-dimensional, with disorder or frustration. We apply effective field theory associated with the Operator Differential Technique - TOD. A new formulation of this technique has enabled the development of a numerical implementation where the coefficients are now constructed fully automatically. This allowed growing up the number N of spins of the cluster and thus observe the behavior of the system when it tends to the real case ($N \rightarrow \infty$), which is bounded by the computational time needed to carry out all operations.

We apply this methodology to study the Ising model with random field - *RFIM*, where we use three probability distributions for the field: bimodal, gaussian and gaussian double-peaked. The phase-diagrams were obtained in $t - h$ plane for the cases Ferromagnetic-F and Antiferromagnetic-AF with the aid of Maxwell's construction procedure (equality of the free energies at line phase transition) identifying the tricritical point - PTC in each case. We present two proposals for obtaining the free energy, and in one of them it was possible to study the behavior of the thermodynamic properties in the regions of 1st and 2nd order.

For a second application of numerical implementation, we use the quantum model of anisotropic Heisenberg spin (1/2) (with anisotropy parameter Δ), which lies in the particular cases that are important: one-dimensional Ising ($\Delta=1$) and isotropic Heisenberg ($\Delta=0$), being applied in the study of magnetic thin films formed by monolayers where the presence of free surfaces substantially alters the system behavior. We simulate this case, the spin frustration of considering interactions between the first (J_1) and second (J_2) interactions with neighboring F and AF respectively, being related by the parameter $\alpha=J_1/J_2$. We studied the influence of increasing the dimensionality of the system, made by increasing the number of layers (L) of the film, the behavior of the phase diagram $\alpha - t$.

Finally, we apply the relations of the Renormalization Group in the Heisenberg Hamiltonian for a thin film to study the behavior of critical exponents as a function of parameters such as temperature and number of layers.

Sumário

1	Introdução	13
1.1	Transição de Fase e Fenômenos Críticos	14
1.1.1	Expoentes Críticos	16
1.1.2	Hipótese de Widom e Universalidade	21
1.1.3	Argumento de Kadanoff	23
1.1.4	Teoria de Landau	25
1.2	Técnica do Operador Diferencial (TOD)	31
1.3	Motivação e Apresentação da Tese	42
2	Implementação Numérica da Técnica do Operador Diferencial	46
2.1	Introdução	46
2.2	Desenvolvimento do Algoritmo	48
2.2.1	Aplicação para $N = 2$ Sítios Centrais	50
2.2.2	Generalização para $N \geq 4$ Spins	54
2.2.3	Análise dos Termos e Implementação Numérica	57
2.2.4	Equação de Estado Através da Nova Proposta de Energia Livre	62
2.3	Análise dos Resultados	66
3	Modelo de Ising com Campo Aleatório	71
3.1	Introdução	71
3.2	Funções Distribuição de Probabilidade	79

3.2.1	Distribuição de Probabilidade Bimodal	79
3.2.2	Distribuição de Probabilidade Gaussiana	80
3.2.3	Distribuição de Probabilidade Gaussiana Duplo-Pico	80
3.3	Modelo de Ising com Campo Aleatório	81
3.3.1	Aglomerado com $N = 1$ Spin	82
3.3.2	Aglomerado com $N = 2$ Spins	88
3.3.3	Generalização para $N \geq 4$ Spins	97
3.4	Criticalidade e Propriedades Termodinâmicas	100
3.4.1	Método da Derivada	101
3.4.2	Primeira Proposta da Energia Livre	103
3.4.3	Segunda Proposta da Energia Livre	110
3.5	Discussão dos Resultados	113
3.5.1	Diagramas de Fases	113
3.5.2	Propriedades Termodinâmicas	129
4	Filmes-Finos Magnéticos	149
4.1	Introdução	149
4.2	Criticalidade no Modelo $J_1 - J_2$	153
4.2.1	Estado Ferromagnético	160
4.2.2	Estado Superferromagnético	172
4.2.3	Estado Antiferromagnético	179
4.2.4	Estado Superantiferromagnético	181
4.2.5	Modelagem Numérica	183
4.2.6	Resultados	186
4.3	Grupo de Renormalização e Expoentes Críticos	192
4.3.1	Caso $N = 1$	196
4.3.2	Caso $N = 2$	197
4.3.3	Relações de Escala para o Filme Fino	199
4.3.4	Resultados	203

Lista de Figuras

1.1	Parâmetro de ordem (magnetização) em função da temperatura mostrando os dois tipos de transição: (a) primeira e (b) segunda ordem.	16
1.2	Comportamento de $\frac{H}{ t ^\Delta}$ versus $\frac{M(t,H)}{ t ^\beta}$ para o composto ferromagnético $CrBr_3$ obtido experimentalmente[17]. Observe os colapsos das duas curvas, uma para $T > T_c$ e a outra para $T < T_c$ confirmando a hipótese de Widom.	23
1.3	Divisão de uma rede bidimensional em células de tamanho La , sendo a a distância entre primeiros-vizinhos da rede. A escolha de L é de tal forma que $L \gg 1$ e $La \ll \xi$ [19].	24
1.4	Diagrama de fase referente a um sistema antiferromagnético no espaço de parâmetro (T, H, H_s) . S_1 e S_2 representam as superfícies de primeira ordem. A seta em g indica o PTC.	28
1.5	Comportamento da energia livre no plano $a-b$. Sendo indicadas as regiões de transição de primeira e segunda ordem, além do ponto tricrítico. . . .	30
1.6	Estrutura topológica das redes: (a) kagomé, (b) quadrada, (c) triangular e (d) cúbica simples.	40
2.1	Arranjo ferromagnético para um aglomerado com $N = 2$ spins numa rede cúbica simples.	50
2.2	Arranjo para uma rede cúbica ferromagnética, considerando aglomerado com $N = 4$ sítios centrais e seus primeiros vizinhos.	55

2.3	Arranjo para uma rede ferromagnética considerando aglomerado com $N = 9$ sítios centrais.	56
2.4	Fluxograma mostrando o processo numérico para a construção dos coeficientes A_i para a equação de estado. Para a energia livre temos o mesmo procedimento.	61
2.5	Na figura acima, em (a) temos o comportamento da temperatura crítica reduzida $t_c = \frac{k_B T_c}{J}$ em função da quantidade N de sítios do aglomerado para uma rede quadrada ferromagnética. Em (b) temos a análise de tamanho finito encontrando o valor $t_c = 2.21$ para $N \rightarrow \infty$	68
2.6	Na figura acima temos em (a) o comportamento da temperatura crítica reduzida $t_c = \frac{k_B T_c}{J}$ em função da quantidade N de sítios do aglomerado para uma rede cúbica simples ferromagnética. Em (b) temos a análise de tamanho finito encontrando o valor $t_c = 4.03$ para $N \rightarrow \infty$	69
3.1	Distribuição de probabilidade gaussiana duplo-pico, Eq.(3.5) , para valores da relação $h/\sigma = \frac{1}{2}, 1$ e $\frac{3}{2}$	81
3.2	Distribuição de probabilidade gaussiana duplo-pico, Eq.(3.5) para $h/\sigma = 15$, tendendo para a distribuição bimodal ($\sigma \rightarrow 0$).	82
3.3	Esquema de um aglomerado com $N = 1$ spin numa rede cúbica simples ferromagnética.	84
3.4	Arranjo antiferromagnético para um aglomerado com $N = 2$ spins numa rede cúbica simples.	92
3.5	Comportamento dos parâmetros m e m_s em função da temperatura nos seguintes casos: (a) aplicação de um campo longitudinal constante $h = 1.0$ mostrando os comportamentos diferenciados de m e m_s para cada temperatura; (b) considerando um campo aleatório $h = 1.0$ dado por uma distribuição bimodal onde o parâmetro m_s permanece com valor nulo para qualquer temperatura.	96

3.6	Arranjo para um sistema antiferromagnético para um aglomerado com $N = 4$ spins numa rede cúbica simples.	100
3.7	Comportamento da magnetização $m(t)$ em função da temperatura, indicando a região de indefinição em \mathfrak{R} no caso do RFIM numa rede cúbica simples, usando EFT-1 para $h = 1.9$	109
3.8	Diagrama de fases no plano $t - h$ ($t \equiv k_B T/J$ e $h = H/J$) do RFIM ferromagnético obtido via EFT-1 numa rede cúbica simples. As linhas tracejadas e contínuas correspondem às linhas de primeira e segunda ordem, respectivamente. O PTC é representado pelo ponto em negrito. As soluções foram obtidas através dos métodos: (a) da derivada, (b) primeira proposta da energia livre e (c) segunda proposta da energia livre para uma distribuição bimodal.	114
3.9	Diagramas de fases no plano $t - h$ do RFIM AF obtido para aglomerado com $N = 1, 2$ e 4 numa rede cúbica simples (a) e quadrada (b). As linhas de primeira ordem (tracejada) e segunda ordem (contínua) foram obtidas usando o método da primeira proposta da energia livre com distribuição de probabilidade bimodal.	117
3.10	Diagramas de fases no plano $t - h$ do RFIM ferromagnético obtido para aglomerados com $N = 1, 2, 4$ e 8 spins numa rede cúbica simples (a) e quadrada (b). As linhas de transição (1^a e 2^a ordem) foram obtidas usando o método da primeira proposta da energia livre com distribuição de probabilidade bimodal.	118
3.11	Diagramas de fases no plano $t - h$ do RFIM com campo transversal ferromagnético obtido para um aglomerado com $N = 1$ spin numa rede quadrada (a) e cúbica simples (b). As linhas de transição (1^a e 2^a ordem) foram obtidas usando o método da primeira proposta da energia livre para diversos valores do campo transversal reduzido $\omega = \Omega/J$ com distribuição de campo bimodal.	119

3.12	Em (a) temos o diagrama de fases no estado fundamental no plano $\omega - h$ do RFIM ferromagnético obtido via EFT-1 considerando as redes quadrada ($z = 4$) e cúbica simples ($z = 6$). Em (b) temos o comportamento da magnetização em função do campo transversal para vários valores do campo aleatório, aplicado numa rede cúbica simples. Em ambos os casos foi utilizada a distribuição de probabilidade bimodal.	120
3.13	Diagramas de fases no plano $t - h$ do RFIM antiferromagnético obtido via EFT-1($N1$), 2($N2$), 4($N4$), 8($N8$) e 12($N12$) numa rede quadrada (a) e cúbica simples (b). As linhas de transições (1^a e 2^a ordem) foram obtidas usando o método da segunda proposta da energia livre com distribuição de campo bimodal.	124
3.14	Diagramas de fases no plano $t - h$ do RFIM ferromagnético obtido via EFT-1 ($N1$), 2 ($N2$), 4 ($N4$), 8 ($N8$) e 12 ($N12$) numa rede quadrada (a) e cúbica simples (b). As linhas de transições (1^a e 2^a ordem) foram obtidas usando a segunda proposta de energia livre com a distribuição de campo bimodal.	125
3.15	Diagramas de fases no plano $t - h$ do RFIM antiferromagnético (a) e ferromagnético (b) obtido via EFT-1 ($N1$), 2 ($N2$), 4 ($N4$) e 8 ($N8$) numa rede cúbica simples. As linhas críticas foram obtidas usando a segunda proposta de energia livre com a distribuição de campo gaussiana.	126
3.16	Diagrama de fase no plano $t - h$ do RFIM ferromagnético obtido via EFT-1 ($N1$), 2 ($N2$) e 4 ($N4$) para $\sigma = 0.5$ (a) e EFT-2 para diversos valores de σ (b) numa rede cúbica simples usando a segunda proposta de energia livre com a distribuição gaussiana duplo-pico.	127
3.17	Diagrama de fases no plano $t - \sigma$ do RFIM ferromagnético obtido via EFT-2 numa rede cúbica simples, usando a segunda proposta da energia livre com a distribuição do campo gaussiana duplo-pico, para vários valores do campo reduzido $h = h_o/J$	128

3.18	Comportamento da magnetização por spin em função da temperatura reduzida $t = k_B T/J$ para o RFIM ferromagnético, obtido via EFT-1 numa rede cúbica simples para diversos valores do campo reduzido $h = h_o/J$ indicados nas curvas. As linhas tracejadas correspondem às soluções instáveis, que foram eliminadas usando a construção de Maxwell para obter o ponto de transição de primeira ordem, para o caso da distribuição de campo bimodal.	131
3.19	Comportamento da energia interna u em função da temperatura reduzida t do RFIM ferromagnético, obtido via EFT-1 numa rede cúbica simples para o caso da distribuição de campo bimodal, usando o primeira proposta de energia livre e construção de Maxwell para localizar o ponto de transição de fase. As curvas nas Figuras (a) e (b) correspondem às soluções com transições de 2ª e 1ª ordem, respectivamente.	132
3.20	Comportamento do calor específico em função da temperatura obtido a partir da derivação numérica dos resultados apresentados na Fig.(3.19) para a energia interna. As regiões de transição de 2ª e 1ª ordem são mostradas em (a) e (b) respectivamente.	133
3.21	Comportamento da entropia em função da temperatura reduzida do RFIM ferromagnético obtido via EFT-1 numa rede cúbica simples para o caso da distribuição de campo bimodal, usando o primeiro método da energia livre para localizar a transição de segunda ordem (a) e primeira ordem (b).	134
3.22	Comportamento da magnetização m em função da temperatura reduzida t do RFIM ferromagnético, obtido via EFT-4 numa rede cúbica simples para os casos de distribuições bimodal (a) e gaussiana (b) usando a segunda proposta da energia livre para vários valores de h . As linhas tracejadas correspondem às soluções instáveis que são eliminadas através da análise da construção de Maxwell.	137

3.23	Comportamento da energia interna em função da temperatura reduzida do RFIM ferromagnético obtido via EFT-4 numa rede cúbica simples para o caso de distribuição bimodal. As linhas tracejadas correspondem às soluções instáveis, (a) e (b) representam as transições de 2ª e 1ª ordem respectivamente.	138
3.24	Comportamento do calor específico c_h em função da temperatura reduzida do RFIM ferromagnético obtido por EFT-4 numa rede cúbica simples com distribuição de campo bimodal, encontrado a partir da derivação numérica da curva $u(t)$ dada na Fig.(3.23).	139
3.25	Comportamento da entropia em função da temperatura reduzida do RFIM ferromagnético obtido via EFT-4 numa rede cúbica simples, com distribuição bimodal de campo. As linhas tracejadas correspondem às soluções instáveis obtidas através da segunda proposta da energia livre, onde (a) e (b) representam os comportamentos das transições de 2ª e 1ª ordem, respectivamente.	140
3.26	Comportamento da energia livre em função da temperatura reduzida do RFIM ferromagnético obtido via EFT-4, numa rede cúbica simples com distribuição de campo bimodal, onde foi usado o segundo método da energia livre.	141
3.27	Diagrama de fases no plano $t-h$ do RFIM ferromagnético obtido via EFT-4 numa rede cúbica simples com distribuição bimodal e usando a segunda proposta de energia livre. As linhas tracejada e contínua correspondem às transições de 1ª e 2ª ordem, respectivamente. O PTC é representado pelo ponto em negrito, enquanto os pontos em cinza são o pontos que caracterizam as suas respectivas ordens de transição acompanhadas do comportamento da energia livre $F(m)$ associadas (figuras inseridas). . . .	142

3.28	Comportamento da energia interna (a) e calor específico (b) em função da temperatura reduzida do RFIM ferromagnético obtido via EFT-4 através da segunda proposta de energia livre, numa rede cúbica simples com distribuição gaussiana.	143
3.29	Comportamento da entropia (a) e energia livre (b) em função da temperatura reduzida do RFIM ferromagnético obido através da segunda proposta de energia livre via EFT-4, numa rede cúbica simples com distribuição de campo gaussiana.	144
4.1	Na foto à esquerda temos um esquema de gravação de dados em uma superfície magnética. À direita, uma foto real mostrando os <i>bits</i> organizados na superfície. (Fonte: Gurteq)	150
4.2	Modelo de spins frustrados $J_1 - J_2$ onde temos os ordenamentos: a) Ferromagnético (F), b) Super-Ferromagnético (SF), c) Antiferromagnético (AF), d) Super-Antiferromagnético (SAF).	155
4.3	Comportamento da temperatura crítica em função do parâmetro de frustração J_2/J_1 para o modelo de Ising com interações entre primeiros (J_1) e segundos (J_2) vizinhos numa rede quadrada. A linha contínua é obtida pelo método CVM[55], pontos triangulares pelo método de Monte Carlo[52] e os pontos circulares pela expansão em série[51].	156
4.4	Esquema de uma estrutura tridimensional representando uma rede de spins onde, para realizar a construção de um sistema de camadas (filme-fino), diferenciamos a magnetização em cada camada.	159
4.5	Estado de ordenamento Ferromagnético considerando interações de primeiros e segundos vizinhos.	161
4.6	Arranjo Ferromagnético para um aglomerado com $N = 4$ spins, com interações de primeiros e segundos vizinhos.	169
4.7	Arranjo de spins na fase planar, que caracteriza o arranjo SF. Aqui consideramos $N = 2$ sítios centrais.	173

4.8	Arranjo de spins na fase planar, que caracteriza o arranjo SF. Aqui consideramos $N = 4$ sítios centrais.	176
4.9	Arranjo de spins na fase AF mostrando a estrutura de sub-redes. Aqui consideramos $N = 2$ sítios centrais.	179
4.10	Arranjo SAF, mostrando a configuração dos spins alternados em linhas (fase colinear) para o caso $N = 2$	182
4.11	Figura representativa de um filme fino com ℓ camadas e interações de superfície J_s e do <i>bulk</i> $J_b = J$ em uma rede cúbica simples ferromagnética.	184
4.12	Comportamento do parâmetro α_c em função do número de camadas L para diferentes valores do parâmetro $x = \frac{J_s}{J}$, feito no estado fundamental para o modelo de Ising.	188
4.13	Comportamento da temperatura de transição $t_c(t_N)$ em função do parâmetro α considerando o modelo de Ising ($\Delta = 1.0$) para vários valores do número de camadas L . Para $L = 1$ consideramos EFT-4 para obter melhores resultados. As figuras vazadas indicam transição de primeira ordem, enquanto que as figuras cheias indicam transição de segunda ordem.	189
4.14	Comportamento do diagrama de fases $t - \alpha$ para o modelo de Heisenberg para vários valores da quantidade L de camadas, entre as fases AF/P/SAF. As figuras vazadas indicam transição de primeira ordem, enquanto que as figuras cheias indicam transição de segunda ordem.	190
4.15	Comportamento do diagrama de fases $t - \alpha$ considerando o modelo de Heisenberg para vários valores da quantidade L de camadas, nas fases F/P/SF. As figuras vazadas indicam transição de primeira ordem, enquanto que as figuras cheias indicam transição de segunda ordem.	191
4.16	Comportamento do expoente β em função do número de camadas para um filme de <i>Ni</i> mostrando a região do <i>crossover</i> de dimensionalidade. Fonte: Yi Li e K. Baberschke.	195

4.17	Comportamento da magnetização em função da temperatura reduzida $t = k_B T / J$ para cada camada n de um filme fino Heisenberg na rede cúbica simples e parâmetro $x = 0.0$	204
4.18	Comportamento da temperatura crítica t_c em função do número de camadas do filme para diferentes valores do parâmetro de anisotropia Δ . . .	205
4.19	Comportamento da temperatura crítica t_c em função do parâmetro de anisotropia Δ para diferentes valores do número de camadas do filme. . .	206
4.20	Comportamento dos expoentes críticos térmico (y_t), magnético (y_h) e β como função do número de camadas do filme considerando o modelo de Ising ($\Delta = 1.0$).	209
4.21	Comportamento dos expoentes críticos térmico (y_t), magnético (y_h) e β como função do número de camadas do filme considerando o modelo de Heisenberg ($\Delta = 0.0$).	210

Capítulo 1

Introdução

O fenômeno do magnetismo já era bem conhecido pelos gregos antigos e ao longo dos séculos tem despertado o interesse do homem na busca de uma descrição completa deste fenômeno. Essa busca tem seu momento marcante nos Séc XVIII e XIX com os trabalhos de Ampère, Faraday, Maxwell, dentre outros, que com base em resultados experimentais criaram um ramo da Física que hoje conhecemos como Eletromagnetismo. Nos materiais, uma explicação plausível para o comportamento magnético só apareceu no Séc. XX com o advento da Mecânica Quântica. A partir desta época, diversos modelos magnéticos que envolvem interações entre os spins localizados (isolante) ou itinerantes (metal) sobre uma rede cristalina, têm sido propostos a fim de descrever as propriedades macroscópicas dos compostos magnéticos.

Na impossibilidade de resolver a mecânica estatística de modelos interagentes, métodos aproximativos foram desenvolvidos para reproduzir resultados qualitativos das propriedades magnéticas. Com o desenvolvimento da simulação computacional em Física, introduzida por John von Neumann, e o aumento na capacidade de processamento de dados dos computadores, algoritmos como Monte Carlo têm se tornado uma importante ferramenta teórica para a simulação do comportamento de sistemas reais.

Os materiais ferromagnéticos são bem conhecidos e utilizados em várias aplicações

tecnológicas como gravação magnética e na medicina. Pesquisas recentes sugerem também a utilização dos antiferromagnetos em tecnologias emergentes, caso da spintrônica, que é uma das formas possíveis de implementação do *qubit*¹ em computação quântica. Dessa forma, a descrição completa do comportamento termodinâmico desses materiais é de grande interesse tanto do ponto de vista científico quanto tecnológico.

1.1 Transição de Fase e Fenômenos Críticos

É característica de certos materiais na natureza sofrer mudanças em suas propriedades físicas quando certos parâmetros são alterados como temperatura, pressão, campo magnético, provocando assim uma transição de fase no sistema. Como exemplo, temos: os fluidos, sistemas magnéticos e ferroelétricos, superfluidos, supercondutores, ligas binárias, cristais líquidos, sistemas que sofrem mudanças estruturais, entre outros. Esta transição de fase caracteriza-se por apresentar quebra espontânea de simetria o que provoca efeitos macroscopicamente observados (perda de magnetização em sistemas ferromagnéticos, alteração na densidade de fluidos, etc).

Podemos estudar este comportamento das transições de fases de um dado sistema por meio de um diagrama de fases que delimita a região de existência de cada fase sob a variação dos parâmetros externos, ou através de uma função de estado (densidade, magnetização, energia interna, etc) que reflete uma mudança de fase sob a variação de um parâmetro externo. Quando esta função de estado assume valores diferentes nas distintas fases e se anula na fase mais desordenada, então esta é definida como parâmetro de ordem. Por exemplo, para sistemas ferromagnéticos o parâmetro de ordem é a magnetização²; por outro lado, para uma transição líquido-gás, o parâmetro de ordem é a diferença das densidades do líquido e do gás.

O desenvolvimento teórico no estudo das transições de fase foi iniciado na década

¹O *quantum* de informação.

²Para um antiferromagneto, o parâmetro de ordem é a diferença das magnetizações das sub-redes A e B definida como $m_S = (m_A - m_B)/2$.

de 60, quando os conceitos básicos de classe de universalidade e escala das funções termodinâmicas foram introduzidas, além dos princípios de cálculo associado ao grupo de renormalização.

Um dos critérios para a classificação quanto a ordem de uma transição de fase é dado através da descontinuidade da função energia livre $g(T, H)$. Uma transição de primeira ordem é caracterizada pela descontinuidade da magnetização e/ou entropia (primeira derivada da energia livre). Uma transição de segunda ordem (ou contínua) é caracterizada pela descontinuidade da susceptibilidade e calor específico (segunda derivada da energia livre). Devemos salientar que, mesmo numa de primeira ordem a susceptibilidade pode vir a sofrer divergência quando o sistema atinge uma temperatura crítica T_c . Por outro lado, numa transição de segunda ordem, a magnetização espontânea (com $H = 0$), para um ferromagneto, por exemplo, vai a zero continuamente quando $T = T_c$. Além da magnetização, outras grandezas apresentam singularidades no *ponto crítico* (T_c). A denominação de ponto crítico só deve ser dada àqueles referentes à transição de segunda ordem, no caso da transição de fase de primeira ordem chamamos apenas de ponto de transição. À medida que $T \rightarrow T_c$, o sistema simplesmente começa a ajustar-se sobre todas as escalas de comprimento. Estes ajustes aparecem sob a forma de flutuações térmicas os quais tornam-se muito grandes nas proximidades destes pontos. Por exemplo, a susceptibilidade está associada à flutuação da magnetização, o calor específico à flutuação da energia interna do sistema (Hamiltoniano do ponto visto teórico). Na Fig.(1.1) temos esquematizado o comportamento da magnetização quando ocorre uma transição de primeira ou segunda ordem ³.

Segundo o teorema de Yang e Lee, numa transição contínua (2ª ordem) para um ferromagneto, o ponto crítico no diagrama de fase no plano $H - T$ corresponde a ($H = 0$, $T = T_c$). Para $T < T_c$, a magnetização não é nula e dizemos que o sistema tem uma ordem de longo-alcance. De um ponto de vista qualitativo, a ordem de longo-alcance

³O termo transição de fase de “segunda ordem”, usado de forma sinônima com transição de fase contínua, é um resquício da classificação de transições de fases em primeira, segunda, terceira,...ordem devido a Ehrenfest.

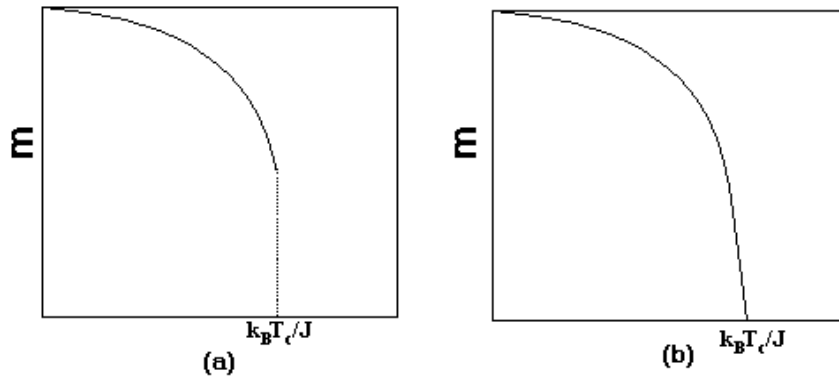


Figura 1.1: Parâmetro de ordem (magnetização) em função da temperatura mostrando os dois tipos de transição: (a) primeira e (b) segunda ordem.

no ferromagneto pode ser entendida como a competição entre a energia de troca J_{ij} , responsável pelo alinhamento dos spins paralelamente, e a energia térmica $K_B T$, que tem a função de destruir esta ordem magnética. Para altas temperaturas ($K_B T \gg J$), o sistema comporta-se aproximadamente como se não existisse a interação (íons livres) de modo que o efeito microscópico dos spins será a ausência de ordem magnética (magnetização espontânea). À medida que diminui a temperatura, a interação de troca começa a ficar relevante e os spins a curtas distâncias (\leq comprimento de correlação ξ) ficam correlacionados. Quando o sistema atinge a temperatura crítica, ou seja, $K_B T \simeq J$, o comprimento de correlação diverge, ou seja, todos os spins da rede se correlacionam, e o sistema sofre uma transição de fase. A existência de correlações de longo-alcance é responsável pelo comportamento singular das funções termodinâmicas.

1.1.1 Expoentes Críticos

Como podemos observar na Fig.(1.1), na transição de segunda ordem, a magnetização varia continuamente com o aumento da temperatura até se tornar nula na temperatura de transição T_c . Em torno de T_c , a magnetização varia com a temperatura de acordo com

uma lei de potência definida por

$$m \sim |t|^\beta,$$

onde $t = 1 - T/T_c$ é a temperatura reduzida, T é a temperatura absoluta e β é um expoente crítico. Além da magnetização, outras grandezas termodinâmicas apresentam singularidades no ponto crítico. Tais singularidades também são caracterizadas por uma lei de potência ao redor do ponto crítico, cada qual com um expoente crítico bem definido. Em geral, para um sistema canônico que sofre transição de 2ª ordem (contínua), ao redor do ponto crítico ($H = 0, T = T_c$) as grandezas termodinâmicas apresentam os seguintes comportamentos assintóticos:

a) Magnetização

$$M(T, H) = -\frac{\partial g}{\partial H} = \begin{cases} M(t, H = 0) \approx (-t)^\beta, (t \rightarrow 0^-) \\ M(t = 0, H) \approx H^{1/\delta}, (H \rightarrow 0^+) \end{cases}. \quad (1.1)$$

Note que $M(T, H)$ é a grandeza canonicamente conjugada ao campo H , assim sendo, para o antiferromagneto m_s está acoplada (conjugada) com o campo *staggered* H_s .

b) Susceptibilidade

$$\chi_o(t) = -\left(\frac{\partial^2 g}{\partial H^2}\right)_{H=0} \approx |t|^{-\gamma}, \quad (1.2)$$

c) Calor específico

$$C_o(t) = -T \left(\frac{\partial^2 g}{\partial T^2}\right) \approx |t|^{-\alpha}, \quad (1.3)$$

d) Função de correlação

$$G_c(r) = \langle \vec{\sigma}(0) \bullet \vec{\sigma}(\vec{r}) \rangle - \langle \vec{\sigma}(0) \rangle \bullet \langle \vec{\sigma}(\vec{r}) \rangle, \quad (1.4)$$

$$G_c(r) \approx \frac{\exp(-r/\xi)}{r^{d-2+\eta}}, \quad (r \rightarrow \infty), \quad (1.5)$$

onde $\xi \approx |t|^{-\nu}$ é o comprimento de correlação que mede o tamanho médio dos aglomerados correlacionados.

Baseados em argumentos de estabilidade dos potenciais termodinâmicos, vários autores obtiveram relações de desigualdade entre os expoentes críticos, tais como:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \alpha + 2\beta + \gamma \geq 2, & \text{(Rushbrooke,1963)} \\ \alpha + \beta(1 + \delta) \geq 2, & \text{(Griffiths,1965)} \\ \nu d \geq 2 - \alpha, & \text{(Josephson,1967)} \\ (2 - \eta)\nu \geq \gamma, & \text{(Fisher,1969)}. \end{array} \right. \quad (1.6)$$

Os expoentes críticos $\{\alpha, \beta, \gamma, \delta, \nu, \eta\}$ dependem fortemente da dimensionalidade da rede (d) e da dimensão do parâmetro de ordem (n) para sistemas com interação de curto alcance. Por exemplo, para o modelo de Ising em duas dimensões ($n = 1, d = 2$) temos a presença de uma transição de fase em $\frac{k_b T_c}{J} = 2.269\dots$ com os seguintes expoentes críticos exatos: $\{\alpha = 0(\log), \beta = \frac{1}{8}, \gamma = \frac{7}{4}, \delta = 15, \nu = 1, \eta = 1/4\}$, enquanto o modelo de Heisenberg isotrópico ($n = 3$) em duas dimensões ($d = 2$) não apresenta transição de fase ($T_c = 0$) segundo o teorema de Mermin-Wagner[1]. Por outro lado, o modelo XY ($n = 2, d = 2$) não apresenta ordem de longo-alcance convencional, mas apresenta uma ordem topológica associada aos vórtices formados pelos spins que é destruída numa dada temperatura característica T_{KT} onde o comprimento de correlação diverge exponencialmente[2]. Essa dependência dos expoentes críticos com os valores de n e d é o que define a **Classe de Universalidade**. Essas idéias culminaram na década de 70 com o desenvolvimento da teoria do grupo de renormalização, que rendeu o prêmio Nobel de Física a K. G. Wilson[3].

Outra característica marcante dessa classe (ou hipótese) de universalidade é a independência dos expoentes críticos com o valor do spin (S), assim o modelo de Heisenberg quântico de spin $\frac{1}{2}$ 3D tem os mesmos expoentes do seu equivalente clássico ($S = \infty$)[4, 5] bem como seu equivalente quântico antiferromagnético numa rede 3D não frustrada[6, 7].

Existem, porém, alguns modelos que violam a hipótese de universalidade. O primeiro modelo exatamente solúvel por Baxter[8, 9] é o de oito vértices, que apresenta uma linha crítica no diagrama de fase com os parâmetros do Hamiltoniano onde os expoentes

críticos variam continuamente. Este modelo é uma generalização para a descrição de cristais com ligação de hidrogênio. Seja μ o parâmetro presente no modelo de oito vértices, então Baxter mostrou que os expoentes críticos apresentam os seguintes valores: $\alpha = 2 - \frac{\pi}{\mu}$, $\beta = \frac{\pi}{16\mu}$, $\nu = \frac{\pi}{2\mu}$, $\delta = 15$, $\eta = \frac{1}{4}$. Suzuki[10] propôs uma pequena hipótese de universalidade, no qual definiu os expoentes críticos em termos do inverso do expoente crítico do comprimento de correlação ($\frac{1}{\nu}$). Desta forma os expoentes críticos reduzidos $\{\bar{\alpha} \equiv \frac{2-\alpha}{\nu} = 2, \bar{\beta} = \frac{\beta}{\nu} = \frac{1}{8} \text{ e } \bar{\gamma} = \frac{\gamma}{\nu} = \frac{7}{4}\}$ são independentes do parâmetro μ . Outro modelo que viola a hipótese de universalidade é o Ising numa rede quadrada com interações de primeiros (J) e segundos (J') vizinhos. Os primeiros estudos indicam na região $|J'/J| < \frac{1}{2}$ uma variação contínua dos expoentes críticos com o parâmetro $\alpha = J'/J$ [11], no entanto, resultados recentes tem mostrado que o conceito de classe de universalidade tem de ser estendido, por exemplo, se $J' < 0$ e $J > 0$ (sistemas Lifshitz (N, d, m)).

A determinação experimental dos expoentes críticos $\{\beta, \delta, \gamma, \alpha, \eta, \nu\}$ depende especialmente da escolha do intervalo para a variável t . O intervalo considerado pequeno é uma escolha delicada que é fortemente influenciada pelo tipo de material analisado, ou seja, o primeiro problema técnico para os físicos experimentais é identificar a região crítica (intervalo para t), região esta onde temos fortes flutuações térmicas⁴. Para sistemas magnéticos escolhe-se para região crítica $|t| \simeq 10^{-3}$, enquanto que para supercondutores temos $|t| \simeq 10^{-10}$, transição *lambda* (H_c^4) $|t| \simeq 10^{-7}$. Esta escolha da região crítica é feita baseada no fato de que a medida do expoente crítico não é afetada por esta escolha, e conseqüentemente a inclinação da curva (reta) do gráfico $\ln(f(t))$ versus $\ln(|t|)$ está relacionada com o seu expoente crítico associado.

Temos da solução exata do modelo de Ising 2D, os seguintes expoentes críticos $\{\beta = \frac{1}{8}, \gamma = \frac{7}{4}, \delta = 15, \alpha = 0, \nu = 1, \eta = \frac{1}{4}\}$ que satisfazem igualdades das relações dadas nas Eqs.(1.6). Assim sendo, esperamos para quaisquer sistemas que os expoentes críticos não

⁴Do teorema da flutuação-dissipação temos que a susceptibilidade magnética, que diverge em $T = T_c$ (com $H = 0$), está relacionada com a flutuação da magnetização e representa na realidade a função de correlação das flutuações dos spins (função de correlação).

Modelo	β	γ	δ	α	ν	η
Ising 2D	1/8	7/4	15	0 (<i>log</i>)	1	1/4
Ising 3D	0.33	1.24	4.8	0.10	0.63	0.04
XY 3D	0.34	1.30	4.8	0.01	0.66	0.04
Heisenberg 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
Materiais	β	γ	δ	α	ν	η
Fe	0.39	1.33	4.35	-0.11	-	-
Co	0.44	1.23	3.35	-0.095	-	-
Ni	0.38	1.34	4.58	-0.10	-	-
Fe _{0.9} Al _{0.1}	0.41	1.33	4.28	-0.16	-	-
Fe _{0.8} Al _{0.2}	0.42	1.35	4.26	-0.20	-	-
Gd _{0.67} Co _{0.33}	0.41	1.16	3.60	0.02	-	-
Gd _{0.8} Co _{0.2}	0.44	1.29	3.96	-0.17	-	-

Tabela I.1: Valores teóricos e experimentais dos expoentes críticos

sejam independentes entre si mas guardem certas relações ⁵ que postulamos ser dadas por

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha + 2\beta + \gamma = 2, \\ \alpha + \beta(\delta + 1) = 2, \\ \gamma = \beta(\delta - 1), \\ \nu d = 2 - \alpha, \\ (2 - \eta)\nu = \gamma, \end{array} \right. \quad (1.7)$$

onde d é a dimensionalidade do sistema, que para o modelo de Ising acima temos $d = 2$.

Na Tabela-1.1 apresentamos, resumidamente, os valores dos expoentes críticos β , γ , α , δ , ν , η de modelos teóricos que apresentam transição de fase de segunda ordem, e comparamos com alguns valores experimentais. Os resultados dos expoentes obtidos via aproximação de campo médio são universais e independem da dimensão e simetria do Hamiltoniano.

⁵Estas relações postuladas são baseadas nas desigualdades Eq.(1.6) que para o modelo de Ising 2d temos a igualdade exata.

Nessa tabela, observamos que para a simetria Ising os expoentes críticos são distintos quando analisados em dimensões diferentes $d = 2$ e $d = 3$, mas o uso de topologias diferentes numa mesma dimensão estes expoentes são únicos. Ou seja, os expoentes críticos do modelo de Ising 3D numa rede cúbica simples e numa rede cúbica de corpo centrado, são os mesmos. A aproximação de campo médio despreza as flutuações térmicas, que são relevantes na criticalidade, por isto, foi argumentado por Ginzburg (conhecida como critério de Ginzburg [12]) que para $d > 4$ os expoentes críticos são universais, independem do tipo de modelo analisado e que os valores de campo médio são considerados exatos. De uma outra maneira, dizemos que para altas dimensões $d > 4$ as flutuações são irrelevantes. Outro resultado teórico interessante observado na Tabela 1.1, tem relação com as universalidades dos expoentes δ e η para os três modelos analisados, fato corroborado por cálculos de grupo de renormalização no espaço real[13].

1.1.2 Hipótese de Widom e Universalidade

A solução exata do modelo de Ising em duas dimensões sem campo externo [14], representa o marco da época moderna do estudo de transição de fase e fenômenos críticos. Com conhecimento prévio desta solução exata, Widom [15], Domb e Hunter [16], observaram que quando os parâmetros que caracterizam a região crítica (t e H) variam, as funções termodinâmicas preservam a dependência funcional, mudando apenas em escala. Assim, o comportamento crítico de um sistema é ditado pela parte singular das funções termodinâmicas, a qual pode ser descrita apenas em termos dos parâmetros que traduzem as “distâncias ” ao ponto crítico. Desta maneira, foi assumida para a parte singular da energia livre uma função homogênea generalizada do tipo

$$g_{sing}(\lambda^x t, \lambda^y H) = \lambda g_{sing}(t, H), \quad (1.8)$$

onde os dois expoentes x e y definem o grau de homogeneidade, fazendo com que a Eq.(1.8) seja verdadeira para qualquer valor de λ . Embora não permita uma abordagem

microscópica dos fenômenos críticos, a hipótese de escala aponta um caminho para generalizar a equação de Curie-Weiss, obtendo apenas os expoentes críticos em função dos parâmetros x e y , isto é,

$$\begin{cases} \beta = \frac{1-y}{x}, \\ \gamma = \frac{2y-1}{x}, \\ \delta = \frac{y}{1-y}, \\ \alpha = \frac{2x-1}{x}, \end{cases} \quad (1.9)$$

combinando as relações acima, mostramos, por exemplo, as identidades de Rushbrooke: $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$, Griffiths: $\alpha + \beta(\delta + 1) = 2$ e Widom: $\gamma = \beta(\delta - 1)$. Além de relacionar os expoentes críticos por intermédio de igualdades, Eq.(1.9), a hipótese de escala Eq.(1.8) faz previsões específicas com relação a equação de estado magnética. Diferenciando ambos os lados da Eq.(1.8) na variável H , obtemos que

$$M(\lambda^x t, \lambda^y H) = \lambda^{1-y} M(t, H), \quad (1.10)$$

e escolhendo $\lambda^x |t| = 1$, encontramos

$$\frac{M(t, H)}{|t|^\beta} = M\left(1, \frac{H}{|t|^\Delta}\right), \quad (1.11)$$

onde temos usado as relações (1.11), sendo $\Delta = \beta\delta = \beta + \gamma$. Em termos das variáveis $m = \frac{M(t, H)}{|t|^\beta}$ e $h = \frac{H}{|t|^\Delta}$, denominados de magnetização e campo escalares, respectivamente, a Eq. (1.11) pode ser reescrita na forma reduzida

$$m = F_\pm(h), \quad (1.12)$$

onde o lado direito da Eq.(1.12) é uma função apenas da variável renormalizada h e o sinal \pm indica se a temperatura crítica é atingida a partir da fase desordenada ($T = T_c^+$) ou da fase ordenada ($T = T_c^-$). A Eq.(1.12) é uma equação de estado magnética ou de escala visto que ela relaciona as variáveis M , H e T . Além disso, esta relação implica que

m como uma função de h recai sobre duas curvas universais diferentes, ou seja, $F_+(h)$ para temperaturas acima de T_c e $F_-(h)$ para temperaturas abaixo de T_c . Na Fig.(1.2) temos os resultados experimentais para o ferromagneto $CrBr_3$ [17].

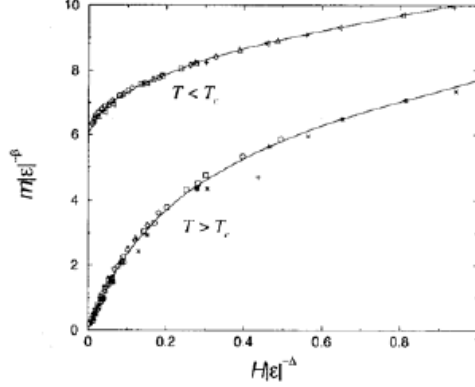


Figura 1.2: Comportamento de $\frac{H}{|t|^\Delta}$ versus $\frac{M(t,H)}{|t|^\beta}$ para o composto ferromagnético $CrBr_3$ obtido experimentalmente[17]. Observe os colapsos das duas curvas, uma para $T > T_c$ e a outra para $T < T_c$ confirmando a hipótese de Widom.

Resultados análogos para a susceptibilidade $\chi(t, H)$ e calor específico a campo constante $C_H(t, H)$ podem ser obtidos a partir da diferenciação da Eq.(1.8) e escolhendo também $\lambda^x |t| = 1$. Assim sendo, encontramos os seguintes resultados:

$$\frac{\chi(t, H)}{|t|^{-\gamma}} = \chi\left(\frac{t}{|t|}, \frac{H}{|t|}\right) = G_{\pm}(h), \quad (1.13)$$

$$\frac{C_H(t, H)}{|t|^{-\alpha}} = C_H\left(\frac{t}{|t|}, \frac{H}{|t|}\right) = Y_{\pm}(h), \quad (1.14)$$

onde $G_{\pm}(h)$ e $Y_{\pm}(h)$ são outras funções universais.

1.1.3 Argumento de Kadanoff

Supondo que a hipótese de escala Eq.(1.8) é verdadeira, necessita-se de uma explicação microscópica para tal relação. Baseado no fato de que, próximo do ponto crítico as

correlações do sistema têm alcance muito grande ($\xi \rightarrow \infty$) e detalhes de curto-alcance não são fundamentais para seu comportamento, Kadanoff[18] apresentou um argumento heurístico para chegar a Eq.(1.8). Este argumento baseia-se em dividir a rede de tamanho a^d (d é a dimensão e a o parâmetro da rede) em células de tamanho a^{td} (onde $a^{td} = La$ e $a \ll La \ll \xi$ perto de T_c), conforme mostra a Fig.(1.3).

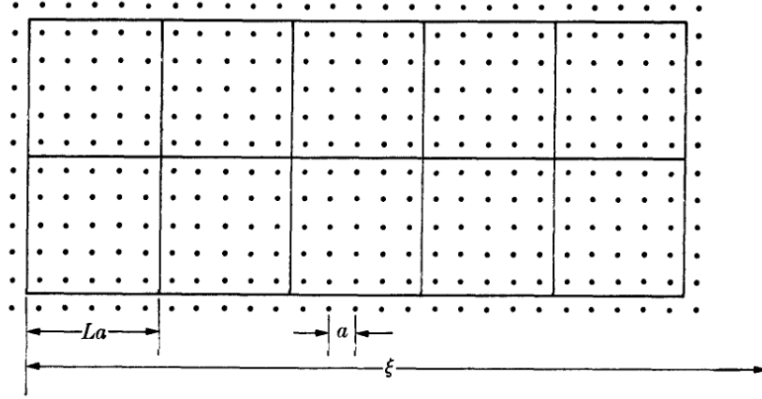


Figura 1.3: Divisão de uma rede bidimensional em células de tamanho La , sendo a a distância entre primeiros-vizinhos da rede. A escolha de L é de tal forma que $L \gg 1$ e $La \ll \xi$ [19].

Substituindo cada célula por um único spin, o que corresponde à eliminação de graus de liberdade, e supondo que o Hamiltoniano do novo sistema terá a mesma forma do Hamiltoniano original, com parâmetros renormalizados, é possível escrever a Eq.(1.8) admitindo a invariância da função de partição, identificando L com o fator de escala da renormalização.

Após a renormalização temos os novos parâmetros $H' = L^{y_h} H$ (campo) e $J' = L^{y_t} J$ (acoplamento) modificados. Próximo da criticalidade a função de partição fica invariante na renormalização, ou seja,

$$Z_{N'}(t', H) \simeq Z_N(t, H), \quad (1.15)$$

onde $t' = L^{y_t} t$ e $L = (N/N')^{1/d}$ sendo d a dimensão do espaço. Com a relação acima a hipótese de Widon fica completamente justificada. As determinações de y_t e y_h (ex-

poentes críticos térmico e magnético, respectivamente) são feitas a partir do processo de renormalização usado. A base de qualquer proposta aproximativa de GR tem como ponto de partida a relação para a energia livre (hipótese de Widom) dada por

$$g_N(t, H) = L^d g_{N'}(t', H'), \quad (1.16)$$

sendo

$$g_N(t, H) = -\frac{K_B T}{N} \ln [Z_N(t, H)]. \quad (1.17)$$

1.1.4 Teoria de Landau

A teoria de Landau [19] permite determinar, qualitativamente, os diagramas de fases nas vizinhanças dos pontos críticos e multicríticos, trata na realidade da transição entre fases que possuem simetrias distintas. Antes do desenvolvimento desta teoria fenomenológica, vamos fazer algumas considerações relevantes para o entendimento desta teoria. Seja um sistema com n variáveis termodinâmicas independentes, caracterizado por $n + 1$ campos $\{H_0, H_1 \dots H_n\}$, sendo um deles (H_0 , por exemplo) função dos demais. Por exemplo, temperatura (T), pressão (P), potencial químico (μ), campo magnético (H) e elétrico (E) são denominados, genericamente, de campos. O campo dependente, para o qual usaremos o símbolo $\phi(H_1, H_2, H_n)$, será chamado de *potencial termodinâmico*. As grandezas canonicamente conjugadas são denominadas de densidades $\{\rho_i\}$ e podem ser obtidas por simples derivadas, ou seja,

$$\rho_j = - \left(\frac{\partial \phi}{\partial H_j} \right)_{H_i} \quad \text{com } i \neq j. \quad (1.18)$$

Os potenciais termodinâmicos são funções tipo energia para as quais o equilíbrio termodinâmico corresponde a um mínimo global. Também são chamados de energia livre, uma nomenclatura que nos lembra as origens da termodinâmica em problemas de engenharia: onde se deseja saber quanto de energia está livre para a realização de trabalho mecânico em diversas situações. A existência de vários potenciais termodinâmicos está

relacionada com a necessidade prática de se descrever sistemas através dessa ou daquela variável de estado. Por exemplo, em algumas situações pode ser trivial controlar a temperatura e o volume do sistema, enquanto que a pressão e a entropia ficam livres para tomarem qualquer valor. Em outros casos pode ser mais simples controlar a temperatura e a pressão, deixando o volume livre. A energia interna é um potencial termodinâmico adequado para uma descrição em termos de X (volume, por exemplo), S (entropia) e N (número de partículas). Temos outros tipos de potenciais termodinâmicos mais comuns que são: as energias livres de Helmholtz e de Gibbs, e o grande potencial termodinâmico.

Na formulação da termodinâmica é fundamental que energia e a entropia sejam quantidades *extensivas*. Absolutamente, toda estrutura matemática da termodinâmica depende dessa propriedade. No caso genérico de uma variável, por exemplo X , se definirmos $x = X/N$, onde N é o número de partículas do sistema, podemos garantir que X é extensiva se x não depender de N quando $N \rightarrow \infty$. A condição $N \rightarrow \infty$ é chamada de *limite termodinâmico*. Em sistemas contínuos podemos estabelecer o limite termodinâmico através do volume, ou seja, $V \rightarrow \infty$, mas lembrando que o limite deve ser tomado mantendo-se a densidade (de massa ou de partículas) constante. É sempre possível escolher o potencial $\phi(H_1, H_2, H_n)$ como uma função dos campos, implicando na estabilidade termodinâmica do sistema.

Quando duas fases I e II estão em equilíbrio, cada campo deve ter o mesmo valor em ambas as fases, isto é, $H_j^I = H_j^{II}$ ($j = 0, 1, \dots, n$). Se pensarmos no espaço dos n campos independentes, esta condição de equilíbrio definirá uma hipersuperfície de dimensão $(n - 1)$ neste espaço. Desde que pelo menos uma das densidades seja uma função descontínua dos campos nesta hipersuperfície, então teremos uma superfície de coexistência ou de transição de primeira ordem. Caso contrário teremos superfície crítica, onde as diferenças de densidade entre duas fases tendem a zero continuamente.

No diagrama de fase pode existir pontos nos quais várias fases coexistem, e são denominados de **pontos multicríticos**. De acordo com as regras de Gibbs e Zernike, a observação de tais pontos numa mistura de substâncias puras é possível apenas acima de

um certo número de componentes. Um **ponto bicrítico** (duas fases críticas em coexistência ou duas linhas críticas que se interceptam), só pode ser observado numa mistura com pelo menos 4 componentes. Um **ponto tetracrítico** (quatro fases ordinárias se tornam idênticas), só pode ser observado numa mistura de no mínimo cinco componentes, etc.

O **ponto tricrítico** (ver Fig.(1.4)) corresponde ao ponto onde três fases se tornam idênticas ou três linhas críticas que se interceptam. Nessa figura, mostramos esquematicamente o diagrama de fase tridimensional no espaço dos parâmetros (T, H, H_s) , referente a um sistema antiferromagnético. Temos aqui $H_s = H^+$ que representa o campo *staggered* conjugado com o parâmetro de ordem m_s do sistema antiferromagnético. A linha pontilhada representa, no plano $T - H$, a linha de transição de primeira ordem (coexistência das fases AF e P). A linha contínua representa a transição de fase de segunda ordem. Se considerarmos $H_s \neq 0$ podemos obter duas superfícies S_1 e S_2 de transição de fase de acordo com $H_s < 0$ e $H_s > 0$, respectivamente. O ponto $(T_t, H_t, 0)$ foi denominado por Griffiths [20] de ponto tricrítico. Este ponto foi detectado experimentalmente em misturas de $H_e^3 - H_e^4$, materiais metamagnéticos (F_eCl_2 e $N_iNO_3 \cdot 2H_2O$) que se caracterizam por alta anisotropia, em modelos teóricos de Blume e Capel, magneto diluído (*annealed*), Ising com campo aleatório, Heisenberg com interação Dzyaloshinski-Moriya e metamagneto diluído.

Ao redor do ponto tricrítico $t = (T - T_t)/T_t \ll 1$ e $H = H_t$ (metamagneto), as grandezas termodinâmicas apresentam comportamentos de leis de potências com expoentes críticos diferentes dos relacionados ao longo da linha crítica. Por exemplo, na aproximação de campo médio $\beta = \frac{1}{2}$ na linha crítica e $\beta_t = \frac{1}{4}$ ao redor do PTC.

Na ausência de campo externo, a energia livre F é expandida em termos de potências pares do parâmetro de ordem magnética, por exemplo, onde para o caso de um sistema ferromagnético o parâmetro de ordem é a magnetização. Assim sendo, ficaremos com a

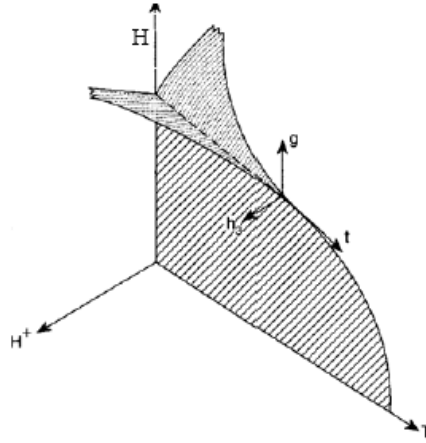


Figura 1.4: Diagrama de fase referente a um sistema antiferromagnético no espaço de parâmetro (T, H, H_s) . S_1 e S_2 representam as superfícies de primeira ordem. A seta em g indica o PTC.

seguinte expansão de Landau para a energia livre:

$$F = \frac{a}{2}m^2 + \frac{b}{2}m^4 + \frac{c}{2}m^6 + \dots, \quad (1.19)$$

onde $a, b, c = f(T)$. Em particular, Landau supôs $a = a_o(T - T_c)$, tal que $a_o > 0$ e T_c é a temperatura crítica. Fazendo uma análise do mínimo da energia livre ($F'(m) = 0$, $F''(m) > 0$), ficaremos com os seguintes resultados para a primeira e segunda derivadas até o termo de sexta potência em m

$$\frac{\partial F}{\partial m} = ma + 2bm^3 + 3cm^5 = 0, \quad (1.20)$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial m^2} = a + 6bm^2 + 15cm^4 < 0. \quad (1.21)$$

Da Eq.(1.20) encontramos cinco raízes, ou seja: $m = 0, \pm m_+$ e $\pm m_-$, sendo que $m_{\pm} = \sqrt{\frac{1}{2c}(-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac})}$. Para $a > 0$ devemos ter $T > T_c$ qualquer que seja o valor de b , a solução $m = 0$ é um ponto de mínimo, então apenas as soluções $\pm m_{\pm}$ são

fisicamente aceitáveis, assim sendo a Eq.(1.21) ficará reescrita nesta solução por

$$\left(\frac{\partial^2 F}{\partial m^2}\right)_{m=m_{\pm}} = \frac{1}{c}\sqrt{b^2 - 4ac}m_{\pm}^2, \quad (1.22)$$

resultando que m_- corresponde a um ponto de máximo e m_+ a um o ponto de mínimo e o sistema se encontra num estado ordenado ($m \neq 0$).

Considere agora $a > 0$, $b > 0$ e $c > 0$, então a solução $m = 0$ é um ponto de mínimo, as soluções $m = \pm m_{\pm}$ são complexas. Assim sendo, o único ponto de mínimo é a solução desordenada $m = 0$, e dizemos que o eixo positivo $b > 0$ é uma linha crítica.

Por outro lado, se $a > 0$, $b < 0$ e $c > 0$ as três soluções $m = 0$, $\pm m_+$ são pontos de mínimos, ou seja, o sistema se encontra num estado triplamente degenerado. Escolhemos como referência $F(T, 0) = 0$, obtemos da Eq.(1.20) o seguinte resultado:

$$m_+^2 = -\frac{4a}{b}, \quad (1.23)$$

comparando com a solução $m_{\pm} = \sqrt{\frac{1}{2c}(-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac})}$ obtida acima, encontramos

$$b = -4\sqrt{\frac{ac}{3}}, \quad (1.24)$$

que é uma linha de primeira ordem, onde m tem uma descontinuidade que vai a zero na forma

$$m = \left(\frac{3a}{c}\right)^{1/4}, \quad (1.25)$$

sendo $a = a_o(T_c - T)$. Da Eq.(1.25) obtemos na aproximação de campo médio o expoente tricrítico $\beta_t = 1/4$.

Portanto, podemos concluir que o conjunto de pontos críticos que geram a linha de transição de segunda ordem são dados pelas seguintes condições: $a = 0$, $b > 0$ e $c > 0$. O ponto que separa na linha de transição de fase as regiões de primeira e de segunda

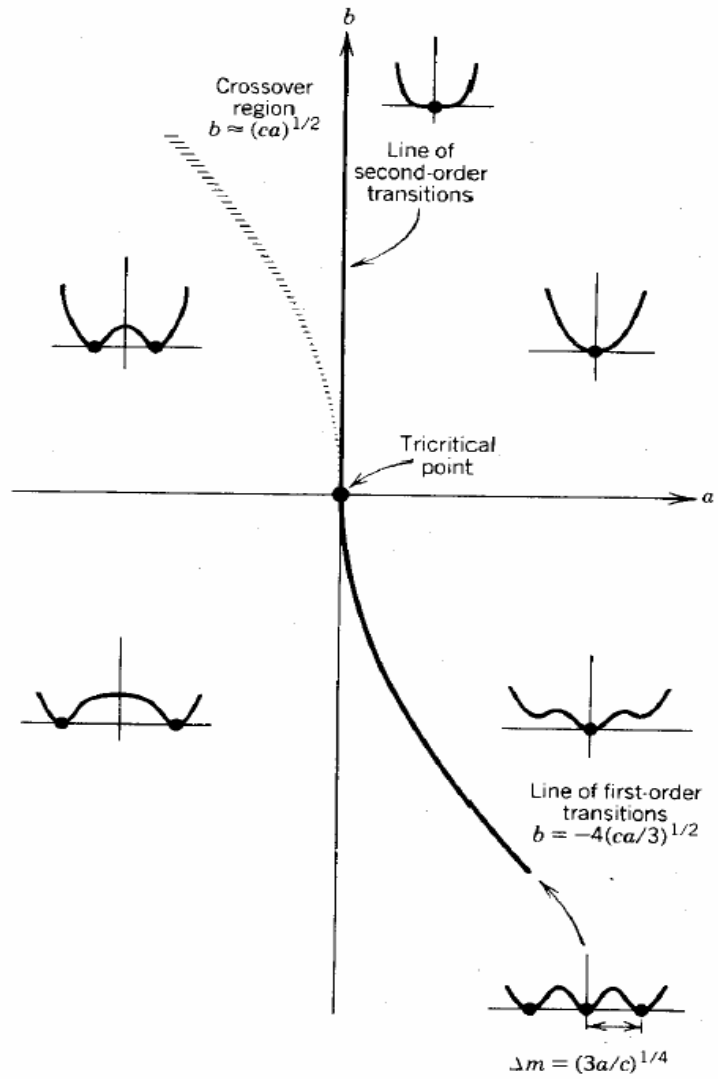


Figura 1.5: Comportamento da energia livre no plano $a - b$. Sendo indicadas as regiões de transição de primeira e segunda ordem, além do ponto tricrítico.

ordem é denominado de ponto tricrítico (PTC), as condições para determinação deste ponto são dadas pelas seguintes expressões: $a = 0$, $b = 0$ e $c > 0$. É interessante observar que para $a < 0$ e $b < 0$ não existe fase. Estes comportamentos são ilustrados no plano $a - b$ apresentado na Fig.(1.5).

1.2 Técnica do Operador Diferencial (TOD)

A aproximação de campo médio (MFA), nas suas diversas formas (campo molecular, desigualdade de Bogoliubov, interação de longo-alcance, Bragg-Williams), é a primeira e mais simples metodologia utilizada para estudar fenômenos críticos, onde o conceito de campo molecular foi introduzido inicialmente por Weiss [21] para o ferromagnetismo (F) e posteriormente por Néel [22] para o antiferromagnetismo (AF). MFA encontra certas inconsistências nas propriedades magnéticas quando comparamos com resultados experimentais, sobretudo por causa do “desprezo” das funções de correlações presentes no tratamento de muitos corpos interagentes. Por exemplo, MFA prediz erroneamente uma transição de fase para o modelo de Ising 1d ($T_c \neq 0$); obtém expoentes críticos universais⁶ $\{\beta = 1/2, \gamma = 1, \delta = 3, \alpha = 0, \eta = 0, \nu = 1/2\}$ independentes da dimensão- d e simetria do Hamiltoniano.

Várias outras técnicas têm sido usadas para estudar modelos magnéticos, entre essas podemos citar a Teoria de Campo Efetivo (*Effective Field Theory* - **EFT**). Esta teoria é baseada em aglomerados finitos com N sítios centrais (*EFT-N*), com uma quantidade de z vizinhos para cada sítio que indica a topologia da rede e também a dimensão espacial D . Os spins da vizinhança, em relação aos sítios centrais, apresentam uma orientação espacial bem definida, sendo usada uma direção privilegiada para os spins da vizinhança (aproximação axial), enquanto que as variáveis de spins dos sítios centrais têm a liberdade de usar todas as suas componentes espaciais.

⁶A medida que a dimensão espacial cresce, as flutuações térmicas decrescem e dizemos que para $d > 4$ as flutuações são irrelevantes, tornando a solução MFA exata.

No *ensemble* canônico, a média térmica de uma dada grandeza \mathcal{O} é dada por

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \left\langle \frac{\text{Tr} \hat{\mathcal{O}} \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}})}{Z} \right\rangle, \quad (1.26)$$

onde $Z = \text{Tr} \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}})$ é a função de partição, $\hat{\mathcal{O}}$ é o operador associado ao observável \mathcal{O} , $\beta = 1/k_B T$ (k_B é a constante de Boltzmann e T é a temperatura absoluta) e $\text{Tr}\{\dots\}$ é o funcional traço no espaço dos spins associado ao Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$.

Dado o Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$ com N spins é sempre possível separar o sistema em duas partes: uma representando o aglomerado (*cluster*) finito Ω com $n < N$ spins, que descreve as interações dentro do aglomerado e sua vizinhança, e a parte restante Ω' que não possui spins deste aglomerado. Assim sendo, podemos reescrever o Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$ na forma fatorada

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_\Omega + \hat{\mathcal{H}}_{\Omega'}, \quad (1.27)$$

onde $\hat{\mathcal{H}}_\Omega$ representa o Hamiltoniano do aglomerado Ω e $\hat{\mathcal{H}}_{\Omega'}$ representa a parte do Hamiltoniano restante (Ω').

Escolhemos uma grandeza que contenha apenas variáveis de spin do aglomerado Ω , ou seja, $\mathcal{O}(\Omega)$. Caso $\hat{\mathcal{H}}_\Omega$ e $\hat{\mathcal{H}}_{\Omega'}$ comutem, isto é, $[\hat{\mathcal{H}}_\Omega, \hat{\mathcal{H}}_{\Omega'}] = 0$, o traço da Eq.(1.26) pode ser efetuado em dois passos: primeiramente o traço sobre o aglomerado finito (Tr_Ω) e em seguida sobre os spins da vizinhança não pertencentes ao aglomerado ($\text{Tr}'_{\Omega'}$), acompanhado da fatoração

$$\exp \left[-\beta(\hat{\mathcal{H}}_\Omega + \hat{\mathcal{H}}_{\Omega'}) \right] = \exp \left[-\beta \hat{\mathcal{H}}_\Omega \right] \exp \left[-\beta \hat{\mathcal{H}}'_{\Omega'} \right], \quad (1.28)$$

segundo podemos definir o traço $\text{Tr}_\Omega = \text{Tr}'_{\Omega'} \text{Tr}_\Omega$, e desta maneira, obtemos o valor médio a partir da Eq.(1.27) por

$$\langle \mathcal{O}(\Omega) \rangle = \frac{\text{Tr}'_{\Omega'} \exp \left(-\beta \hat{\mathcal{H}}'_{\Omega'} \right) \text{Tr}_\Omega \left[\hat{\mathcal{O}}(\Omega) \exp \left(-\beta \hat{\mathcal{H}}_\Omega \right) \right]}{Z}, \quad (1.29)$$

onde separamos os traços para cada termo. Multiplicando o numerador da Eq.(1.29) por um fator unidade do tipo

$$1 \equiv \frac{\text{Tr} \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}})}{\text{Tr} \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}})} = \frac{\text{Tr} \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}})}{\text{Tr}'_{\Omega'} \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}}'_{\Omega'}) \text{Tr}_{\Omega} \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}}_{\Omega})}, \quad (1.30)$$

ficaremos com

$$\langle \mathcal{O}(\Omega) \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\text{Tr} \left\{ \text{Tr}_{\Omega} \left[\hat{\mathcal{O}}(\Omega) \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}}_{\Omega}) \right] \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}}) \right\}}{\text{Tr}_{\Omega} \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}}_{\Omega})}. \quad (1.31)$$

Combinando, mediante as propriedades de separação do traço e do Hamiltoniano, na Eq.(1.31), obtemos

$$\langle \mathcal{O}(\Omega) \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left\{ \frac{\text{Tr}_{\Omega} \left[\hat{\mathcal{O}}(\Omega) \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}}_{\Omega}) \right]}{\text{Tr}_{\Omega} \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}}_{\Omega})} \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}}) \right\}. \quad (1.32)$$

Comparando a Eq.(1.32) com a definição dada pela Eq.(1.26), teremos que o valor médio da grandeza $\hat{\mathcal{O}}(\Omega)$ fica reduzido ao cálculo parcial no aglomerado finito, ou seja,

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \left\langle \frac{\text{Tr}_{\Omega} \left[\hat{\mathcal{O}}(\Omega) \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}}_{\Omega}) \right]}{\text{Tr}_{\Omega} \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}}_{\Omega})} \right\rangle. \quad (1.33)$$

Podemos ainda generalizar a Eq.(1.33) para obter a função de correlação $\langle A(\Omega')B(\Omega) \rangle$, onde $A(\Omega')$ é uma grandeza que não contém variáveis de spin do aglomerado Ω , que seguindo os procedimentos adotados anteriormente obtemos

$$\langle A(\Omega')B(\Omega) \rangle = \left\langle A(\Omega') \frac{\text{Tr} \left[B(\Omega) \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}}_{\Omega}) \right]}{\text{Tr}_{\Omega} \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}}_{\Omega})} \right\rangle. \quad (1.34)$$

A Eq.(1.34) é exata para sistemas clássicos, pois neste limite as variáveis de spin

presentes no Hamiltoniano comutam. Por outro lado, para modelos quânticos, a Eq.(1.34) não é exata uma vez que $[\widehat{\mathcal{H}}_\Omega, \widehat{\mathcal{H}}_{\Omega'}] \neq 0$. Sá Barreto e Fittipaldi [23] aplicaram de forma aproximada a Eq.(1.34) para estudar as propriedades termodinâmicas e a criticalidade do modelo de Ising $-\frac{1}{2}$ com campo transversal.

Vamos considerar como protótipo de estudo o modelo de Ising descrito pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_N = -J \sum_{\langle i \neq j \rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad (1.35)$$

onde J ($J > 0$ e $J < 0$ corresponde aos sistemas ferromagnético e antiferromagnético, respectivamente) é a interação de troca, σ_i ($= \pm 1$ para um sistema de spins $S = 1/2$) denota as variáveis de spin e a notação $\langle i \neq j \rangle$ representa a soma sobre os primeiros vizinhos (z) numa rede cristalina.

A título de ilustração, usaremos um aglomerado com $N = 1$ spin (ou aglomerado com um sítio central) onde, da Eq.(1.35) reescrevemos o Hamiltoniano para este aglomerado na forma

$$\mathcal{H}_1 = -J \sigma_1 \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}}, \quad (1.36)$$

sendo que $\vec{\delta}$ representa o vetor primeiros vizinhos ao redor do spin σ_1 . Para o sistema ferromagnético, a magnetização por spin $m = \langle \sigma_1 \rangle$ é obtida a partir da Eq.(1.33), usando $\mathcal{O} = \sigma_1$, ou seja,

$$m = \langle \sigma_1 \rangle = \left\langle \tanh \left(K \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}} \right) \right\rangle, \quad (1.37)$$

sendo que $K = \beta J$.

Esta identidade ficou sendo conhecida como identidade de Callen e Suzuki [24, 25], onde temos no lado direito uma média estatística de variáveis de spins (vizinhos ao sítio σ_1) do argumento da função tangente hiperbólica. A aproximação de campo médio (MFA) equivale a reescrever a Eq.(1.37) como uma média no argumento, obtendo assim uma expressão auto-consistente para a magnetização tipo Curie-Weiss. A identidade de Callen-Suzuki foi primeiramente aplicada para se obter funções de correlação e

temperatura crítica do modelo de Ising 2D usando o método da expansão em série de altas temperaturas. Diversos autores, tais como: Matsudara [26], Frank e Mitran [27], Tanaka e Uryû [28], Zhang [29], usaram a identidade de Callen-Suzuki para se obter as propriedades críticas do modelo de Ising de spin $S = 1/2$.

A técnica do operador diferencial (TOD) desenvolvida por Honmura e Kaneyoshi [30], tem como ponto de partida o uso da identidade

$$\exp(\alpha D_x)F(x) = F(x + \alpha), \quad (1.38)$$

onde $D_x = \frac{\partial}{\partial x}$ é denominado de operador diferencial em relação a variável x e $F(x)$ é uma função analítica. Escrita de outra maneira temos:

$$F(\alpha) = \exp(\alpha.D_x)F(x)|_{x=0}.$$

Definindo $F(x) = \tanh(x)$, a Eq.(1.37) ficará reescrita na forma

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^z \exp(K\sigma_{1+\vec{\delta}}D_x) \right\rangle F(x)|_{x=0}. \quad (1.39)$$

Usando a identidade de van der Waerden para a variável de spin $\sigma_i = \pm 1$ ⁷, dada por

$$e^{\varphi\sigma_i} = \cosh(\varphi) + \sigma_i \sinh(\varphi), \quad (1.40)$$

a Eq.(1.39) ficará

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^z \left[\cosh(KD_x) + \sigma_{1+\vec{\delta}} \sinh(KD_x) \right] \right\rangle F(x)|_{x=0}. \quad (1.41)$$

Vamos desenvolver a Eq.(1.41) para uma rede quadrada ($z = 4$) e denotemos por $\{\sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \sigma_5\}$ os spins vizinhos ao sítio σ_1 , assim sendo, ficaremos com a seguinte

⁷Válida até quando σ_i é matriz 2×2 .

expressão para a magnetização:

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^4 \left[\alpha_x + \sigma_{1+\vec{\delta}} \beta_x \right] \right\rangle F(x)|_{x=0}, \quad (1.42)$$

onde $\alpha_x = \cosh(KD_x)$ e $\beta_x = \sinh(KD_x)$. Sendo $F(x)$ uma função ímpar, ou seja, $F(-x) = -F(x)$, a aplicação de qualquer operador $\hat{\mathcal{O}}_{par}$ na função $F(x)$ no ponto $x = 0$ o resultado é nulo, ou seja, $\hat{\mathcal{O}}_{par} F(x)|_{x=0} = 0$. Desta maneira, a Eq.(1.42) ficará reduzida a forma

$$m = A_1(K) \left\langle \frac{1}{4} (\sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4 + \sigma_5) \right\rangle + A_3(K) \left\langle \frac{1}{4} (\sigma_2\sigma_3\sigma_4 + \sigma_2\sigma_3\sigma_5 + \sigma_3\sigma_4\sigma_5 + \sigma_2\sigma_4\sigma_5) \right\rangle, \quad (1.43)$$

sendo

$$A_1 = 4\alpha_x^3\beta_x F(x)|_{x=0} = \frac{1}{2}(t_4 + 2t_2) \quad (1.44)$$

e

$$A_3 = 4\alpha_x\beta_x^3 F(x)|_{x=0} = \frac{1}{2}(t_4 - 2t_2), \quad (1.45)$$

onde $t_n \equiv \tanh(nK)$. Para obter as expressões de $A_1(K)$ e $A_3(K)$ usamos a identidade do operador diferencial dado pela Eq.(1.38). Aplicando a propriedade da simetria translacional, a Eq.(1.43) ficará sendo dada por

$$m = A_1(K) + A_3(K)\Gamma, \quad (1.46)$$

onde Γ é a função de correlação de três spins dada por

$$\Gamma = \langle \sigma_i \sigma_j \sigma_l \rangle \quad (1.47)$$

com $i \neq j \neq l = 2, 3, 4, 5$.

A Eq.(1.46) é exata, mas de difícil manipulação, pois envolve no segundo membro o

cálculo da função de correlação, gerando assim um sistema infinito de equações acopladas, de várias funções de correlação. Este fato é semelhante ao que acontece no formalismo da função de Green de Zubarev. Assim sendo, algum tipo de aproximação (para o desacoplamento da função de correlação) deve ser usada. A aproximação mais simples consiste em desprezar as correlações entre os spins (*RPA-random phase approximation*), ou seja,

$$\langle \sigma_i \sigma_j \cdots \sigma_l \rangle \simeq \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \cdots \langle \sigma_l \rangle, \quad (1.48)$$

sendo $i \neq j \neq l$.

Usando a aproximação dada na Eq.(1.48) na Eq.(1.46) ficaremos com seguinte resultado para a magnetização:

$$m = \sqrt{\frac{1 - A_1(K)}{A_3(K)}}. \quad (1.49)$$

A temperatura crítica é obtida da Eq.(1.49) fazendo $m \rightarrow 0$, resultando na expressão dada por

$$A_1(K_c) = 1, \quad (1.50)$$

da qual encontramos, a partir de um processo numérico, o seguinte resultado $T_c = K_c^{-1} \simeq 3.09$ ($= 4$, MFA) que pode ser comparada com a solução exata $T_c = 2.27$.

Para uma rede com número de coordenação arbitrário z , podemos aplicar a aproximação dada pela Eq.(1.48) e obter a equação de estado dada por

$$m = [\alpha_x + m\beta_x]^z F(x)|_{x=0}. \quad (1.51)$$

No limite $m \rightarrow 0$, da Eq.(1.51) encontramos T_c resolvendo numericamente a expressão dada por

$$A_1 = z\alpha_x^{z-1}\beta_x F(x)|_{x=0} = 1. \quad (1.52)$$

Para a rede cúbica simples ($z = 6$) obtemos da Eq.(1.52) a temperatura crítica $T_c \simeq 5.07$, que podemos comparar com os resultados de simulação de Monte Carlo

$T_c \simeq 4.51$. Devido o uso da propriedade de cinemática de spin $\sigma_i^2 = 1$, na teoria de campo efetivo em aglomerado com um spin ($EFT - 1$), descrito acima, os resultados quantitativos são superiores aos obtidos por campo médio (MFA). Em particular, o valor exato $T_c = 0$ para a rede unidimensional ($z = 2$) obtida pela Eq.(1.52) representa um grande avanço em relação a MFA. À medida que o número de coordenação z cresce, temos um aumento gradual no valor de T_c , como é esperado fisicamente por tornar os spins mais correlacionados. No limite $z \rightarrow \infty$ temos que $t_c = T_c/z$ converge para o resultado de campo médio $t_c = 1$, onde agora em dimensão infinita ($z \rightarrow \infty$) MFA representa a solução exata.

Outros tipos de desacoplamentos têm sido aplicados na Eq.(1.47). Por exemplo, Kaneyoshi e colaboradores [31] propuseram um desacoplamento em que se leva em consideração as flutuações dos spins ao redor do spin σ_1 na forma dada por

$$\sigma_i = \langle \sigma_i \rangle + \lambda (\sigma_1 - \langle \sigma_i \rangle), \quad (1.53)$$

onde λ representa uma reação (denominada de campo de Onsager) de um spin devido a presença dos vizinhos. Usando esta nova aproximação, Kaneyoshi e colaboradores obtiveram uma temperatura crítica igual a da aproximação de Bethe-Peierls, ou seja,

$$T_c = \frac{2}{\ln\left(\frac{z}{z-2}\right)}. \quad (1.54)$$

Desejando obter melhores valores de T_c , mas mantendo a simplicidade de desacoplamento da aproximação RPA, vamos aumentar o tamanho do aglomerado para $N = 2$ spins. Desta maneira teremos o seguinte Hamiltoniano para o caso Ising

$$\mathcal{H}_N = -J\sigma_1\sigma_2 - J\sigma_1 \sum_{\vec{\delta}_1}^{z-1} \sigma_{1+\vec{\delta}_1} - J\sigma_2 \sum_{\vec{\delta}_2}^{z-1} \sigma_{2+\vec{\delta}_2}. \quad (1.55)$$

Sendo a magnetização definida por $m = \frac{1}{2} \langle \sigma_1 + \sigma_2 \rangle$, obtemos

$$m = \left\langle \frac{\sinh(C_1 + C_2)}{\cosh(C_1 + C_2) + \exp(-2K) \cosh(C_1 + C_2)} \right\rangle, \quad (1.56)$$

sendo

$$C_p = K \sum_{\vec{\delta}_p}^{z-1} \sigma_{p+\vec{\delta}_p}, \quad (p = 1, 2). \quad (1.57)$$

Definindo a função

$$G(x_1, x_2) = \frac{\sinh(x_1 + x_2)}{\cosh(x_1 + x_2) + \exp(-2K) \cosh(x_1 + x_2)}, \quad (1.58)$$

generalizamos a propriedade do operador diferencial, ou seja,

$$\exp(a_1 D_{x_1} + a_2 D_{x_2}) G(x_1, x_2) = G(x_1 + a_1, x_2 + a_2), \quad (1.59)$$

onde $D_\nu = \frac{\partial}{\partial \nu}$ ($\nu = x_1, x_2$) é o operador diferencial. Aplicando a Eq.(1.59) na Eq.(1.56) ficaremos com a seguinte expressão para a magnetização:

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}_1}^{z-1} \exp(K D_{x_1} \sigma_{1+\vec{\delta}_1}) \prod_{\vec{\delta}_2}^{z-1} \exp(K D_{x_2} \sigma_{2+\vec{\delta}_2}) \right\rangle G(x_1, x_2)|_{x_1, x_2=0}. \quad (1.60)$$

Uma análise mais cuidadosa na Eq.(1.60) evidencia logo a presença de dois tipos de vizinhos, expressos através dos produtórios $\prod_{\vec{\delta}_1}^{z-1}$ e $\prod_{\vec{\delta}_2}^{z-1}$. Dependendo da topologia da rede os spins centrais σ_1 e σ_2 podem admitir vizinhos comuns z' desta maneira podemos expandir a Eq.(1.60) resultando

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}_1}^{z-z'-1} \exp(K D_{x_1} \sigma_{1+\vec{\delta}_1}) \prod_{\vec{\delta}_2}^{z-z'-1} \exp(K D_{x_2} \sigma_{2+\vec{\delta}_2}) \prod_{\vec{\delta}}^{z'} \exp [K (D_{x_1} + D_{x_2}) \sigma_{\vec{\delta}}] \right\rangle G(x_1, x_2)|_{x_1, x_2=0}. \quad (1.61)$$

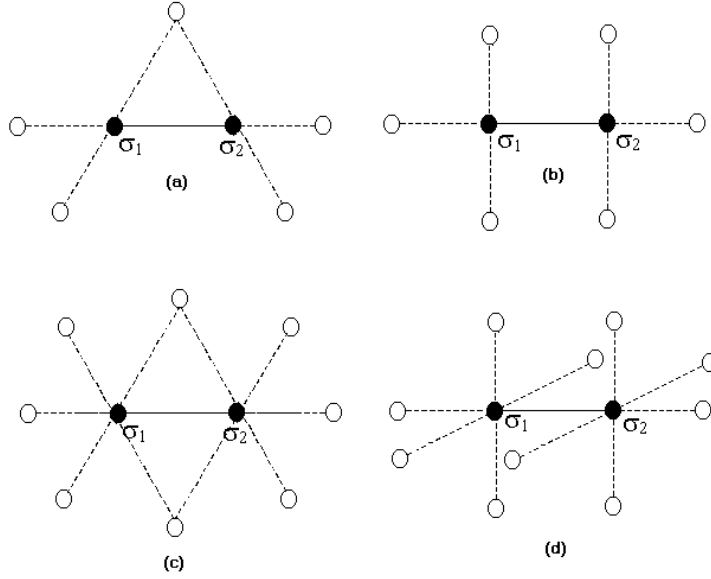


Figura 1.6: Estrutura topológica das redes: (a) kagomé, (b) quadrada, (c) triangular e (d) cúbica simples.

Claramente, a forma explícita de vizinhos, comuns ou não aos sítios 1 e 2, no aglomerado com dois spins centrais assegura a distinção da topologia da rede. Para ilustrar a topologia da rede no aglomerado com dois spins, na Fig.(1.6) apresentamos a rede kagomé ($z = 4$ e $z' = 1$), quadrada ($z = 4$ e $z' = 0$), triangular ($z = 6$ e $z' = 2$) e cúbica simples ($z = 6$ e $z' = 0$).

Usando a identidade de van der Waerden e aproximação linear na Eq.(1.61) obtemos a expressão

$$m = (\alpha_{x_1} + m\beta_{x_1})^{z-z'-1} (\alpha_{x_2} + m\beta_{x_2})^{z-z'-1} (\alpha_{x_1x_2} + m\beta_{x_1x_2})^{z'} G(x_1, x_2)|_{x_1, x_2=0}, \quad (1.62)$$

onde $\alpha_\nu = \cosh(KD_\nu)$, $\beta_\nu = \sinh(KD_\nu)$, $\alpha_{x_1x_2} = \cosh(K(D_{x_1} + D_{x_2}))$ e $\beta_{x_1x_2} = \sinh(K(D_{x_1} + D_{x_2}))$.

No limite $m \rightarrow 0$, podemos determinar a temperatura crítica a partir da Eq.(1.62), na teoria de campo efetivo com aglomerado de dois spins (EFT-2), resolvendo numerica-

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

Tabela I.2: Valores da temperatura crítica para várias redes em 2D e 3D no modelo de Ising-1/2 obtidas via teoria de campo efetivo com aglomerados de 1 spin (EFT-1) e 2 spins (EFT-2). Os resultados EFT são comparados com a solução exata (2d) e simulação de Monte Carlo (3d).

mente a seguinte expressão:

$$A_1^{z,z'}(K_c) = 1, \quad (1.63)$$

sendo

$$A_1^{z,z'}(K_c) = \left[2(z - z' - 1)\alpha_{x_1}^{z-z'-2}\alpha_{x_2}^{z-z'-1}\beta_{x_1} + z'\alpha_{x_2}^{z-z'-1}\alpha_{x_1}^{z-z'-1}\alpha_{x_1x_2}^{z'-1}\beta_{x_1x_2} \right] G(x_1, x_2)|_{x_1, x_2=0}. \quad (1.64)$$

Da Eq.(1.63) obtemos T_c para diversas topologias de redes. Na Tabela-1.2 apresentamos os resultados para T_c obtidos por EFT-1 e EFT-2, que são comparados com as soluções exatas em redes bidimensionais (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 a análise é feita com relação a topologia da rede. Porém, os resultados quantitativos para T_c não estão ainda em boa concordância com os valores rigorosos (exatos e simulações de Monte Carlo). Uma análise de tamanho finito pode também ser desenvolvida, mas a convergência dos valores é muito lenta em direção aos resultados rigorosos, o que a priori, não justifica o desenvolvimento do presente formalismo para aglomerado com $N > 2$.

1.3 Motivação e Apresentação da Tese

A teoria de campo efetivo (EFT) associada à técnica do operador diferencial (TOD) tem apresentado bons resultados tanto qualitativa quanto quantitativamente quando comparados com resultados obtidos por métodos mais rigorosos como o de simulação computacional utilizando o método de Monte Carlo. No entanto, este método tem encontrado limitação em sua aplicação pois a introdução da relação de cinemática de spin faz com que os coeficientes da equação de estado cresçam exponencialmente com o aumento do tamanho do aglomerado de spins o que impedia muitas vezes a extensão da análise para sistemas maiores e mais complexos.

No entanto, uma nova proposta de aplicação da TOD desenvolvida por Viana e de Sousa[32] favoreceu uma implementação numérica, que será desenvolvida no Capítulo 2, onde os coeficientes são obtidos integralmente no próprio algoritmo utilizado para calcular as raízes das equações. Isso tem possibilitado a aplicação desta técnica utilizando aglomerados cada vez maiores e assim uma observação mais precisa do comportamento dos sistemas pôde ser feita. Nesta tese trataremos o modelo de Ising com campo aleatório e filmes-finos magnéticos com interações de primeiros e segundos vizinhos.

O modelo de Ising com campo aleatório tem sido tratado na literatura com grande interesse na medida que a existência de um ponto tricrítico no diagrama de fases no plano $t \times h$ ainda não está completamente compreendido devido a divergência nos resultados encontrados pelas diversas técnicas empregadas (como será discutido posteriormente), bem como a dimensionalidade crítica a partir da qual temos a existência de ordem de longo alcance no sistema. Essa aplicação tem seu desenvolvimento apresentado no Capítulo 3 desta tese com os resultados para as curvas críticas e funções termodinâmicas. Utilizamos três diferentes técnicas para uma melhor análise e comparação dos resultados.

Outra importante discussão é a respeito da influência da dimensionalidade e da presença de superfícies em sistemas conhecidos como filmes-finos no comportamento das funções termodinâmicas e nas propriedades na região da criticalidade. A possibilidade de controlar o número de camadas do filme possibilita observar esses comportamentos

quando o sistema passa de 2D para 3D (*crosssover* de dimensionalidade). No Capítulo 4 desenvolvemos uma importante investigação neste sistema que trata do comportamento da curva crítica no plano $t \times \alpha$ onde α é o parâmetro que relaciona a interação entre primeiros e segundos vizinhos, definido por $\alpha = \frac{J_2}{J_1}$, quando variamos o número de camadas.

Seguindo a linha de investigação dos expoentes críticos desenvolvida por Amazonas e de Sousa[33] aplicamos a teoria do Grupo de Renormalização para obter o comportamento dos expoentes críticos y_t , y_h e β em função do número de camadas do filme. Tais sistemas apresentam sua construção experimental bem conhecida e procuramos comparar os resultados teóricos aqui encontrados com os já observados tanto teórico quanto experimentalmente, disponíveis na literatura.

Finalmente, no Capítulo 5 apresentamos as principais conclusões deste trabalho e perspectivas futuras.

Referências

- [1] N. D. Mermin e H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **22**, 1133 (1966).
- [2] J. M. Kosterlitz e D. J. Thouless, *J. Phys. C* **6**, 1181 (1973).
- [3] K. G. Wilson, *Phys. Rev. B* **4**, 3174 (1971).
- [4] A. J. F. de Sousa, U. M. S. Costa e M. L. Lyra, *Phys. Rev. B* **62**, 8909 (2000).
- [5] K. Chen, A. M. Ferrenberg e D. P. Landau, *Phys. Rev. B* **48**, 3249 (1993).
- [6] A. W. Sandvik, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5196 (1998).
- [7] A. K. Murtazaev e H. K. Aliev, *Phys. Uspekhi* **42**, 698 (1999).
- [8] A. J. Baxter, *Ann. Phys.* **70**, 193 (1972).
- [9] A. J. Baxter, *Exactly Models in Statistical Mechanics*, Academic Press, 1982.
- [10] M. Suzuki, *Progr. Phys.* **51**, 1992 (1974).
- [11] D. P. Landau e K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge University Press, 2000.
- [12] V. L. Ginzburg, *Sov. Phys. Solid State* **2**, 1824 (1960).
- [13] J. R. de Sousa, Plascak, J. A., *Phys. Rev. A* **237**, 66 (1997).
- [14] L. Onsager, *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944).

- [15] B. Widom, *J. Chem. Phys.* **43**, 3892 (1965).
- [16] C. Domb e D. L. Hunter, *Proc. Phys. Soc.* **86**, 1147 (1965).
- [17] J. T. Ho e J. D. Lister, *Phys. Rev. Lett.* **22**, 603 (1969).
- [18] L. P. Kadanoff, *Physics* **2**, 263 (1966), *Ann. Phys.* **100**, 559 (1976).
- [19] H. E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Oxford University Press (1971).
- [20] R. B. Griffiths, *Phys. Rev. B* **7**, 545 (1973).
- [21] P. Weiss, *J. Phys. Radium* **4**, 661 (1907).
- [22] L. Néel, *Ann. Physique* **18**, 5 (1932).
- [23] F. C. Sá Barreto e I. P. Fittipaldi, *Physica A* **129**, 360 (1985).
- [24] H.B. Callen, *Phys. Lett.* **4**, 161 (1963).
- [25] N. Suzuki, *Phys. Lett.* **19**, 267 (1965).
- [26] N. Matsudara, *J. Phys. Soc. Jpn.* **35**, 1493 (1973).
- [27] B. Frank e O. Mitran, *J. Phys. C* **10**, 2641 (1977); **11**, 2087 (1978).
- [28] Y. Tanaka e N. Uryû, *Phys. Rev.* **21**, 1994 (1980).
- [29] H. I. Zhang e A. K. Rajagopal, *J. Phys. C* **12**, L 277 (1979).
- [30] R. Honmura e T. Kaneyoshi, *J. Phys. C* **12**, 3970 (1979).
- [31] T. Kaneyoshi, I. P. Fittipaldi, R. Honmura e T. Manbe, *Phys. Rev. B* **24**, 481 (1981).
- [32] J. R. Viana, J. R. de Sousa, *Tese de Doutorado*, Convênio UFAM-UFSCar (2007).
- [33] M. S. Amazonas, J. R. de Sousa, *Tese de Mestrado*, UFAM (2003).

Capítulo 2

Implementação Numérica da Técnica do Operador Diferencial

2.1 Introdução

No capítulo anterior foi discutida a Técnica do Operador Diferencial (TOD) e seus resultados foram comparados com soluções exatas e rigorosas como a simulação de Monte Carlo. Para aplicações envolvendo sistemas mais complexos¹ essa técnica tem-se mostrado de difícil aplicação devido a quantidade de termos gerados para cada coeficiente da equação de estado. Como exemplo de aplicação desta técnica temos o trabalho de Cabral Neto² que aplicou a TOD no estudo das propriedades termodinâmicas e criticalidade de filmes-finos e super redes magnéticas, onde a cada novo cálculo da equação de estado era exigida a construção de novos coeficientes, introduzidos de forma manual no algoritmo. Este processo consumia muito tempo, sendo um fator que limitou a aplicação da técnica a sistemas com aglomerado pequeno (até $N = 2$ spins).

¹Sistemas com interações entre primeiros e segundos vizinhos ou considerando uma quantidade maior de sítios no aglomerado, por exemplo.

²Tese de doutorado defendida em 2004 desenvolvida através do convênio UFAM/UFSCar.

Assim, uma implementação numérica onde os coeficientes fossem construídos de forma automática através de uma subrotina no FORTRAN foi feita, possibilitando o estudo de sistemas magnéticos com um número maior de sítios do aglomerado tendo apenas o limite do processamento computacional como um fator limitante em sua aplicação. A possibilidade da construção de um algoritmo que realizasse o processo de construção dos coeficientes de forma automática ocorreu devido a uma nova formulação da aplicação da TOD estar em função de exponenciais e não mais de funções trigonométricas o que favoreceu o processo de substituição dos argumentos das exponenciais na função semente.

O estudo dos diagramas de fases para a verificação de uma possível existência de pontos tricríticos em sistemas competitivos foi feita por Viana e de Sousa através da aplicação da construção de Maxwell utilizando uma primeira proposta de energia livre (Φ) para esta técnica, originada da teoria de Landau onde a equação de estado é dada por um processo de minimização com relação ao parâmetro de ordem do sistema ($\frac{d\Phi}{dm}$). Os resultados apresentados estão em concordância com os encontrados na literatura, no entanto, a falta de uma completa caracterização deste funcional impossibilitou a obtenção do comportamento das propriedades termodinâmicas. Isso motivou a busca por uma nova proposta de energia livre associada à TOD. Esta nova formulação foi obtida a partir do tratamento da energia interna para aglomerados finitos apresentando resultados mais satisfatórios que a primeira proposta além do que possibilitou a determinação das funções termodinâmicas.

Nosso objetivo neste Capítulo é apresentar a nova formulação da TOD em termos de funções exponenciais e o processo de implementação numérica aplicada a um sistema simples, como é o caso do modelo de Ising Ferromagnético em uma rede cúbica (3D) e quadrada (2D) com interações entre primeiros vizinhos. Os resultados para a temperatura de transição em função do número N de sítios do aglomerado foram obtidos para esta nova formulação e análise de tamanho finito.

2.2 Desenvolvimento do Algoritmo

Como um dos primeiros modelos para explicar o magnetismo, o modelo de Ising tem sido amplamente estudado pelos mais variados métodos. Inicialmente, os resultados encontrados por Onsager e o método numérico de Monte Carlo tornaram-se um marco na aplicação da Mecânica Estatística pois representam um referencial na aplicação de outros métodos como campo médio e expansão em série. Atualmente, a aplicação da computação através de softwares e algoritmos mais eficientes tem permitido a ampliação do estudo do magnetismo através dos modelos de Ising e Heisenberg para sistemas mais complexos, antes impossíveis de serem tratados dada a enorme tarefa de construção dos coeficientes. Como consequência, novos fenômenos têm sido observados dando nova motivação ao estudo do magnetismo.

Utilizando a aproximação de campo efetivo para o desacoplamento dos operadores de spin, a técnica do operador diferencial (TOD) gera uma equação de estado dada por uma expansão em série de potências da magnetização

$$m = \sum_{i=0}^z A_i m^i, \quad (2.1)$$

onde z é o número de coordenação da rede cristalina assumindo os valores $z = 6$ para o caso da rede cúbica e $z = 4$ para uma rede quadrada. Os coeficientes A_i apresentam toda a informação do sistema com relação a parâmetros externos ou internos que possam influenciar no comportamento do sistema.

A forma tradicional de aplicação da TOD resulta em coeficientes que tem sua estrutura composta por uma combinação das funções trigonométricas $\sinh(\alpha D_x)$ e $\cosh(\alpha D_x)$. Para um desenvolvimento numérico, esta forma não se mostrou adequada pois o processo de substituição acontece no argumento das funções. Para contornar essa dificuldade, utilizamos as seguintes relações para as funções hiperbólicas:

$$\sinh \nu = \frac{e^\nu - e^{-\nu}}{2}; \quad \cosh \nu = \frac{e^\nu + e^{-\nu}}{2};$$

cuja consequência é obtermos agora uma combinação de exponenciais que ao serem aplicadas na função "semente" $F(x)$, originada do cálculo da média de um dado operador, retornam à identidade fundamental da TOD:

$$e^{\alpha D_x} F(x) = F(\alpha) |_{x=0} .$$

Numericamente, realizamos a aplicação da TOD na forma exponencial simplesmente fazendo a substituição da variável x pelo termo α no argumento da função. Isso foi feito através de uma subrotina sistemática e eficiente no *software* FORTRAN, possibilitando o estudo de sistemas magnéticos com um maior número de sítios do aglomerado, tendo apenas o limite do processamento computacional como um fator limitante em sua aplicação.

O estudo dos diagramas de fases para a verificação de uma possível existência de pontos tricríticos em sistemas competitivos usando a TOD foi feita por Viana e de Sousa através da metodologia da construção de Maxwell (igualdade das energias livres), utilizando assim uma primeira proposta de energia livre (Φ) originada da idéia da teoria de Landau, onde a equação de estado é dada através de um processo de minimização com relação ao parâmetro de ordem do sistema ($\frac{d\Phi}{dm} = 0$). Os resultados encontrados neste trabalho estão em concordância com os apresentados pela literatura, no entanto, a falta de uma completa caracterização deste funcional impossibilitou a obtenção do comportamento das propriedades termodinâmicas, em particular a entropia.

Isso motivou a busca por uma nova proposta de energia livre associada à TOD. Esta nova formulação foi obtida a partir do tratamento da energia interna para aglomerados finitos apresentando resultados mais satisfatórios que a primeira proposta, além do que possibilitou a determinação das propriedades termodinâmicas em função da temperatura.

Nosso objetivo neste Capítulo é apresentar uma nova formulação da TOD em termos de funções exponenciais e o processo de implementação numérica aplicada a um sistema simples, como é o caso do protótipo do modelo de Ising Ferromagnético em uma rede cúbica (3D) e quadrada (2D) com interações entre primeiros vizinhos, juntamente com

a formulação da energia livre para estes casos. Os resultados para a temperatura de transição em função do número N de sítios do aglomerado foram obtidos e uma análise de tamanho finito foi discutida.

2.2.1 Aplicação para $N = 2$ Sítios Centrais

O modelo de Ising ferromagnético (F) para um sistema infinito é dado pelo Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = - \sum_{i,j} J_{ij} S_i S_j, \quad (2.2)$$

onde J_{ij} é a interação de *exchange* entre os sítios i e j , S_i é a componente no eixo z do operador de spin no sítio i .

Tratando a Eq.(2.2) através da aproximação de aglomerados finitos para $N = 2$ sítios centrais (EFT-2), conforme mostrado na Fig.(2.1), obtemos:

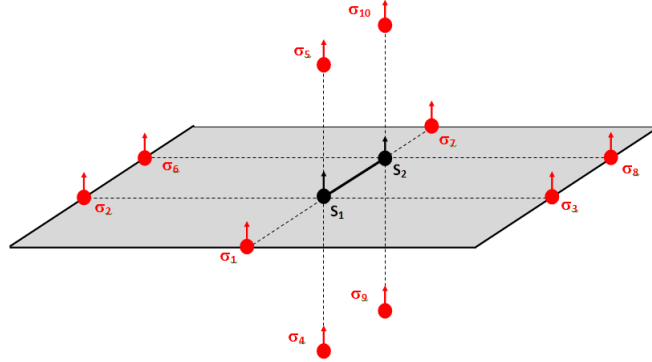


Figura 2.1: Arranjo ferromagnético para um aglomerado com $N = 2$ spins numa rede cúbica simples.

$$\mathcal{H}_2 = - JS_1 S_2 - JS_1 \sum_i^{n_1} \sigma_i - JS_2 \sum_j^{n_2} \sigma_j, \quad (2.3)$$

onde σ_i é o operador de spin dos sítios vizinhos ao aglomerado, J a interação entre

primeiros vizinhos e denotaremos por n_i o número de coordenação associado a cada sítio i do aglomerado. Colocando a Eq.(2.3) na forma reduzida, $H_2 = -\beta\mathcal{H}_2$, ficamos:

$$H_2 = K S_1 S_2 + \sum_{j=1}^2 C_{x_j} S_j, \quad (2.4)$$

sendo

$$C_{x_j} = K \sum_j^{n_j} \sigma_j,$$

o termo relacionado às interações com os primeiros vizinhos (C_x) do sítio j e $K = \beta J$.

Obtemos a matriz do operador H_2 , aplicando na base Λ que usualmente a diagonaliza. Para um aglomerado com $N = 2$ e spin $\frac{1}{2}$ é dada por:

$$\Lambda = [|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle],$$

cuja matriz resultante é

$$H_2 = \begin{bmatrix} K + C_{x_1} - C_{x_2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -K + C_{x_1} + C_{x_2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -K - C_{x_1} - C_{x_2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & K - C_{x_1} + C_{x_2} \end{bmatrix}. \quad (2.5)$$

Os termos da diagonal principal desta matriz são os autovalores de H_2 na base Λ cuja soma, ou traço da matriz, define a função de partição dada por

$$Z_2 = \text{Tre}^{H_2}. \quad (2.6)$$

Manipulando algebricamente a Eq.(2.6) após a substituição dos elementos do traço na identidade (2.5) encontramos:

$$Z_2 = 2e^K \cosh(C_{x_1} + C_{x_2}) + 2e^{-K} \cosh(C_{x_1} - C_{x_2}). \quad (2.7)$$

A magnetização por spin é definida por:

$$m = \frac{1}{2} \langle S_1 + S_2 \rangle,$$

que resulta na expressão

$$m = \left\langle \frac{\sinh(C_{x_1} + C_{x_2})}{\cosh(C_{x_1} + C_{x_2}) + e^{-2K} \cosh(C_{x_1} - C_{x_2})} \right\rangle, \quad (2.8)$$

sendo a função geradora $F_2(x_1, x_2)$:

$$F_2(x_1, x_2) = \frac{\sinh(x_1 + x_2)}{\cosh(x_1 + x_2) + e^{-2K} \cosh(x_1 - x_2)}. \quad (2.9)$$

A extensão da Técnica do Operador Diferencial para duas variáveis aplicada na Eq.(2.8) permite colocarmos a média da magnetização em função dos operadores diferenciais D_{x_1} e D_{x_2} . Assim temos:

$$m = \langle \exp(C_{x_1} D_{x_1}) \exp(C_{x_2} D_{x_2}) \rangle F_2(x_1, x_2) |_{x_1=x_2=0}.$$

Substituindo pela expressão que define cada termo C_{x_ν} e transformando o somatório nos argumentos em produtos de exponenciais obtemos

$$m = \left\langle \prod_{i=1}^{n_1} \exp(k\sigma_i D_{x_1}) \prod_{i=1}^{n_2} \exp(k\sigma_i D_{x_2}) \right\rangle F_2(x_1, x_2) |_{x_1=x_2=0}.$$

Aplicando a relação de cinemática de spin para o caso de spin $\frac{1}{2}$ ($\sigma_i = \pm 1$):

$$\exp(\alpha\sigma_i) = \cosh(\alpha) + \sigma_i \sinh(\alpha),$$

seguida das relações trigonométricas:

$$\begin{aligned}\cosh(\alpha) &= \frac{e^\alpha + e^{-\alpha}}{2}, \\ \sinh(\alpha) &= \frac{e^\alpha - e^{-\alpha}}{2},\end{aligned}$$

obtemos

$$m = \left\langle \prod_{i=1}^{n_1} [a_i \exp(KD_{x_1}) + b_i \exp(-KD_{x_1})] \prod_{i=1}^{n_2} [a_i \exp(KD_{x_2}) + b_i \exp(-KD_{x_2})] \right\rangle F_2(x_1, x_2) |_{x_1=x_2=0}, \quad (2.10)$$

onde $a_i = \frac{1+\sigma_i}{2}$ e $b_i = \frac{1-\sigma_i}{2}$.

O desenvolvimento da Eq.(2.10) apresenta uma dificuldade devido as correlações entre spin que é resolvida utilizando uma aproximação para o desacoplamento entre os operadores de spin dada por

$$\langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \dots \rangle \simeq \langle \sigma_1 \rangle \langle \sigma_2 \rangle \langle \sigma_3 \rangle \dots,$$

o que permite aplicarmos a média térmica nos termos a_i e b_i e considerar cada operador de spin separadamente.

A condição do sistema ser do tipo ferromagnético implica que a média térmica aplicada em todos os operadores resulta no mesmo valor m . Substituindo estes resultados na Eq.(2.10) e colocando cada produtório na sua forma binomial, resulta em:

$$m = \left\{ \sum_{p_1=0}^{n_1} \left[\binom{n_1}{p_1} a^{(n_1-p_1)} b^{p_1} \exp((n_1 - 2p_1)KD_{x_1}) \right] \sum_{p_2=0}^{n_2} \left[\binom{n_2}{p_2} a^{(n_2-p_2)} b^{p_2} \exp((n_2 - 2p_2)KD_{x_2}) \right] \right\} F_2(x_1, x_2) |_{x_1=x_2=0}, \quad (2.11)$$

sendo agora $a = \frac{1+m}{2}$ e $b = \frac{1-m}{2}$.

O desenvolvimento da Eq.(2.11) mostrou que podemos colocá-la em uma forma mais

compacta, agrupando os termos comuns em cada somatório, resultando na forma final para a magnetização:

$$m = \sum_{p_1=0}^{n_1} \sum_{p_2=0}^{n_2} \left[\prod_{i=1}^2 \binom{n_i}{p_i} \right] a^{\left(\sum_{i=1}^2 n_i - \sum_{i=1}^2 p_i \right)} b^{\left(\sum_{i=1}^2 p_i \right)} \exp \left[\sum_{i=1}^2 (n_i - 2p_i) K D_{x_i} \right] F_2(x_1, x_2) |_{x_1=x_2=0} \quad (2.12)$$

O fato de colocarmos a Eq.(2.11) na sua forma compacta dada pela Eq.(2.12) representou um ganho muito grande em termos de eficiência do algoritmo (tempo computacional).

2.2.2 Generalização para $N \geq 4$ Spins

O Hamiltoniano reduzido para este caso é dado por

$$H_q = K \sum_{(i,j)} S_i S_j + \sum_{i=1}^q C_{x_i} S_i, \quad (2.13)$$

onde $\sum_{(i,j)}$ indica que a soma é feita sobre todas as combinações possíveis entre os sítios i e j do aglomerado para um total de q sítios centrais, e

$$C_{x_i} = K \sum_{j=1}^{n_i} \sigma_j,$$

corresponde à interação do i -ésimo sítio central com seus n_i vizinhos. As Figs.(2.2) e (2.3) ilustram este ponto na construção do Hamiltoniano para uma quantidade $N = q$ de sítios do aglomerado.

Quando este Hamiltoniano é escrito na base ortogonal adequada para os q sítios centrais, encontramos uma matriz já diagonalizada, semelhante à (2.5). Isto facilita a obtenção da função de partição através de um processo numérico pois basta realizarmos a soma sobre todas as combinações possíveis, considerando que $S_i = \pm 1$.

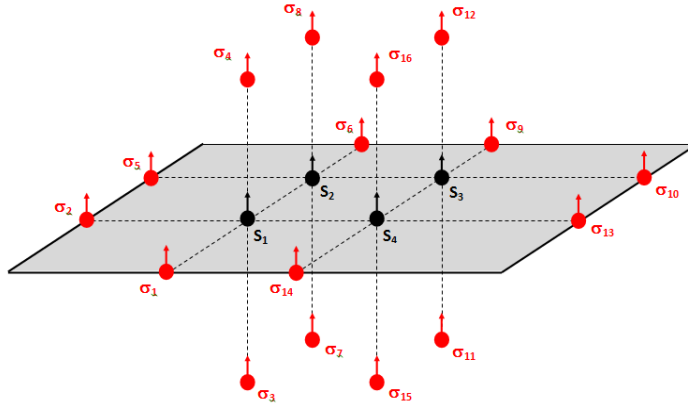


Figura 2.2: Arranjo para uma rede cúbica ferromagnética, considerando aglomerado com $N = 4$ sítios centrais e seus primeiros vizinhos.

Assim sendo, temos para o caso de q sítios centrais a seguinte expressão para a função de partição Z_q

$$Z_q = \sum_{S_1=\pm 1} \dots \sum_{S_q=\pm 1} \exp(H_q). \quad (2.14)$$

A magnetização é definida por

$$m = \frac{1}{q} \langle S_1 + \dots + S_q \rangle, \quad (2.15)$$

ou, em função da derivada da função de partição reescrevemos

$$m = \frac{1}{q} \left\langle \frac{\partial}{\partial \phi} \ln(Z_q) \right\rangle, \quad (2.16)$$

onde ϕ é o termo associado ao operador S_q do aglomerado no Hamiltoniano reduzido na Eq.(2.13).

A aplicação da identidade fundamental da TOD para o caso de q sítios centrais deve ser generalizada pois temos agora a existência de q operadores diferenciais. Essa generalização pode ser feita utilizando uma formulação "vetorial" dada por:

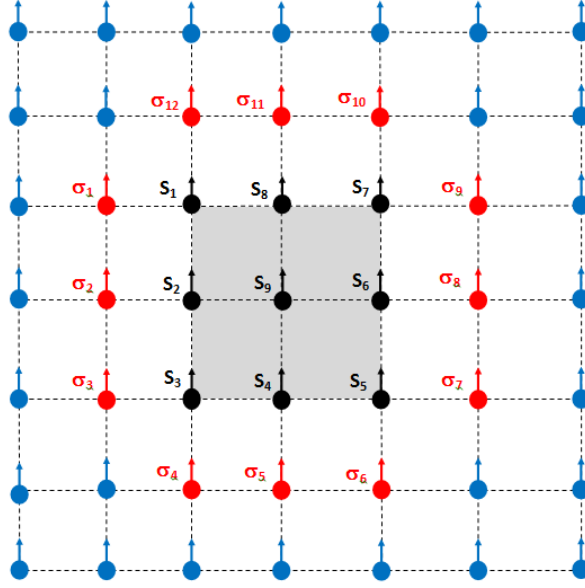


Figura 2.3: Arranjo para uma rede ferromagnética considerando aglomerado com $N = 9$ sítios centrais.

$$\exp(\mathbf{a} \cdot \mathbf{D}) F_q(\mathbf{r}) = F_q(\mathbf{a}) |_{\mathbf{r}=0}, \quad (2.17)$$

sendo $\mathbf{r} = (x_1, \dots, x_q)$, $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_q)$ e $\mathbf{D} = (D_{x_1}, \dots, D_{x_q})$ (com $D_{x_i} = \partial/\partial x_i$).

Usando a relação dada pela Eq.(2.17) em (2.16) resulta em:

$$m = \left\langle \prod_{i=1}^q \exp(C_{x_i} D_{x_i}) \right\rangle F_q(\mathbf{a}) |_{\mathbf{r}=0},$$

onde a função $F_q(\mathbf{a})$ é obtida considerando a função de partição dada pela Eq.(2.14) associada ao processo de derivação numérica definido na Eq.(2.13).

Aplicando os procedimentos descritos para EFT-2, obtemos a função magnetização para q sítios centrais dada por:

$$m = \sum_{p_1=0}^{n_1} \dots \sum_{p_q=0}^{n_q} \left\{ \left[\prod_{i=1}^q \binom{n_i}{p_i} \right] a^{\left[\sum_{i=1}^q (n_i - p_i) \right]} b^{\left[\sum_{i=1}^q p_i \right]} \exp \left[\sum_{i=1}^q (n_i - 2p_i) K D_{x_i} \right] \right\} F_q(\mathbf{r}) |_{\mathbf{r}=0}. \quad (2.18)$$

Agrupando as Eqs.(2.12) e (2.18) em função de potências da magnetização temos a equação de estado na forma de uma expansão em série de potências, dada por:

$$m = \sum_{i=1}^z A_i m^i, \quad (2.19)$$

onde z é o número de sítios primeiros vizinhos circundantes ao aglomerado. Por exemplo, para uma rede quadrada e $N = 2$ temos $z = 4$. Para $N = 4$ temos $z = 8$, etc.

2.2.3 Análise dos Termos e Implementação Numérica

Para uma implementação numérica que reproduza corretamente o processo de construção dos coeficientes A_i definidos na Eq.(2.19), é necessário que saibamos previamente a forma com que esses termos são agrupados no processo distributivo.

Para essa verificação, vamos analisar inicialmente o primeiro somatório presente na Eq.(2.11):

$$\sum_{p_1=0}^{n_1} \binom{n_1}{p_1} a^{(n_1-p_1)} b^{p_1} \exp((n_1 - 2p_1) K D_{x_1}) = \left[\binom{n_1}{0} a^{n_1} b^0 e^{(n_1 K D_{x_1})} + \binom{n_1}{1} a^{(n_1-1)} b^1 e^{((n_1-2) K D_{x_1})} + \dots + \binom{n_1}{n_1} a^0 b^{n_1} e^{(-n_1 K D_{x_1})} \right]. \quad (2.20)$$

O termo $a^p b^q$ pode ser expandido da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
a^p b^q &= \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}m\right)^p \cdot \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}m\right)^q \\
&= \left[\sum_{i_1=0}^p \binom{p}{i_1} \left(\frac{1}{2}\right)^{(p-i_1)} \left(\frac{1}{2}\right)^{(i_1)} (m)^{i_1} \right] \left[\sum_{i_2=0}^q \binom{q}{i_2} \left(\frac{1}{2}\right)^{(q-i_2)} \left(-\frac{1}{2}\right)^{(i_2)} (m)^{i_2} \right] \\
&= \sum_{i_1=0}^p \sum_{i_2=0}^q \left[\binom{p}{i_1} \left(\frac{1}{2}\right)^p \right] \left[\binom{q}{i_2} (-1)^{i_2} \left(\frac{1}{2}\right)^q \right] m^{(i_1+i_2)},
\end{aligned}$$

que em uma forma mais compacta fica:

$$a^p b^q = \sum_{i_1=0}^p \sum_{i_2=0}^q a_{p,i_1} b_{q,i_2} m^{(i_1+i_2)}. \quad (2.21)$$

Introduzindo o coeficiente $c(p, q, i)$ dado por:

$$c(p, q, i) = a_{p,i_1} b_{q,i_2},$$

que na implementação é um vetor que guarda os valores para cada conjunto de variáveis p, q e i , onde o índice i ($i = i_1 + i_2$) dá a potência da magnetização, ficando a Eq.(2.21):

$$a^p b^q = \sum_{i_1=0}^p \sum_{i_2=0}^q c(p, q, i) m^i.$$

Substituindo este resultado na Eq.(2.20) e agrupando os termos em função da potência de m fica:

$$\begin{aligned}
& \sum_{p_1=0}^{n_1} \binom{n_1}{p_1} a^{(n_1-p_1)} b^{p_1} \exp((n_1-2p_1)KD_{x_1}) = \\
& \quad \left[\binom{n_1}{0} c(n_1, 0, 0) e^{n_1 KD_{x_1}} + \binom{n_1}{1} c((n_1-1), 1, 0) e^{(n_1-2)KD_{x_1}} + \dots \right. \\
& \quad \quad \left. + \binom{n_1}{n_1} c(0, n_1, 0) e^{(-n_1)KD_{x_1}} \right] m^0 + \\
& \quad \left[\binom{n_1}{0} c(n_1, 0, 1) e^{n_1 KD_{x_1}} + \binom{n_1}{1} c((n_1-1), 1, 1) e^{(n_1-2)KD_{x_1}} + \dots \right. \\
& \quad \quad \left. + \binom{n_1}{n_1} c(0, n_1, 1) e^{(-n_1)KD_{x_1}} \right] m^1 + \\
& \quad \dots + \\
& \quad \left[\binom{n_1}{0} c(n_1, 0, n_1) e^{n_1 KD_{x_1}} + \binom{n_1}{1} c((n_1-1), 1, n_1) e^{(n_1-2)KD_{x_1}} + \dots \right. \\
& \quad \quad \left. + \binom{n_1}{n_1} c(0, n_1, n_1) e^{(n_1-2n_1)KD_{x_1}} \right] m^{n_1}.
\end{aligned}$$

Fazendo o mesmo procedimento para o segundo somatório obtemos uma expressão semelhante, sendo que agora o maior expoente para a magnetização é dado por n_2 .

Realizando a multiplicação termo a termo de cada um dos dois somatórios encontramos:

$$\begin{aligned}
& \sum_{p_1=0}^{n_1} \binom{n_1}{p_1} a^{(n_1-p_1)} b^{p_1} e^{(n_1-2p_1)KD_{x_1}} \sum_{p_2=0}^{n_2} \binom{n_2}{p_2} a^{(n_2-p_2)} b^{p_2} e^{(n_2-2p_2)KD_{x_2}} = \\
& \quad \left[\binom{n_1}{0} \binom{n_2}{0} c(n_1+n_2, 0, 0) e^{(n_1 KD_{x_1} + n_2 KD_{x_2})} + \dots \right. \\
& \quad \left. + \binom{n_1}{n_1} \binom{n_2}{n_2} c(0, n_1+n_2, 0) e^{(-n_1 KD_{x_1} - n_2 KD_{x_2})} \right] m^0 + \\
& \quad \left[\binom{n_1}{0} \binom{n_2}{0} c(n_1+n_2, 0, 1) e^{(n_1 KD_{x_1} + n_2 KD_{x_2})} + \dots \right. \\
& \quad \left. + \binom{n_1}{n_1} \binom{n_2}{n_2} c(0, n_1+n_2, 1) e^{(-n_1 KD_{x_1} - n_2 KD_{x_2})} \right] m^1 + \\
& \quad \dots + \\
& \quad \left[\binom{n_1}{0} \binom{n_2}{0} c(n_1+n_2, 0, n_1+n_2) e^{(n_1 KD_{x_1} + n_2 KD_{x_2})} + \dots \right. \\
& \quad \left. + \binom{n_1}{n_1} \binom{n_2}{n_2} c(0, n_1+n_2, n_1+n_2) e^{(-n_1 KD_{x_1} - n_2 KD_{x_2})} \right] m^{n_1+n_2}.
\end{aligned}$$

Observar que o coeficiente $c(e_1, e_2, i)$ está associado ao resultado do produto dos termos a e b de ambos os somatórios, o que faz com que sua localização como vetor seja dado pela combinação dos índices respectivos de cada termo.

Assim, podemos observar o padrão geral de formação para o coeficiente A_i para o caso de apenas dois produtórios:

$$\begin{aligned}
A_i &= \binom{n_1}{0} \binom{n_2}{0} c(i, 0, i) e^{(n_1 K D_{x_1} + n_2 K D_{x_2})} + \dots & (2.22) \\
&\dots + \binom{n_1}{p_1} \binom{n_2}{p_2} c(i - (p_1 + p_2), (p_1 + p_2), i) e^{((n_1 - 2i_1) K D_{x_1} + (n_2 - 2i_2) K D_{x_2})} + \dots \\
&+ \dots \binom{n_1}{n_1} \binom{n_2}{n_2} c(0, i, i) e^{(-n_1 K D_{x_1} - n_2 K D_{x_2})}.
\end{aligned}$$

Esse processo pode ser generalizado para uma quantidade indefinida de somatórios³, sendo limitado apenas pela capacidade de processamento computacional na construção dos coeficientes, pois a cada somatório adicionado no processo representa um *looping* (comando *do*) a mais no programa. O caso geral corresponde a expressão final para a construção dos coeficientes dado pela Eq.(2.12). Notar que na Eq.(2.22) ainda não foi aplicada na função geradora $F(x_1, x_2)$ dada pela Eq.(2.9). Isso é feito simplesmente substituindo o termo associado a cada operador D_{x_i} nas variáveis x_i presentes no argumento dessa função. Podemos colocar o processo de construção da equação de estado na forma de um fluxograma, mostrado na Fig(2.4).

Aplicando para o caso de uma rede quadrada ferromagnética com $N = 2$ sítios centrais com interações somente entre primeiros vizinhos, temos que $n_1 = n_2 = 3$. Com isso obtemos os seguintes coeficientes:

³Sendo que cada somatório está associado à interação do sítio do aglomerado com sua vizinhança.

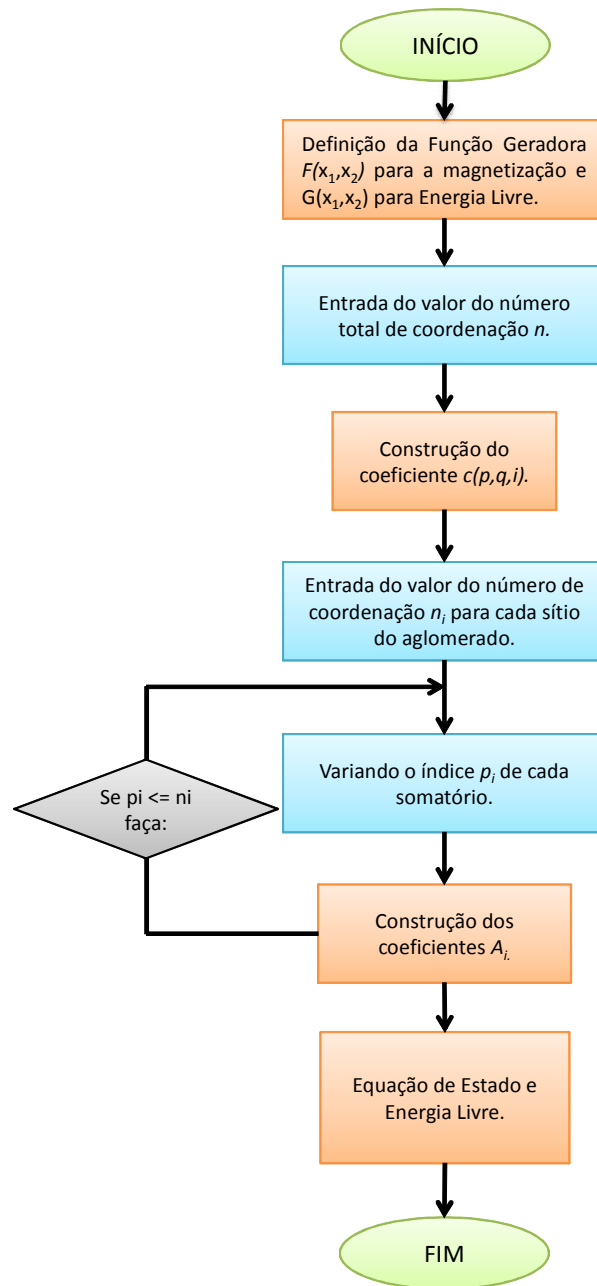


Figura 2.4: Fluxograma mostrando o processo numérico para a construção dos coeficientes A_i para a equação de estado. Para a energia livre temos o mesmo procedimento.

$$A_1 = \frac{3}{16} \frac{\sinh(\frac{6}{t})}{\cosh(\frac{6}{t}) + e^{-\frac{2}{t}}} + \frac{3}{4} \frac{\sinh(\frac{4}{t})}{\cosh(\frac{4}{t}) + e^{-\frac{2}{t}} \cosh(\frac{2}{t})} + \frac{3}{8} \frac{\sinh(\frac{2}{t})}{\cosh(\frac{2}{t}) + e^{-\frac{2}{t}} \cosh(\frac{4}{t})} + \frac{9}{16} \frac{\sinh(\frac{2}{t})}{\cosh(\frac{2}{t}) + e^{-\frac{2}{t}}},$$

$$A_3 = \frac{5}{8} \frac{\sinh(\frac{6}{t})}{\cosh(\frac{6}{t}) + e^{-\frac{2}{t}}} - \frac{3}{4} \frac{\sinh(\frac{2}{t})}{\cosh(\frac{2}{t}) + e^{-\frac{2}{t}} \cosh(\frac{4}{t})} - \frac{9}{8} \frac{\sinh(\frac{2}{t})}{\cosh(\frac{2}{t}) + e^{-\frac{2}{t}}},$$

$$A_5 = \frac{3}{16} \frac{\sinh(\frac{6}{t})}{\cosh(\frac{6}{t}) + e^{-\frac{2}{t}}} - \frac{3}{4} \frac{\sinh(\frac{4}{t})}{\cosh(\frac{4}{t}) + e^{-\frac{2}{t}} \cosh(\frac{2}{t})} + \frac{3}{8} \frac{\sinh(\frac{2}{t})}{\cosh(\frac{2}{t}) + e^{-\frac{2}{t}} \cosh(\frac{4}{t})} + \frac{9}{16} \frac{\sinh(\frac{2}{t})}{\cosh(\frac{2}{t}) + e^{-\frac{2}{t}}},$$

onde os termos pares são nulos devido ao comportamento simétrico da Eq.(2.19) apresentada para o caso ferromagnético. O procedimento pode ser desenvolvido para qualquer tamanho de aglomerado, limitando sua aplicação à capacidade computacional.

2.2.4 Equação de Estado Através da Nova Proposta de Energia Livre

Para análise dos diagramas de fase, Viana e de Sousa propuseram uma nova forma de determinação da energia livre associada à técnica do operador diferencial. Essa nova proposta parte da definição da média de um operador feita para aglomerados finitos. Nessa abordagem, vimos que um sistema de N spins pode ser separado em duas partes: a primeira parte Ω constituída por N_Ω spins que contém as variáveis de spin do aglomerado e de seus vizinhos, e uma parte Ω' que não contém as variáveis de spin do aglomerado, sendo $N = N_\Omega + N_{\Omega'}$. Com base nisso podemos reescrever o Hamiltoniano do sistema de N spins como:

$$\mathcal{H}_N = \mathcal{H}_\Omega + \mathcal{H}_{\Omega'}, \quad (2.23)$$

onde \mathcal{H}_N é o Hamiltoniano para um sistema com N spins, \mathcal{H}_Ω o Hamiltoniano que contém as variáveis de spin associadas ao aglomerado e seus vizinhos e $\mathcal{H}_{\Omega'}$ correspondendo às interações com o restante do sistema. Considerando que a propriedade física \mathcal{O} esteja relacionada com as variáveis de spin do aglomerado, e considerando também o caso em que \mathcal{H}_Ω e $\mathcal{H}_{\Omega'}$ comutam, ou seja $[\mathcal{H}_\Omega, \mathcal{H}_{\Omega'}] = 0$, o valor médio da propriedade \mathcal{O} pode ser reduzida para o cálculo parcial

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \langle \langle \mathcal{O}(\Omega) \rangle_\Omega \rangle = \left\langle \frac{Tr_\Omega [\mathcal{O}(\Omega) \exp(-\beta \mathcal{H}_\Omega)]}{Tr_\Omega \exp(-\beta \mathcal{H}_\Omega)} \right\rangle,$$

onde \mathcal{H}_Ω é o modelo de Ising puro para $N = 2$, dado pela Eq.(2.4).

Aplicando a definição usual de energia interna na relação (2.23) temos:

$$U = \langle \mathcal{H}_N \rangle = \langle \langle \mathcal{H}_\Omega \rangle_\Omega \rangle + \langle \mathcal{H}_{\Omega'} \rangle. \quad (2.24)$$

Utilizando a definição de função de partição canônica para os espaços com N e N_Ω partículas, podemos reescrever a Eq.(2.24) na forma:

$$-\frac{\partial}{\partial \beta} (\ln(Z_N)) = \left\langle -\frac{\partial}{\partial \beta} (\ln(Z_\Omega)) \right\rangle + \langle \mathcal{H}_{\Omega'} \rangle, \quad (2.25)$$

onde

$$Z_\Omega = Tr_\Omega \exp(-\beta \mathcal{H}_\Omega).$$

No limite termodinâmico, a energia livre de Helmholtz é dada por:

$$\Phi = -\frac{1}{\beta} \ln(Z_N),$$

que para o espaço do aglomerado fica:

$$\Phi_{\Omega} = -\frac{1}{\beta} \ln(Z_{\Omega}). \quad (2.26)$$

A partir dessas relações, a Eq.(2.25) ficará reescrita na forma

$$\frac{\partial}{\partial \beta} (\beta \Phi) = \left\langle \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta \Phi_{\Omega}) \right\rangle + \langle \mathcal{H}_{\Omega'} \rangle. \quad (2.27)$$

Usando o fato que:

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta \Phi_{\Omega}) \right\rangle = \frac{\partial}{\partial \beta} \langle \beta \Phi_{\Omega} \rangle,$$

podemos reescrever a Eq.(2.27) por:

$$\frac{\partial}{\partial \beta} (\beta \Phi) = \frac{\partial}{\partial \beta} \langle \beta \Phi_{\Omega} \rangle + \langle \mathcal{H}_{\Omega'} \rangle.$$

Aplicando a integração em relação a β , obtemos a relação para a energia livre:

$$\Phi = \langle \Phi_{\Omega} \rangle + \frac{1}{\beta} \int \langle \mathcal{H}_{\Omega'} \rangle d\beta. \quad (2.28)$$

A análise do segundo termo mostra que este representa a interação dos vizinhos do aglomerado com a segunda vizinhança, mostrado na Fig.(2.3) e que pode, em primeira aproximação, ser dado por

$$\langle \mathcal{H}_{\Omega'} \rangle = \gamma m^2, \quad (2.29)$$

sendo γ um termo desconhecido. Aplicando a Eq.(2.29) na Eq.(2.28), sendo m e β variáveis independentes, obtemos

$$\Phi = \langle \Phi_{\Omega} \rangle + \lambda m^2, \quad (2.30)$$

onde λ pode ser determinado a partir das condições de contorno para o estado fundamental do sistema e $\langle \Phi_{\Omega} \rangle$ a média da função energia livre dada pela Eq.(2.26) no espaço

N_Ω do aglomerado, onde podemos aplicar a relação fundamental da TOD resultando em uma expansão do parâmetro de ordem na forma

$$\langle \Phi_\Omega \rangle = \sum_{i=0}^n C_i m^i, \quad (2.31)$$

onde os coeficientes C_i são obtidos aplicando a TOD na função geradora encontrada para a energia livre na Eq.(2.26).

No estado fundamental, a energia interna por partícula obtida do Hamiltoniano dado pela Eq.(2.4) é dado por

$$E_o = \frac{\mathcal{H}_o}{JN} = \frac{\mathcal{H}_N(\sigma_i, \sigma_j = 1)}{JN} = -\frac{n}{2},$$

onde n é o número de coordenação da rede de spins. Nesta situação, vale a relação para a energia livre:

$$\frac{\Phi}{J} = E_o.$$

Aplicando estas condições na Eq.(2.30), obtemos a expressão para λ :

$$\lambda = E_o - \psi_\Omega(m = 1),$$

onde $\psi_\Omega = \frac{\langle \Phi_\Omega \rangle}{J}$.

Tendo a forma da energia livre corrigida do sistema dada pela Eq.(2.30), aplicamos o princípio da minimização da energia livre com relação ao parâmetro de ordem, assim obtendo a equação de estado:

$$m = -\frac{1}{2\lambda} \sum_{i=0}^n i C_i m^{(i-1)}, \quad (2.32)$$

a partir da qual podemos obter a temperatura crítica do sistema.

2.3 Análise dos Resultados

A proposta de uma nova formulação de energia livre e equação de estado deve apresentar resultados condizentes com os já encontrados por outros métodos na literatura. Assim, verificar sua tendência de comportamento quando o sistema tende para o limite termodinâmico é crucial para a validação da proposta. Como exemplo deste procedimento, temos o trabalho de Suzuki, Katori e Hu[1], que apresentaram os resultados para o Método da Anomalia Coerente (CAM) no estudo dos fenômenos críticos.

Nesta seção apresentamos os resultados da temperatura crítica em função do número N de sítios do aglomerado para os casos de uma rede quadrada e cúbica simples ferromagnética, onde consideramos a equação de estado dada pela Eq.(2.32) obtida a partir da nova formulação da energia livre. A análise de tamanho finito é obtida considerando a expressão:

$$t_c = t_c^* + AN^{-\frac{1}{\nu}} \quad (2.33)$$

onde t_c^* é o valor da temperatura crítica encontrada pela processo de extrapolação no limite termodinâmico, ν um expoente crítico que para teorias de campo médio é igual a 0.5 e A uma constante obtida do coeficiente angular da reta.

Na Fig.(2.5) encontramos o valor de t_c considerando aglomerados com até $N = 36$ sítios centrais numa rede quadrada. Podemos ter uma idéia desse arranjo fazendo uma extensão da Fig.(2.3) para este caso. A temperatura crítica parte de um valor menor tendendo ao valor exato, $t_c = 2.27$, na medida que aumentamos o número de sítios do aglomerado. A análise de tamanho finito mostra que $t_c^* = 2.21$, bem próximo do valor exato. Suzuki[1] encontrou para a rede quadrada o valor $t_c^* = 2.24$ aplicando a CAM em campo médio na aproximação de aglomerados finitos, onde foi usado aglomerado com até $N = 69$ spins.

No caso da rede cúbica, temos os resultados mostrados na Fig.(2.6) para aglomerado com até $N = 16$ spins. A temperatura crítica apresenta o mesmo comportamento da

rede quadrada na medida que aumentamos o número de spins do aglomerado, no entanto, para três dimensões a tendência ao valor "exato", $t_c = 4.51$, é reduzida devido o arranjo tridimensional da estrutura⁴ obtendo aproximadamente $t_c^* = 4.03$. Neste caso, Suzuki encontrou $t_c^* = 4.53$ utilizando aglomerado com até $N = 81$ sítios centrais.

Observamos através destes resultados que esta nova proposta é promissora pois tem apresentado comportamento que tende ao valor exato com o crescimento do número de sítios do aglomerado. Esses resultados estimularam sua aplicação no estudo dos diagramas de fases em sistemas com campo aleatório que será tema de estudo do próximo capítulo.

⁴Em um arranjo tridimensional os spins encontram-se com um número maior de ligações com seus vizinhos, o que dificulta o processo de convergência do método.

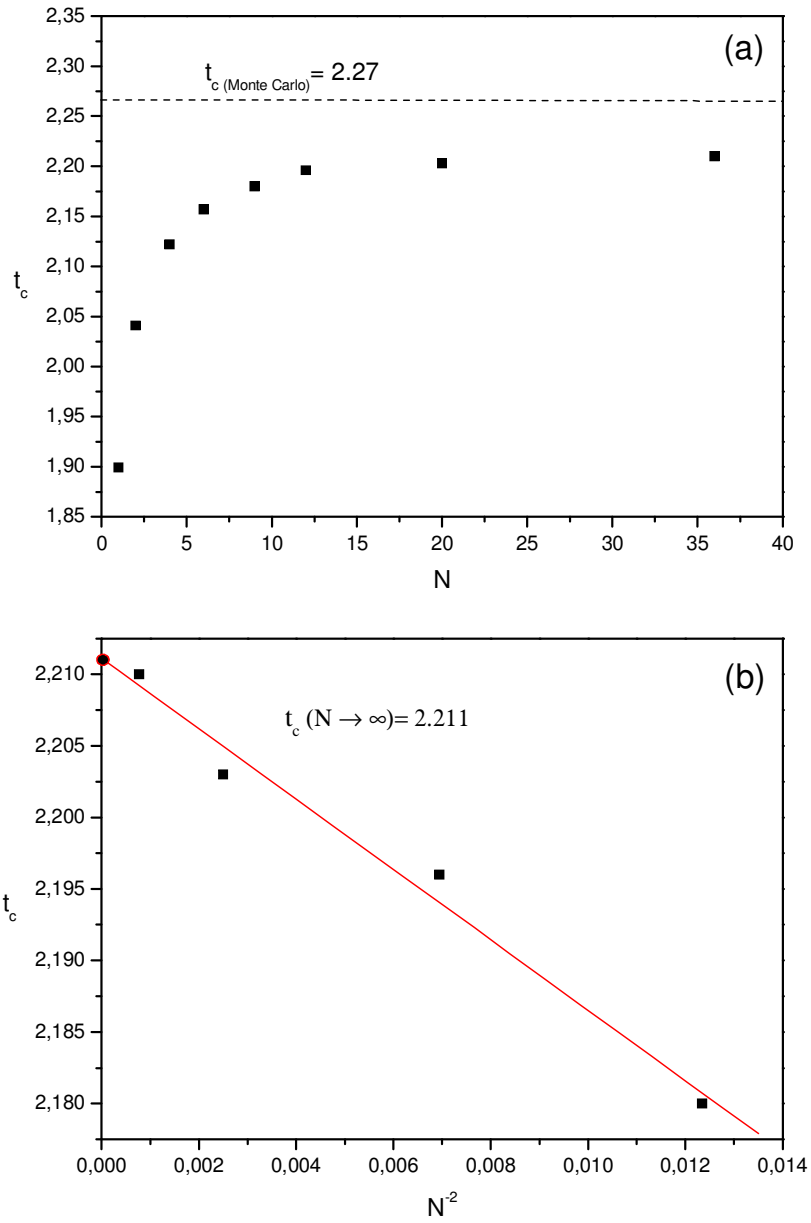


Figura 2.5: Na figura acima, em (a) temos o comportamento da temperatura crítica reduzida $t_c = \frac{k_B T_c}{J}$ em função da quantidade N de sítios do aglomerado para uma rede quadrada ferromagnética. Em (b) temos a análise de tamanho finito encontrando o valor $t_c = 2.21$ para $N \rightarrow \infty$.

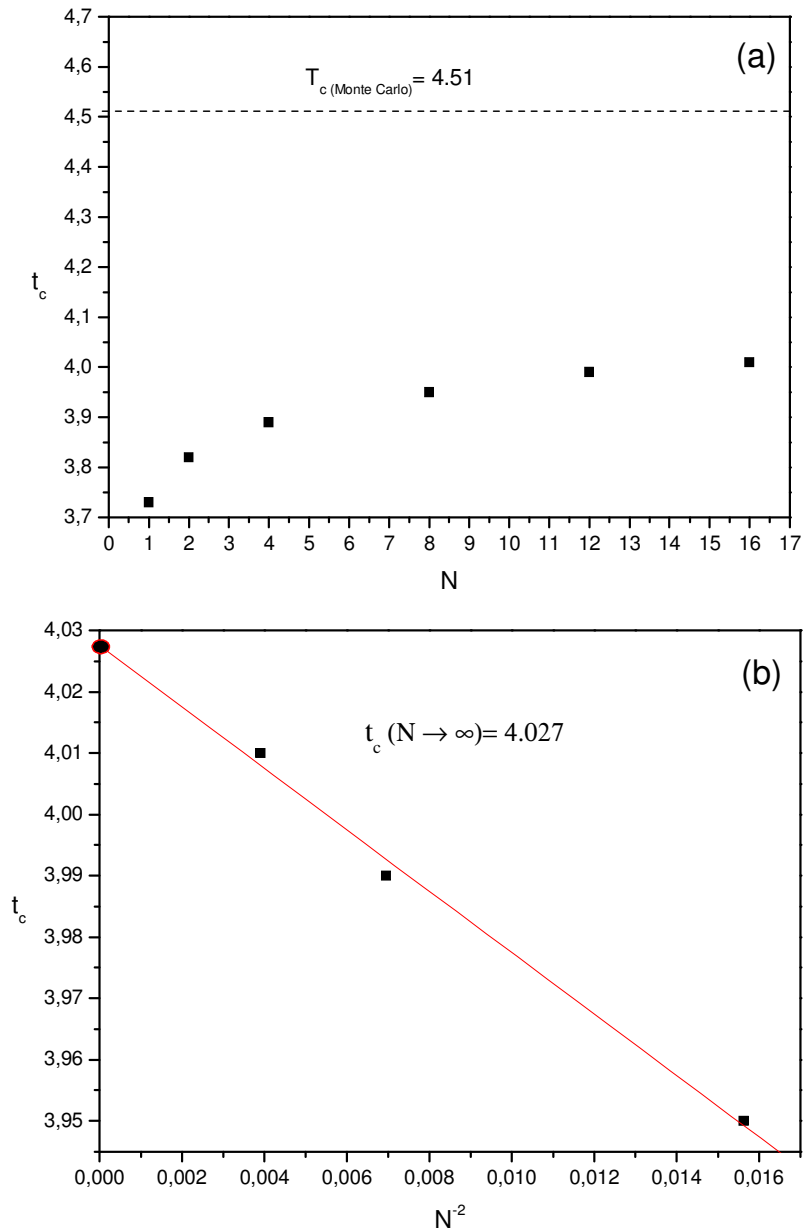


Figura 2.6: Na figura acima temos em (a) o comportamento da temperatura crítica reduzida $t_c = \frac{k_B T}{J}$ em função da quantidade N de sítios do aglomerado para uma rede cúbica simples ferromagnética. Em (b) temos a análise de tamanho finito encontrando o valor $t_c = 4.03$ para $N \rightarrow \infty$.

Referências

- [1] M. Suzuki, M. Katori e X. Hu, *J. Phys. Soc. Jap.*, **56**, 3092 (1987).

Capítulo 3

Modelo de Ising com Campo Aleatório

3.1 Introdução

O êxito na aplicação da Mecânica Estatística no estudo de sistemas fluidos e magnéticos têm levado a um melhor entendimento dos princípios fundamentais que regem o comportamento da matéria. Em particular, temos a teoria das transições de fase contínua, ditas de segunda ordem, que está muito bem compreendida[1, 2] tanto do ponto de vista teórico quanto experimental. No entanto, temos na natureza a ocorrência muito comum de transições de fase de primeira ordem. Para esse caso, o comprimento de correlação permanece com um valor finito e assim, um comportamento universal não se faz mais presente no sistema e características interessantes passam a ser observadas tais como: descontinuidade do parâmetro de ordem e das funções termodinâmicas no ponto de transição e a presença de um calor latente, necessário para um reordenamento do sistema dentro de uma mesma temperatura. Para alguns sistemas, essa transição de primeira ordem pode tornar-se contínua com a alteração de parâmetros externos como a pressão e o campo magnético aplicado ou com a adição de impurezas[3]. Essas influências podem

ser bem definidas ou de caráter aleatório levantando então uma importante questão que é a influência da aleatoriedade sobre a transição de fase termodinâmica.

Para o estudo da influência da aleatoriedade no sistema, tem-se trabalhado com o modelo de Ising com campo aleatório (RFIM - *Random Field Ising Model*) dado pelo Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = \pm J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - \sum_j h_i S_i, \quad (3.1)$$

onde o segundo termo é a interação Zeeman, h_i a variável aleatória associada ao campo magnético, S_i a variável de spin do sítio i na direção axial (eixo z) com a soma abrangendo todos os sítios da rede e $\pm J$ simulando os estados ferromagnético ($\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow$) e antiferromagnético ($\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$). Este modelo tem atraído um grande interesse a partir da sua simulação experimental, da existência de uma dimensão crítica abaixo da qual não existe ordem de longo alcance e da presença de fenômenos de multicriticalidade.

Experimentalmente, podemos obter o RFIM a partir de um antiferromagneto Ising diluído na presença de um campo magnético uniforme[4, 5]. Como exemplo de sistemas que têm sido extensivamente investigados temos os compostos $Fe_x Zn_{1-x} F_2$ e $Fe_x Mg_{1-x} Cl_2$ que, para certos valores de concentração, são considerados como padrões para a realização experimental do RFIM. Especificamente, o composto $Fe_x Mg_{1-x} Cl_2$ apresenta um comportamento de vidro de spin Ising para $x < 0.55$ sendo considerado um típico RFIM para altas concentrações magnéticas, pois apresenta o fenômeno da multicriticalidade[6]-[8]. Fisicamente, a presença de impurezas nesses compostos leva a variações locais na soma de interações de troca, que ligam um determinado sítio a outros sítios da rede, de tal forma que a aplicação de um campo magnético externo uniforme gera uma reversão nos sítios com impurezas, alterando a magnetização local que pode variar tanto em sinal como em magnitude. Isso leva ao aparecimento de um campo aleatório local, o que altera drasticamente o comportamento crítico do sistema. Esse modelo inicialmente tornou-se relevante no estudo da instabilidade eletrônica em com-

postos do tipo $K_2Pt(CN)_4Br_{0.3}.3H_2O$ proposto por Sham e Patton[9] para explicar a ausência de ordem de longo alcance nesse material.

A influência da aleatoriedade do campo magnético no comportamento crítico do sistema foi tratado inicialmente por Larkin[10] no estudo de supercondutores e, mais tarde, generalizada por Imry e Ma[11], onde analisaram o modelo isotrópico clássico com relação à influência dos parâmetros n , que dá o total de componentes de spin¹ e d que especifica a dimensionalidade do sistema. Através de argumentos associados à energia necessária para a formação de domínios magnéticos no estado fundamental², seguido à aplicação de um campo aleatório, e na observação da divergência da função susceptibilidade de estados ordenados, mostraram que para $n = 1$ não existe ordem de longo alcance para dimensionalidades menores que o valor crítico $d_c = 2$. Para sistemas com simetria contínua, ou seja, $n \geq 2$, concluíram que a ordem deixa de existir para valores abaixo de $d_c = 4$, isso acontecendo mesmo para o estado fundamental, resultado este que difere da teoria de campo médio que fornece $d_c = 6$ encontrado por Lacour-Gayet e Toulouse[12, 13]³ no estudo do gás ideal de Bose. No entanto, os autores já destacavam que este comportamento para sistemas com simetria contínua não é exato, pois apenas a parte linear foi utilizada na análise da função de correlação.

Seguindo estes resultados, Schneider e Pytte[14] resolveram o modelo exato de Ising dado pela Eq.(3.1) através do princípio variacional de Bogoliubov, associado a uma distribuição de probabilidade gaussiana, com a energia livre do sistema obtida pelo método das réplicas. A linha de transição encontrada foi inteiramente de segunda ordem separando uma fase ferromagnética de uma fase vidro de spin com a fase ferromagnética

¹Com $n = 1$ para o modelo de Ising, $n = 2$ modelo XY e $n = 3$ simulando o modelo de Heisenberg. No caso clássico, para $n \geq 2$ o sistema é dito de simetria contínua, com a variável de spin podendo assumir qualquer valor no plano de rotação.

²A criação desses domínios no estado fundamental destrói a ordem de longo alcance no sistema.

³Aqui há uma intensa discussão à respeito do valor de d_c utilizando argumentos de grupo de renormalização, análise de expansão ε e teoria de perturbação. Estabeleceram a regra para $n \geq 2$ na qual um sistema d -dimensional ($4 < d < 6$) com interação de curto alcance e campo aleatório apresenta os mesmos expoentes críticos de um sistema puro $d - 2$ dimensional. Para $n = 1$ essa regra não pode ser aplicada devido a problemas com a convergência dos elementos da expansão.

apresentando-se instável em qualquer temperatura para um campo suficientemente alto.

A simulação de Monte Carlo foi desenvolvida por Landau e Lee[15] no estudo de modelos RFIM 3D como uma tentativa de prover dados "experimentais" para esse caso. A análise dos expoentes críticos mostrou que abaixo de $kT/J \sim 2$ a transição torna-se de primeira ordem, sugerindo a presença de um ponto tricrítico, resultado este em desacordo com os obtidos através de métodos de expansão em série[12, 16, 17], que sugerem não existir transição de fase para $d < 4$ para o modelo de Ising com campo aleatório. Surge então o fenômeno da multicriticalidade no estudo de RFIM, no entanto, isto pode ser consequência do tamanho finito do sistema ou indicando uma quebra na regra de dimensionalidade para o modelo de Ising. Estes resultados foram confirmados mais tarde por Rasmussen, Novotny e Landau[18] utilizando MCRG (*Monte Carlo Renormalization Group*), Hernandez e Diep[19] através da análise dos histogramas em Monte Carlo e também por Fytas[20] usando algoritmo de Wang-Landau. Para o caso 3D observaram uma descontinuidade na transição, onde os expoentes críticos são aparentemente modificados pelo campo aleatório com uma transição de segunda ordem para campos abaixo de $h^t \simeq 1.8$. Na região acima desse valor não apresentou dados consistentes, o que levou os autores a tratar esta região como sendo de primeira ordem e para $d = 2$ não encontraram nenhuma transição de fase.

Aharony[21], trabalhando com o modelo clássico da Eq.(3.1), onde os spins apresentam n componentes, aplicou teoria de campo médio e argumentos de grupo de renormalização com a variável aleatória h_i tratada através de uma distribuição bimodal. O diagrama de fases $T_c(h)$ foi obtido com uma linha de transição de primeira e segunda ordem separadas por um ponto tricrítico localizado em $h^t = 0.44$ e $T^t = 0.67$ (com os campos medidos em unidades de zJ e a temperatura em unidade de zJ/k , sendo z o número de coordenação), sendo verificado que este comportamento está associado diretamente aos detalhes da função distribuição $P(h_i)$ utilizada. Ele observou que sempre que uma distribuição simétrica e analítica para os campos apresenta um valor mínimo a campo nulo, devemos esperar um ponto tricrítico e transição de primeira ordem para

temperaturas suficientemente baixas, o que explica o diagrama encontrado por Schneider e Pytte, pois a função gaussiana apresenta um valor máximo em torno de $h = 0$. Em geral, temos que a existência de um ponto tricrítico é uma característica presente nos diagramas de fase em teorias de campo médio para distribuições bimodais.

A possibilidade da existência de um ponto tricrítico no diagrama de fases do RFIM gerou novos e intensos debates na busca de uma completa caracterização desse sistema. No entanto, a confirmação de um valor definitivo para a dimensionalidade crítica ainda continua à espera de uma determinação mais precisa tanto teórica quanto experimentalmente. Apesar de ter sido encontrado que $d_c = 2$ para o caso Ising utilizando análises teóricas rigorosas[22, 23], argumentos de Grupo de Renormalização[24, 25], expansão em série em altas temperaturas[26], simulações numéricas[27, 18] e dados experimentais[28], alguns métodos como o da equivalência, ordem por ordem, em teoria de perturbação no modelo de Ginzburg-Landau e cálculos de Grupo de Renormalização [13, 17, 29, 30], sugerem $d_c = 3$. Essa discrepância de resultados pode ser consequência das aproximações existentes em cada método ao tentar reproduzir o comportamento de sistemas reais ou no método de medição gerando conclusões errôneas. Como exemplo do esforço de aperfeiçoamento dos métodos temos o trabalho de Grinstein e Ma[24] usando novos modelos de interface no RFIM e também Imbrie[23], onde encontraram novamente $d_c = 2$. Este resultado foi confirmado experimentalmente por Belanger e Jaccarino[28, 31] usando o método de birrefringência linear nos antiferromagnetos $Fe_xZn_{1-x}F_2$ e $Mn_xZn_{1-x}F_2$.

Experimentalmente, as contradições encontradas no valor de d_c estão relacionadas a longos tempos de equilíbrio e comportamento dependente da história⁴ observado, dentre outros casos, em modelos como o sólido-sólido (SOS) para verificar a taxa de crescimento das barreiras de domínios em função da aplicação do campo aleatório, da interação de troca e da temperatura. A forma como o sistema é resfriado também influencia nos resultados. No caso de um antiferromagneto resfriado na presença de um campo aleatório, normalmente não apresenta ordem de longo alcance até nas mais baixas temperaturas

⁴Para uma discussão mais aprofundada, ver as referências em [32].

estudadas. Por outro lado, a ordem de longo alcance antiferromagnética é estabelecida quando é resfriado a campo nulo, que persiste sob aplicação de fortes campos. Assim, num dado ponto do plano $h(t)$ o sistema pode apresentar ordem de longo alcance ou não, isso dependendo de como o ponto tenha sido atingido. Não está ainda claro qual desses dois procedimentos de resfriamento produz o estado de equilíbrio verdadeiro sobre o qual tanta atenção teórica tem sido dispensado, assim podemos ter $d_c = 2$ ou 3.

O desenvolvimento de métodos computacionais mais precisos e o aumento no poder de processamento permitiram análises com resultados mais conclusivos no estudo da influência da função distribuição utilizada nos diagramas de fase. Para três dimensões, a análise da expansão em série[26] em altas temperaturas determinou o ponto tricrítico em $h^t = 0.28 \pm 0.03$ e $T^t = 0.58 \pm 0.01$ estando em boa concordância com os resultados obtidos anteriormente. A visão geral que emerge da análise de séries é que cada vez mais a linha de transição é de primeira ordem quanto mais a dimensionalidade é reduzida. Uma questão importante surge aí: a partir de qual dimensão aparece o ponto tricrítico? Para responder a essa pergunta, Houghton e Khurana[33] aplicaram expansão em série no RFIM com distribuição gaussiana. Variando a dimensionalidade d entre 6 e 3 do sistema, encontraram para essa distribuição um possível ponto tricrítico para $d = 3$ com a curva apresentando um leve comportamento reentrante.

A caracterização do tipo de transição para o RFIM tridimensional no regime de baixas temperaturas também tem apresentado divergências nos resultados encontrados. Expansões em série em alta temperatura[34] e uma análise de escala no estado fundamental[35] encontraram transições contínuas, tanto para as distribuições gaussiana quanto bimodal. No entanto, vários outros trabalhos[36]-[38] sugerem uma transição de primeira ordem para este modelo. Isto ocorre porque a magnetização e os expoentes críticos associados ao calor específico são muito pequenos nesse regime, dificultando uma observação mais precisa do comportamento da magnetização, se varia contínua ou descontinuamente no ponto de transição. No entanto, para quatro dimensões, uma análise do estado fundamental[35] conduz a uma transição de primeira ordem, no caso bimodal e uma contínua para uma

distribuição gaussiana, de acordo com as previsões de campo médio.

Com o objetivo de verificar a tendência de comportamento do sistema com o aumento do número de sítios na rede e outras possíveis influências na linha de transição, Grest e Soukoulis[39], trabalhando com simulação de Monte Carlo e campo médio no estudo do RFIM com as distribuições bimodal e gaussiana, cresceram o sistema até $L = 200$ para o caso $2D$ e $L = 40$ para $3D$. O diagrama $\Delta(T)$ para $2D$ foi obtido com auxílio da função energia livre via campo médio, sendo Δ a variável aleatória associada ao campo magnético. A curva em $T = 0$ toca o eixo Δ no valor Δ_c e observa-se uma diminuição desse valor, com tendência a zero, conforme aumenta o número de sítios na simulação⁵. Este comportamento, derivado de campo médio e confirmado por Monte Carlo no estudo da magnetização, fornece evidências para a ausência de ordem de longo alcance em $2D$ conforme previsto por Imry e Ma. Para o caso $3D$ foi obtido apenas o valor de Δ_c com uma tendência de diminuição desse valor, mas de maneira muito menos acentuada que no caso $2D$. Um ponto tricrítico não foi observado devido a utilização da distribuição gaussiana para a obtenção desse diagrama. A transição de primeira ordem pode ser observada aplicando a distribuição bimodal na construção da curva para a magnetização. Uma característica desse diagrama para o caso gaussiano é a diminuição do valor da magnetização no estado fundamental com o aumento do campo aplicado. Os diagramas de fases encontrados para o caso antiferromagnético num campo uniforme são similares ao RFIM, fato este já destacado por Aharony[13].

Atualmente, o estudo do RFIM tem contado com técnicas mais avançadas para a análise dos diagramas de fase e comportamento da magnetização, tais como o uso de distribuição dupla[41] e tripla gaussiana usando o método das réplicas[42], Teorias de Campo Efetivo (EFT)[43]-[49], aplicação em redes hierárquicas[50] e metamagnetos com interações entre primeiros e segundos vizinhos[51] o que tem melhorado os resultados,

⁵Essa tendência de comportamento do diagrama de fases também foi encontrado mais tarde por Fortin[40] usando Grupo de Renormalização mostrando que a linha de transição obtida é resultado das limitações/aproximações das técnicas utilizadas.

confirmando tendências de comportamento já observadas.

A aplicação de EFT tem mostrado a existência de um ponto tricrítico somente para o caso $z \geq 6$ [45], mas a aplicação de um campo transversal feita por Sarmiento[47] encontrou um ponto tricrítico associado a um comportamento reentrante para valores maiores que $z = 4$, considerando distribuição de probabilidade bimodal. Esse comportamento reentrante também foi observado por Fortin[40], Akinci[43] e Yusuf[44] próximo do ponto tricrítico o que pode ser indício de uma linha de instabilidade.

Nosso objetivo nesse Capítulo é aplicar a técnica do operador diferencial (TOD) na aproximação de campo efetivo (EFT) em aglomerados finitos para o estudo do RFIM. Os diagramas de fase e propriedades termodinâmicas serão obtidos para o RFIM nos sistemas Ferro (F) e antiferromagnético(AF) em duas e três dimensões. Nesses sistemas, temos basicamente a linha de transição separando a fase ordenada (F/AF) da fase desordenada Paramagnética (P). A implementação computacional dessa técnica permitiu o crescimento dos aglomerados com $N = 1, 2, 4, 8$ e 12 spins, o que favoreceu a observação da tendência de comportamento do sistema para o limite exato ($N \rightarrow \infty$). Para essa análise, utilizamos os métodos da construção de Maxwell, através de duas propostas de energia livre, e da análise da descontinuidade na derivada da magnetização ($\frac{dm}{dt}$) na região de transição de fase. Consideramos as funções distribuição de probabilidade bimodal, gaussiana e gaussiana duplo-pico e também com o campo transversal sendo tratado para $N = 1$ no estudo das influências do fenômeno da multicriticalidade. Encontramos as propriedades termodinâmicas do sistema para o caso de $N = 1$ sítio central aplicando o processo numérico de integração do calor específico para a determinação da entropia e energia livre. Uma nova metodologia foi utilizada para a determinação da energia livre diretamente na aplicação da TOD com resultados mais confiáveis possibilitando ainda o estudo das propriedades termodinâmicas do sistema de forma mais eficiente, gerando resultados qualitativamente e quantitativamente satisfatórios.

3.2 Funções Distribuição de Probabilidade

Em estatística, uma distribuição de probabilidade descreve a chance que uma variável pode assumir ao longo de um espaço de valores. Ela é uma função cujo domínio são os valores da variável e cuja imagem são as probabilidades da variável assumir cada valor do domínio. Para o caso de uma função distribuição $P(h')$ contínua, definimos o valor médio, ou média configuracional, de uma função $f(h')$ como

$$\langle f(h') \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(h')P(h')dh', \quad (3.2)$$

sendo h' a variável aleatória com a média sendo feita sobre todos os valores possíveis.

A presença da aleatoriedade no RFIM é introduzida através da variável h' associada ao campo magnético, sendo aqui nesta tese tratada através de três tipos de distribuição: bimodal, gaussiana e gaussiana duplo-pico.

3.2.1 Distribuição de Probabilidade Bimodal

Para tratarmos a aleatoriedade do campo através de uma função distribuição discreta, utilizamos a distribuição de probabilidade bimodal para a variável aleatória h' que é dada por

$$P(h') = \frac{1}{2} [\delta(h' - h) + \delta(h' + h)]. \quad (3.3)$$

Essa distribuição, composta por duas funções delta de Dirac (δ) simula o caso do campo h' assumindo apenas os valores discretos $\pm h$. Essa função apresenta um valor mínimo (nulo) a campo nulo o que induz ao aparecimento de uma região de transição de fase de 1º ordem no diagrama de fase $t \times h$ e um ponto tricrítico que o separa da linha de 2º ordem. A existência de um ponto tricrítico e a influência da dimensionalidade em seu comportamento tem sido um dos principais fatores de estímulo no estudo do RFIM.

3.2.2 Distribuição de Probabilidade Gaussiana

Para o caso contínuo temos como primeiro caso a ser tratado a distribuição de probabilidade gaussiana dada pela função

$$P(h') = \sqrt{\frac{1}{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}h'^2\right), \quad (3.4)$$

sendo σ a dispersão da distribuição⁶ e h' a variável aleatória que assume valores contínuos no eixo real.

A distribuição gaussiana tem sua origem na distribuição binomial, para o caso em que temos um número de eventos muito grande. Apresenta como característica importante um ponto de máximo a campo nulo, o que gera apenas linhas de segunda ordem nos diagramas de fase do RFIM.

3.2.3 Distribuição de Probabilidade Gaussiana Duplo-Pico

A distribuição de probabilidade gaussiana duplo-pico para o campo aleatório é dada por

$$P(h') = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{2\pi\sigma^2}} \left\{ \exp\left[-\frac{(h' - h)^2}{2\sigma^2}\right] + \exp\left[-\frac{(h' + h)^2}{2\sigma^2}\right] \right\}, \quad (3.5)$$

onde σ é a dispersão da distribuição e h' a variável do campo aleatório que pode assumir os valores $\pm h$ com igual probabilidade de ocorrência. Na verdade trata-se da união da distribuição bimodal e gaussiana. Assim, temos uma distribuição contínua gaussiana com dois picos de máximo em $\pm h$ que dependem da relação $\frac{h}{\sigma}$ conforme mostrado nas Figs. (3.1) e (3.2).

A aplicação das funções distribuição gaussiana e gaussiana duplo-pico na definição de média configuracional, Eq.(3.2), tem gerado integrais cujas soluções são obtidas através de procedimentos numéricos. Aqui utilizamos principalmente o método da quadratura

⁶O aumento no valor de σ implica no aumento da aleatoriedade do sistema.

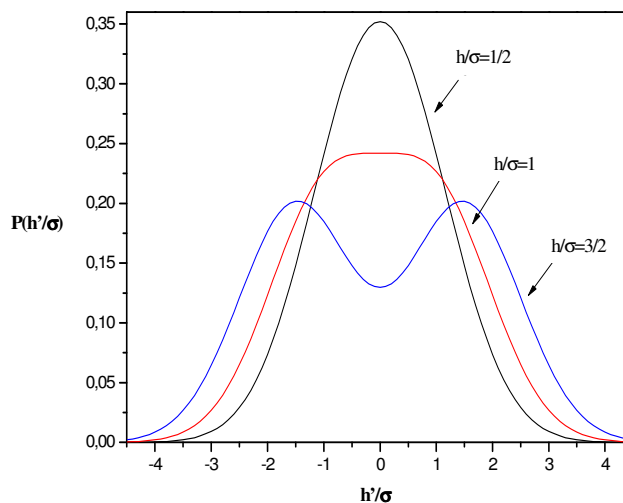


Figura 3.1: Distribuição de probabilidade gaussiana duplo-pico, Eq.(3.5), para valores da relação $h/\sigma = \frac{1}{2}, 1$ e $\frac{3}{2}$.

gaussiana devido seus resultados serem superiores aos obtidos por outros métodos (como o da quadratura e o de Newton-Cotes), desde que não haja singularidades no integrando ou na sua derivada.

3.3 Modelo de Ising com Campo Aleatório

Vamos a seguir resolver o modelo de Ising com campo aleatório (RFIM) dado pela Eq.(3.1) aplicando a definição usual de média termodinâmica no ensemble canônico. O conhecimento da função de partição é um ponto inicial para obtermos qualquer propriedade do sistema, como a magnetização e as funções termodinâmicas que serão apresentadas na próxima seção. Faremos a aplicação da Técnica do Operador Diferencial (TOD) na aproximação de campo efetivo (*Effective Field Theory* - EFT) para vários tamanhos de aglomerados gerando expansões do tipo

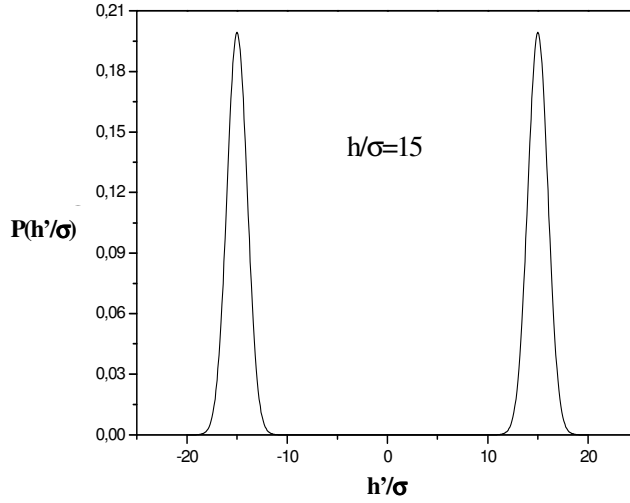


Figura 3.2: Distribuição de probabilidade gaussiana duplo-pico, Eq.(3.5) para $h/\sigma = 15$, tendendo para a distribuição bimodal ($\sigma \rightarrow 0$).

$$m = \sum_i^z A_i m^i, \quad (3.6)$$

onde o processo de construção dos coeficientes A_i é feito a partir da implementação numérica discutida no Capítulo 2 dessa tese. Uma exposição completa de cada coeficiente é aqui inviável de ser feita dado seu tamanho excessivamente longo. Faremos a aplicação para aglomerados com $N = 1$ e 2 sítios centrais nos sistemas F e AF realizando então a generalização para $N \geq 4$. O método não impõe limites para o valor de N , no entanto, o processamento computacional sim, o que fez com que nos limitássemos a aglomerados com até $N = 12$ spins para o caso $2D$ e $N = 8$ spins para o caso $3D$.

3.3.1 Aglomerado com $N = 1$ Spin

Para aplicação da TOD em teoria de campo efetivo, aplicamos a aproximação de aglomerados finitos, onde as interações entre os sítios centrais são tratadas de forma

exata enquanto que a vizinhança é tratada através da aproximação uniaxial. Vamos representar as variáveis de spin dos sítios centrais por S_i e dos sítios adjacentes por σ_i , onde está subentendido que são as componentes no eixo z , o que resulta na simplificação

$$\sum_i \sigma_i \cdot \mathbf{S}_i = \sum_i \sigma_i S_i. \quad (3.7)$$

Desenvolveremos as equações para os casos ferromagnético (F) e antiferromagnético (AF) nas redes quadrada (2D) e cúbica simples (3D). A aplicação em um sítio central (EFT-1) não apresenta resultados qualitativos e quantitativos tão bons quando comparados com métodos mais rigorosos, mas representa um ponto inicial do estudo para a observação da tendência de comportamento do sistema para o caso exato ($N \rightarrow \infty$). Para este caso, devido a relativa facilidade na implementação computacional dado que a matriz associada ao Hamiltoniano já se apresentar diagonalizado, iremos considerar, além do campo aleatório h_o , um campo transversal Ω na direção x para verificar sua influência nos diagramas de fase na distribuição de probabilidade bimodal.

Estado Ferromagnético (F)

O estado ferromagnético é caracterizado pelo fato de todos os spins da rede estarem orientados em uma mesma direção no espaço (\uparrow ou \downarrow) e para EFT-1 temos o arranjo mostrado na Fig.(3.3) para o caso de uma rede cúbica simples, com 6 primeiros vizinhos ($n = 6$). A rede quadrada se faz eliminando os sítios 5 e 6 na figura, caindo no caso 2D com 4 primeiros-vizinhos ($n = 4$).

A expressão para o Hamiltoniano é dado por:

$$\mathcal{H}_1^F = -J \sum_{i=1}^n \sigma_i S_i - h_o S_1 - \Omega S_1^x, \quad (3.8)$$

onde $\sigma_i(S_1)$ representa a componente z da matriz de Pauli e S_1^x a componente x transversal.

Para simplificar as aplicações seguintes, utilizaremos a relação $H_1^F = -\beta \mathcal{H}_1^F$, ficando

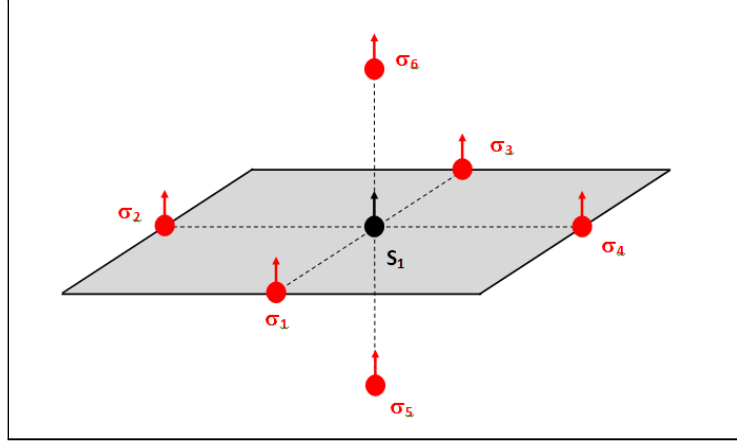


Figura 3.3: Esquema de um aglomerado com $N = 1$ spin numa rede cúbica simples ferromagnética.

então

$$H_1^F = (C_{x_1} + L) S_1 + K\omega S_1^x, \quad (3.9)$$

onde $K = \beta J$, $L = Kh'$, $h' = \frac{h_0}{J}$, $\omega = \frac{\Omega}{J}$ e

$$C_{x_1} = K \sum_i^n \sigma_i,$$

o termo associado à interação com os n primeiros vizinhos ao sítio central (aqui indicado pelo índice x_1 , onde x indica que o termo C refere-se à soma das interações somente entre primeiros vizinhos ao sítio 1 do aglomerado central).

A matriz de H_1^F é construída na base ortogonal $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ resultando em uma matriz não diagonal dada por

$$H_1^F = \begin{bmatrix} C_{x_1} + L & K\omega \\ K\omega & -C_{x_1} - L \end{bmatrix}. \quad (3.10)$$

Através do processo de diagonalização, encontramos seus autovalores λ_i para assim obtermos a função de partição

$$Z_1^F = \sum_{i=1}^2 e^{\lambda_i}. \quad (3.11)$$

Simplificando a soma das exponenciais, obtemos a expressão analítica para a função de partição:

$$Z_1^F = 2 \cosh \left(\sqrt{(C_{x_1} + L)^2 + (K\omega)^2} \right). \quad (3.12)$$

A magnetização por spin na presença do campo aleatório e transverso é obtida fazendo-se inicialmente a média térmica nas configurações de spin, e em seguida a média configuracional utilizando as distribuições de probabilidade dadas pelas Eqs.(3.3), (3.4) e (3.5), sendo que a ordem na qual essas médias são feitas, para o caso de campo aleatório, não altera o resultado final. Matematicamente temos

$$m = \langle \langle S_1 \rangle \rangle_c = \left\langle \left\langle \frac{\partial}{\partial \phi} \ln(Z_1^F) \right\rangle \right\rangle_c, \quad (3.13)$$

sendo $\phi = C_{x_1} + L$ o termo relacionado à variável S_1 na Eq.(3.9).

A média térmica é dada pela média das possíveis configurações (*ensemble*) do sistema em cada temperatura. Desenvolvendo a Eq.(3.13) para esta média obtemos

$$\langle S_1 \rangle = \left\langle \frac{(C_{x_1} + L)}{\sqrt{(C_{x_1} + L)^2 + (K\omega)^2}} \tanh \left(\sqrt{(C_{x_1} + L)^2 + (K\omega)^2} \right) \right\rangle.$$

Aplicando a relação fundamental da TOD proposta por Honmura e Kaneyoshi[52] para o caso de interação com primeiros vizinhos com 1 sítio central, obtemos

$$\langle S_1 \rangle = \langle \exp(C_{x_1} D_{x_1}) \rangle F_1^F(x_1, h', \omega) |_{x_1=0}, \quad (3.14)$$

onde a função geradora $F_1^F(x_1, h, \omega)$ é dada por

$$F_1^F(x_1, h', \omega) = \frac{(x_1 + L)}{\sqrt{(x_1 + L)^2 + (K\omega)^2}} \tanh \left(\sqrt{(x_1 + L)^2 + (K\omega)^2} \right). \quad (3.15)$$

Aplicando agora a identidade de van der Waerden para o caso de spin $\frac{1}{2}$ dada por

$$\exp(\alpha\sigma) = \cosh(\alpha) + \sigma \sinh(\alpha), \quad (3.16)$$

com σ assumindo os valores ± 1 e colocando a expressão na forma exponencial, reescrevemos a Eq.(3.14) na forma

$$\langle S_1 \rangle = \left\langle \prod_{i=1}^n (a_i \exp(KD_{x_i}) + b_i \exp(KD_{x_i})) \right\rangle F_1^F(x_1, h', \omega) |_{x_1=0}, \quad (3.17)$$

onde $a_i = \frac{1+\sigma_i}{2}$ e $b_i = \frac{1-\sigma_i}{2}$.

Aplicando a média térmica considerando desacoplamento de 1º ordem para campo efetivo, conforme mostrado no Capítulo 2 desta tese, obtemos a seguinte expressão aproximada

$$\langle S_1 \rangle = \left[\sum_{p=0}^n \binom{n}{p} a^{(n-p)} b^p \exp[(n-2p)KD_{x_1}] \right] F_1^F(x_1, h', \omega) |_{x_1=0}, \quad (3.18)$$

onde n indica o número de primeiros vizinhos ao sítio central, especificando o tipo de rede que estamos trabalhando, com $a = \frac{1+m}{2}$ e $b = \frac{1-m}{2}$. A expressão final fica na forma de uma expansão binomial pois é mais apropriada para uma implementação computacional.

Na Eq. (3.18) podemos observar que somente a função $F_1^F(x_1, h', \omega)$ depende da variável aleatória h' , assim, somente ela entrará no cálculo da média configuracional, dada pela Eq.(3.2).

A aplicação da média configuracional para o caso de uma distribuição de probabilidade bimodal, Eq.(3.3), a solução da integral fornece uma expressão analítica ficando então a magnetização do sistema dada por

$$m = \left[\sum_{p=0}^n \binom{n}{p} a^{(n-p)} b^p \exp[(n-2p)KD_{x_1}] \right] F_{1c}^F(x_1, h, \omega) |_{x_1=0}, \quad (3.19)$$

sendo

$$F_{1c}^F(x_1, h, \omega) = \langle F_1^F(x_1, h, \omega) \rangle_c = \frac{1}{2} [F_1^F(x_1, h, \omega) + F_1^F(x_1, -h, \omega)].$$

Na aplicação das funções distribuição gaussiana e gaussiana duplo-pico, a solução da integral para a obtenção da função $F_{1c}^F(x_1, h, \omega)$ é feita através de um procedimento numérico introduzido no algoritmo, sendo aqui aplicado o método da quadratura gaussiana, isto se repetindo para outros valores de N presentes no aglomerado.

Ao desenvolvermos o somatório na Eq. (3.19) obtemos a expansão em série dada pela Eq.(3.6). Para o caso em que temos a presença de um campo longitudinal nulo, teremos que os coeficientes dos termos da magnetização de expoente par são nulos, isto acontece devido a simetria da Eq.(3.6), ou seja, quando é feito a mudança $m \rightarrow -m$ os dois membros devem respeitar essa condição, o que só acontece se os coeficientes de índice par forem nulos. Verificamos que isso também ocorre para o caso do campo aleatório.

A construção dos coeficientes A_i foi tratada com mais detalhes no Capítulo 2 desta tese. Como visto, são expressões extensas que crescem à medida que trabalhamos com sistemas mais complexos (tais como: aumento na quantidade de spins do aglomerado, interação com segundos vizinhos, etc) acarretando um esforço computacional crescente para sua obtenção.

Estado Antiferromagnético (AF)

O estado antiferromagnético é construído invertendo a direção do spin central S_1 Fig.(3.3). O Hamiltoniano para este caso é dado por

$$\mathcal{H}_1^{AF} = J \sum_{i=1}^n \sigma_i S_1 - h_o S_1 - \Omega S_1^x, \quad (3.20)$$

sendo a função de partição associada também dada pela Eq.(3.12), onde agora

$$C_{x_1} = -K \sum_i^n \sigma_i^z.$$

Como a configuração de spins em torno do sítio central no antiferromagneto não sofreu alteração, encontramos a mesma expressão binomial para a magnetização após a aplicação das médias térmica e configuracional para a função de distribuição bimodal. Assim temos

$$m = \left[\sum_{p=0}^n \binom{n}{p} a^{(n-p)} b^p \exp[(n-2p)KD_{x_1}] \right] F_{1c}^{AF}(x_1, h, \omega) |_{x_1=0} \quad (3.21)$$

onde

$$\langle F_1^{AF}(x_1, h, \omega) \rangle_c = F_{1c}^{AF}(x_1, h, \omega) = \frac{1}{2} [F_1^{AF}(x_1, h, \omega) + F_1^{AF}(x_1, -h, \omega)],$$

sendo que F_1^F se diferencia de F_1^{AF} através do termo C_{x_1} .

Para sistemas Ising puro, a simetria contida na expressão para a magnetização em EFT-1 faz com que os sistemas F e AF apresentem as mesmas propriedades termodinâmicas e conseqüentemente o mesmo diagrama de fases (i.e. $T_c = T_N$). Este comportamento se mantém com a aplicação do campo aleatório devido a simetria presente no cálculo da média configuracional. Para um campo longitudinal uniforme temos um comportamento diferenciado para as duas fases.

3.3.2 Aglomerado com $N = 2$ Spins

A extensão para $N = 2$ sítios centrais, EFT-2, mostra uma diferenciação no arranjo dos spins para os estados F e AF o que implicará numa mudança na construção dos coeficientes A_i tanto na forma binomial quanto na função geradora. Faremos inicialmente a aplicação em uma rede cúbica, mostrada na Fig.(2.1), sendo que a extensão para a rede quadrada se faz eliminando os sítios 4, 5, 9 e 10. Não mais utilizaremos o campo transversal para a análise em EFT-2 pois nesse caso a matriz resultante não apresenta

diagonalização exata, sendo necessário um procedimento numérico para obtenção de seus autovalores, gerando assim um aumento no tempo computacional, o que dificulta o estudo do sistema com campo aleatório para $N > 4$.

Estado Ferromagnético

O Hamiltoniano reduzido H_2^F que descreve o modelo de Ising com $N = 2$ sítios centrais, Fig.(2.1), na presença de um campo aleatório para o estado ferromagnético é dado por

$$H_2^F = K S_1 S_2 + C_{x_1} S_1 + C_{x_2} S_2 + L(S_1 + S_2), \quad (3.22)$$

sendo

$$C_{x_1} = K \sum_{i=1}^5 \sigma_i,$$

$$C_{x_2} = K \sum_{i=6}^{10} \sigma_i,$$

as interações com os primeiros vizinhos dos sítios centrais 1 e 2.

A matriz para o Hamiltoniano H_2^F é gerada na base ortogonal $\{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\}$, onde S_1 e S_2 são diagonais, resultando na função de partição

$$Z_2^F = 2 [\exp(K) \cosh(C_{x_1} + C_{x_2} + 2L) + \exp(-K) \cosh(C_{x_1} - C_{x_2})]. \quad (3.23)$$

A magnetização é calculada a partir da expressão

$$m = \frac{1}{2} \langle\langle S_1 + S_2 \rangle\rangle_c. \quad (3.24)$$

Tomando inicialmente a média térmica fica:

$$\frac{1}{2} \langle S_1 + S_2 \rangle = \left\langle \frac{\sinh(C_{x_1} + C_{x_2} + 2L)}{\cosh(C_{x_1} + C_{x_2} + 2L) + \exp(-2K) \cosh(C_{x_1} - C_{x_2})} \right\rangle. \quad (3.25)$$

Aplicando a Técnica do Operador Diferencial para o caso de dois operadores e a relação de Van der Waerden, podemos reescrever a Eq.(3.25) na forma

$$\frac{1}{2} \langle S_1 + S_2 \rangle = \left\langle \prod_{i=1}^{n_1} (a_i e^{KD_{x_1}} + b_i e^{-KD_{x_1}}) \prod_{i=6}^{n_2} (a_i e^{KD_{x_2}} + b_i e^{-KD_{x_2}}) \right\rangle F_2^F(x_1, x_2, h') |_{x_1=x_2=0}, \quad (3.26)$$

com n_1 identificando os primeiros vizinhos ao sítio 1 e n_2 os primeiros vizinhos ao sítio 2.

Para uma rede cúbica simples e quadrada, temos que $n_1 = n_2 = 5$ e 3 , respectivamente.

A função geradora $F_2^F(x_1, x_2, h')$ é definida por:

$$F_2^F(x_1, x_2, h') = \frac{\sinh(x_1 + x_2 + 2L)}{\cosh(x_1 + x_2 + 2L) + \exp(-2K) \cosh(x_1 - x_2)}. \quad (3.27)$$

Aplicando a média térmica na Eq.(3.26) e colocando na forma binomial fica:

$$\frac{1}{2} \langle S_1 + S_2 \rangle = \left[\sum_{p_1=0}^{n_1} \binom{n_1}{p_1} a^{(n_1-p_1)} b^{p_1} e^{(n_1-2p_1)KD_{x_1}} \cdot \sum_{p_2=0}^{n_2} \binom{n_2}{p_2} a^{(n_2-p_2)} b^{p_2} e^{(n_2-2p_2)KD_{x_2}} \right] F_2^F(x_1, x_2, h') |_{x_1=x_2=0}$$

Para o cálculo da média configuracional na distribuição bimodal, utilizamos a Eq.(3.3) para o processo de integração. Resolvendo a integral para a variável h' no intervalo $-\infty$ e $+\infty$ obtemos:

$$\langle F_2^F(x_1, x_2, h') \rangle_c = F_{2c}^F(x_1, x_2, h) = \frac{1}{2} [F_2^F(x_1, x_2, h) + F_2^F(x_1, x_2, -h)],$$

ficando

$$m = \left[\sum_{p_1=0}^{n_1} \binom{n_1}{p_1} a^{(n_1-p_1)} b^{p_1} e^{(n_1-2p_1)KD_{x_1}} \sum_{p_2=0}^{n_2} \binom{n_2}{p_2} a^{(n_2-p_2)} b^{p_2} e^{(n_2-2p_2)KD_{x_2}} \right] F_{2c}^F(x_1, x_2, h) |_{x_1=x_2=0}, \quad (3.28)$$

ou na forma compacta, mais adequada à implementação numérica,

$$m = \sum_{p_1=0}^{n_1} \sum_{p_2=0}^{n_2} \left[\prod_{i=1}^2 \binom{n_i}{p_i} \right] a^{\left(\sum_{i=1}^2 (n_i - p_i) \right)} b^{\left(\sum_{i=1}^2 p_i \right)} \exp \left[\sum_{i=1}^2 (n_i - 2p_i) KD_{x_i} \right] F_{2c}^F(x_1, x_2, h) |_{x_1=x_2=0}. \quad (3.29)$$

Aqui, também, temos uma expansão em série de potências para m semelhante à Eq.(3.6), no entanto, com os coeficientes A_i obtidos de acordo com a aplicação dada pela Eq.(3.29) e o somatório acontecendo para o número total de vizinhos do aglomerado ($n = n_1 + n_2$).

Estado Antiferromagnético

Para o estado antiferromagnético teremos a presença de duas subredes, conforme mostrado na Fig.(3.4): tipo A (*spin up*, \uparrow) e tipo B (*spin down*, \downarrow).

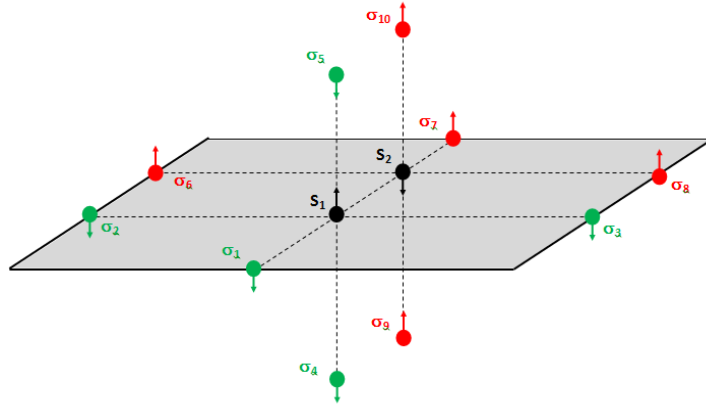


Figura 3.4: Arranjo antiferromagnético para um aglomerado com $N = 2$ spins numa rede cúbica simples.

O Hamiltoniano reduzido que descreve este estado é dado por

$$H_2^{AF} = -K S_1 S_2 + C_{x_1} S_1 + C_{x_2} S_2 + L(S_1 + S_2), \quad (3.30)$$

onde $S_1(S_2)$ representa o spin na subrede $A(B)$ no aglomerado.

A função de partição é obtida pelo mesmo processo empregado para o caso F, obtendo

$$Z_2^{AF} = 2 [\exp(-K) \cosh(C_{x_1} + C_{x_2} + 2L) + \exp(K) \cosh(C_{x_1} - C_{x_2})] \quad (3.31)$$

sendo

$$C_{x_1} = -K \sum_{i=1}^{n_1} \sigma_i^B,$$

$$C_{x_2} = -K \sum_{i=6}^{n_2} \sigma_i^A.$$

Também aqui, como no caso F, encontramos a magnetização a partir da relação dada

pela Eq.(3.24), no entanto, destacando aqui a presença das duas sub-redes no sistema:

$$\frac{1}{2} \langle S_1 + S_2 \rangle = \left\langle \prod_{i=1}^{n_1} (a_i^B e^{KD_{x_1}} + b_i^B e^{-KD_{x_2}}) \prod_{i=6}^{n_2} (a_i^A e^{KD_{x_1}} + b_i^A e^{-KD_{x_2}}) \right\rangle F_2^{AF}(x_1, x_2, h') \Big|_{x_1=x_2=0}, \quad (3.32)$$

onde

$$F_2^{AF}(x_1, x_2, h') = \frac{\sinh(x_1 + x_2 + 2L)}{\cosh(x_1 + x_2 + 2L) + \exp(2K) \cosh(x_1 - x_2)}.$$

A aplicação da média térmica na estrutura de subredes gera duas magnetizações no sistema dadas por m_a , quando a média é realizada nos spins da subrede A e m_b quando a média é realizada nos spins da subrede B . Assim temos as seguintes possibilidades:

$$\begin{aligned} \langle a_i^A \rangle &= aa = \left(\frac{1 + m_a}{2} \right), & \langle b_i^A \rangle &= ba = \left(\frac{1 - m_a}{2} \right), \\ \langle a_i^B \rangle &= ab = \left(\frac{1 + m_b}{2} \right), & \langle b_i^B \rangle &= bb = \left(\frac{1 - m_b}{2} \right). \end{aligned} \quad (3.33)$$

A presença dessas duas magnetizações m_a e m_b no caso antiferromagnético leva a adotar as novas grandezas m conhecida como magnetização total ou uniforme e m_s , o novo parâmetro de ordem do sistema, conhecida como magnetização *staggered*, que se anula no ponto de transição. Assim temos as seguintes definições

$$\begin{aligned} m &= \frac{1}{2}(m_a + m_b), \\ m_s &= \frac{1}{2}(m_a - m_b). \end{aligned} \quad (3.34)$$

A construção feita com base nessas definições, gera dois tipos de coeficientes na ex-

pansão de m_a e m_b aqui denominados de C_j e B_j

$$\begin{aligned} m_a &= \sum_{j=0}^5 C_j m_s^j, \\ m_b &= \sum_{j=0}^5 B_j m_s^j. \end{aligned} \tag{3.35}$$

Na aplicação de um campo longitudinal uniforme, foi observado o seguinte comportamento entre os coeficientes:

$$\begin{aligned} C_{j \rightarrow par} &= B_{j \rightarrow par} \neq 0, \\ C_{j \rightarrow impar} &= -B_{j \rightarrow impar}. \end{aligned} \tag{3.36}$$

Isso faz com que tenhamos mais equações no sistema, pois m_a e m_b devem ser resolvidas simultaneamente com a variação da temperatura.

No entanto, a aplicação de um campo aleatório alterou a estrutura do cálculo dos coeficientes, apresentando comportamento semelhante ao sistema ferromagnético, ou seja:

$$\begin{aligned} C_{j \rightarrow par} &= B_{j \rightarrow par} = 0, \\ C_{j \rightarrow impar} &= -B_{j \rightarrow impar}. \end{aligned} \tag{3.37}$$

Nota-se que a mudança para campo aleatório anula o termo m_s , assim sua presença não altera a configuração das subredes e podemos então adotar as igualdades:

$$m_a = m_b = m,$$

resultando, então, num novo conjunto de relações:

$$\begin{aligned}
a &= \langle a_i^A \rangle = \langle b_i^B \rangle = \left(\frac{1+m}{2} \right), \\
b &= \langle a_i^B \rangle = \langle b_i^A \rangle = \left(\frac{1-m}{2} \right).
\end{aligned} \tag{3.38}$$

A fim de ilustração, apresentamos na Fig.(3.5) os comportamentos de m e m_s em função da temperatura para os casos de $h = 1.0$ para as distribuições uniforme e bimodal do campo. No caso do Ising AF na presença de um campo uniforme, temos que o parâmetro de ordem $m_s(t)$ decresce monotonicamente com o aumento da temperatura se anulando em $t_c(h) = 5.07$. Por outro lado, a magnetização total m aumenta gradualmente, apresentando um comportamento tipo cúspide quando atinge a temperatura crítica, depois diminuindo monotonicamente. No caso do RFIM AF temos um comportamento "tipo ferromagnético" com as magnetizações de subredes equivalentes com $m_s = 0$ e m sendo o parâmetro de ordem.

Aplicando as relações em (3.38) na Eq.(3.32) para o cálculo da média térmica obtemos:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} \langle S_1 + S_2 \rangle &= \left[\sum_{p_1=0}^{n_1} \binom{n_1}{p_1} a^{(n_1-p_1)} b^{p_1} e^{(n_1-2p_1)KD_{x_1}} \right. \\
&\quad \left. \sum_{p_2=0}^{n_2} \binom{n_2}{p_2} b^{(n_2-p_2)} a^{p_2} e^{(n_2-2p_2)KD_{x_2}} \right] F_2^{AF}(x_1, x_2, h') \Big|_{x_1=x_2=0}. \tag{3.39}
\end{aligned}$$

A magnetização é obtida após a aplicação da média configuracional na função F_2^{AF} , ficando então

$$\begin{aligned}
m &= \left[\sum_{p_1=0}^{n_1} \binom{n_1}{p_1} a^{(n_1-p_1)} b^{p_1} e^{(n_1-2p_1)KD_{x_1}} \right. \\
&\quad \left. \sum_{p_2=0}^{n_2} \binom{n_2}{p_2} b^{(n_2-p_2)} a^{p_2} e^{(n_2-2p_2)KD_{x_2}} \right] F_{2c}^{AF}(x_1, x_2, h') \Big|_{x_1=x_2=0} \tag{3.40}
\end{aligned}$$

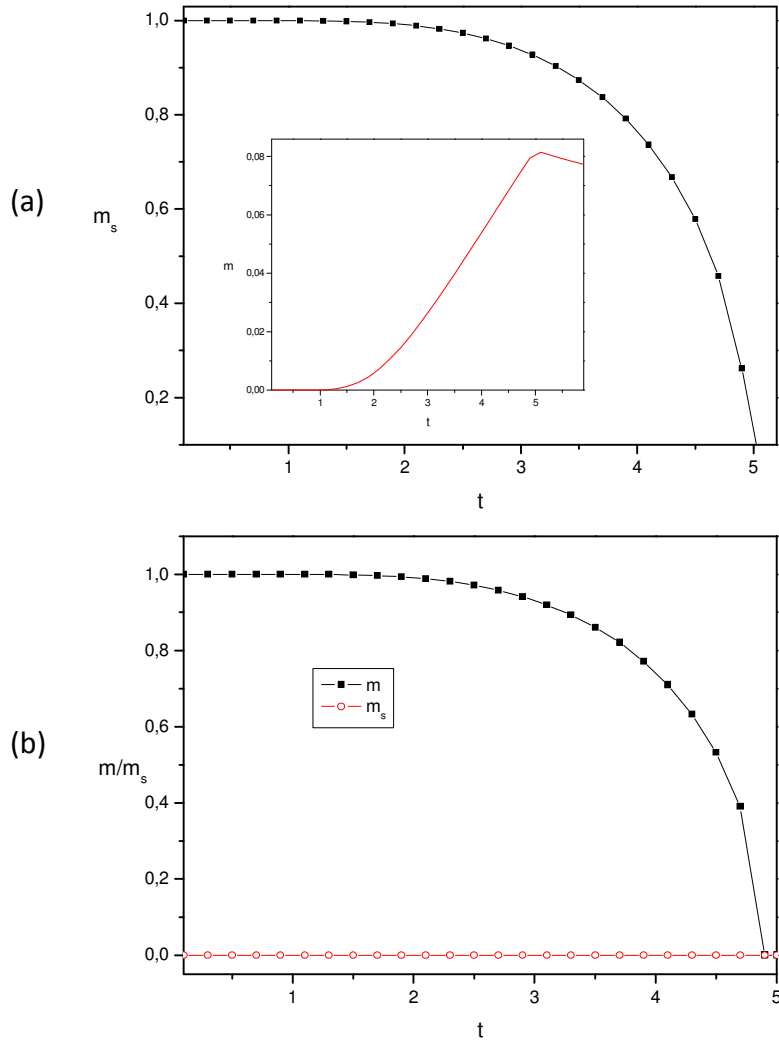


Figura 3.5: Comportamento dos parâmetros m e m_s em função da temperatura nos seguintes casos: (a) aplicação de um campo longitudinal constante $h = 1.0$ mostrando os comportamentos diferenciados de m e m_s para cada temperatura; (b) considerando um campo aleatório $h = 1.0$ dado por uma distribuição bimodal onde o parâmetro m_s permanece com valor nulo para qualquer temperatura.

onde, para o caso da distribuição bimodal, temos a função analítica:

$$\langle F_2^{AF}(x_1, x_2, h') \rangle_c = F_{2c}^{AF}(x_1, x_2, h) = \frac{1}{2} [F_2^{AF}(x_1, x_2, h) + F_2^{AF}(x_1, x_2, -h)].$$

Colocando na forma compacta, resulta em

$$m = \sum_{p_1=0}^{n_1} \sum_{p_2=0}^{n_2} \left[\prod_{i=1}^2 \binom{n_i}{p_i} \right] [a^{(n_1-p_1+p_2)} b^{(n_2-p_2+p_1)}] \exp \left[\sum_{i=1}^2 (n_i - 2p_i) K D_{xi} \right] F_{2c}^{AF}(x_1, x_2, h) |_{x_1=x_2=0} \quad (3.41)$$

3.3.3 Generalização para $N \geq 4$ Spins

O estabelecimento de um algoritmo que efetuasse automaticamente o processo de construção dos coeficientes na aplicação da TOD estimulou-nos a tratar sistemas com um número maior de sítios centrais no aglomerado. Isso foi possível com a aplicação do algoritmo de um processo para obtenção dos autovalores do Hamiltoniano para o modelo de Ising na presença de um campo aleatório. Esse procedimento é possível sempre que temos o campo agindo na mesma direção dos spins⁷.

Estado Ferromagnético (F)

Tomando a Fig.(2.2) como referência, construiremos um modelo com a presença de uma quantidade q de sítios centrais.

O Hamiltoniano reduzido para este caso é dado por

⁷Para o caso Ising temos uma só direção, assim apenas componentes no eixo z estão presentes no Hamiltoniano. Já para o modelo XY e Heisenberg(aqui com a presença das três componentes no Hamiltoniano) esse procedimento não é mais possível e devemos realizar o procedimento de diagonalização numérica.

$$H_q^F = K \sum_{(i,j)} S_i S_j + \sum_{i=1}^q C_{x_i} S_i + L \sum_{i=1}^q S_i, \quad (3.42)$$

onde $\sum_{(i,j)}$ indica que a soma é feita sobre todas as combinações possíveis para os q sítios centrais enquanto que

$$C_{x_i} = K \sum_{j=1}^{n_i} \sigma_j,$$

é a "interação" do i -ésimo sítio central com seus n_i vizinhos.

Quando este Hamiltoniano é escrito na base ortogonal adequada para os q sítios centrais, encontramos uma matriz já diagonalizada. Isto facilita a obtenção da função de partição Z_q , pois basta então realizarmos a soma sobre todas as combinações possíveis considerando que $S_i = \pm 1$. Assim temos, para um caso de q sítios centrais, a função de partição dada por

$$Z_q = \sum_{S_1=\pm 1} \dots \sum_{S_q=\pm 1} \exp(H_q^F). \quad (3.43)$$

A magnetização generalizada, para a aplicação de uma média térmica e configuracional, é definida por

$$m = \frac{1}{q} \langle \langle S_1 + \dots + S_q \rangle \rangle_c. \quad (3.44)$$

Aplicaremos a generalização da TOD para q sítios, definida por

$$\exp(\mathbf{a} \cdot \mathbf{D}) F(\mathbf{r}) = F(\mathbf{r} + \mathbf{a}),$$

onde $\mathbf{r} = (x_1, \dots, x_q)$, $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_q)$ e $\mathbf{D} = (D_{x_1}, \dots, D_{x_q})$ (com $D_{x_i} = \partial/\partial x_i$).

Aplicando as sucessivas médias obtemos a magnetização generalizada dada por

$$m = \sum_{p_1=0}^{n_1} \dots \sum_{p_q=0}^{n_q} \left[\prod_{i=1}^q \binom{n_i}{p_i} \right] a \left[\sum_{i=1}^q (n_i - p_i) \right] b \left[\sum_{i=1}^q p_i \right] \exp \left[\sum_{i=1}^q (n_i - 2p_i) K D_{x_i} \right] F_{qc}^F(\mathbf{r}, h) |_{\mathbf{r}=0}, \quad (3.45)$$

onde $F_q^F(\mathbf{r}, h)$ é obtida do processo de derivação inerente à Eq.(3.44) após aplicação da média configuracional para os três casos aqui tratados. Especificamente para a distribuição bimodal temos:

$$F_{qc}^F(\mathbf{r}, h) = \langle F_q^F(\mathbf{r}, h') \rangle_c = \frac{1}{2} [F_q^F(\mathbf{r}, h) + F_q^F(\mathbf{r}, -h)].$$

Estado Antiferromagnético (AF)

O caso AF, como visto anteriormente, apresenta a estrutura de sub-redes, cujo arranjo para EFT-4 é mostrado na Fig.(3.6). O Hamiltoniano reduzido para este caso é dado por

$$H_q^{AF} = -K \sum_{(i,j)} S_i S_j + \sum_{i=1}^q C_{x_i} S_i + L \sum_{i=1}^q S_i, \quad (3.46)$$

sendo

$$C_{x_i} = -K \sum_{j=1}^{n_i} \sigma_j,$$

A função de partição é obtida aqui através do procedimento numérico para a construção de todas as combinações possíveis da Eq.(3.43), cujos termos são dados agora pelo Hamiltoniano (3.46).

Aplicando a definição de magnetização dada pela Eq.(3.44) e utilizando a notação generalizada da TOD para q sítios centrais para o caso antiferromagnético, encontramos a magnetização do sistema dada por

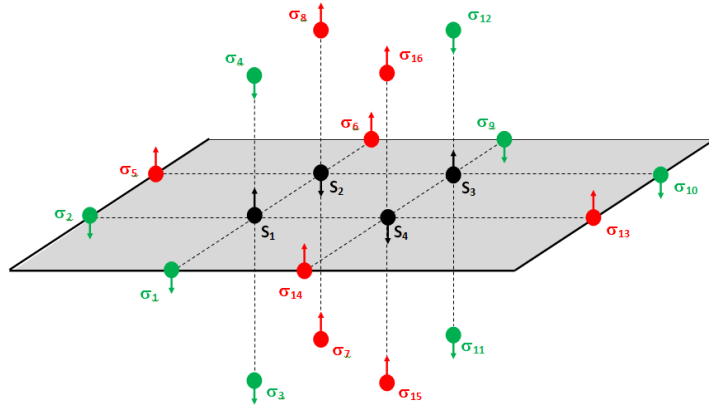


Figura 3.6: Arranjo para um sistema antiferromagnético para um aglomerado com $N = 4$ spins numa rede cúbica simples.

$$m = \sum_{p_1=0}^{n_1} \dots \sum_{p_q=0}^{n_q} \left[\prod_{i=1}^q \binom{n_i}{p_i} \right] a \left[\sum_{i=1}^{q\uparrow} (n_i - p_i) + \sum_{i=1}^{q\downarrow} p_i \right] b \left[\sum_{i=1}^{q\downarrow} (n_i - p_i) + \sum_{i=1}^{q\uparrow} p_i \right] \exp \left[\sum_{i=1}^q (n_i - 2p_i) K D_{x_i} \right] F_{qc}^{AF}(\mathbf{r}, h') |_{\mathbf{r}=0},$$

onde $\sum_{i=1}^{q\uparrow\downarrow}$ indica que a soma é realizada especificamente nos elementos das subredes com spin *up* (\uparrow) e *down* (\downarrow) sendo uma generalização da expressão encontrada para EFT-2. A função F_{qc}^{AF} é encontrada pelo mesmo processo dado para F_{qc}^F considerando as três distribuições de probabilidade.

3.4 Criticalidade e Propriedades Termodinâmicas

A análise do diagrama de fases necessita de um conjunto de informações a respeito do comportamento do sistema para chegar a conclusões corretas. Para sistemas com a

presença de campo aleatório, têm sido observada a existência de transições de primeira e segunda ordem com a presença de um ponto tricrítico (PTC). Assim, é fundamental que tenhamos um conjunto de equações adequadas para fornecer simultaneamente valores da temperatura crítica t_c e da magnetização m para cada valor do campo aleatório h , bem como a identificação precisa do PTC no diagrama de fases, usando as idéias da teoria de Landau para a obtenção do PTC.

Neste trabalho apresentamos duas propostas para obter a energia livre do sistema mais o método da derivada⁸, onde esta última metodologia parte da descontinuidade da magnetização que ocorre no ponto de transição, e com as equações de estado adequadas para cada método, construiremos os diagramas de fases. Foi possível obtermos também as propriedades termodinâmicas: energia interna, calor específico e entropia, bem como o comportamento da própria energia livre.

O princípio físico da Construção de Maxwell permite igualarmos as energias livres (Φ) nas fases F ou AF ($\Phi_{F/AF}(m \neq 0)$) e Paramagnética (P) ($\Phi_P(m = 0)$) no ponto de transição para eliminar as instabilidades do sistema. A função nula \mathcal{F} que descreve essa construção é dada por

$$\mathcal{F} = \Phi_{F(AF)}(m \neq 0) - \Phi_P(m = 0), \quad (3.47)$$

que será importante na implementação do procedimento numérico.

3.4.1 Método da Derivada

As dificuldades existentes na análise da curva de transição de primeira ordem fez-nos aplicar, inicialmente, o método da derivada para o cálculo da temperatura de transição num sistema com $N = 1$ spin central (EFT-1) na presença de um campo transversal

⁸Este método encontra sua validade apenas em transições de segunda ordem, onde a magnetização se anula através de uma curva contínua. Na região de primeira ordem, a construção da curva $t_c(h)$ é feita utilizando os dados da curva $m(t)$ feito para vários valores do campo h , identificando os pontos onde $(\frac{dm}{dt}) \rightarrow \infty$, no caso da transição de primeira (segunda) ordem encontramos $m \neq 0$ ($m = 0$) após solução das duas equações acopladas (não linear).

e campo longitudinal aleatório com uma distribuição bimodal. O método da derivada foi utilizado por Viana e de Sousa⁹ no estudo dos diagramas de fase para o modelo de Heisenberg quântico com interações de primeiros e segundos vizinhos e mais recentemente por Costabile, Amazonas, Viana e de Sousa no estudo do modelo de Blume-Capel com spin 1[53].

As linhas de transições obtidas apresentam excelentes resultados quando comparadas com o método da construção de Maxwell, utilizando a energia livre do sistema. Esse método consiste basicamente em analisar a divergência da derivada da magnetização ($\frac{dm}{dt}$) no ponto de inflexão da curva. O ponto na curva de $m(t)$ onde ocorre essa divergência, t_D , coincide com a temperatura crítica t_c para o caso de uma transição de segunda ordem. No entanto, para o caso de uma transição de primeira ordem é observado que $t_c < t_D$.

Da equação de estado dada pela expansão na Eq.(3.6) obtemos a expressão para $\frac{dm}{dt}$ dada por:

$$\frac{dm}{dt} = \frac{\sum_{i=0}^n D_i m^i}{\left[1 - \sum_{i=0}^n i A_i m^{(i-1)} \right]}, \quad (3.48)$$

onde $D_i = \frac{dA_i}{dt}$. No ponto de divergência temos que $\frac{dm}{dt} \rightarrow \infty$, isso ocorre se na Eq.(3.48) tivermos

$$\sum_{i=0}^n i A_i m^{(i-1)} = 1. \quad (3.49)$$

A partir dessa expressão, juntamente com a equação de estado que a originou, podemos obter os valores de t_D em função do campo aplicado juntamente com o comportamento da magnetização do sistema.

⁹Tese de doutorado de J. R. Viana: Transição de fase quântica e modelos de spins frustrados, UFSCar, 2007.

3.4.2 Primeira Proposta da Energia Livre

Na técnica do operador diferencial, não tem sido proposta uma expressão de energia livre, sendo feito apenas a análise do comportamento tricrítico em modelos de spins como, por exemplo, o modelo de Blume-Capel[54] e Heisenberg com campo aleatório[55].

Recentemente, Viana e de Sousa desenvolveram uma proposta de um funcional energia livre na aplicação da Técnica do Operador Diferencial (TOD) para a construção dos diagramas de fases. Partindo da teoria das transições de fase de Landau, onde uma equação de estado do sistema é obtida a partir do processo de minimização de uma energia livre $\Phi(m)$ com relação ao parâmetro de ordem m (i.e. $\frac{d\Phi}{dm} = 0$), Viana e de Sousa propuseram um funcional cuja minimização resultasse na equação de estado dada pela Eq.(3.6). Através de um processo de integração, chega-se a expressão:

$$\Phi(m, t, h) = \lambda_1(t, h) + \lambda_2(t, h) \left[\frac{1}{2}m^2 - \sum_{i=0}^n \left(\frac{A_i}{i+1} \right) m^{(i+1)} \right], \quad (3.50)$$

onde $\lambda_1(t, h)$ e $\lambda_2(t, h)$ são constantes de integração independentes de m cuja forma aqui torna-se irrelevante devido o processo de igualdade de energias (Construção de Maxwell) entre as fases F(AF)-P. Assim, eliminam-se tais funções, resultando na expressão

$$\sum_{i=0}^n \left(\frac{2A_i}{i+1} \right) m^{(i-1)} = 1. \quad (3.51)$$

Esse procedimento é aplicado para qualquer valor do número de spins centrais, ficando apenas os coeficientes A_i adequados para cada situação.

Resolvendo simultaneamente as Eqs. (3.6) e (3.51), encontramos os valores de t_c e m para um dado valor de h . Essa proposta representa um grande salto na aplicação da TOD, na medida que permite trabalhar com mais uma equação na análise das transições de fase. No entanto, ainda temos aqui a impossibilidade de obter as funções termodinâmicas pois a falta de um procedimento para a determinação de $\lambda_1(t, h)$ e $\lambda_2(t, h)$ impede a completa análise da Eq.(3.50). Essa dificuldade motivou a introdução de uma nova proposta para a determinação da energia livre, onde as propriedades termodinâmicas pudessem ser

analisadas através de uma implementação direta da aplicação da TOD. No entanto, como uma primeira abordagem desse estudo, aplicaremos os procedimentos tradicionais para a determinação das propriedades termodinâmicas considerando EFT-1 numa rede cúbica simples ferromagnética utilizando a função distribuição bimodal.

A energia livre de Helmholtz é definida como sendo a parcela da energia interna de um sistema, passível de ser utilizada na forma de trabalho em processos onde a temperatura e volume são mantidos constantes. Através da transformada de Legendre da energia interna chegamos a expressão

$$\Phi = U - TS, \quad (3.52)$$

onde U é a energia interna, T a temperatura e S a entropia obtidas a partir da definição do Hamiltoniano do sistema. Vamos apresentar aqui os processos utilizados para determinar cada grandeza.

I. Energia Interna

A energia interna por partícula em unidades de J ($u = \frac{U}{NJ}$) é obtida diretamente a partir da média do Hamiltoniano \mathcal{H}_1^F dado pela Eq.(3.8), ou seja,

$$u = - \left\langle \left\langle \sum_{i=1}^n \sigma_i S_1 + h_o S_1 \right\rangle \right\rangle_c, \quad (3.53)$$

onde $\langle \langle \dots \rangle \rangle_c$ indica as médias térmica e configuracional.

Aplicamos inicialmente a média térmica nessa expressão levando em conta que, devido termos também a média configuracional, devemos trabalhar separadamente com cada termo na Eq.(3.53) para que a variável h associada ao campo magnético esteja somente no argumento da função geradora e não na exponencial no desenvolvimento da TOD. Assim, temos para o primeiro termo:

$$\left\langle \sum_{i=1}^n \sigma_i S_1 \right\rangle = \left\langle \frac{\text{Tr}_1 \left(\sum_{i=1}^n \sigma_i S_1 \right) \exp(H_1^F)}{\text{Tr}_1 \exp(H_1^F)} \right\rangle \quad (3.54)$$

sendo agora H_1^F o Hamiltoniano reduzido dado por:

$$H_1^F = B_{x_1} S_1 + L S_1, \quad (3.55)$$

onde $L = \beta h'$ e

$$B_{x_1} = K \sum_i^n \sigma_i.$$

A função de partição é dada por

$$Z_1^F = 2 \cosh(B_{x_1} + L).$$

Através de algumas manipulações algébricas na Eq.(3.54), chegamos na identidade:

$$\left\langle \sum_{i=1}^n \sigma_i S_1 \right\rangle = \left\langle \frac{\partial}{\partial K} \ln Z_1^F \right\rangle.$$

Aplicando a derivada e colocando a expressão na forma própria da TOD obtemos:

$$\left\langle \sum_{i=1}^n \sigma_i S_1 \right\rangle = \langle \exp(B_{x_1} D_{x_1}) \rangle G_1^F(x_1, h') |_{x_1=0}, \quad (3.56)$$

onde

$$G_1^F(x_1, h) = \frac{x_1}{K} \tanh(x_1 + L).$$

A segunda média térmica na Eq.(3.53) é a própria definição de magnetização do sistema, ou seja,

$$\langle S_1 \rangle = \frac{Tr S_1 \exp(H_1^F)}{Tr \exp(H_1^F)}.$$

Desenvolvendo esta expressão e colocando na forma da TOD, fica

$$\langle S_1 \rangle = \langle \exp(B_{x_1} D_{x_1}) \rangle F_1^F(x_1, h') |_{x_1=0}, \quad (3.57)$$

sendo

$$F_1^F(x_1, h') = \tanh(x_1 + L).$$

Substituindo as Eqs. (3.56) e (3.57) na Eq.(3.53) obtemos a expressão para a média térmica da energia interna reduzida

$$u = - \langle \exp(B_{x_1} D_{x_1}) \rangle [G_1^F(x_1, h') |_{x_1=0} + h' F_1^F(x_1, h') |_{x_1=0}]. \quad (3.58)$$

Aplicando a média configuracional considerando a distribuição bimodal obtemos:

$$u = - \langle \exp(B_{x_1} D_{x_1}) \rangle [G_{1c}^F(x_1, h) |_{x_1=0} + h F_{1c}^F(x_1, h) |_{x_1=0}]$$

sendo

$$\begin{aligned} F_{1c}^F(x_1, h) &= \frac{1}{2} [\tanh(x_1 + L) - \tanh(x_1 - L)], \\ G_{1c}^F(x_1, h) &= \frac{1}{2} \frac{x_1}{K} [\tanh(x_1 + L) + \tanh(x_1 - L)]. \end{aligned}$$

Na notação de uma expansão binomial ficaremos

$$u = \sum_{p=0}^n \binom{n}{p} a^{(n-p)} b^p \exp((n-2p)K D_{x_1}) [G_{1c}^F(x_1, h) |_{x_1=0} + h F_{1c}^F(x_1, h) |_{x_1=0}] \quad (3.59)$$

Em termos de uma expansão em série de potências da magnetização, reescrevemos a Eq.(3.59) na forma

$$u = \sum_{j=0}^n B_j m^j, \quad (3.60)$$

onde os coeficientes B_j são obtidos a partir da aplicação do operador diferencial nas funções $G_{1c}^F(x_1, h)$ e $F_{1c}^F(x_1, h)$, e são expressões demasiadamente grandes e por isto omitiremos aqui.

Como no diagrama de fases investigamos a transição F(AF)-P, temos de obter expressões adequadas para cada uma delas, de acordo com o comportamento da magnetização. Para a fase P, temos magnetização nula ($m = 0$), assim, devemos considerar apenas o coeficiente B_0 na expansão dada pela Eq.(3.60). Isso será determinante no processo de cálculo das outras funções termodinâmicas como calor específico e entropia, que descreveremos a seguir.

II. Calor Específico

A partir da expansão em série da energia interna para cada fase do sistema, dada pela Eq.(3.60), podemos prosseguir nossos estudos do cálculo das propriedades termodinâmicas, obtendo agora o calor específico. Esta grandeza é fundamental para obtermos a entropia e sua determinação foi baseada inicialmente na Eq.(3.60), chegando a uma função analítica que possa ser integrada. No entanto, dificuldades com relação ao domínio da função magnetização, a partir de certo valor do campo aleatório, fez-nos adotar o método gráfico para a realização da integração. Aqui apresentamos os dois métodos, ambos válidos para aplicação, obedecendo certos limites de aplicabilidade numérica.

a) Procedimento Analítico.

O calor específico a um campo magnético constante é definido por

$$c_h = \left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_h. \quad (3.61)$$

A aplicação direta da derivada na Eq.(3.60) deve ser feita com cuidado pois temos que levar em conta a dependência da magnetização com a temperatura. Assim, temos a presença do termo $\frac{dm}{dt}$ que apresenta comportamento divergente na temperatura de transição de primeira ordem. Obtemos, então, a seguinte expressão:

$$c_h = \sum_{i=0}^n C_j m^j + \frac{dm}{dt} \sum_{i=0}^n j B_j m^{(j-1)}, \quad (3.62)$$

onde $C_j = \frac{dB_j}{dt}$ e o termo $\frac{dm}{dt}$ é dado pela Eq.(3.48).

Para que o processo de integração do calor específico no cálculo da entropia seja realizado apenas em função da temperatura, temos de encontrar a dependência da magnetização com a temperatura. Essa relação é obtida através da equação de estado dada na Eq.(3.6). Para o caso de uma rede cúbica ($n = 6$) encontramos:

$$m^4 + am^2 + b = 0,$$

onde $a = \frac{A_3}{A_5}$ e $b = \frac{A_1-1}{A_5}$, com a solução física dada por

$$m(t) = \frac{1}{2} \sqrt{-2a + 2\sqrt{a^2 - 4b}}. \quad (3.63)$$

A análise de $m(t)$ e sua aplicação no cálculo do calor específico e da entropia apresentaram bons resultados mas, à medida que aumentávamos o campo aleatório h , foi verificado o crescimento de uma região definida fora do domínio \mathfrak{R} , a partir de $h = 1.8$. Esse comportamento pode ser observado na Fig.(3.7), onde temos o comportamento de $m(t)$ para um campo aleatório $h = 1.9$. Nota-se uma região não definida, compreendida entre $t = 0.5$ e $t = 2.3$. Esse comportamento impossibilitou o uso dessa técnica para a análise da transição de 1ª ordem, que ocorre em torno de $h = 2.9$ no caso de EFT-1.

b) **Procedimento Numérico.**

O processo anterior tem sua importância na medida que representa uma primeira solução do problema de calcular o calor específico e a entropia do sistema. Seus resultados

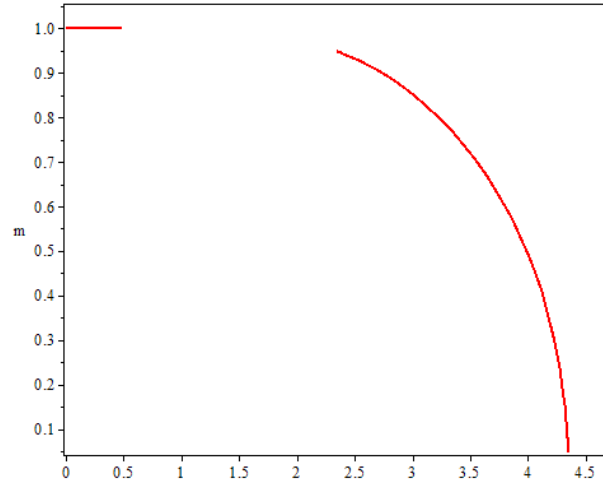


Figura 3.7: Comportamento da magnetização $m(t)$ em função da temperatura, indicando a região de indefinição em \mathfrak{R} no caso do RFIM numa rede cúbica simples, usando EFT-1 para $h = 1.9$.

iniciais servem como base de comparação com outros métodos que venham a ser utilizados para a obtenção destas funções.

Com o impedimento de se obter o comportamento completo da expressão analítica de $m(t)$, avançamos nossos estudos com a introdução do algoritmo onde um processo automático de leitura dos valores de m e $\frac{dm}{dt}$ para cada valor específico da temperatura foi implementado.

Aplicando o método de Newton-Raphson para a determinação das raízes da equação de estado dada pela Eq.(3.6), criamos um arquivo de saída na extensão .DAT com os valores de m e $\frac{dm}{dt}$ associados a sua temperatura específica. Em seguida, já em outro programa com a expressão analítica para o calor específico, utilizamos os comandos OPEN e READ para leitura dos valores e substituição na função $c_h(m, \frac{dm}{dt}, h, t)$, dada pela Eq.(3.62), obtendo assim, o comportamento do calor específico para qualquer valor do campo aleatório.

III. Entropia

A entropia é uma grandeza fundamental neste trabalho pois dela depende a energia livre de Helmholtz, função importante para uma primeira descrição das propriedades termodinâmicas. A sua definição nesse contexto é dada por

$$S = S_o + \int_0^t \frac{c_h}{t'} dt', \quad (3.64)$$

onde S_o é um valor de referência e a integração realizada do ponto de referência até uma dada temperatura específica.

Novamente utilizamos os comandos OPEN e READ para a realização da integração da função $c_h(m, \frac{dm}{dt}, h, t)$ tomando cuidado na aplicação correta destes comandos, pois o valor da entropia numa dada temperatura é obtida através da integração do ponto de referência até este valor. Isso faz com que tenhamos um processo de leitura que se repete para cada novo valor de t .

O comportamento suave da função $c_h(m, \frac{dm}{dt}, h, t)$ favoreceu a aplicação da regra do trapézio para o cálculo da integral, um método simples mas que facilitou o procedimento de leitura dos dados. Desta maneira resulta a importância desse procedimento pois a sua facilidade de aplicação permite o estudo das propriedades termodinâmicas de sistemas maiores e mais complexos bem como a obtenção da energia livre.

3.4.3 Segunda Proposta da Energia Livre

No Capítulo anterior, demonstramos, a partir do formalismo em EFT para o cálculo da média térmica de uma propriedade \mathcal{O} , a seguinte relação:

$$\mathcal{H}_N = \mathcal{H}_\Omega + \mathcal{H}_{\Omega'}, \quad (3.65)$$

onde \mathcal{H}_N é o Hamiltoniano para um sistema com N spins, \mathcal{H}_Ω o Hamiltoniano que contém as variáveis de spin associadas ao aglomerado e seus vizinhos e $\mathcal{H}_{\Omega'}$ a parte que contém as interações com o restante do sistema. Considerando que a propriedade física

\mathcal{O} esteja relacionada com as variáveis de spin do aglomerado, e que \mathcal{H}_Ω e $\mathcal{H}_{\Omega'}$ comutam, ou seja $[\mathcal{H}_\Omega, \mathcal{H}_{\Omega'}] = 0$, o valor médio do observável \mathcal{O} pode ser reduzida ao cálculo parcial expresso por

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \langle \langle \mathcal{O}(\Omega) \rangle_\Omega \rangle = \left\langle \frac{Tr_\Omega [\mathcal{O}(\Omega) \exp(-\beta \mathcal{H}_\Omega)]}{Tr_\Omega \exp(-\beta \mathcal{H}_\Omega)} \right\rangle.$$

Aplicando a definição usual de energia interna na relação (3.65) e admitindo a hipótese de que

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta \Phi_\Omega) \right\rangle = \frac{\partial}{\partial \beta} \langle \beta \Phi_\Omega \rangle,$$

onde Φ_Ω é a energia livre calculada no espaço do aglomerado, ou seja,

$$\Phi_\Omega = -\frac{1}{\beta} \ln(Z_\Omega), \quad (3.66)$$

chegamos à relação

$$\Phi = \langle \Phi_\Omega \rangle + \lambda m^2, \quad (3.67)$$

onde o segundo termo sendo uma primeira aproximação da interação com todos os sítios da rede e λ um termo a ser determinado. O primeiro termo corresponde à média da função energia livre obtida através da diagonalização do Hamiltoniano proposto no espaço do aglomerado. Esta média é desenvolvida semelhante a aplicação da TOD feita para obter a equação de estado. Esse procedimento resulta numa expansão do parâmetro de ordem na forma

$$\langle \Phi_\Omega \rangle = \sum_{i=0}^n C_i m^i. \quad (3.68)$$

A função geradora para a construção dos coeficientes C_i é obtida da definição usual de energia livre, Eq.(3.66), com a função de partição Z_Ω definida para cada Hamiltoniano reduzido na aproximação de aglomerados finitos.

Da análise do estado fundamental para o RFIM, dado pela Eq.(3.1), obtemos a energia interna por partícula E_o por

$$E_o = \frac{\langle \mathcal{H} \rangle}{JN} = -\frac{n}{2}, \quad (3.69)$$

onde n é o número de coordenação da rede cristalina e N o número total de sítios do sistema. A existência de um campo aleatório com distribuição simétrica de probabilidade, implica no anulamento do segundo termo devido a realização da soma sobre todos os possíveis valores de h (no intervalo $\pm h$), isto é, $\langle h \rangle_c = 0$.

Na condição do estado fundamental, temos ainda que $m = 1$ e também que a energia interna é igual a energia livre. Aplicamos essas duas condições na Eq.(3.67) obtemos

$$\lambda = E_o - \psi_\Omega(m = 1), \quad (3.70)$$

onde não fixamos a temperatura, pois o valor $m = 1$ persiste para valores de t maiores que 0 e $\psi_\Omega(m = 1) = \frac{\Phi_\Omega(m=1)}{J}$.

Tendo, então, a forma da energia livre corrigida do sistema, aplicamos o princípio da minimização com relação ao parâmetro de ordem onde obtemos a equação de estado:

$$m = -\frac{1}{2\lambda} \sum_{i=0}^n i C_i m^{(i-1)}. \quad (3.71)$$

As propriedades termodinâmicas são obtidas através das relações originadas da análise dos potenciais termodinâmicos, ou seja,

a) Entropia:

$$S = - \left(\frac{\partial \Phi}{\partial t} \right)_h,$$

b) Energia Interna:

$$U = \Phi + tS,$$

c) Calor Específico:

$$c_h = \left(\frac{\partial U}{\partial t} \right)_h.$$

A construção de Maxwell fornece a função nula dada por:

$$\mathcal{F} = \Phi_{F/AF}(m \neq 0) - \Phi_P(m = 0). \quad (3.72)$$

3.5 Discussão dos Resultados

Faremos a seguir a discussão dos resultados numéricos encontrados para os diagramas de fases e propriedades termodinâmicas do RFIM (F e AF) para os casos 2D e 3D. A influência da aleatoriedade na criticalidade do sistema será estudada utilizando as três distribuições de probabilidade já citadas nessa tese: bimodal, gaussiana e gaussiana duplo-pico, bem como a influência do campo transversal para o caso EFT-1. Serão abordadas, principalmente, as duas metodologias de energia livre propostas na seção anterior, sendo que, devido a limitações inerentes ao processo computacional, utilizaremos aglomerados com até $N = 12$ spins para o caso 2D e $N = 8$ spins para o caso 3D, permitindo uma extrapolação da análise do comportamento para o caso $N \rightarrow \infty$.

3.5.1 Diagramas de Fases

Na Fig.(3.8), apresentamos o diagrama de fases no plano $t - h$ para o RFIM com interação F usando EFT-1 para a distribuição bimodal, obtido através dos três métodos: (a) método da derivada, (b) primeira proposta da energia livre e (c) segunda proposta da energia livre. Em ambos os casos, notamos a presença de um ponto tricrítico (PTC) localizado em $h^t = 2.9$ e $t^t = 2.3$ para os métodos (a) e (b) e em $h^t = 2.4$ e $t^t = 1.5$ para o método (c). Os métodos da derivada e da primeira proposta da energia livre apresentam o mesmo comportamento na região de transição de segunda ordem, diferenciando-se a partir do ponto tricrítico, onde começa a linha de transição de primeira ordem. Isso ocorre

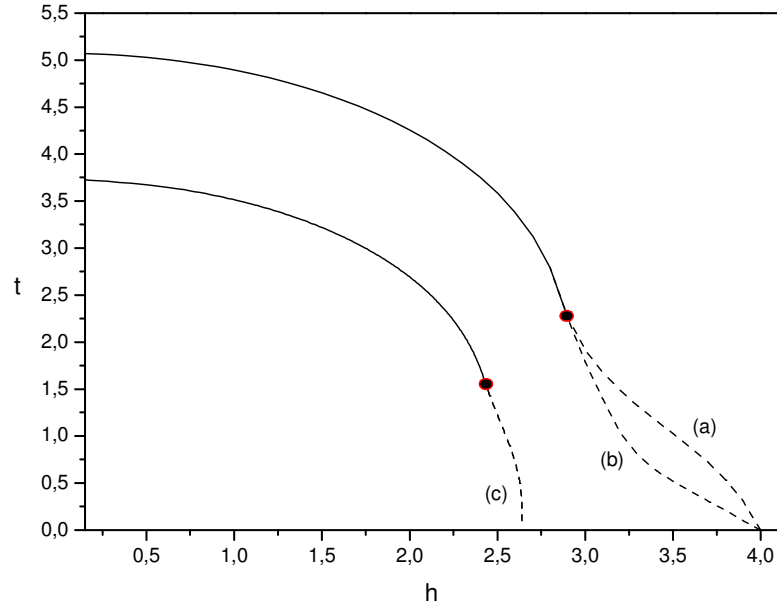


Figura 3.8: Diagrama de fases no plano $t - h$ ($t \equiv k_B T/J$ e $h = H/J$) do RFIM ferromagnético obtido via EFT-1 numa rede cúbica simples. As linhas tracejadas e contínuas correspondem às linhas de primeira e segunda ordem, respectivamente. O PTC é representado pelo ponto em negrito. As soluções foram obtidas através dos métodos: (a) da derivada, (b) primeira proposta da energia livre e (c) segunda proposta da energia livre para uma distribuição bimodal.

pois na transição de 2^a ordem a magnetização vai continuamente a zero, fazendo com que a temperatura crítica reduzida t_c coincida com o ponto de divergência, t_D , na função $\frac{dm}{dt}$. Já para a região de 1^a ordem, a temperatura de transição, obtida pela construção de Maxwell, não mais coincide com o ponto de divergência de $\frac{dm}{dt}$. Foi observado que $t_c < t_D$, no entanto ambos tendem para o mesmo valor de campo crítico $h_c = 4$, onde $t = 0$. Apesar do método da derivada fornecer bons resultados, concentraremos nossos estudos aplicando os dois métodos obtidos via construção de Maxwell por ser física e matematicamente mais consistente, eliminando possíveis linhas de instabilidade.

Primeira Proposta de Energia Livre

A construção dos diagramas de fases do RFIM através da primeira proposta da energia livre consiste em resolver simultaneamente a equação de estado dada pela expansão na Eq.(3.6) e da construção de Maxwell para o funcional energia livre proposto na Eq.(3.51). Para esta proposta, nos limitamos na análise do caso da função distribuição bimodal. Para EFT-1 temos também a presença do campo aleatório para investigar sua influência no ponto tricrítico e no comportamento da magnetização.

Na Fig.(3.9) mostramos o diagrama de fases do RFIM no plano $t - h$ para o caso AF em redes 2D e 3D usando aglomerado com $N = 1, 2$ e 4 spins. As linhas contínuas correspondem a transição de segunda ordem, enquanto que as linhas tracejadas são referentes a transição de primeira ordem separadas pelo ponto tricrítico (em negrito). O aumento no tamanho do aglomerado na rede 3D mostra a variação do PTC, desaparecendo para $N = 4$, com apenas transição de segunda ordem. Em ambos os casos o campo crítico ($t = 0$) encontrado é $h_c = 4.0$. A aplicação na rede quadrada (2D) apresentou PTC apenas para o caso de $N = 1$ spin. O campo crítico encontrado tem o valor $h_c = 2.0$ usando $N = 1$ e 2 , enquanto que para $N = 4$ obtém-se novamente $h_c = 4.0$. Nas duas topologias de rede notamos uma tendência da temperatura para seus valores exatos com o aumento do tamanho do aglomerado.

No caso do RFIM ferromagnético, uma discussão pertinente é analisar qual será a dimensão crítica d_c do sistema, acima da qual temos ordem de longo-alcance. Apresentamos os resultados para o caso 3D na Fig.(3.10) considerando aglomerados até $N = 8$ spins. Em todas as linhas de transição que separam as fases F e P, podemos observar a existência de um PTC cuja variação, com o aumento da quantidade de spins do aglomerado, mostra a tendência da linha de transição ser completamente de primeira ordem para o caso $N \rightarrow \infty$. O valor de h_c , inicialmente igual a 4.0 , diminui gradualmente até atingir o valor $h_c = 1.5$ para $N = 8$ spins, indicando uma possível inexistência de ordem de longo alcance para essa dimensão. Uma análise mais apurada para confirmar este possível resultado no caso 3D, considerando uma quantidade maior de spins no aglomerado

($N \geq 8$), foi impossibilitada devido o tempo computacional excessivamente longo para a construção dos coeficientes.

No caso da rede 2D, usamos EFT até o tamanho $N = 4$, onde continuamos a observar a tendência de h_c para um valor nulo, também indicando uma possível inexistência de ordem de longo alcance para essa dimensão, com seu valor passando de $h_c = 2.0$ para $h_c = 1.0$ com o aumento do tamanho (N) do sistema, resultado este em oposição ao observado para o caso AF. A linha de transição também apresenta tendência de tornar-se totalmente de primeira ordem. Devido a simetria existente no sistema RFIM, temos observado o mesmo comportamento das curvas para EFT-1 nos casos F e AF para as redes 2D e 3D. Vale ressaltar que os resultados para o caso AF nunca foram obtidos na literatura.

Consideramos agora a influência quântica do campo transversal no comportamento da criticalidade do RFIM ferromagnético usando EFT-1. Na Fig.(3.12) temos o comportamento da temperatura de transição em função do campo aleatório numa rede quadrada (a) e cúbica simples (b) para vários valores do campo transversal ω . Na descrição da rede quadrada, não foi observada a presença de um PTC para os valores de ω considerados. Para a rede cúbica simples, o efeito do aumento do valor do campo transversal foi eliminar o PTC entre $\omega = 1.0$ e 2.0 , tornando a linha de transição inteiramente de segunda ordem. Em ambos os casos, temos a diminuição da temperatura crítica do sistema ($h = 0$), assim como o valor de h_c levando a ausência de ordem de longo alcance no sistema para ω relativamente alto.

O comportamento do sistema no estado fundamental é mostrado na Fig.(3.13). Em (a) temos o diagrama $\omega - h$ para a rede quadrada ($z = 4$) e cúbica simples ($z = 6$). O PTC é observado para a rede cúbica simples em torno de $\omega^t = 2.25$ e $h^t = 2.70$ não tendo sido observado este ponto para a rede quadrada. Em (b) temos, para o caso 3D, o comportamento da magnetização em função do campo transversal para vários valores do campo aleatório mostrando, para $h = 0.0$, a ausência de ordem de longo-alcance no sistema a partir de $\omega = 2.75$.

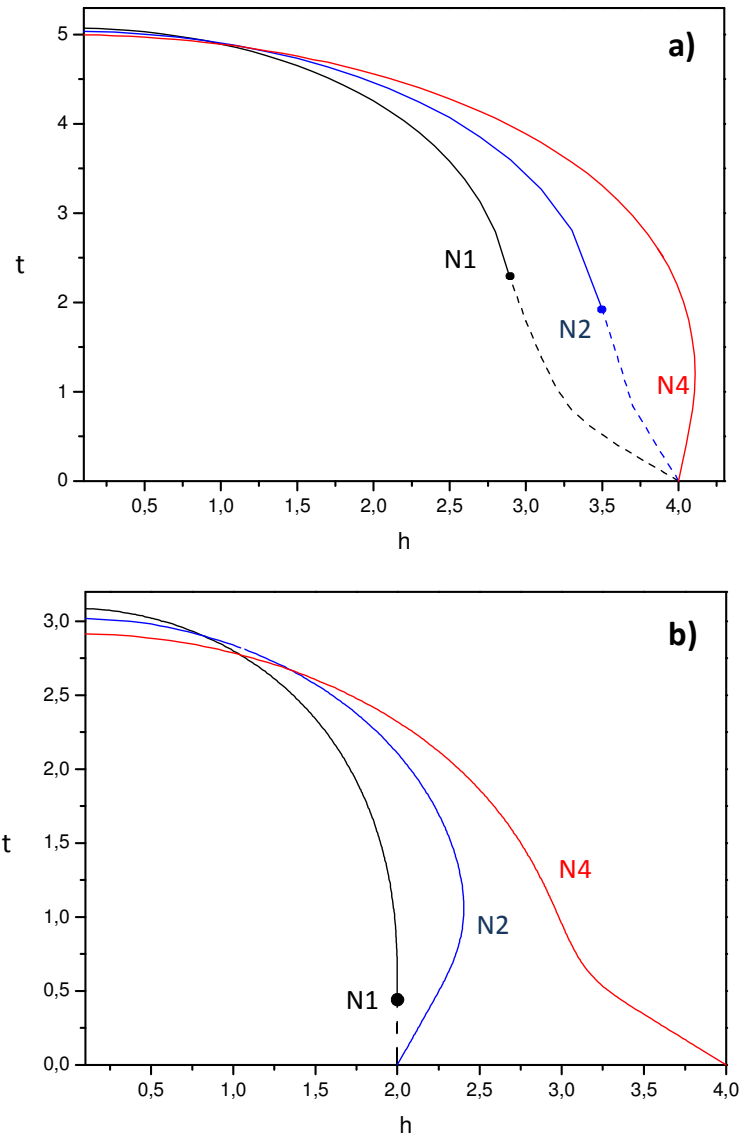


Figura 3.9: Diagramas de fases no plano $t-h$ do RFIM AF obtido para aglomerado com $N = 1, 2$ e 4 numa rede cúbica simples (a) e quadrada (b). As linhas de primeira ordem (tracejada) e segunda ordem (contínua) foram obtidas usando o método da primeira proposta da energia livre com distribuição de probabilidade bimodal.

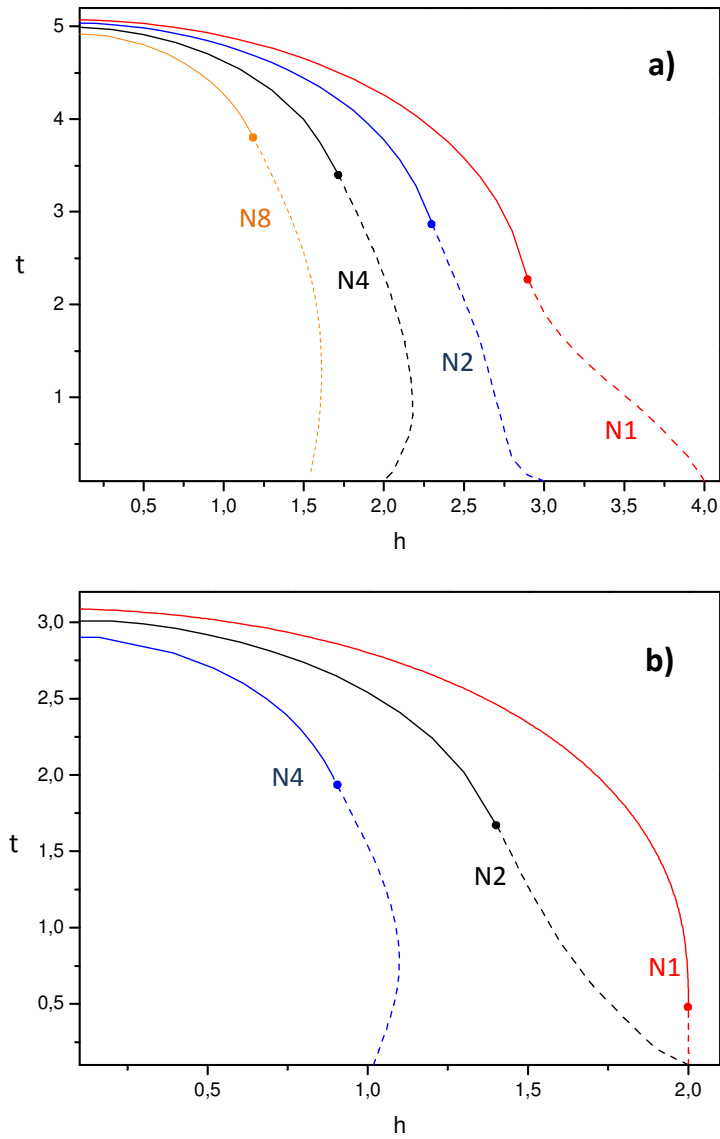


Figura 3.10: Diagramas de fases no plano $t - h$ do RFIM ferromagnético obtido para aglomerados com $N = 1, 2, 4$ e 8 spins numa rede cúbica simples (a) e quadrada (b). As linhas de transição (1^a e 2^a ordem) foram obtidas usando o método da primeira proposta da energia livre com distribuição de probabilidade bimodal.

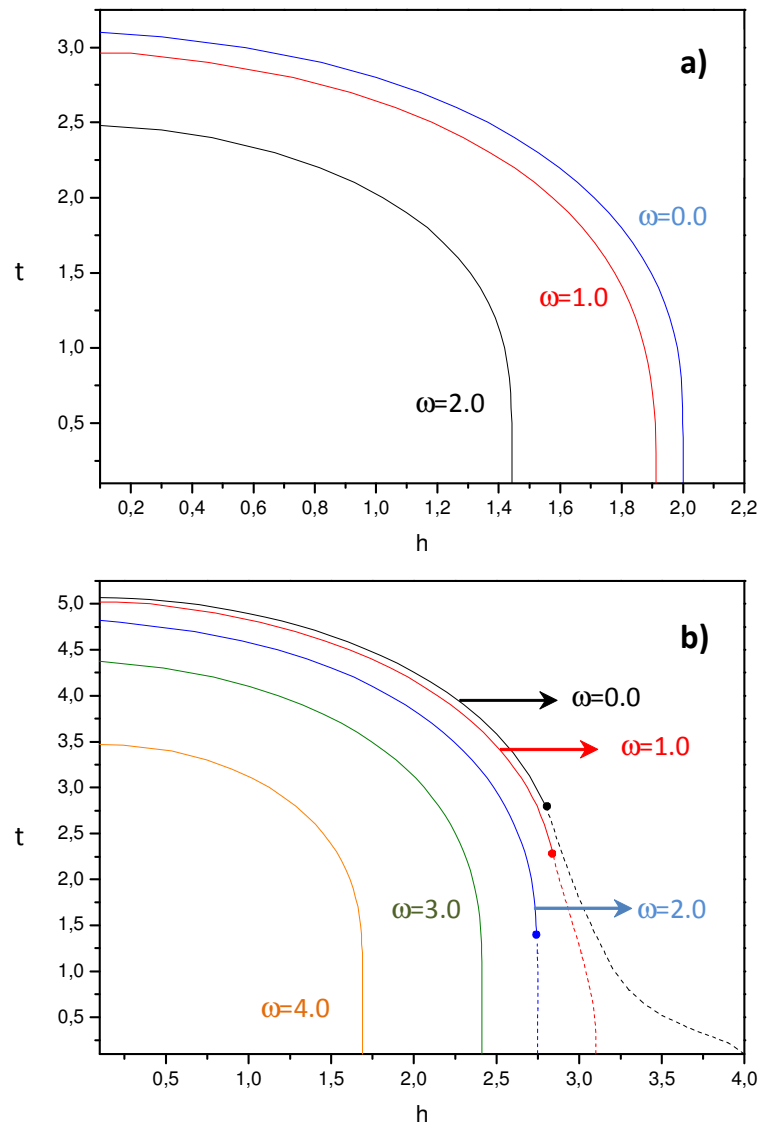


Figura 3.11: Diagramas de fases no plano $t - h$ do RFIM com campo transversal ferromagnético obtido para um aglomerado com $N = 1$ spin numa rede quadrada (a) e cúbica simples (b). As linhas de transição (1^a e 2^a ordem) foram obtidas usando o método da primeira proposta da energia livre para diversos valores do campo transversal reduzido $\omega = \Omega/J$ com distribuição de campo bimodal.

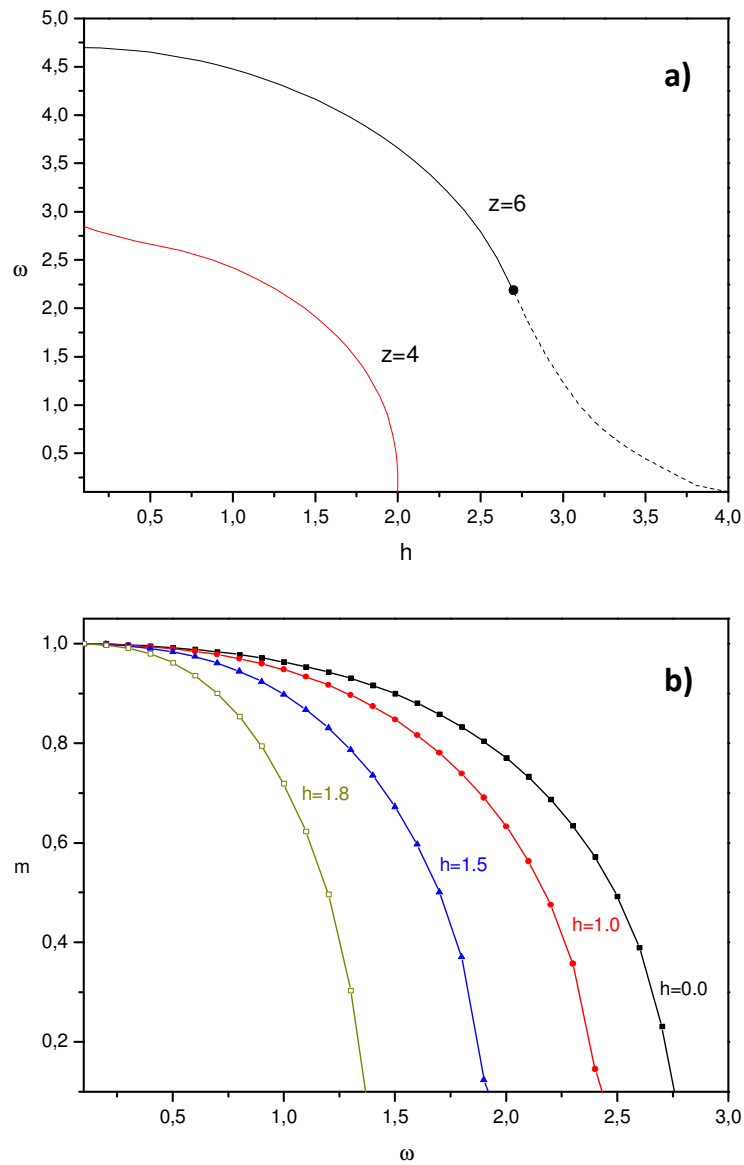


Figura 3.12: Em (a) temos o diagrama de fases no estado fundamental no plano $\omega - h$ do RFIM ferromagnético obtido via EFT-1 considerando as redes quadrada ($z = 4$) e cúbica simples ($z = 6$). Em (b) temos o comportamento da magnetização em função do campo transversal para vários valores do campo aleatório, aplicado numa rede cúbica simples. Em ambos os casos foi utilizada a distribuição de probabilidade bimodal.

Segunda Proposta de Energia Livre

A aplicação da segunda proposta de energia livre mostrou resultados mais estáveis para o diagrama de fases, pois sua obtenção parte do princípio de mínimo de energia, o que estimulou a aplicação em outras funções distribuição de probabilidade como a gaussiana e gaussiana duplo-pico. Para isso, resolvemos o sistema formado pelas equações de estado, Eq.(3.71), e construção de Maxwell, Eq.(3.72). A aplicação do método de Newton-Raphson permitiu encontrarmos as soluções para m e h para um dado valor da temperatura t . Desta maneira, as linhas de transições de primeira e segunda ordem foram identificadas com mais precisão, assim como a localização do PTC. Estendemos a aplicação considerando aglomerados com até $N = 12$ spins na rede 2D e $N = 8$ spins na rede 3D.

Na Fig.(3.13) temos o diagrama de fases no plano $t - h$ do RFIM AF numa rede quadrada (a) e cúbica simples (b), aplicando a distribuição de probabilidade bimodal. Apesar de encontrarmos uma pequena região de primeira ordem para EFT-1, tal resultado não é observado com o aumento do número de sítios do aglomerado, sendo então todas as linhas de segunda ordem. O valor do campo crítico h_c aumenta gradualmente com o aumento do aglomerado, partindo aproximadamente de $h_c = 1.35$ para a rede 2D e $h_c = 2.65$ no caso 3D. Esses resultados estão de acordo com o encontrado na aplicação da primeira proposta da energia livre para o RFIM AF bidimensional, mostrado na Fig.(3.9)-(b). Para a rede cúbica simples, a comparação entre os métodos mostra uma mudança significativa no comportamento de h_c , antes fixo no valor 4.0 para os três aglomerados considerados.

Aqui vale ressaltar uma diferença marcante entre os métodos: o fato de que para o primeiro caso a temperatura de transição começa com um valor mais alto para EFT-1 convergindo para o valor "exato" com o aumento do número de sítios do aglomerado. Já no segundo método, temos o comportamento oposto, ou seja, partimos de um valor mais baixo de t_c convergindo para o valor "exato" com o aumento do aglomerado. Assim, na primeira proposta temos valores de t_c e t_N superestimados em relação a resultados

obtidos por métodos mais elaborados (ex: simulação de Monte Carlo), enquanto que a segunda proposta encontra valores subestimados.

Para o RFIM com interação F, temos os diagramas de fases mostrados na Fig.(3.14) para os sistemas 2D (a) e 3D (b). O aumento no número de spins do aglomerado (N), para os dois casos, mostra uma tendência do PTC convergir para a temperatura crítica t_c , tornando a linha de transição inteiramente de primeira ordem. Temos também com esse crescimento do aglomerado, a diminuição do valor de h_c , mostrando uma possível inexistência de ordem de longo-alcance para o caso real ($N \rightarrow \infty$). Podemos então especular $d_c = 3$ como sendo a dimensionalidade superior do RFIM.

No caso de uma função distribuição gaussiana para o campo aleatório, tem sido mostrado a inexistência de um PTC no diagrama de fases em qualquer dimensão para teoria de campo médio. Aqui confirmamos esses resultados, mostrados na Fig.(3.15) para o caso 3D com interações AF (a) e F (b). Em ambos os casos temos o mesmo comportamento para h_c já observado para a distribuição bimodal, novamente indicando uma tendência de ausência ordem de longo alcance no caso 3D.

A aplicação da função distribuição gaussiana duplo-pico foi feita apenas no sistema 3D-F, onde podemos observar o efeito do campo aleatório h e da dispersão σ no diagrama de fases. Na Fig.(3.16), temos em (a) o comportamento de $t(h)$ fixando o valor $\sigma = 0.5$, onde consideramos aglomerados com 1, 2 e 4 sítios centrais. As curvas apresentam regiões de transição de primeira e segunda ordem, separadas por um PTC que tende a t_c , na medida que aumentamos o número N de sítios do aglomerado. O sistema mostra a tendência de h_c tornar-se nulo para um sistema infinito, evidenciando mais uma vez a ausência de ordem de longo alcance para este caso. Em (b) temos o comportamento $t(h)$ para um aglomerado com $N = 2$ spins centrais variando o valor da dispersão σ . O aumento do valor de σ destrói o PTC do sistema, fazendo com que a curva seja inteiramente de segunda ordem a partir de $\sigma_c = 1.0$ e diminui o valor de h_c juntamente com a temperatura crítica a campo nulo.

O comportamento $t(\sigma)$ é mostrado na Fig.(3.17) para vários valores do campo aleatório

h . A temperatura do PTC diminui com o acréscimo do campo aleatório, desaparecendo entre $h = 1.8$ e $h = 2.0$.

O fenômeno da reentrância presente em algumas aplicações no RFIM, foi encontrado quando não aplicamos corretamente as condições iniciais, como o valor inicial da magnetização, gerando soluções que não correspondem ao mínimo de energia do sistema.

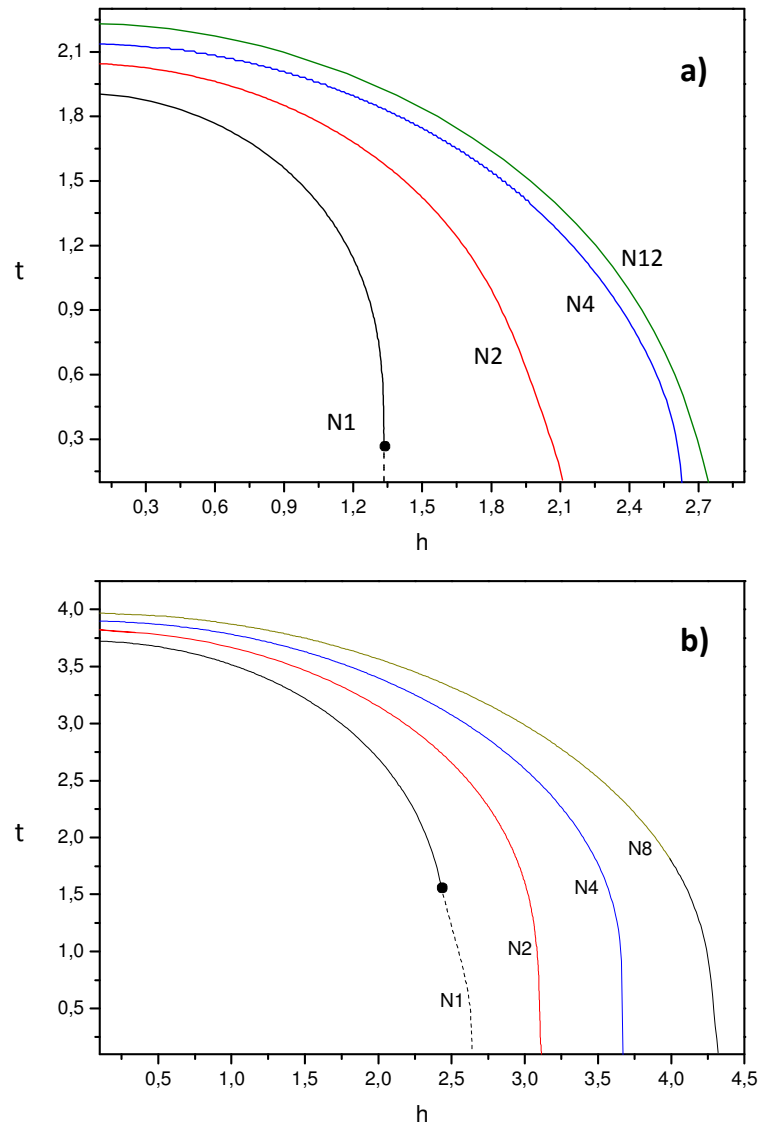


Figura 3.13: Diagramas de fases no plano $t - h$ do RFIM antiferromagnético obtido via EFT-1($N1$), 2($N2$), 4($N4$), 8($N8$) e 12($N12$) numa rede quadrada (a) e cúbica simples (b). As linhas de transições (1^a e 2^a ordem) foram obtidas usando o método da segunda proposta da energia livre com distribuição de campo bimodal.

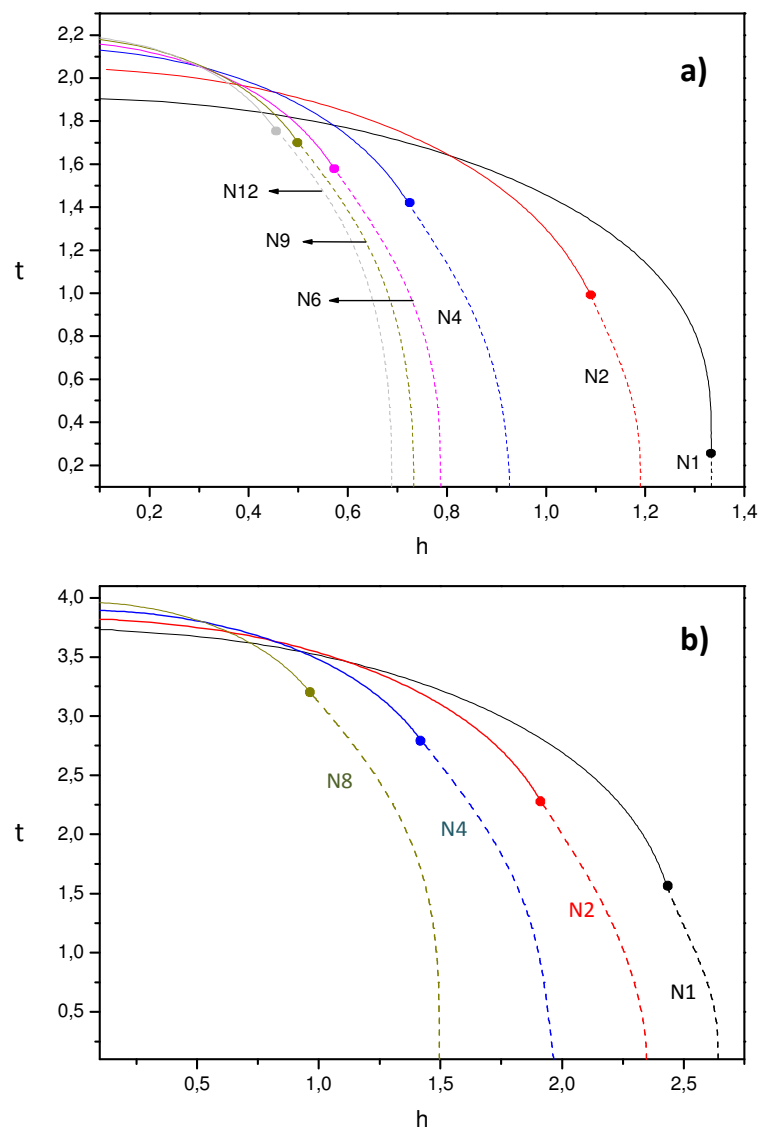


Figura 3.14: Diagramas de fases no plano $t-h$ do RFIM ferromagnético obtido via EFT-1 ($N1$), 2 ($N2$), 4 ($N4$), 8 ($N8$) e 12 ($N12$) numa rede quadrada (a) e cúbica simples (b). As linhas de transições (1^a e 2^a ordem) foram obtidas usando a segunda proposta de energia livre com a distribuição de campo bimodal.

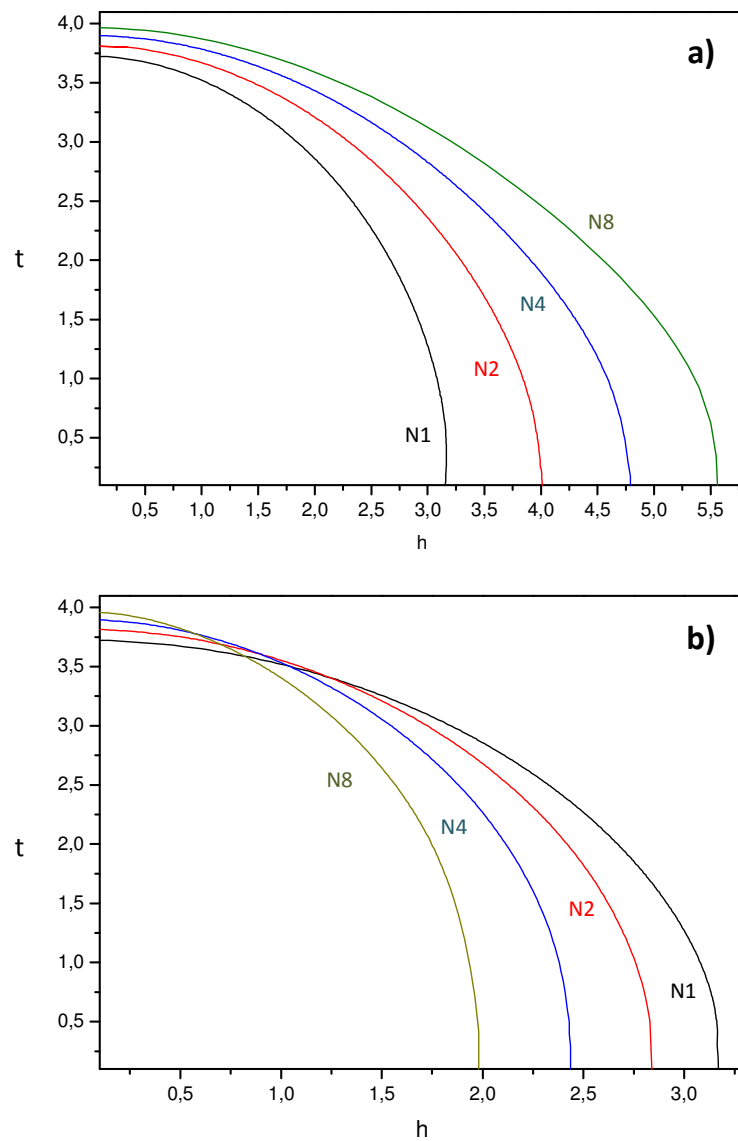


Figura 3.15: Diagramas de fases no plano $t - h$ do RFIM antiferromagnético (a) e ferromagnético (b) obtido via EFT-1 ($N1$), 2 ($N2$), 4 ($N4$) e 8 ($N8$) numa rede cúbica simples. As linhas críticas foram obtidas usando a segunda proposta de energia livre com a distribuição de campo gaussiana.

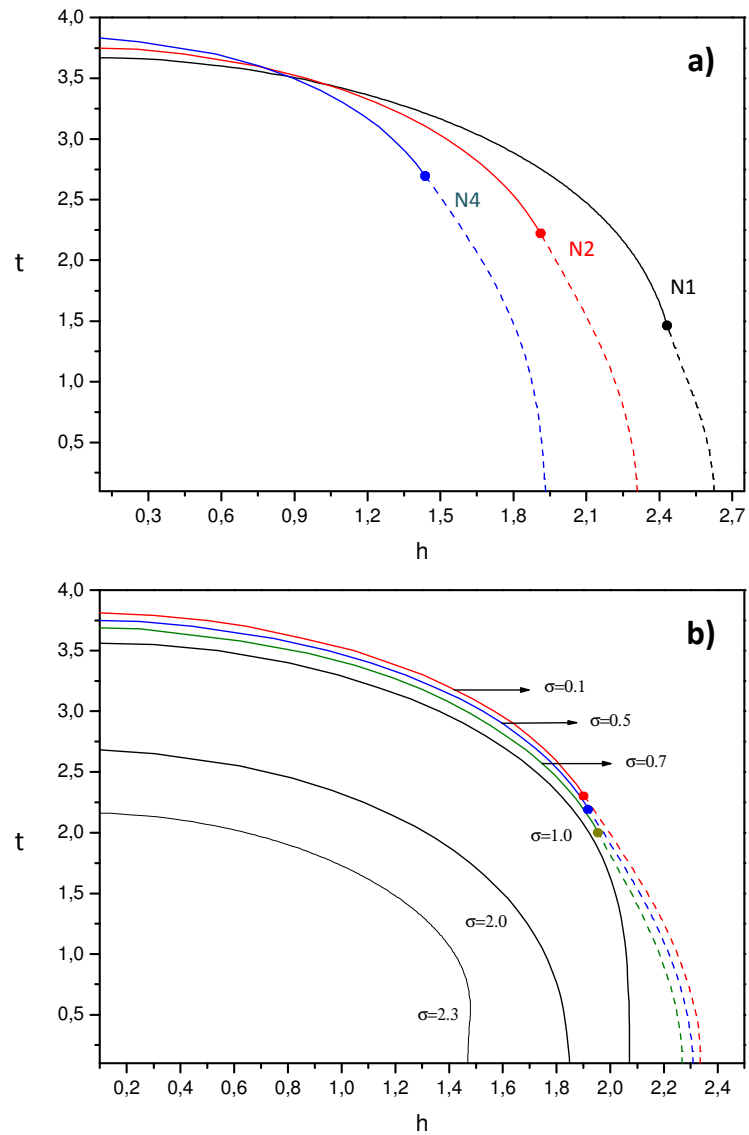


Figura 3.16: Diagrama de fase no plano $t-h$ do RFIM ferromagnético obtido via EFT-1 ($N1$), 2 ($N2$) e 4 ($N4$) para $\sigma = 0.5$ (a) e EFT-2 para diversos valores de σ (b) numa rede cúbica simples usando a segunda proposta de energia livre com a distribuição gaussiana duplo-pico.

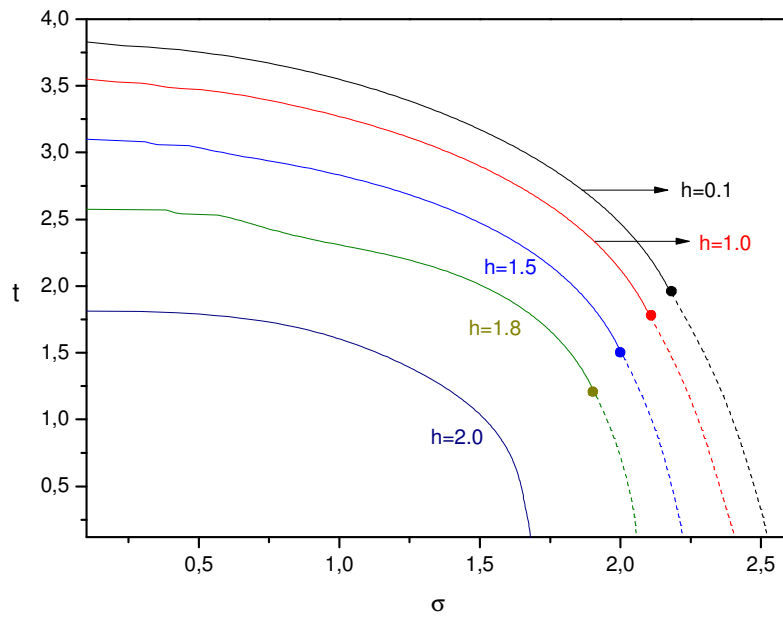


Figura 3.17: Diagrama de fases no plano $t - \sigma$ do RFIM ferromagnético obtido via EFT-2 numa rede cúbica simples, usando a segunda proposta da energia livre com a distribuição do campo gaussiana duplo-pico, para vários valores do campo reduzido $h = h_o/J$.

3.5.2 Propriedades Termodinâmicas

Nessa tese, trabalhamos com três métodos para analisar os diagramas de fase utilizando a energia livre do sistema através da Construção de Maxwell. Esse esforço resultou, em dois casos, na elaboração de procedimentos que possibilitaram o estudo das principais propriedades termodinâmicas como energia interna, calor específico e entropia. Os resultados estão divididos entre o método tradicional, onde a energia interna é obtida através da média do Hamiltoniano do sistema dado pela Eq.(3.53), e a segunda proposta da energia livre, onde utilizamos as relações para os potenciais termodinâmicos na formulação da energia livre de Helmholtz a partir da Eq.(3.67), em acordo com o apresentado na Seção 3.4.3 desta tese.

Método Tradicional

A aplicação desse procedimento necessita do conhecimento prévio do comportamento da magnetização em função da temperatura $m(t)$, haja vista que a energia interna é obtida através da aplicação sucessiva das médias térmica e configuracional no Hamiltoniano RFIM, o que resulta numa expansão em função do parâmetro de ordem, dado pela Eq.(3.60). Os valores da magnetização m em função da temperatura t e do campo aleatório h , foram obtidos resolvendo inicialmente a equação de estado, dada pela Eq.(3.6), onde os coeficientes A_i foram construídos utilizando a primeira proposta da energia livre. Para a determinação da temperatura de transição entre as fases F e P (1ª e 2ª ordem) adicionamos uma equação no algoritmo, obtida através do procedimento da Construção de Maxwell, Eq.(3.51). As funções termodinâmicas são obtidas conforme procedimento apresentado na seção 3.4.2 desta tese.

Deste modo, consideramos o sistema F com $N = 1$ spin no aglomerado utilizando a distribuição de campo bimodal com a linha de transição de fase mostrada na Fig.(3.8), curva (b). O comportamento para $m(t)$ correspondente é mostrado Fig.(3.18) onde podemos notar, a partir do campo aleatório $h = 2.9$, a presença das linhas de instabilidade para a transição de 1ª ordem. Em geral temos que a temperatura de transição

diminui com o aumento do campo aleatório h , fato este que será observado no comportamento das funções termodinâmicas.

A energia interna $u = \frac{U}{J}$ em função da temperatura é mostrada na Fig.(3.19) para a região de transição de fase de segunda (a) e primeira ordem (b) ordem com a aplicação de três valores do campo aleatório h . De posse desses resultados, obtemos o comportamento do calor específico pelo processo de derivação numérica, mostrado na Fig.(3.20).

O processo para a determinação da entropia é mais complexo pois exige um processo de integração onde devemos ter os valores corretos de m e $\frac{dm}{dt}$ específicos para cada valor de temperatura. Contornamos essa dificuldade com a utilização adequada dos comandos READ e OPEN no algoritmo para leitura dos dados, contidos nas Figs.(3.18) para a magnetização e (3.20) para o calor específico, e assim obtemos as curvas na região de transição de segunda (a) e primeira ordem (b), mostrados na Fig.(3.21), para diferentes valores de campo aleatório aplicado.

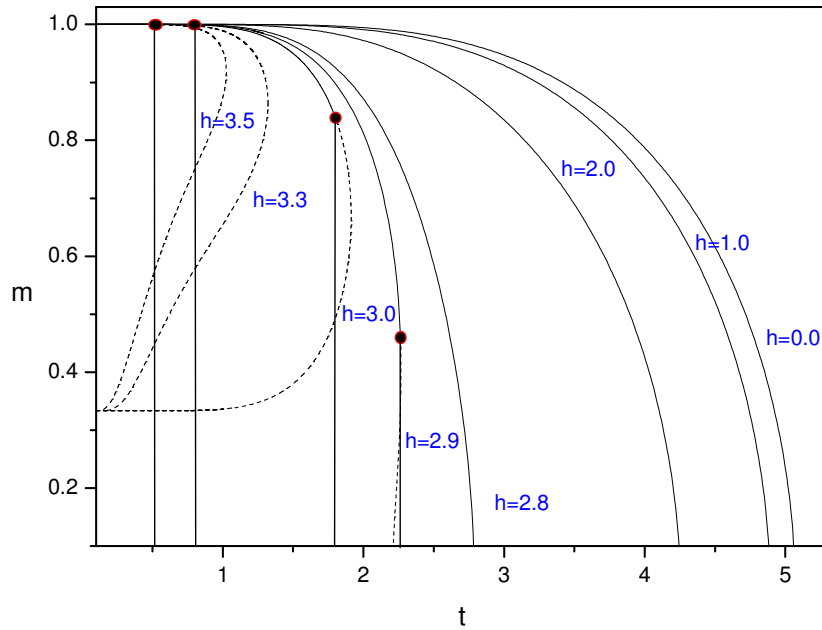


Figura 3.18: Comportamento da magnetização por spin em função da temperatura reduzida $t = k_B T/J$ para o RFIM ferromagnético, obtido via EFT-1 numa rede cúbica simples para diversos valores do campo reduzido $h = h_o/J$ indicados nas curvas. As linhas tracejadas correspondem às soluções instáveis, que foram eliminadas usando a construção de Maxwell para obter o ponto de transição de primeira ordem, para o caso da distribuição de campo bimodal.

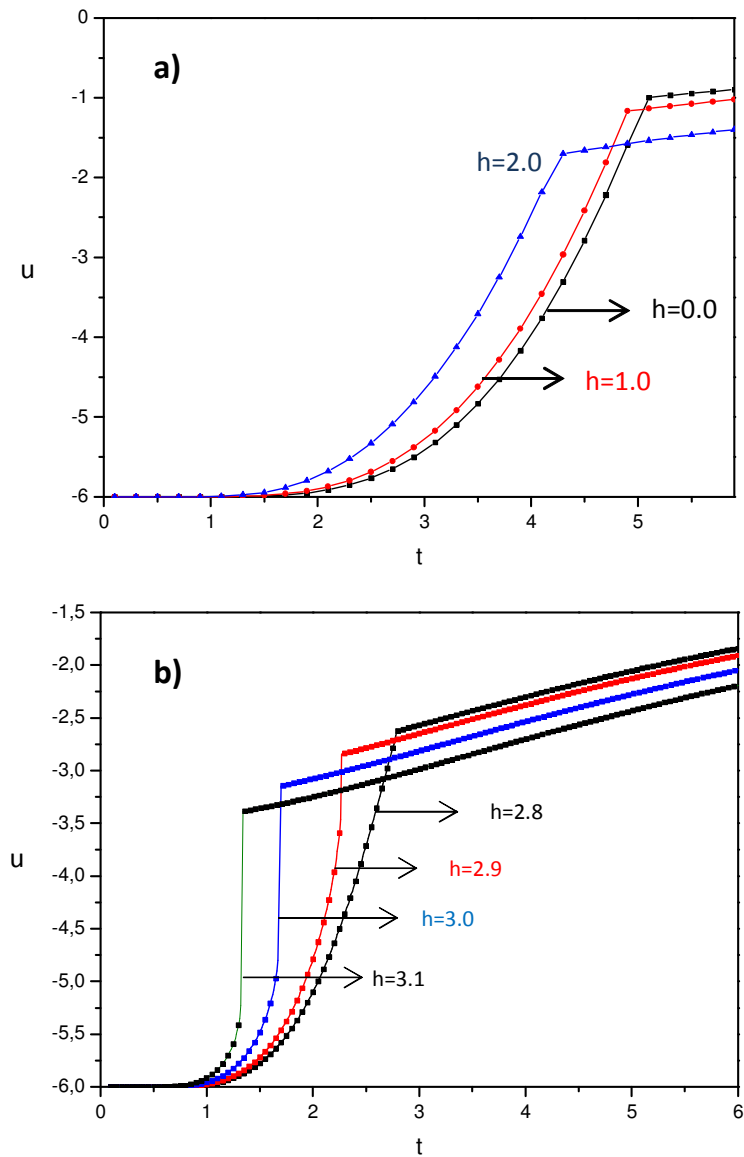


Figura 3.19: Comportamento da energia interna u em função da temperatura reduzida t do RFIM ferromagnético, obtido via EFT-1 numa rede cúbica simples para o caso da distribuição de campo bimodal, usando o primeira proposta de energia livre e construção de Maxwell para localizar o ponto de transição de fase. As curvas nas Figuras (a) e (b) correspondem às soluções com transições de 2^a e 1^a ordem, respectivamente.

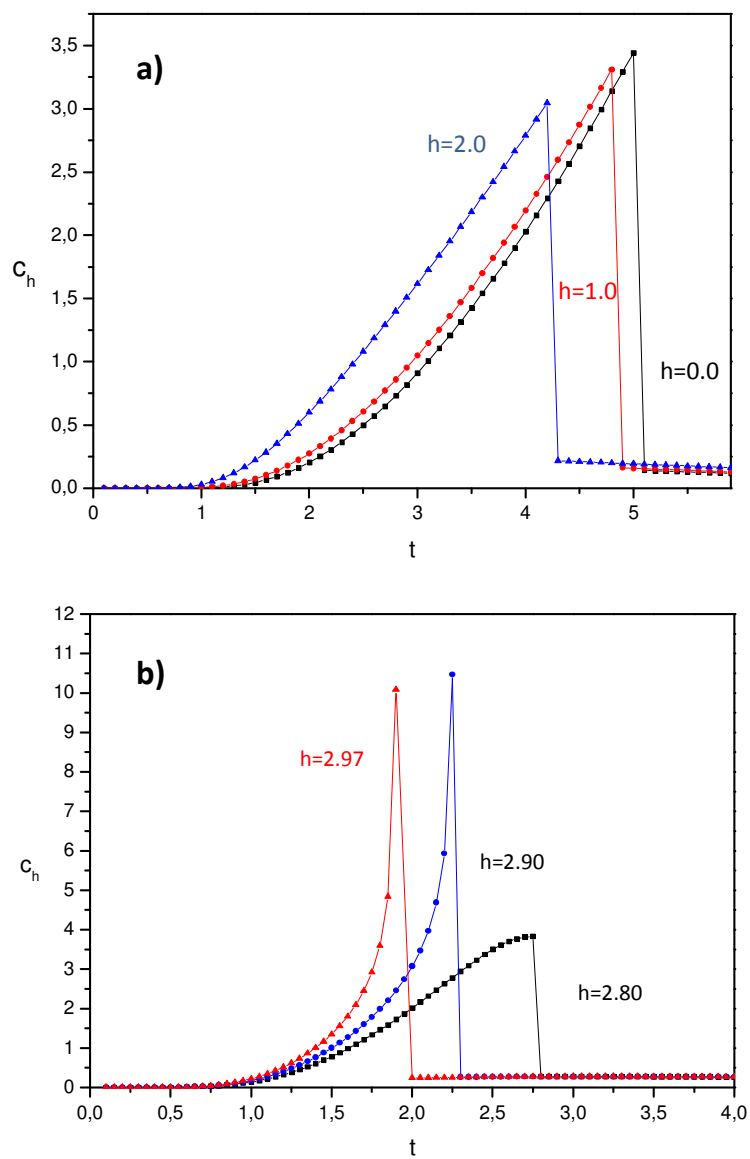


Figura 3.20: Comportamento do calor específico em função da temperatura obtido a partir da derivação numérica dos resultados apresentados na Fig.(3.19) para a energia interna. As regiões de transição de 2^a e 1^a ordem são mostradas em (a) e (b) respectivamente.

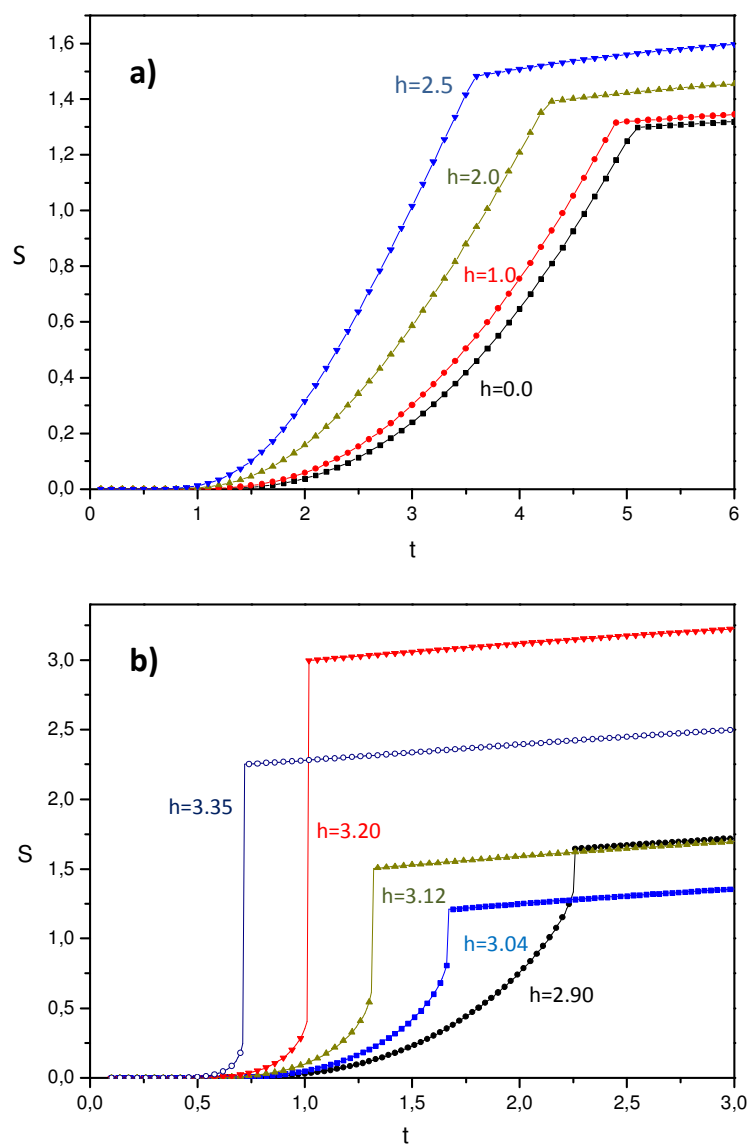


Figura 3.21: Comportamento da entropia em função da temperatura reduzida do RFIM ferromagnético obtido via EFT-1 numa rede cúbica simples para o caso da distribuição de campo bimodal, usando o primeiro método da energia livre para localizar a transição de segunda ordem (a) e primeira ordem (b).

Segunda Proposta de Energia Livre

A busca por um procedimento para obter a energia livre diretamente da aplicação da TOD gerou como resultado um método simples e eficiente para o estudo das propriedades termodinâmicas. Através de um processo de análise da energia interna na aproximação de aglomerados finitos, considerando agora a influência de toda a rede através de uma aproximação de primeira ordem dada pelo termo λm^2 , obtemos a energia livre dada pela Eq.(3.67), cujas condições iniciais de contorno para a determinação do parâmetro λ colocam esta formulação em acordo com o critério de mínimo de energia do sistema.

A aplicação conjunta com a equação de estado resultante do processo de minimização da energia com relação ao parâmetro de ordem, Eq.(3.71), e o procedimento da construção de Maxwell para a determinação das linhas de transição de fases, discutidas na seção anterior, permitiu a obtenção das principais funções termodinâmicas. Apresentaremos os resultados obtidos nas regiões de transição de 1ª e 2ª ordem, entre as fases F-P, utilizando as distribuições de campo bimodal e gaussiana para um aglomerado com $N = 4$ spins (EFT-4) numa rede cúbica simples (3D).

Na Fig.(3.22) temos o comportamento da magnetização em função da temperatura para vários valores do campo aleatório nos casos (a) bimodal e (b) gaussiana. Para a distribuição bimodal, temos as duas regiões (1ª e 2ª ordem) bem definidas com as linhas de instabilidade presentes na região de 1ª ordem, a partir de $h = 1.47$. No caso da distribuição gaussiana, vemos que o efeito do aumento do campo aleatório é destruir a ordem magnética, sempre com transição de 2ª ordem.

Começamos mostrando o comportamento da energia interna $u = \frac{U}{J}$ em função da temperatura, na Fig.(3.23). Para valores de campo aleatório correspondentes a região de primeira ordem, podemos observar a descontinuidade na função juntamente com as linhas de instabilidade, decorrentes das soluções não físicas para a magnetização. A esse comportamento, temos associado a função calor específico obtido a partir da derivada $\frac{du}{dt}$ a campo constante mostrado nas Fig.(3.24), notando-se a diferença na forma da descontinuidade ocorrida nessa função para o caso de primeira ordem, quando comparado

com o encontrado pela primeira proposta, mostrado na Fig.(3.20).

Para a entropia, temos seu comportamento em função da temperatura mostrado na Fig.(3.25). Nota-se nesse comportamento características importantes que não são observadas nos resultados encontrados na aplicação da primeira proposta tais como, a mudança na concavidade da curva que ocorre exatamente no ponto de transição e também o resultado quantitativo correto para a entropia no regime de altas temperaturas, que está associado ao número de graus de liberdade do spin. Para esta aplicação, temos $s = \pm \frac{1}{2}$, resultando assim $\ln(2) = 0.69$. O comportamento da energia livre em função da temperatura é mostrado na Fig.(3.26) para vários valores do campo aleatório. Na Fig.(3.27) temos associado a vários pontos da linha de transição para EFT-4, o comportamento da energia livre em função do parâmetro de ordem m , em acordo com o previsto pela expansão de Landau para essas diferentes regiões. Em destaque o PTC, com a presença de três mínimos de energia, característica desse ponto.

O comportamento das funções termodinâmicas em função da temperatura, para a distribuição gaussiana, é mostrado nas Figs.(3.28) e(3.29) apresentando como principal característica somente transição de fase contínua (2^{a} ordem) entre as fases F-P.

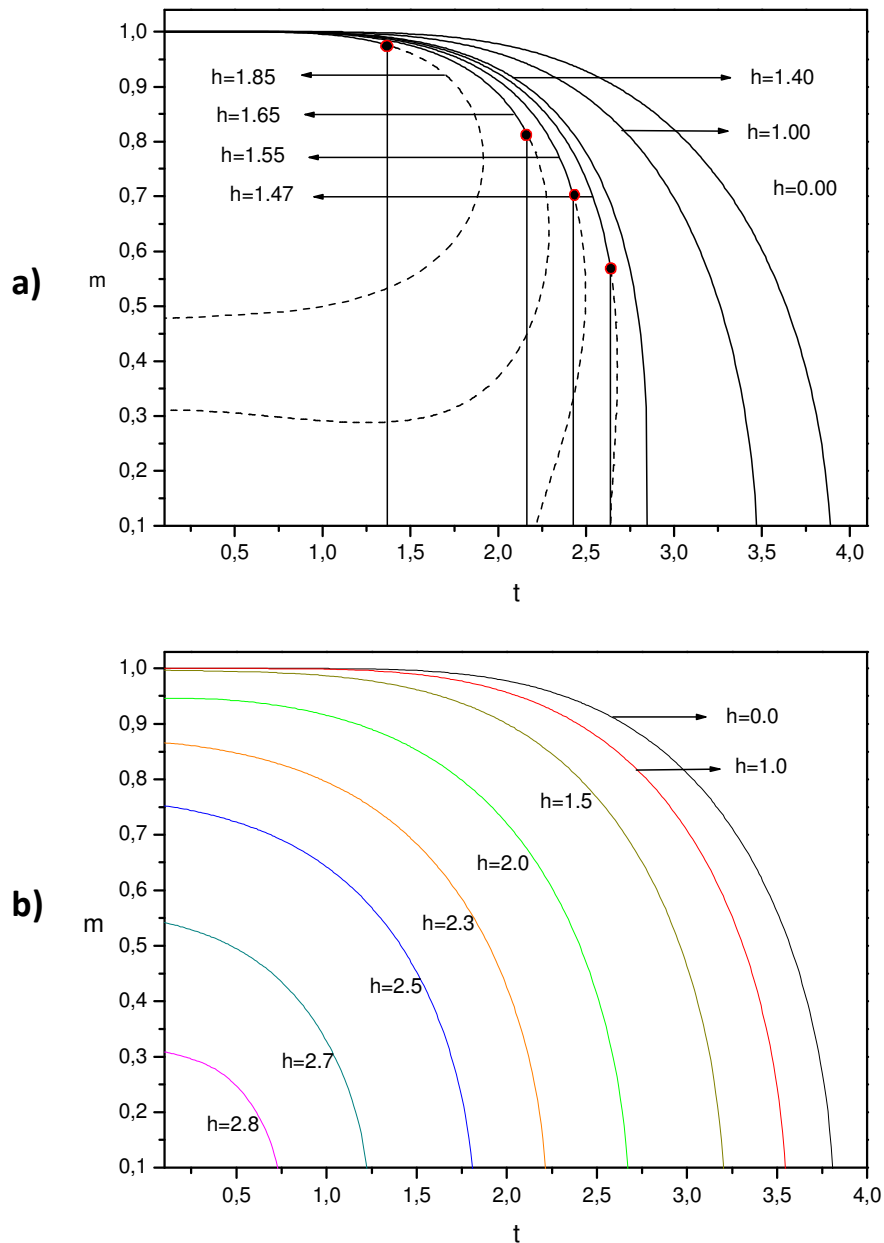


Figura 3.22: Comportamento da magnetização m em função da temperatura reduzida t do RFIM ferromagnético, obtido via EFT-4 numa rede cúbica simples para os casos de distribuições bimodal (a) e gaussiana (b) usando a segunda proposta da energia livre para vários valores de h . As linhas tracejadas correspondem às soluções instáveis que são eliminadas através da análise da construção de Maxwell.

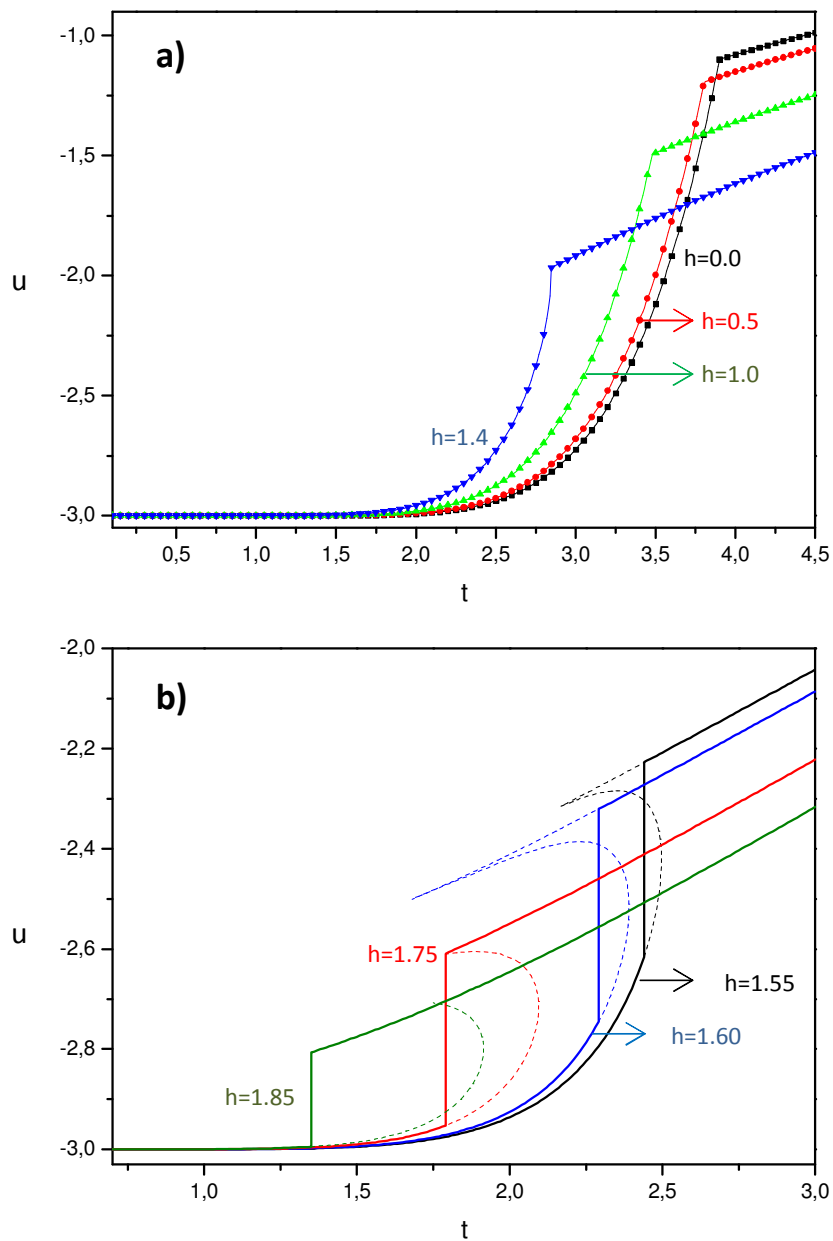


Figura 3.23: Comportamento da energia interna em função da temperatura reduzida do RFIM ferromagnético obtido via EFT-4 numa rede cúbica simples para o caso de distribuição bimodal. As linhas tracejadas correspondem às soluções instáveis, (a) e (b) representam as transições de 2^a e 1^a ordem respectivamente.

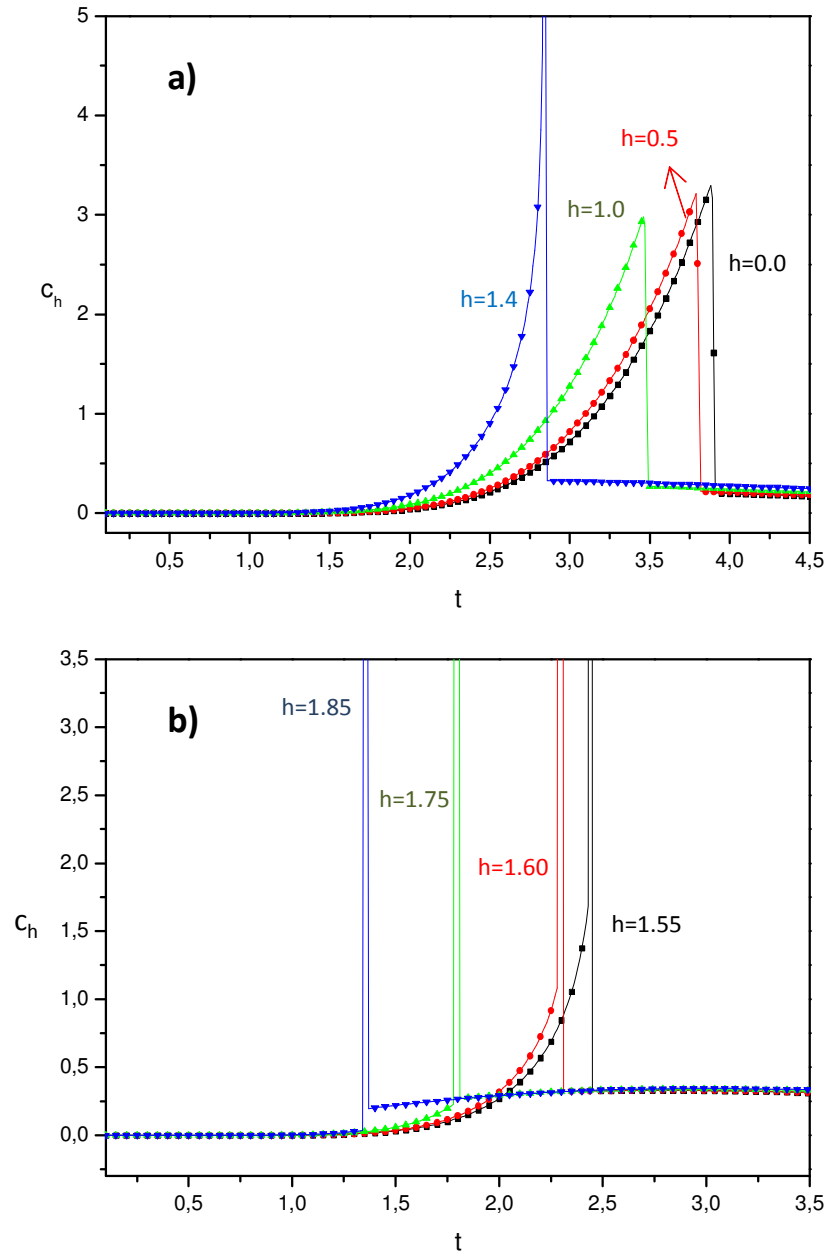


Figura 3.24: Comportamento do calor específico c_h em função da temperatura reduzida do RFIM ferromagnético obtido por EFT-4 numa rede cúbica simples com distribuição de campo bimodal, encontrado a partir da derivação numérica da curva $u(t)$ dada na Fig.(3.23).

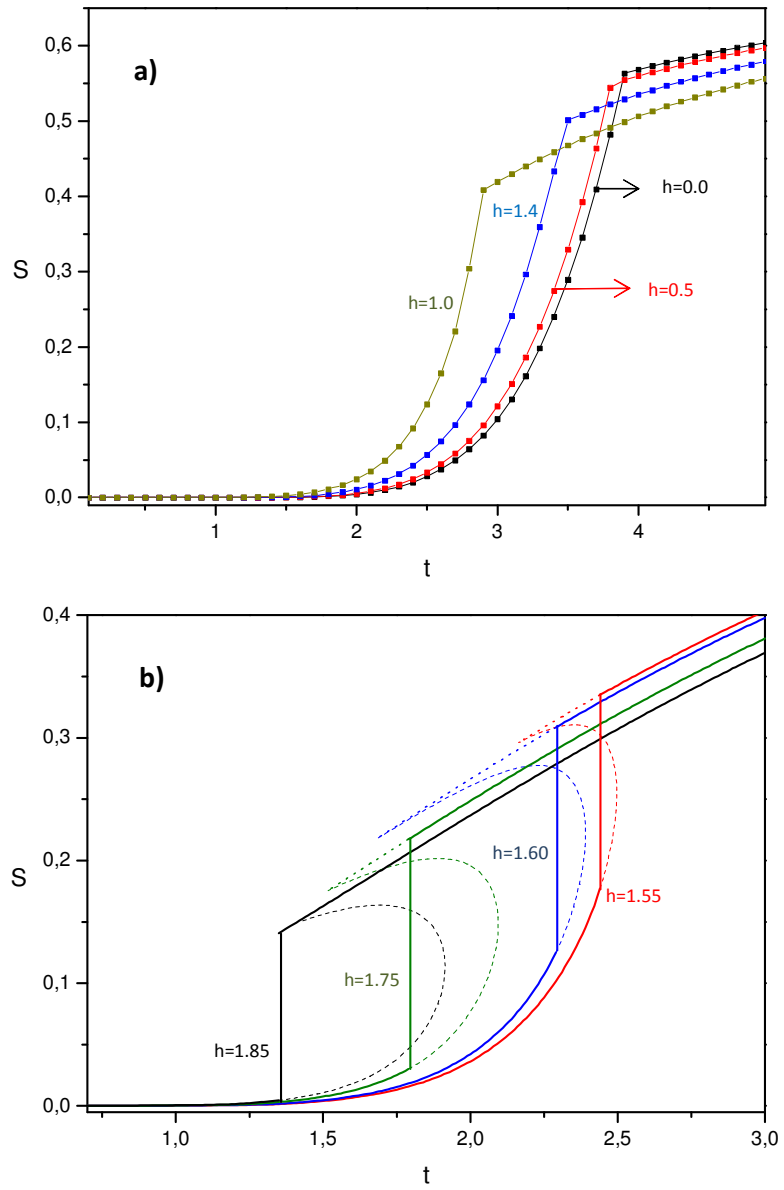


Figura 3.25: Comportamento da entropia em função da temperatura reduzida do RFIM ferromagnético obtido via EFT-4 numa rede cúbica simples, com distribuição bimodal de campo. As linhas tracejadas correspondem às soluções instáveis obtidas através da segunda proposta da energia livre, onde (a) e (b) representam os comportamentos das transições de 2^a e 1^a ordem, respectivamente.

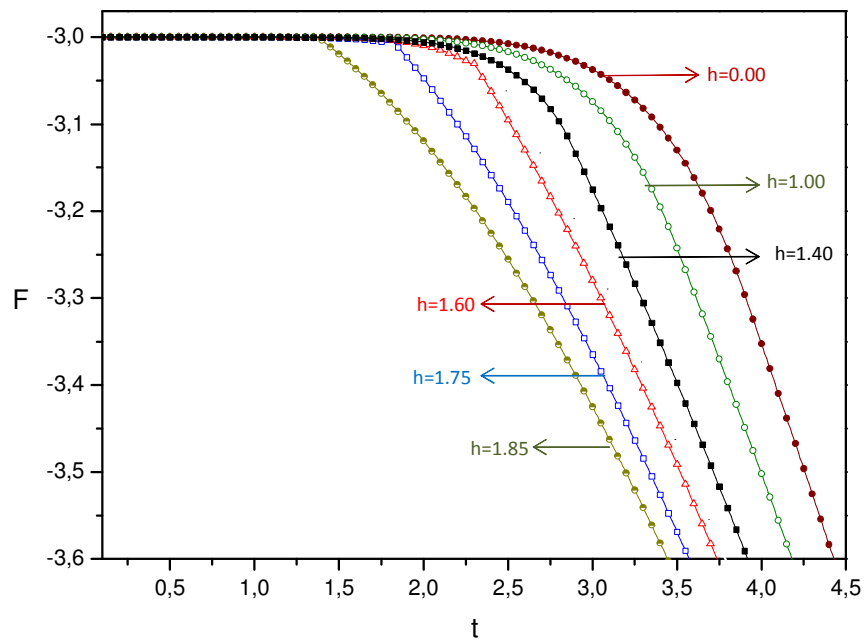


Figura 3.26: Comportamento da energia livre em função da temperatura reduzida do RFIM ferromagnético obtido via EFT-4, numa rede cúbica simples com distribuição de campo bimodal, onde foi usado o segundo método da energia livre.

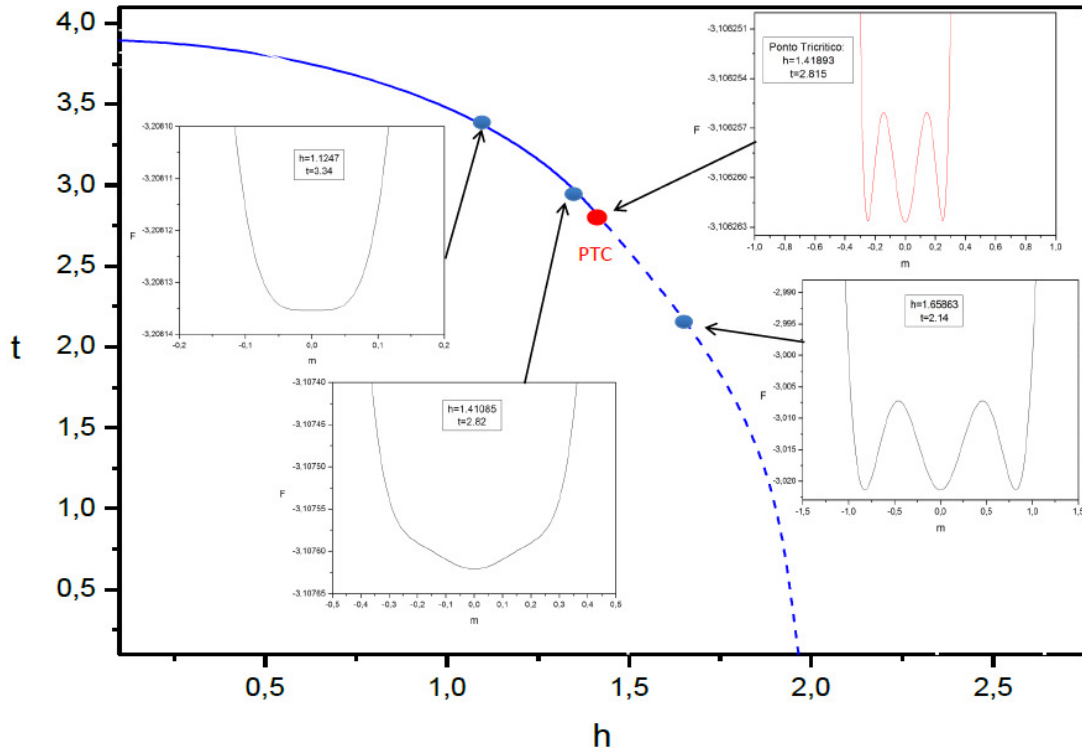


Figura 3.27: Diagrama de fases no plano $t - h$ do RFIM ferromagnético obtido via EFT-4 numa rede cúbica simples com distribuição bimodal e usando a segunda proposta de energia livre. As linhas tracejada e contínua correspondem às transições de 1^a e 2^a ordem, respectivamente. O PTC é representado pelo ponto em negrito, enquanto os pontos em cinza são o pontos que caracterizam as suas respectivas ordens de transição acompanhadas do comportamento da energia livre $F(m)$ associadas (figuras inseridas).

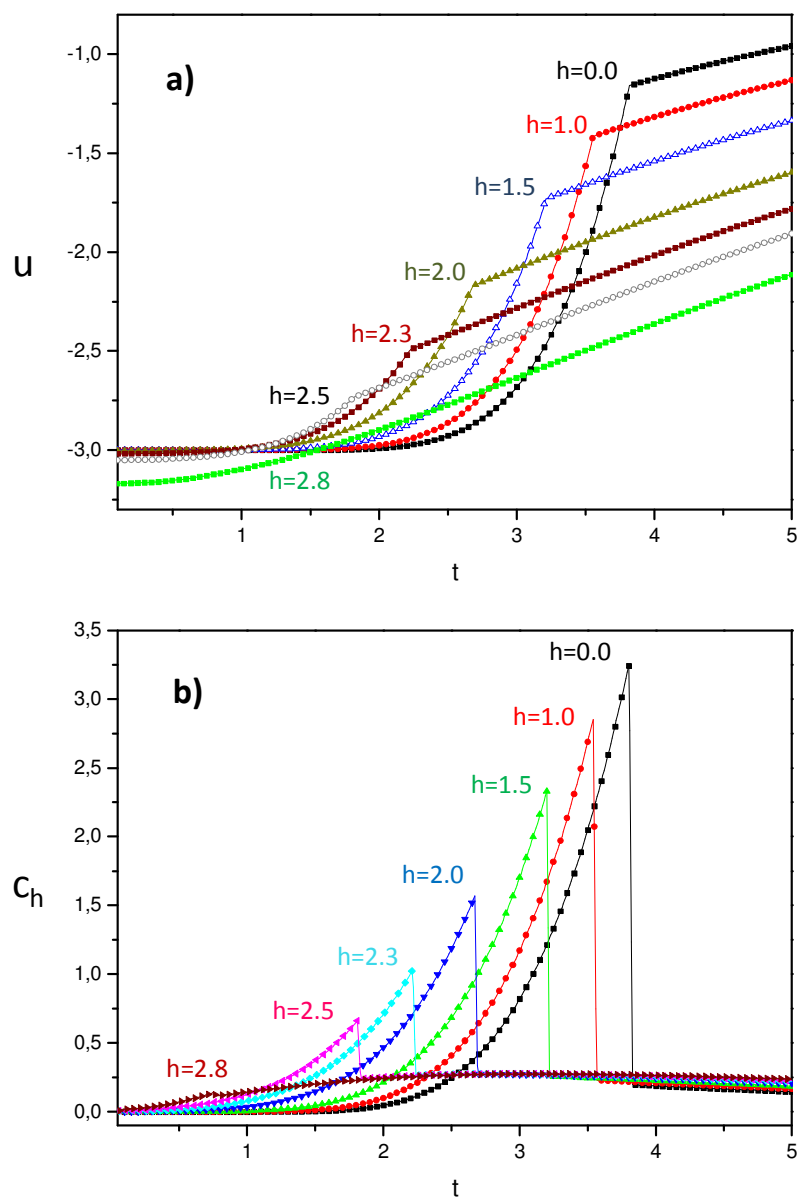


Figura 3.28: Comportamento da energia interna (a) e calor específico (b) em função da temperatura reduzida do RFIM ferromagnético obtido via EFT-4 através da segunda proposta de energia livre, numa rede cúbica simples com distribuição gaussiana.

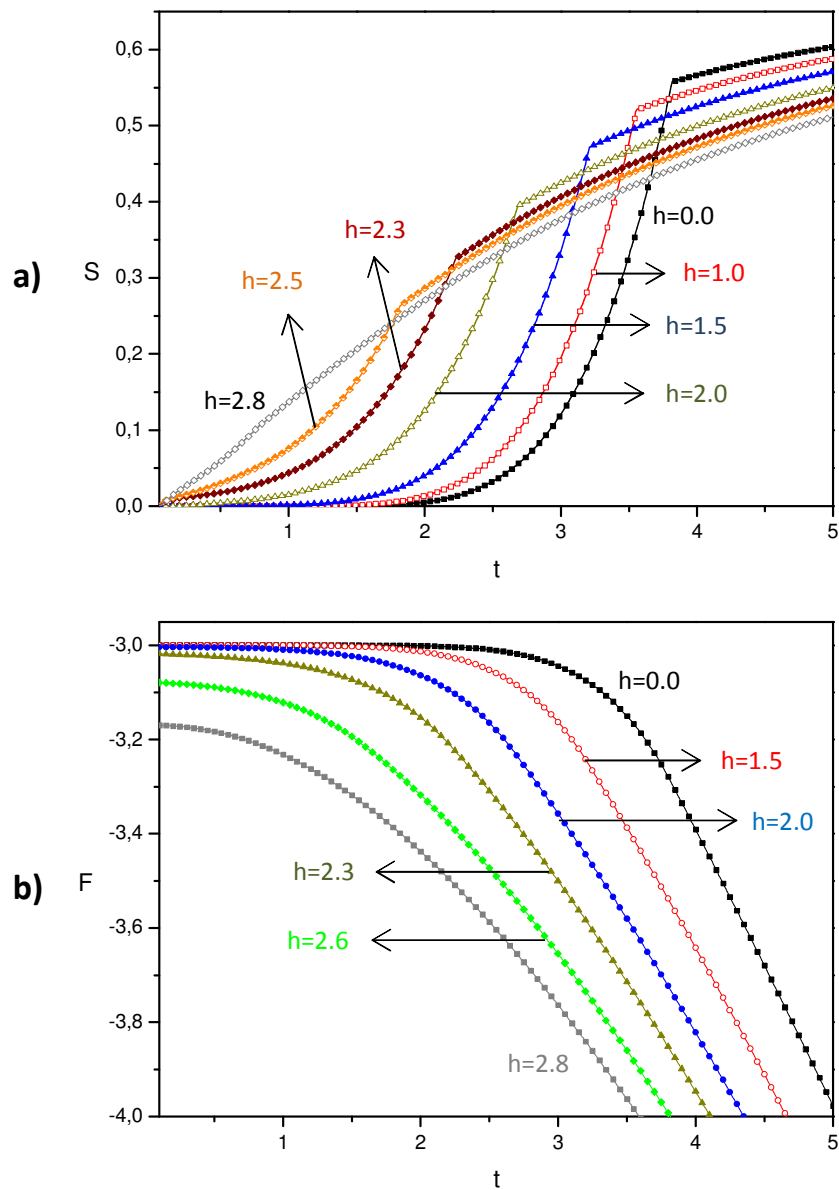


Figura 3.29: Comportamento da entropia (a) e energia livre (b) em função da temperatura reduzida do RFIM ferromagnético obido através da segunda proposta de energia livre via EFT-4, numa rede cúbica simples com distribuição de campo gaussiana.

Referências

- [1] H. E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Oxford University Press (1971).
- [2] D. J. Amit, *Field Theory, the Renormalization Group and Critical Phenomena*, World Scientific (1984).
- [3] Y. Imry e M. Wortis, *Phys. Rev. B*, **19**, 3580 (1979).
- [4] S. Fishman e A. Aharony, *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **12**, L729 (1979).
- [5] J. Cardy, *Phys. Rev. B*, **29**, 505 (1984).
- [6] D. P. Belanger, *Spin Glasses and Random Fields*, ed. A P Young (1998).
- [7] P. Z. Wong , S. von Molnar e P. Dimon, *J. Appl. Phys.*, **53**, 7954 (1982).
- [8] M. Kaufman, P. E. Kluzinger e A. Khurana, *Phys. Rev. B*, **34**, 4766 (1986).
- [9] L. J. Sham e B. R. Patton, *Phys. Rev. B*, **13**, 3151 (1976).
- [10] A. I. Larkin, *Sov. Phys. JETP*, **31**, 784 (1970).
- [11] Y. Imry e S. K. Ma, *Phys. Rev. Lett.*, **35**, 1399 (1975).
- [12] P. Lacour-Gayet e G. Toulouse, *J. Phys.*, **35**, 425 (1974).
- [13] A. Aharony , Y. Imry e S. K. Ma, *Phys. Rev. Lett.*, **37**, 20 (1976).

- [14] T. Schneider e E. Pytte, *Phys. Rev. B*, **15**, 1519 (1977).
- [15] D. P. Landau, H. H. Lee e W. Kao, *J. Appl. Physics*, **3**, 49 (1978).
- [16] E. Pytte, Y. Imry e D. Muk, *Phys. Rev. Lett.*, **46**, 1173 (1981).
- [17] G. Parisi e N. Surlas, *Phys. Rev. Lett.*, **43**, 744 (1979).
- [18] E. B. Rasmussen, M. A. Novotny e D. P. Landau, *J. Appl. Phys.*, **3**, 53 (1982).
- [19] L. Hernandez e H. T. Diep, *Phys. Rev. B*, **55**, 14080 (1997).
- [20] N.G. Fytas e A. Malakis, *Eur. Phys. J. B*, **61**, 111 (2008).
- [21] A. Aharony, *Phys. Rev. B*, **18**, 3318 (1978).
- [22] J. T. Chalker, *J. Phys. C*, **16**, 6615 (1983).
- [23] J. Z. Imbrie, *Phys. Rev. Lett.*, **35**, 1747 (1984).
- [24] G. Grinstein e S. K. Ma, *Phys. Rev. Lett.*, **49**, 685 (1982).
- [25] A. N. Berker, *Phys. Rev. B*, **29**, 5243 (1984).
- [26] A. Khurana, F. J. Seco e A. Houghton, *Phys. Rev. Lett.*, **54**, 357 (1985).
- [27] D. Andelman, H. Orland e L. C. R. Wijewardhana, *Phys. Rev. Lett.*, **52**, 145 (1984).
- [28] D. P. Belanger, A. R. King e V. Jaccarino, *Phys. Rev. Lett.*, **48**, 1050 (1982).
- [29] G. Grinstein, *Phys. Rev. Lett.*, **37**, 944 (1976).
- [30] A. P. Young, *J. Phys. C*, **10**, L257 (1977).
- [31] D. P. Belanger, A. R. King, V. Jaccarino e J. L. Cardy, *Phys. Rev. B*, **28**, 2522 (1983).

- [32] G. Grinstein e J. F. Fernandez, *Phys. Rev. Lett.*, **29**, 6387 (1984); J. Villain, *Phys. Rev. Lett.*, **52**, 1543 (1984); R. Bruinsma e G. Aeppli, *Phys. Rev. Lett.*, **52**, 1547 (1984).
- [33] A. Houghton, A. Khurana e F. J. Seco, *Phys. Rev. Lett.*, **55**, 856 (1985).
- [34] M. Gofman, J. Adler, A. Aharony, A. B. Harris e M. Schwartz, *Phys. Rev. B*, **53**, 6362(1996).
- [35] M. R. Swift, A. J. Bray, A. Maritan, M. Cieplak e J. R. Banavar, *Europhys. Lett.*, **38**, 273 (1997).
- [36] J. Machta, M. E. Newman e L. B. Chayes, *Phys. Rev. E*, **62**, 8782 (2000).
- [37] A. A. Middleton E D. S. Fisher, *Phys. Rev. B*, **65**, 134411 (2002).
- [38] I. Dukovski e J. Machta, *Phys. Rev. B*, **67**, 014413 (2003).
- [39] S. G. Grest, C. M. Soukoulis e K. Levin, *Phys. Rev. B*, **33**, 7659 (1986).
- [40] J. Y. Fortin e P. C. Holdsworth, *J. Phys. A: Math. Gen.*, **31**, 85 (1988).
- [41] N. Crokidakis e F. D. Nobre, *J. Phys.: Condens. Matter*, **20**, 145211 (2008).
- [42] O. R. Salmon, N. Crokidakis e F. D. Nobre, *J. Phys.: Condens. Matter*, **21**, 056005 (2009).
- [43] U. Akinci, Y. Yüksel e H. Polat, *Phys Rev. E*, **83**, 061103 (2011).
- [44] Y. Yüksel, U. Akinci, H. Polat, *Phys. A*, **391**, 415 (2012).
- [45] H. E. Borges e P. R. Silva, *Phys. A*, **144**, 561 (1987).
- [46] Y. Q. Liang, G. Z. Wei, Q. Zhang, Z. H. Xin e G. L. Song, *J. Magn. and Magn. Mat.*, **284**, 47 (2004).
- [47] E. F. Sarmiento e T. Kaneyoshi, *Phys. Rev. B*, **39**, 9555 (1989).

- [48] R. M. Sebastianes e W. Figueiredo, *Phys. Rev. B*, **46**, 969 (1992).
- [49] T. Kaneyoshi, *Physica A*, **139**, 455 (1985).
- [50] A. Rosas, S. Coutinho, *J. Magn. and Magn. Mat.*, **226**, 1349 (2001).
- [51] S. Galam, C. S. O. Yokoi e S. R. Salinas, *Phys Rev B*, **57**, 8370 (1998).
- [52] R. Hommura e T. Kaneyoshi, *J. Phys. C*, **12**, 3970 (1979).
- [53] E. Costabile, M. A. Amazonas, J. R. Viana, J. R. de Sousa, *Phys. Lett. A*, *in press*, 2012.
- [54] J.W. Tucker, *J. Magn. and Magn. Mat.*, **183**, 299 (1998).
- [55] D. F. Albuquerque, S. R. L. Alves e Alberto S. Arruda, *Phys. Lett. A*, **346**, 128 (2005).

Capítulo 4

Filmes-Finos Magnéticos

4.1 Introdução

O desenvolvimento de novos materiais com características específicas para uma dada aplicação, requer o conhecimento detalhado das interações microscópicas e como elas são afetadas por fatores como sua composição, preparação e interação com o meio externo. Como exemplo temos os metamateriais, cujo controle exato de sua estrutura interna tem levado ao desenvolvimento do antimagneto[1], projeção de hologramas[2], controle preciso da luz[3] e mantos de invisibilidade[4]. Para aplicações na área de armazenamento de dados, temos o desenvolvimento de filmes-finos magnéticos, o que requer a fixação da magnetização aplicada em sua superfície¹ e leitura posterior desses dados com alto grau de precisão, conforme mostra a Fig.(4.1). Variações na composição do filme podem ser usadas para manipular as propriedades desejadas e sua sensibilidade na presença de um campo externo. A habilidade em lidar com esses parâmetros é fundamental para o estabelecimento de sua estrutura física, fazendo com que sua performance seja otimizada trazendo significativos benefícios tecnológicos.

¹Recentes estudos[6] mostram que o processo de fixação e leitura magnética pode ser feito através de pulsos de calor direcionados por um laser, eliminando a necessidade de eletroímãs. Isso torna o processo

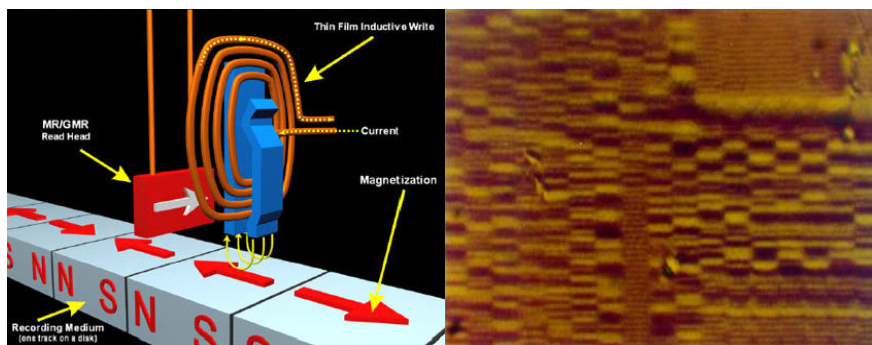


Figura 4.1: Na foto à esquerda temos um esquema de gravação de dados em uma superfície magnética. À direita, uma foto real mostrando os *bits* organizados na superfície. (Fonte: Gurteq)

Um dos grandes avanços na análise desses sistemas foi a descoberta do efeito magneto-óptico de superfície, denominado Efeito Kerr, que através da incidência de laser ($\lambda = 632nm$) em uma determinada direção pode informar o comportamento da magnetização em função da temperatura[5]. Além disso, um controle maior da deposição atômica feita camada por camada através de técnicas modernas de alto-vácuo, como o método da Epitaxia por Feixe Molecular (MBE)[7] ou por processos de eletrodeposição(ED)[8], tem garantido formar novas estruturas de filmes, nas mais diversas orientações. Esta técnica já é aplicada na preparação de cabeçotes de leitura magnética indutiva devido ao baixo custo de fabricação e ao fácil monitoramento da composição das ligas.

Dentre as inúmeras configurações, materiais magnéticos ultrafinos que apresentam anisotropia magnética perpendicular (PMA) são de grande interesse para a armazenagem de informações de alta densidade[9]. Medidas obtidas por meio da rotação polar Kerr mostram que, em filmes com magnetização perpendicular², o sinal é uma ordem de grandeza superior ao obtido para filmes com magnetização paralela[11]. Tal aumento melhora a relação sinal-ruído e permite a redução do tamanho físico dos *bits*[12], possi-

muito mais rápido diminuindo o consumo de energia.

²Recentemente, Stiles e Xiao[10] analisaram a estabilidade da componente perpendicular do momento angular em um ferromagneto através de correntes não polarizadas.

bilitando o aumento da densidade de armazenamento de dados[13, 14].

Com o avanço tecnológico nos processos de deposição e análise do comportamento magnético preciso em cada camada do filme, muitos fenômenos interessantes têm sido observados experimentalmente[16]-[17]. Em geral, esses novos comportamentos têm origem na presença de uma superfície livre com condições de contorno diferenciadas do *bulk* e a transição entre sistemas 2D e 3D através do acréscimo no número de camadas (L) do filme. Esse *crossover* de dimensionalidade altera drasticamente as propriedades do sistema como temperatura e expoentes críticos[41, 42].

Allenspach e Bischof[18], usando microscópio eletrônico, estudaram a variação da estrutura dos domínios magnéticos em filmes finos de $Fe/Cu(001)$ e observaram que este sofre forte influência da temperatura. Abaixo de uma denominada temperatura característica, os momentos magnéticos formam um simples domínio magnético orientado perpendicularmente ao longo do eixo cristalográfico. Com o contínuo aumento da temperatura os momentos magnéticos reorientam-se da direção perpendicular para a direção paralela ao plano do filme, fenômeno este conhecido como transição de reorientação. Esse fenômeno também foi estudado por Santamaria[19] usando simulação de Monte Carlo. Essa mudança estrutural é verificada com a variação na temperatura ou no número de camadas do filme[20, 21]. A importância da estrutura dos domínios magnéticos na estrutura do filme foi bem demonstrada por Speckmann[22] no estudo do crescimento de filmes em amostras de Co e Au (111).

Do ponto de vista teórico, métodos numéricos para o cálculo de T_c para filmes com algumas camadas de spin foram desenvolvidos, como a expansão em série por extrapolação em altas temperaturas (HTSEE)[23], aplicação do Grupo de Renormalização[24]-[27], aproximação de Ginzburg-Landau[28], teoria geral de escala[29]-[31], aplicações em campo médio[32, 33], Função de Green[34] e simulação de Monte Carlo[35]-[36]. Os resultados encontrados para o comportamento termodinâmico e grandezas críticas na região de transição confirmam os resultados obtidos experimentalmente. Assim, esses sistemas são de grande importância na investigação de novos fenômenos relacionados a estrutura

da matéria bem como servem para testar os procedimentos teóricos e computacionais desenvolvidos na Mecânica Estatística.

Recentemente, alguns métodos analíticos foram desenvolvidos com base na expansão do cumulante (VCE) calculando pontos críticos de filmes Ising com precisão arbitrária[37]. Valores de T_c foram obtidos até quarta ordem para as redes cúbica simples (sc), corpo centrado (bcc) e em terceira ordem para a cubica de face centrada[38]. Outra técnica que tem sido exaustivamente utilizada é a teoria de campo efetivo (EFT), empregada nos mais variados tipos de problemas como percolação, ordem e desordem em modelos de spin clássico e quântico[39] e no comportamento crítico da superfície e do *bulk*[40]-[42] onde temos a temperatura crítica T_c encontrada em função: do modelo utilizado(Ising, Heisenberg), do tipo de rede cristalina (sc, fcc,bcc), do número de camadas (ℓ) e da interação entre a superfície e o *bulk* (região central do filme).

A influência da dimensionalidade no comportamento dos filmes finos logo tornou-se motivo principal dos estudos teóricos destes sistemas. Trabalhos pioneiros como os de Fisher e colaboradores[29, 43] influenciaram fortemente estudos posteriores a respeito do efeito de variações da espessura na magnetização de filmes ultra-finos e o comportamento da temperatura crítica T_c do sistema. Tendo por base estes trabalhos, Zhang e Willis[44], utilizando um simples modelo de acoplamento entre spins conseguiram mostrar uma região com uma abrupta variação da temperatura (*crosssover*) crítica quando relacionada ao número de camadas do filme ($\ell < 5$). Seus resultados foram comparados com resultados experimentais onde pode-se observar um comportamento qualitativo próximo do esperado, sendo os valores de T_c maiores que os obtidos experimentalmente. Esse fato já fora observado antes[38] e sua ocorrência se dá pois considera-se a energia de troca J_{ij} constante ao longo do filme. De fato, o *exchange* da superfície é muito diferente do interior do material. Isto é sugerido por Rade[45] e confirmado por Mills e Maraduddin[46].

Os estudos teóricos em filmes finos têm-se limitado na sua grande maioria a sistemas Ising. Somente recentemente, Neto, de Sousa e Plascak[47] desenvolveram uma teoria de campo efetivo baseada na técnica do operador diferencial (TOD) de Honmura e Kaneyoshi

e aplicaram nos filme finos de Heisenberg clássico e quântico, no entanto, esta metodologia tem se mostrado de difícil aplicação em sistemas com maior número de sítios centrais ou com maior complexidade.

Nosso objetivo neste Capítulo é aplicar a implementação numérica da TOD, cujo desenvolvimento foi tratado no Capítulo 2 desta tese, no estudo de filmes-finos com interação entre primeiros e segundos vizinhos, modelo $J_1 - J_2$, para observar a influência de sistemas de baixa dimensionalidade nos diagramas de fases. O parâmetro que relaciona a primeira com a segunda interação (α) é introduzido acarretando o aparecimento de novos estados de ordenamento no sistema.

Como complementação ao estudo, aplicamos MFRG (*Mean Field Renormalization Group*), para tratar o sistema através de aglomerados finitos com $N = 1$ e 2 sítios centrais e obter os expoentes críticos em função do número de camadas do filme.

4.2 Criticalidade no Modelo $J_1 - J_2$

O modelo microscópico de Heisenberg tornou-se um dos mais adequados para descrever sistemas magnéticos isolantes, onde efeitos quânticos podem ser observados. Passados setenta anos desde sua elaboração, este modelo tem sido retomado na literatura com aplicação de métodos aproximativos em aglomerado finito. Consideramos para nossos estudos o Hamiltoniano anisotrópico de Heisenberg para spin $\frac{1}{2}$ descrito por

$$\mathcal{H} = - \sum_{(i,j)} J_{ij} [(1 - \Delta) (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z], \quad (4.1)$$

onde J_{ij} representa a interação de *exchange* entre pares de primeiros vizinhos (i, j) ($J > 0$ e $J < 0$ corresponde os limites ferro e antiferromagnético, respectivamente), Δ é o parâmetro de anisotropia de troca, e S_i^ν a matriz de Pauli ($\nu = x, y, z$). Se (i, j) pertence à superfície $J_{ij} = J_s$, caso contrário $J_{ij} = J$, relacionados através do parâmetro $x = \frac{J_s}{J}$. O Hamiltoniano dado pela Eq.(4.1) reduz-se a alguns casos particulares importantes: Ising ($\Delta = 1$) e Heisenberg isotrópico ($\Delta = 0$).

O conceito de frustração, introduzido inicialmente por Thoulouse[48], está associado ao conflito de ordenamento (competição) de um dado íon magnético distribuído sobre uma rede cristalina³. Do ponto de vista teórico, o fenômeno da frustração tem atraído considerável atenção pois leva o sistema a apresentar novos estados de ordenamento magnético, podendo ser aplicado no estudo da ordem vidro de spin e também supercondutividade.

Basicamente, o modelo com interações competitivas $J_1 - J_2$ é aqui representado com a primeira interação podendo ser do tipo F(-) ou AF(+) e a segunda sempre AF(+). Aumentando o valor do parâmetro α , os efeitos da segunda interação começam a influenciar na orientação dos spins da rede até que este atinja um valor crítico α_c relacionado ao estado fundamental, onde uma nova ordem se apresenta no sistema dependendo da fase inicial. Como podemos observar na Fig.(4.2), a ordem F transforma-se em SF e a ordem AF transforma-se em SAF. Para sistemas 3D, a fase SF apresenta o mesmo ordenamento disposto em planos alternados e por isso é conhecida também como fase planar, enquanto que a fase SAF apresenta o mesmo ordenamento disposto em linhas alternadas e por isso também é conhecida como fase colinear.

Rigorosamente falando, no ponto $\alpha = \alpha_c$ ⁴, temos uma transição de fase de primeira ordem e, portanto, este ponto não corresponde a um ponto crítico. Desta maneira vamos nos referir a este ponto $\alpha = \alpha_c$ como sendo apenas um ponto de coexistência entre as fase AF (ou F) e SAF (ou SF), ou ainda como um ponto de transição.

Para um sistema infinito, tem sido obtido o valor $\alpha_c = \frac{z_1}{2z_2}$ onde z_1 e z_2 denotam respectivamente o número de primeiros e segundos vizinhos. Para a rede quadrada, o diagrama de fases no plano $T - \alpha$ na região $\alpha < \alpha_c = 0.5$ (F ou AF) é bem conhecido. A temperatura crítica $t_c(\alpha)$ decresce a medida que o parâmetro de frustração cresce, se anulando em $\alpha_c = 0.5$. Estes resultados, juntamente com a análise dos expoentes críticos têm sido analisados por diversos métodos, como, por exemplo, teoria da perturbação[50], expansão em série[51], simulação de Monte Carlo[52], método da anomalia coerente (CAM)[53],

³Para uma discussão mais aprofundada de modelos de spins frustrados, consultar a tese de Doutorado de J. R. Viana[49].

⁴Região crítica de Lifshitz para $J_1 > 0$ e $J_2 < 0$.

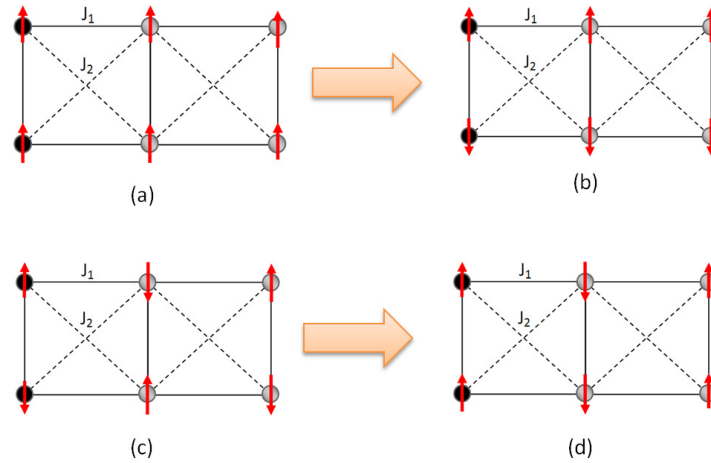


Figura 4.2: Modelo de spins frustrados $J_1 - J_2$ onde temos os ordenamentos: a) Ferromagnético (F), b) Super-Ferromagnético (SF), c) Antiferromagnético (AF), d) Super-Antiferromagnético (SAF).

grupo de renormalização[54] e o método do cluster variacional (CVM)[55].

Na Fig.(4.3) apresentamos o diagrama de fases no plano $t - \alpha$ para o modelo de Ising frustrado numa rede quadrada obtido pelos métodos CVM[55] e Monte Carlo[52]. O resultado de CVM indica que na região $0.5 < \alpha < 1.14$ temos uma transição de primeira ordem e para $\alpha > 1.14$ uma transição de segunda ordem, onde a conexão entre estas duas linhas de transição de fase é denominado de ponto tricrítico ($\alpha_t = 1.14$). Simulação de Monte de Carlo de alta precisão[56] tem previsto um ponto tricrítico no diagrama de fase com valor α_t inferior ao obtido por CVM.

Recentes simulações de MC[57] têm mostrado uma transição de segunda ordem para $\alpha_c = 1.0$, diferente do que foi obtido com CVM que prevê uma transição de primeira ordem. Usando o método da anomalia coerente (CAM), que é muito eficiente na determinação de expoentes críticos[58], é obtida uma transição de fase entre as fases SAF e P de segunda ordem para todo valor de $\alpha > 1/2$. Apesar de conhecermos razoavelmente as propriedades críticas do modelo de Ising frustrado (ou modelo de Ising $J_1 - J_2$) numa rede quadrada, alguns trabalhos recentes tem dado início a essa investigação para o caso

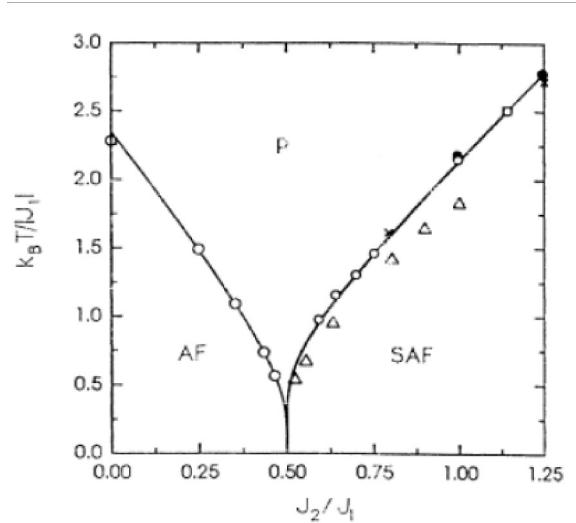


Figura 4.3: Comportamento da temperatura crítica em função do parâmetro de frustração J_2/J_1 para o modelo de Ising com interações entre primeiros (J_1) e segundos (J_2) vizinhos numa rede quadrada. A linha contínua é obtida pelo método CVM[55], pontos triangulares pelo método de Monte Carlo[52] e os pontos circulares pela expansão em série[51].

de redes tridimensionais[49].

Usando o método variacional em aglomerado finito Pelizzola[59], com a inclusão de uma interação de quatro spins (J_3), o diagrama de fase no plano $t - \alpha$ foi obtido para a rede cúbica simples. No caso $J_3 = 0$, que corresponde ao modelo de Ising $J_1 - J_2$ 3D, foi observado que para $\alpha < \alpha_c = 0.25$ a transição entre as fases F(ou AF) e P é de segunda ordem e para $\alpha > \alpha_c$ temos uma transição de primeira ordem entre as fases laminar (spins ordenados em planos alternados) e paramagnética. Foi mostrado, também, que entre as fases F (ou AF) e laminar a transição de fase é de primeira ordem. Para $J_3 \neq 0$, temos uma transição mista de primeira e segunda ordem entre as fases F (ou AF) e P, com a presença de um ponto tricrítico no diagrama de fases.

A aproximação de campo médio não é adequada para o tratamento dos diagramas de fases de modelos frustrados, haja visto que esta aproximação desconfigura a dimensão da rede no tratamento do modelo. Portanto, um método para tratar o modelo $J_1 - J_2$ deve

levar em consideração na sua metodologia a dimensão topológica da rede. Numa primeira abordagem, estaremos apenas interessados nos aspectos qualitativos dos diagramas de fases, com isto, usaremos a técnica do operador diferencial (TOD) desenvolvida por Honmura e Kaneyoshi, e que será aprimorada nesta tese para aglomerados finitos. Esta técnica, aliada com algum desacoplamento nas funções de correlações, tem se mostrada útil para vários outros sistemas, sendo um formalismo bastante eficiente nas análises qualitativas dos diagramas de fases e propriedades termodinâmicas.

Após a descoberta dos novos compostos supercondutores de altas temperaturas formados por planos de CuO_2 , por Bednorz e Muller[60], tem sido estimulante estudar, do ponto de vista teórico, as propriedades termodinâmicas e a criticalidade do modelo de Heisenberg quântico de spin 1/2 em baixa dimensionalidade[61]. Segundo o teorema de Mermin e Wagner[62], este modelo não apresenta ordem de longo-alcance em $t > 0$ para redes bidimensionais, o que significa uma temperatura crítica nula ($t_c = 0$)⁵. A presença da anisotropia induz uma ordem magnética no modelo, apresentando assim uma transição de fase em $t_c \neq 0$. Por exemplo, seja Δ o parâmetro de anisotropia na interação de troca, de tal forma que $\Delta = 0$ e 1, correspondem os limites dos casos Heisenberg isotrópico e Ising 2D, respectivamente. No limite $\Delta \rightarrow 0_+$, a temperatura crítica t_c apresenta um comportamento assintótico do tipo $t_c \approx A/\log(1/\Delta)$ (onde A é uma constante dependente da aproximação usada no tratamento do modelo). No caso antiferromagnético, a temperatura de Néel t_N é menor que t_c , onde tem sido observado um comportamento reentrante ao redor de $\Delta = \Delta_c$, com $t_N \approx B/\log(1/(\Delta_c - \Delta))$, quando $\Delta \rightarrow \Delta_c$.

Estes resultados para t_c e t_N foram previstos recentemente usando diversas métodos de grupo de renormalização[63]. A presença da ordem antiferromagnética no composto isolante La_2CuO_4 é atribuída à pequena interação entre os planos de CuO_2 , onde cada íon de cobre Cu^{+2} tem um spin 1/2, e pode ser descrito teoricamente através do modelo de Heisenberg quase-2D. Várias propriedades termodinâmicas do composto La_2CuO_4

⁵Em temperatura nula ($t = 0$), o modelo de Heisenberg 2D apresenta ordem de longo alcance, onde para o caso ferromagnético temos que $m(T = 0) = S$ (spin), e devido as flutuações quânticas o caso antiferromagnético apresenta o parâmetro de ordem $m(T = 0) < S$.

foram descritas através deste modelo quase-2D[64].

O estudo de filmes-finos magnéticos através de métodos numéricos eficientes para a análise de seu comportamento termodinâmico[40, 42] motivou-nos a aplicar a implementação numérica da TOD na forma exponencial no estudo de filmes-finos no modelo $J_1 - J_2$ para a análise de sistemas de baixa dimensionalidade. O estudo do modelo $J_1 - J_2$ tem sido tratado recentemente usando teoria de campo efetivo[65], onde excelentes resultados foram encontrados na descrição do diagrama de fases $t - \alpha$. Este estudo tem sido feito com base na introdução de um funcional para a energia livre⁶ do sistema, obtida pelo processo de minimização de Landau para uma melhor caracterização do tipo de transição de fase e que aqui será também empregada.

Modelamos numericamente a estrutura de um filme-fino com $L = \ell$ camadas aplicando a TOD em uma estrutura tridimensional de uma rede de spins, fazendo com que a magnetização de cada camada seja considerada separadamente, conforme mostra a Fig.(4.4), onde denominamos de a a camada central, que contém os spins do aglomerado, b e c para as camadas adjacentes.

A equação de estado obtida para esta estrutura, terá a forma de uma expansão em série de potências em termos da magnetização da camada central m_a na forma

$$m_a = \sum_i A_i m_a^i, \quad (4.2)$$

onde os coeficientes A_i contém todas as informações do sistema com relação aos parâmetros de variação do modelo e as magnetizações das camadas adjacentes, ou seja, $A_i = A_i(m_b, m_c, \alpha, x, t)$. Associada à Eq.(4.2), temos a equação para a energia livre dada por

$$\Phi(m_a, m_b, m_c, x, \alpha, t) = \lambda_1(\alpha, t) + \lambda_2(\alpha, t) \left[\frac{1}{2} m_a^2 - \sum_{i=0}^n \left(\frac{A_i}{i+1} \right) m_a^{(i+1)} \right], \quad (4.3)$$

⁶Correspondendo à primeira proposta de energia livre, tratada nesta Tese no Capítulo 3, dedicado ao estudo do modelo de Ising com campo aleatório.

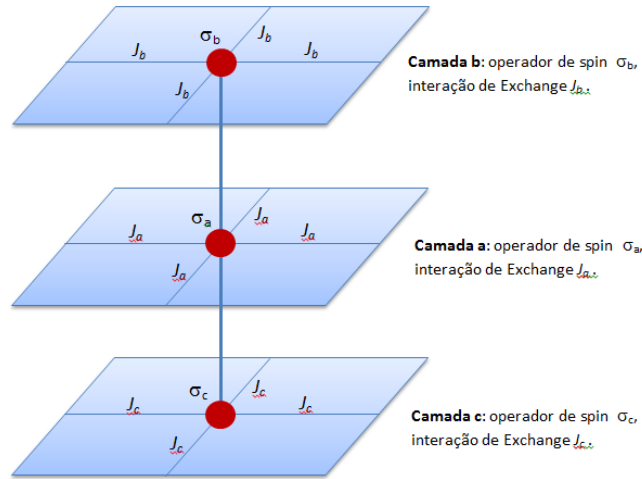


Figura 4.4: Esquema de uma estrutura tridimensional representando uma rede de spins onde, para realizar a construção de um sistema de camadas (filme-fino), diferenciamos a magnetização em cada camada.

cuja dependência com o tipo de ordenamento está contido inteiramente na estrutura dos coeficientes A_j .

Para descrever as linhas de transição que separam as fases presentes no diagrama $t - \alpha$, fazemos uso do método da construção de Maxwell da igualdade da energia livre dada pela Eq.(4.3), ou seja:

$$\Phi_{F/AF} = \Phi_{SF/SAF}. \quad (4.4)$$

As equações de estado, Eq.(4.2), e energia livre, Eq.(4.4), para cada camada do filme, serão construídas a partir da aplicação de condições de contorno adequadas a cada uma delas para a montagem do sistema de equações a ser resolvido. Em geral, temos para o interior do filme a igualdade nas interações, ou seja, $J_a = J_b = J_c = J$. No entanto, ao aplicarmos essa estrutura na superfície, algumas modificações são necessárias tais como: camada b (ou c) torna-se inexistente, $J_a = J_s$ (J_{1s} e J_{2s}) para podermos avaliar o efeito da superfície nas propriedades críticas do sistema sendo que $J_{1s} = xJ_1$ e $J_{2s} = xJ_2$ onde o

parâmetro x estabelece a relação da superfície com o *bulk* (restringiremos ao caso $x = 1.0$ nesta tese). Assim, faremos aqui $J_a = J_s$ para as interações contidas na camada a .

Comparando a energia interna do estado fundamental AF (ou F) com a energia da fase SAF (ou SF), $U_{F/AF} = U_{SF/SAF}$, para o modelo de Ising, mostramos que existe um valor crítico α_c que varia com o número L de camadas do filme dado por:

$$\alpha_c = \frac{2x + L - 2}{4x + 4L - 6}. \quad (4.5)$$

A análise da criticalidade do sistema será feita aplicando a aproximação de aglomerados finitos em campo efetivo (EFT-N). Para o Hamiltoniano de Heisenberg isotrópico, $\Delta = 0$ na Eq.(4.1), tratamos a rede cristalina através de um aglomerado com $N = 2$ spins (EFT-2). Já no modelo de Ising, crescemos o aglomerado até $N = 4$, com o objetivo de melhorar os resultados encontrados no caso bidimensional (filme com $L = 1$ camada). Devido a simetria existente no Hamiltoniano de Ising entre as fases F/SF e AF/SAF, faremos o desenvolvimento das equações para $N = 4$ somente nos casos F e SF.

4.2.1 Estado Ferromagnético

Faremos a demonstração do cálculo para a determinação da equação de estado para o caso F, cujo procedimento servirá de base para os outros estados, onde apresentaremos somente o resultado final para a equação de estado. Isto se faz necessário dado o tamanho excessivamente longo de cada procedimento que, por ser repetitivo, torna-se desnecessário sua exposição.

Caso $N = 2$

O Hamiltoniano de Heisenberg para $N = 2$ ferromagnético, mostrado na Fig.(4.5), na aproximação axial, é dado por:

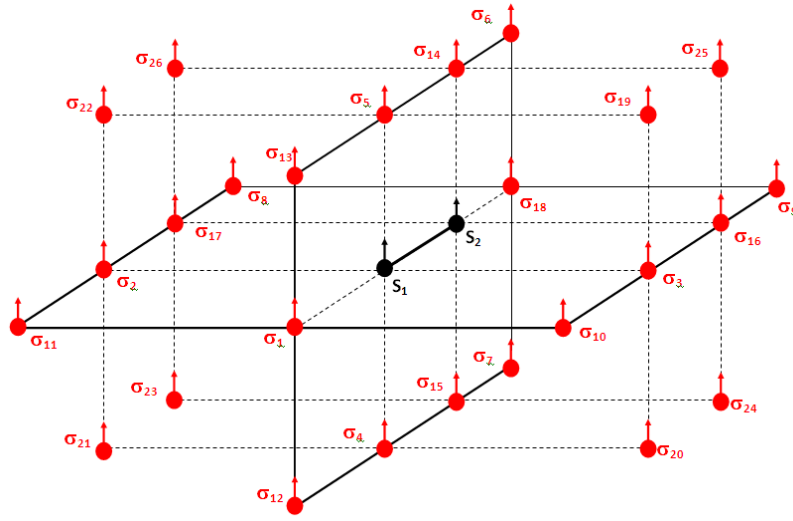


Figura 4.5: Estado de ordenamento Ferromagnético considerando interações de primeiros e segundos vizinhos.

$$\mathcal{H}_2^F = -J [(1 - \Delta) (S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y) + S_1^z S_2^z] + J \sum_i \sigma_i^z S_1^z + J \sum_j \sigma_j^z S_2^z, \quad (4.6)$$

Para fins de simplificação na notação matemática, utilizaremos o Hamiltoniano reduzido $H_2^F = -\beta \mathcal{H}_2^F$, ficando

$$H_2^F = K [(1 - \Delta) (S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y) + S_1^z S_2^z] + C_1 S_1^z + C_2 S_2^z. \quad (4.7)$$

O termo C_n contém todas as interações entre primeiros e segundos vizinhos dos sítios do aglomerado que, para o caso F, é dado por

$$C_n = C_{x_n} - C_{y_n}, \quad (4.8)$$

onde $n = 1, 2$ e as interações entre primeiros e segundos vizinhos sendo representadas pelos índices x e y respectivamente.

Simulamos numericamente a estrutura de um filme-fino magnético, distinguindo a magnetização de cada camada. Isso é feito inicialmente tratando os operadores de spins com os índices que os identificam em cada camada na definição de C_n , dada pela Eq.(4.8). De acordo com a Fig.(4.5), obtemos as seguintes relações

$$\begin{aligned}
C_{x_1} &= K_s \sum_{i=1}^3 \sigma_{ia} + K\sigma_{5b} + K\sigma_{4c}, \\
C_{y_1} &= \alpha K_s \sum_{i=10,11,16,17} \sigma_{ia} + \alpha K \sum_{i=13,14,19,22} \sigma_{ib} + \alpha K \sum_{i=12,15,20,21} \sigma_{ic}, \\
C_{x_2} &= K_s \sum_{i=16}^{18} \sigma_{ia} + K\sigma_{14b} + K\sigma_{15c}, \\
C_{y_2} &= \alpha K_s \sum_{i=2,3,8,9} \sigma_{ia} + \alpha K \sum_{i=5,6,25,26} \sigma_{ib} + \alpha K \sum_{i=4,7,23,24} \sigma_{ic}.
\end{aligned}$$

O operador de spin de cada camada está representado através dos índices: a , com operador σ_a , para a camada central, onde está localizado o aglomerado e b e c , com operadores σ_b e σ_c , para as duas camadas adjacentes.

A função de partição Z_2^F é definida pela equação

$$Z_2^F = Tr \exp(H_2^F), \quad (4.9)$$

fundamental para o estudo do comportamento termodinâmico do sistema, é obtida ao aplicarmos o Hamiltoniano reduzido, dado pela Eq.(4.7) na base ortogonal

$$\Lambda = \{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\}.$$

Através desse procedimento, obtemos para a função de partição a expressão simplificada:

$$Z_2^F = 2 [\exp(K) \cosh(C_1 + C_2) + \exp(-K) \cosh(\Gamma)], \quad (4.10)$$

onde

$$\Gamma = \sqrt{(C_1 - C_2)^2 + 4K^2(1 - \Delta)^2}.$$

A magnetização do sistema ferromagnético para $N = 2$ spins, m_a^{F2} , é dada por

$$m_a^{F2} = \frac{1}{2} \langle S_1^z + S_2^z \rangle, \quad (4.11)$$

o que, em função da magnetização de apenas um sítio, e trabalhando diretamente com a função de partição fica:

$$m_a^{F2} = \left\langle \frac{\partial}{\partial C_1} \ln (Z_2^F) \right\rangle. \quad (4.12)$$

Aplicando a expressão dada pela Eq.(4.10) na Eq.(4.12), obtemos:

$$m_a^{F2} = \left\langle \frac{\sinh(C_1 + C_2) + \exp(-2K) \sinh(\Gamma) \frac{(C_1 - C_2)}{\Gamma}}{\cosh(C_1 + C_2) + \exp(-2K) \cosh(\Gamma)} \right\rangle. \quad (4.13)$$

Para aplicarmos a TOD, utilizamos sua forma generalizada para o caso de quatro tipos de interações, dada por

$$\exp(\vec{a} \cdot \vec{D}) F(\vec{r}) = F(\vec{r} + \vec{a}), \quad (4.14)$$

onde $\vec{r} = (x_1, y_1, x_2, y_2)$, $\vec{a} = (a_1, a_2, a_3, a_4)$ e $\vec{D} = (D_{x_1}, D_{y_1}, D_{x_2}, D_{y_2})$, com $D_{\mu_i} = \frac{\partial}{\partial \mu_i}$.

Em termos dessa notação, reescrevemos a Eq.(4.13) como:

$$m_a^{F2} = \left\langle \exp \left[\sum_{n=1}^2 C_{x_n} D_{x_n} + C_{y_n} D_{y_n} \right] \right\rangle F(\vec{r}) |_{\vec{r}=\vec{0}}, \quad (4.15)$$

onde

$$F(\vec{r}) = \frac{\sinh(r_1 + r_2) + \exp(-2K) \sinh(\Gamma) \frac{(r_1 - r_2)}{\Gamma}}{\cosh(r_1 + r_2) + \exp(-2K) \cosh(\Gamma)},$$

e

$$r_1 = x_1 - y_1 \quad \text{e} \quad r_2 = x_2 - y_2.$$

Transformando a Eq.(4.15) em um produto de exponenciais fica:

$$\begin{aligned}
m_a^{F^2} = & \left\langle \left[\prod_{i=1}^3 \exp(K_s \sigma_{ia} D_{x_1}) \right] \left[\prod_{i=10,11,16,17} \exp(\alpha K_s \sigma_{ia} D_{y_1}) \right] \right. \\
& \left[\prod_{i=13,14,19,22} \exp(\alpha K \sigma_{ib} D_{y_1}) \right] \left[\prod_{i=12,15,20,21} \exp(\alpha K \sigma_{ic} D_{y_1}) \right] \\
& \left[\prod_{i=16}^{18} \exp(K_s \sigma_{ia} D_{x_2}) \right] \left[\prod_{i=2,3,8,9} \exp(\alpha K_s \sigma_{ia} D_{y_2}) \right] \\
& \left[\prod_{i=5,6,25,26} \exp(\alpha K \sigma_{ib} D_{y_2}) \right] \left[\prod_{i=4,7,23,24} \exp(\alpha K \sigma_{ic} D_{y_2}) \right] \\
& \exp(K \sigma_{5b} D_{x_1}) \exp(K \sigma_{4c} D_{x_1}) \\
& \exp(K \sigma_{14b} D_{x_2}) \exp(K \sigma_{15c} D_{x_2}) \rangle F(\vec{r}) |_{\vec{r}=\vec{0}} .
\end{aligned} \tag{4.16}$$

Como feito anteriormente para o caso do campo aleatório, aplicamos na Eq.(4.16) a identidade de van der Waerden para spin $\frac{1}{2}$ dada por:

$$\exp(a \sigma_i^z) = \cosh(a) + \sigma_i^z \sinh(a), \tag{4.17}$$

onde σ_i^z é a componente z do operador de spin para o sítio i , que pode assumir os valores ± 1 , e as relações trigonométricas

$$\cosh(\alpha) = \frac{e^\alpha + e^{-\alpha}}{2} \quad \text{e} \quad \sinh(\alpha) = \frac{e^\alpha - e^{-\alpha}}{2},$$

para obtermos a TOD na forma exponencial. Feito isso, encontramos

$$\begin{aligned}
m_a^{F2} = & \left\langle \prod_{i=1}^3 (a_{ia} \exp(K_s D_{x_1}) + b_{ia} \exp(-K_s D_{x_1})) \right. \\
& \prod_{i=10,11,16,17} (a_{ia} \exp(\alpha K_s D_{y_1}) + b_{ia} \exp(-\alpha K_s D_{y_1})) \\
& \prod_{i=13,14,19,22} (a_{ib} \exp(\alpha K D_{y_1}) + b_{ib} \exp(-\alpha K D_{y_1})) \\
& \prod_{i=12,15,20,21} (a_{ic} \exp(\alpha K D_{y_1}) + b_{ic} \exp(-\alpha K D_{y_1})) \\
& \prod_{i=16}^{18} (a_{ia} \exp(K_s D_{x_2}) + b_{ia} \exp(-K_s D_{x_2})) \\
& \prod_{i=2,3,8,9} (a_{ia} \exp(\alpha K_s D_{y_2}) + b_{ia} \exp(-\alpha K_s D_{y_2})) \\
& \prod_{i=5,6,25,26} (a_{ib} \exp(\alpha K D_{y_2}) + b_{ib} \exp(-\alpha K D_{y_2})) \\
& \prod_{i=4,7,23,24} (a_{ic} \exp(\alpha K D_{y_2}) + b_{ic} \exp(-\alpha K D_{y_2})) [a_{5b} \exp(K D_{x_1}) + b_{5b} \exp(-K D_{x_1})] \\
& [a_{4c} \exp(K D_{x_1}) + b_{4c} \exp(-K D_{x_1})] [a_{14b} \exp(K D_{x_2}) + b_{14b} \exp(-K D_{x_2})] \\
& \left. [a_{15c} \exp(K D_{x_2}) + b_{15c} \exp(-K D_{x_2})] \right\rangle F(\vec{r}) \Big|_{\vec{r}=\vec{0}} \quad (4.18)
\end{aligned}$$

sendo $a_{i\nu} = \frac{1+\sigma_{i\nu}}{2}$ e $b = \frac{1-\sigma_{i\nu}}{2}$, onde $\sigma_{i\nu}$ indica o i -ésimo operador de spin localizado nas camadas $\nu = a, b$ ou c .

Ao desenvolver os produtórios na expressão dada pela Eq.(4.18) e aplicar a média térmica, surgem termos da forma $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$, $\langle \sigma_i \sigma_j \sigma_K \rangle$, ..., onde os spins σ_γ estão acoplados. Adotamos aqui o mesmo processo de desacoplamento tipo RPA, já tratado anteriormente:

$$\langle \sigma_i \sigma_j \sigma_k \rangle \simeq \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \langle \sigma_k \rangle. \quad (4.19)$$

Tomando a condição de contorno $\langle \sigma_{i\nu} \rangle = m_\nu$, $\forall i$, o resultado será uma expressão do tipo $m_a^{2F} = f(m_a, m_b, m_c, x, \alpha, t)$.

Aqui devemos tomar cuidado ao desacoplar a expressão para m_a^{2F} na aplicação da

média térmica pois, ao considerarmos interações entre primeiros e segundos vizinhos, temos alguns sítios que são simultaneamente primeiros vizinhos ao sítio central S_1 e segundos vizinhos ao sítio S_2 (e vice-versa). Desta maneira, no desenvolvimento dos produtórios, aparecem termos do tipo σ_i^2 o que, em acordo com as propriedades da matriz de Pauli para spin $\frac{1}{2}$ corresponde à matriz identidade, $\sigma_i^2 = \mathbf{1}$. Matematicamente, obtemos a seguinte relação para este caso:

$$\prod_{i=k}^n (a_i e^{\phi_1} + b_i e^{-\phi_1}) \prod_{i=k}^n (a_i e^{\phi_2} + b_i e^{-\phi_2}) = \prod_{i=k}^n [a_i e^{(\phi_1+\phi_2)} + b_i e^{-(\phi_1+\phi_2)}]. \quad (4.20)$$

A aplicação da média nos leva às seguintes relações para os operadores de spin:

$$\begin{aligned} \langle a_{i\nu} \rangle &= a_\nu = \left\langle \frac{1 + \sigma_\nu}{2} \right\rangle = \frac{1 + m_\nu}{2}, \\ \langle b_{i\nu} \rangle &= b_\nu = \left\langle \frac{1 - \sigma_\nu}{2} \right\rangle = \frac{1 - m_\nu}{2}. \end{aligned}$$

Fazendo todas essas considerações, obtemos a expressão para a magnetização m_a^{F2} com os termos agrupados por camadas:

$$\begin{aligned}
m_a^{F2} = & \left[\sum_{p_1=0}^2 \binom{n_1}{p_1} (a_a^{(n_1-p_1)} b_a^{p_1} \exp [(K_s D_{x_1} + \alpha K_s D_{y_2}) (n_1 - 2p_1)]) \right. \\
& \sum_{p_2=0}^2 \binom{n_2}{p_2} (a_a^{(n_2-p_2)} b_a^{p_2} \exp [(K_s D_{x_2} + \alpha K_s D_{y_1}) (n_2 - 2p_2)]) \\
& \sum_{p_3=0}^1 \binom{n_3}{p_3} (a_a^{(n_3-p_3)} b_a^{p_3} \exp [K_s D_{x_1} (n_3 - 2p_3)]) \\
& \sum_{p_4=0}^2 \binom{n_4}{p_4} (a_a^{(n_4-p_4)} b_a^{p_4} \exp [\alpha K_s D_{y_1} (n_4 - 2p_4)]) \\
& \sum_{p_5=0}^1 \binom{n_5}{p_5} (a_a^{(n_5-p_5)} b_a^{p_5} \exp [K_s D_{x_2} (n_5 - 2p_5)]) \\
& \sum_{p_6=0}^2 \binom{n_6}{p_6} (a_a^{(n_6-p_6)} b_a^{p_6} \exp [\alpha K_s D_{y_2} (n_6 - 2p_6)]) \\
& \sum_{p_7=0}^1 \binom{n_7}{p_7} (a_b^{(n_7-p_7)} b_b^{p_7} \exp [(K D_{x_1} + \alpha K D_{y_2}) (n_7 - 2p_7)]) \\
& \sum_{p_8=0}^1 \binom{n_8}{p_8} (a_b^{(n_8-p_8)} b_b^{p_8} \exp [(K D_{x_2} + \alpha K D_{y_1}) (n_8 - 2p_8)]) \\
& \sum_{p_9=0}^3 \binom{n_9}{p_9} (a_b^{(n_9-p_9)} b_b^{p_9} \exp [\alpha K D_{y_1} (n_9 - 2p_9)]) \\
& \sum_{p_{10}=0}^3 \binom{n_{10}}{p_{10}} (a_b^{(n_{10}-p_{10})} b_b^{p_{10}} \exp [\alpha K D_{y_2} (n_{10} - 2p_{10})]) \\
& \sum_{p_{11}=0}^1 \binom{n_{11}}{p_{11}} (a_c^{(n_{11}-p_{11})} b_c^{p_{11}} \exp [(K D_{x_1} + \alpha K D_{y_2}) (n_{11} - 2p_{11})]) \\
& \sum_{p_{12}=0}^1 \binom{n_{12}}{p_{12}} (a_c^{(n_{12}-p_{12})} b_c^{p_{12}} \exp [(K D_{x_2} + \alpha K D_{y_1}) (n_{12} - 2p_{12})]) \\
& \sum_{p_{13}=0}^3 \binom{n_{13}}{p_{13}} (a_c^{(n_{13}-p_{13})} b_c^{p_{13}} \exp [\alpha K D_{y_1} (n_{13} - 2p_{13})]) \\
& \left. \sum_{p_{14}=0}^3 \binom{n_{14}}{p_{14}} (a_c^{(n_{14}-p_{14})} b_c^{p_{14}} \exp [\alpha K D_{y_2} (n_{14} - 2p_{14})]) \right] F(\vec{r})|_{\vec{r}=\vec{0}} \cdot \quad (4.21)
\end{aligned}$$

Obtemos uma expressão mais prática para implementação numérica, a partir do procedimento de agrupamento de cada um dos somatórios presentes na Eq.(4.21), resultando em

$$\begin{aligned}
m_a^{F2} = & \sum_{p_1=0}^2 \sum_{p_2=0}^2 \sum_{p_3=0}^1 \sum_{p_4=0}^2 \sum_{p_5=0}^1 \sum_{p_6=0}^2 \sum_{p_7=0}^1 \sum_{p_8=0}^1 \sum_{p_9=0}^3 \sum_{p_{10}=0}^3 \sum_{p_{11}=0}^1 \sum_{p_{12}=0}^1 \sum_{p_{13}=0}^3 \sum_{p_{14}=0}^3 \left[\prod_{i=1}^{14} \binom{n_i}{p_i} \right] \\
& a_a^{\left(\sum_{i=1}^6 n_i - \sum_{i=1}^6 p_i \right)} b_a^{\left(\sum_{i=1}^6 p_i \right)} a_b^{\left(\sum_{i=7}^{10} n_i - \sum_{i=7}^{10} p_i \right)} b_b^{\left(\sum_{i=7}^{10} p_i \right)} a_c^{\left(\sum_{i=11}^{14} n_i - \sum_{i=11}^{14} p_i \right)} b_c^{\left(\sum_{i=11}^{14} p_i \right)} \\
& \exp \left[(K_s D_{x_1} + \alpha K_s D_{y_2}) (n_1 - 2p_1) + (K_s D_{x_2} + \alpha K_s D_{y_1}) (n_2 - 2p_2) + \right. \\
& K_s D_{x_1} (n_3 - 2p_3) + \alpha K_s D_{y_1} (n_4 - 2p_4) + K_s D_{x_2} (n_5 - 2p_5) + \alpha K_s D_{y_2} \\
& (n_6 - 2p_6) + (K D_{x_1} + \alpha K D_{y_2}) (n_7 - 2p_7) + (K D_{x_2} + \alpha K D_{y_1}) (n_8 - 2p_8) + \\
& \alpha K D_{y_1} (n_9 - 2p_9) + \alpha K D_{y_2} (n_{10} - 2p_{10}) + (K D_{x_1} + \alpha K D_{y_2}) (n_{11} - 2p_{11}) + \\
& (K D_{x_2} + \alpha K D_{y_1}) (n_{12} - 2p_{12}) + \alpha K D_{y_1} (n_{13} - 2p_{13}) + \\
& \left. \alpha K D_{y_2} (n_{14} - 2p_{14}) \right] F(\vec{r}) \Big|_{\vec{r}=\vec{0}}. \tag{4.22}
\end{aligned}$$

O desenvolvimento da Eq.(4.22) leva a uma expansão na forma de uma série de potências dada por:

$$m_a^{F2} = \sum_i A_i m_a^i, \tag{4.23}$$

sendo que, na implementação numérica, devemos levar em conta que o processo de coleta de coeficientes ocorre normalmente para a magnetização m_a enquanto que para as magnetizações m_b e m_c , devemos introduzir no processo de construção, os termos associados ao produto $a_a^m b_a^n \cdot a_b^o b_b^p \cdot a_c^q b_c^r$, com os valores adequados para cada grupo de expoentes m, n, o, p, q e r .

Caso $N = 4$

Analisamos agora o caso de um aglomerado com $N = 4$ spins (EFT-4), mostrado na Fig.(4.6). O Hamiltoniano reduzido $H_4^F = -\beta\mathcal{H}_4^F$ que descreve este modelo é dado por:

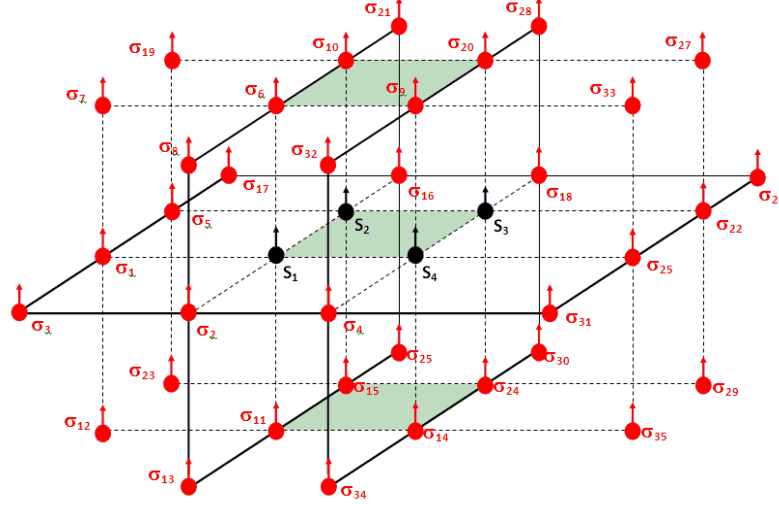


Figura 4.6: Arranjo Ferromagnético para um aglomerado com $N = 4$ spins, com interações de primeiros e segundos vizinhos.

$$H_4^F = K (S_1^z S_2^z + S_2^z S_3^z + S_3^z S_4^z + S_4^z S_1^z) - K\alpha (S_1^z S_3^z + S_2^z S_4^z) + \quad (4.24)$$

$$C_1 S_1^z + C_2 S_2^z + C_3 S_3^z + C_4 S_4^z,$$

Seguindo a notação apresentada para o caso $N = 2$, temos o coeficiente C_n dado por

$$C_n = C_{x_n} - C_{y_n},$$

onde agora

$$\begin{aligned}
C_{x_1} &= K_s \sum_{i=1}^2 \sigma_{ia} + K\sigma_{6b} + K\sigma_{11c}, \\
C_{y_1} &= \alpha K_s \sum_{i=3}^5 \sigma_{ia} + \alpha K \sum_{i=7}^{10} \sigma_{ib} + \alpha K \sum_{i=12}^{15} \sigma_{ic}, \\
C_{x_2} &= K_s \sum_{i=5,16} \sigma_{ia} + K\sigma_{10b} + K\sigma_{15c}, \\
C_{y_2} &= \alpha K_s \sum_{i=1,17,18} \sigma_{ia} + \alpha K \sum_{i=6,21,19,20} \sigma_{ib} + \alpha K \sum_{i=11,23,24,25} \sigma_{ic}, \\
C_{x_3} &= K_s \sum_{i=18,22} \sigma_{ia} + K\sigma_{20b} + K\sigma_{24c}, \\
C_{y_3} &= \alpha K_s \sum_{i=16,25,26} \sigma_{ia} + \alpha K \sum_{i=9,10,27,28} \sigma_{ib} + \alpha K \sum_{i=14,15,29,30} \sigma_{ic}, \\
C_{x_4} &= K_s \sum_{i=4,25} \sigma_{ia} + K\sigma_{9b} + K\sigma_{14c}, \\
C_{y_4} &= \alpha K_s \sum_{i=2,22,31} \sigma_{ia} + \alpha K \sum_{i=6,20,32,33} \sigma_{ib} + \alpha K \sum_{i=11,24,34,35} \sigma_{ic},
\end{aligned}$$

Obtemos uma matriz já diagonalizada para este Hamiltoniano quando aplicamos na base

$$\Lambda = \{|+++ \rangle, |+++- \rangle, \dots, |--+- \rangle, |---- \rangle\}$$

Aplicando a definição de média estatística para a magnetização no caso EFT-4, $m_a^{F_4}$, obtemos

$$m_a^{F_4} = \langle F(C_1, C_2, C_3, C_4) \rangle, \quad (4.25)$$

onde

$$F(C_1, C_2, C_3, C_4) = \frac{F_N}{F_D},$$

e

$$\begin{aligned}
F_N = & \exp(4K - 2\alpha K) \sinh(C_1 + C_2 + C_3 + C_4) + \\
& \exp(2\alpha K) [\sinh(C_1 + C_2 - C_3 - C_4) + \sinh(C_1 - C_2 - C_3 + C_4)] + \\
& \sinh(C_1 + C_2 + C_3 - C_4) + \sinh(C_1 + C_2 - C_3 + C_4) + \\
& \sinh(C_1 - C_2 + C_3 + C_4) - \sinh(-C_1 + C_2 + C_3 + C_4) + \\
& \exp(-4K - 2\alpha K) \sinh(C_1 - C_2 + C_3 - C_4).
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
F_D = & \exp(4K - 2\alpha K) \cosh(C_1 + C_2 + C_3 + C_4) + \\
& \exp(2\alpha K) [\cosh(C_1 + C_2 - C_3 - C_4) + \cosh(C_1 - C_2 - C_3 + C_4)] + \\
& \cosh(C_1 + C_2 + C_3 - C_4) + \cosh(C_1 + C_2 - C_3 + C_4) + \\
& \cosh(C_1 - C_2 + C_3 + C_4) + \cosh(-C_1 + C_2 + C_3 + C_4) + \\
& \exp(-4K - 2\alpha K) \cosh(C_1 - C_2 + C_3 - C_4).
\end{aligned}$$

Aplicando a notação da TOD para a Eq.(4.25) , e juntamente com as relações de van der Waerden e cinemática de spin, observando a presença de operadores de spin sendo comuns para até 3 sítios centrais, obtemos a expressão final para a magnetização

$$\begin{aligned}
m_a^{F4} = & \prod_{i=1}^{16} \sum_{p_i=0}^1 \prod_{j=17}^{20} \sum_{p_j=0}^2 \prod_{k=21}^{24} \sum_{p_k=0}^1 \prod_{l=25}^{28} \sum_{p_l=0}^2 \left[\prod_{i=1}^{28} \binom{n_i}{p_i} \right] a_a \binom{\sum_{i=1}^{12} n_i - \sum_{i=1}^{12} p_i}{\sum_{i=1}^{12} p_i} b_a \binom{\sum_{i=1}^{12} p_i}{\sum_{i=1}^{12} p_i} \\
& a_b \binom{\sum_{i=13}^{20} n_i - \sum_{i=13}^{20} p_i}{\sum_{i=13}^{20} p_i} b_b \binom{\sum_{i=13}^{20} p_i}{\sum_{i=13}^{20} p_i} a_c \binom{\sum_{i=21}^{28} n_i - \sum_{i=21}^{28} p_i}{\sum_{i=21}^{28} p_i} b_c \binom{\sum_{i=21}^{28} p_i}{\sum_{i=21}^{28} p_i} \\
& \exp [(K_s D_{x_1} + \alpha K_s D_{y_2}) (n_1 - 2p_1) + (K_s D_{x_4} + \alpha K_s D_{y_1}) (n_2 - 2p_2) + \\
& (K_s D_{x_1} + \alpha K_s D_{y_4}) (n_3 - 2p_3) + (K_s D_{x_2} + \alpha K_s D_{y_1}) (n_4 - 2p_4) + \\
& (K_s D_{x_3} + \alpha K_s D_{y_2}) (n_5 - 2p_5) + (K_s D_{x_2} + \alpha K_s D_{y_3}) (n_6 - 2p_6) + \\
& (K_s D_{x_3} + \alpha K_s D_{y_4}) (n_7 - 2p_7) + (K_s D_{x_4} + \alpha K_s D_{y_3}) (n_8 - 2p_8) + \\
& \alpha K_s D_{y_2} (n_9 - 2p_9) + \alpha K_s D_{y_1} (n_{10} - 2p_{10}) + \alpha K_s D_{y_4} (n_{11} - 2p_{11}) + \\
& \alpha K_s D_{y_3} (n_{12} - 2p_{12}) + (K D_{x_1} + \alpha K D_{y_2} + \alpha K D_{y_4}) (n_{13} - 2p_{13}) + \\
& (K D_{x_4} + \alpha K D_{y_1} + \alpha K D_{y_3}) (n_{14} - 2p_{14}) + (K D_{x_3} + \alpha K D_{y_2} + \alpha K D_{y_4}) \\
& (n_{15} - 2p_{15}) + (K D_{x_2} + \alpha K D_{y_1} + \alpha K D_{y_3}) (n_{16} - 2p_{16}) + \alpha K D_{y_2} (n_{17} - \\
& 2p_{17}) + \alpha K D_{y_1} (n_{18} - 2p_{18}) + \alpha K D_{y_4} (n_{19} - 2p_{19}) + \alpha K D_{y_3} (n_{20} - \\
& 2p_{20}) + (K D_{x_1} + \alpha K D_{y_2} + \alpha K D_{y_4}) (n_{21} - 2p_{21}) + (K D_{x_4} + \alpha K D_{y_1} + \\
& \alpha K D_{y_3}) (n_{22} - 2p_{22}) + (K D_{x_3} + \alpha K D_{y_2} + \alpha K D_{y_4}) (n_{23} - 2p_{23}) + \\
& (K D_{x_2} + \alpha K D_{y_3} + \alpha K D_{y_1}) (n_{24} - 2p_{24}) + \alpha K D_{y_2} (n_{25} - 2p_{25}) + \\
& \alpha K D_{y_1} (n_{26} - 2p_{26}) + \alpha K D_{y_4} (n_{27} - 2p_{27}) + \\
& \alpha K D_{y_3} (n_{28} - 2p_{28})] F(\vec{r}) |_{\vec{r}=\vec{0}}. \tag{4.26}
\end{aligned}$$

4.2.2 Estado Superferromagnético

O estado superferromagnético - SF, é originado a partir do estado F, pois é a configuração mais estável (menor energia) a partir de certos valores do parâmetro α , como poderemos observar nos diagramas de fases. Temos agora a presença de subredes na

estrutura, aqui denominadas A (para spin \uparrow) e B (para spin \downarrow) o que aumenta ainda mais a complexidade da equação de estado devido a diferenciação dos termos.

Caso $N = 2$

O Hamiltoniano que descreve este estado é dado pela Eq.(4.7) para o estado F mudando apenas a orientação dos spins na rede para a construção da fase planar, conforme mostrado na Fig.(4.7).

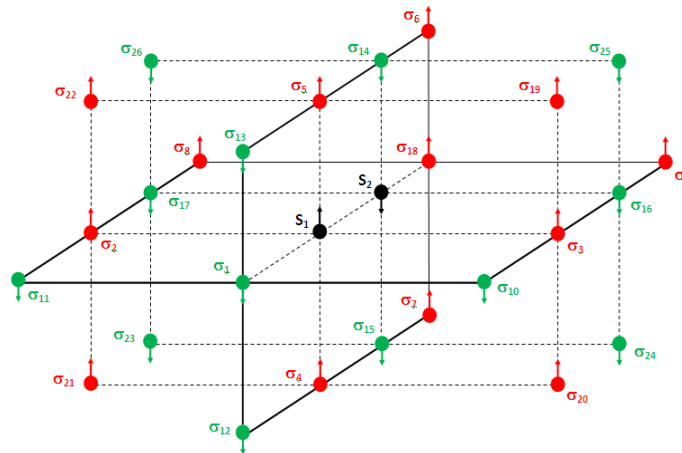


Figura 4.7: Arranjo de spins na fase planar, que caracteriza o arranjo SF. Aqui consideramos $N = 2$ sítios centrais.

A presença de sub-redes A e B , faz com que tenhamos algumas modificações na estrutura dos coeficientes C_n . Assim, de acordo com a Fig.(4.7) temos:

$$\begin{aligned}
C_{x_1} &= K_s \sigma_{1a}^B + K_s \sum_{i=2}^3 \sigma_{ia}^A + K \sigma_{5b}^A + K \sigma_{4c}^A, \\
C_{y_1} &= \alpha K_s \sum_{i=10,11,16,17} \sigma_{ia}^B + \alpha K \sum_{i=13,14} \sigma_{ib}^B + \alpha K \sum_{i=19,22} \sigma_{ib}^A + \alpha K \sum_{i=12,15} \sigma_{ic}^B + \alpha K \sum_{i=20,21} \sigma_{ic}^A, \\
C_{x_2} &= K_s \sigma_{18a}^A + K_s \sum_{i=16}^{17} \sigma_{ia}^B + K \sigma_{14b}^B + K \sigma_{15c}^B, \\
C_{y_2} &= \alpha K_s \sum_{i=2,3,8,9} \sigma_{ia}^A + \alpha K \sum_{i=5,6} \sigma_{ib}^A + \alpha K \sum_{i=25,26} \sigma_{ib}^B + \alpha K \sum_{i=4,7} \sigma_{ic}^A + \alpha K \sum_{i=23,24} \sigma_{ic}^B.
\end{aligned}$$

Para o cálculo da média, a presença de subredes na estrutura influenciará da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
\langle a_{i\nu}^A \rangle &= a_\nu = \left\langle \frac{1 + \sigma_\nu}{2} \right\rangle = \frac{1 + m_\nu}{2}, \\
\langle b_{i\nu}^A \rangle &= b_\nu = \left\langle \frac{1 - \sigma_\nu}{2} \right\rangle = \frac{1 - m_\nu}{2}, \\
\langle a_{i\nu}^B \rangle &= b_\nu = \left\langle \frac{1 - \sigma_\nu}{2} \right\rangle = \frac{1 - m_\nu}{2}, \\
\langle b_{i\nu}^B \rangle &= a_\nu = \left\langle \frac{1 + \sigma_\nu}{2} \right\rangle = \frac{1 + m_\nu}{2},
\end{aligned}$$

Seguindo o mesmo procedimento feito para o caso F, chegamos a equação da magnetização para este caso:

$$\begin{aligned}
m_a^{SF2} = & \sum_{p_1=0}^1 \sum_{p_2=0}^1 \prod_{i=3}^6 \sum_{p_i=0}^2 \prod_{j=7}^{10} \sum_{p_j=0}^1 \sum_{p_{11}=0}^2 \sum_{p_{12}=0}^2 \prod_{k=13}^{16} \sum_{p_k=0}^1 \sum_{p_{17}=0}^2 \sum_{p_{18}=0}^2 \left[\prod_{i=1}^{18} \binom{n_i}{p_i} \right] \\
& a_a \left(\sum_{i_p=2}^6 n_i - \sum_{i_p=2}^6 p_i + \sum_{i_i=1}^5 p_i \right) b_a \left(\sum_{i_i=1}^5 n_i - \sum_{i_i=1}^5 p_i + \sum_{i_p=2}^6 p_i \right) \\
& a_b \left(\sum_{i_p=8}^{12} n_i - \sum_{i_p=8}^{12} p_i + \sum_{i_i=7}^{11} p_i \right) b_b \left(\sum_{i_i=7}^{11} n_i - \sum_{i_i=7}^{11} p_i + \sum_{i_p=8}^{12} p_i \right) \\
& a_c \left(\sum_{i_p=14}^{18} n_i - \sum_{i_p=14}^{18} p_i + \sum_{i_i=13}^{17} p_i \right) b_c \left(\sum_{i_i=13}^{17} n_i - \sum_{i_i=13}^{17} p_i + \sum_{i_p=14}^{18} p_i \right) \\
& \exp [(K_s D_{x_1} + \alpha K_s D_{y_4})(n_1 - 2p_1) + (K_s D_{x_1} + \alpha K_s D_{y_2})(n_2 - 2p_2) + \\
& (K_s D_{x_2} + \alpha K_s D_{y_3})(n_3 - 2p_3) + (K_s D_{x_4} + \alpha K_s D_{y_1})(n_4 - 2p_4) + (K_s D_{x_3} + \\
& \alpha K_s D_{y_4})(n_5 - 2p_5) + (K_s D_{x_2} + \alpha K_s D_{y_1})(n_6 - 2p_6) + (K_s D_{x_4} + \alpha K_s D_{y_3}) \\
& (n_7 - 2p_7) + (K_s D_{x_3} + \alpha K_s D_{y_2})(n_8 - 2p_8) + \alpha K_s D_{y_3}(n_9 - 2p_9) + \alpha K_s D_{y_1} \\
& (n_{10} - 2p_{10}) + \alpha K_s D_{y_4}(n_{11} - 2p_{11}) + \alpha K_s D_{y_2}(n_{12} - 2p_{12}) + (K D_{x_4} + \\
& \alpha K D_{y_1} + \alpha K D_{y_3})(n_{13} - 2p_{13}) + (K D_{x_1} + \alpha K D_{y_2} + \alpha K D_{y_4})(n_{14} - 2p_{14}) + \\
& (K D_{x_3} + \alpha K D_{y_2} + \alpha K D_{y_4})(n_{15} - 2p_{15}) + (K D_{x_2} + \alpha K D_{y_1} + \alpha K D_{y_3}) \\
& (n_{16} - 2p_{16}) + \alpha K D_{y_1}(n_{17} - 2p_{17}) + \alpha K D_{y_1}(n_{18} - 2p_{18})] F(\vec{r})|_{\vec{r}=\vec{0}}. \quad (4.27)
\end{aligned}$$

onde i_p indica que estamos utilizando apenas valores pares no intervalo do somatório e i_i valores ímpares.

Caso $N = 4$

O arranjo para EFT-4 para a fase SF, é mostrado na Fig(4.8) onde podemos observar a disposição das sub-redes alternadas em planos (fase planar). O Hamiltoniano que descreve este estado é também dado pela Eq.(4.7) pois esta fase tem sua origem na fase F.

Em acordo com a notação apresentada para o caso $N = 2$, temos

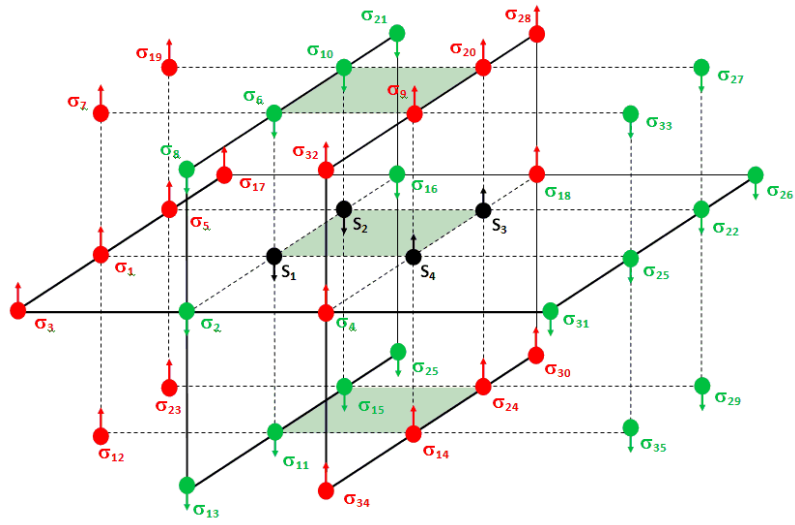


Figura 4.8: Arranjo de spins na fase planar, que caracteriza o arranjo SF. Aqui consideramos $N = 4$ sítios centrais.

$$C_n = C_{x_n} - C_{y_n},$$

onde:

$$\begin{aligned}
C_{x_1} &= K_s \sigma_{2a}^A + K_s \sigma_{1a}^B + K \sigma_{6b}^A + K \sigma_{11c}^A, \\
C_{y_1} &= \alpha K_s \sum_{i=3}^5 \sigma_{ia}^B + \alpha K \sum_{i=7,9} \sigma_{ib}^B + \alpha K \sum_{i=8,10} \sigma_{ib}^A + \alpha K \sum_{12,14} \sigma_{ic}^B + \alpha K \sum_{13,15} \sigma_{ic}^A, \\
C_{x_2} &= K_s \sigma_{16a}^A + K_s \sigma_{5a}^B + K \sigma_{10b}^A + K \sigma_{15c}^A, \\
C_{y_2} &= \alpha K_s \sum_{i=1,17,18} \sigma_{ia}^B + \alpha K \sum_{i=6,21} \sigma_{ib}^A + \alpha K \sum_{i=19,20} \sigma_{ib}^B + \alpha K \sum_{23,24} \sigma_{ic}^B + \alpha K \sum_{11,25} \sigma_{ic}^A, \\
C_{x_3} &= K_s \sigma_{22a}^A + K_s \sigma_{18a}^B + K \sigma_{20b}^B + K \sigma_{24c}^B, \\
C_{y_3} &= \alpha K_s \sum_{i=16,25,26} \sigma_{ia}^A + \alpha K \sum_{i=10,27} \sigma_{ib}^A + \alpha K \sum_{9,28} \sigma_{ib}^B + \alpha K \sum_{14,30} \sigma_{ic}^B + \alpha K \sum_{15,29} \sigma_{ic}^A, \\
C_{x_4} &= K_s \sigma_{25a}^A + K_s \sigma_{4a}^B + K \sigma_{9b}^B + K \sigma_{14c}^B, \\
C_{y_4} &= \alpha K_s \sum_{i=2,22,31} \sigma_{ia}^A + \alpha K \sum_{i=6,33} \sigma_{ib}^A + \alpha K \sum_{i=20,32} \sigma_{ib}^B + \alpha K \sum_{34,24} \sigma_{ic}^B + \alpha K \sum_{11,35} \sigma_{ic}^A,
\end{aligned}$$

Com base nos procedimentos anteriores, obtemos a magnetização para o caso SF com $N = 4$:

$$\begin{aligned}
m_a^{SF4} = & \prod_{i=1}^{36} \sum_{p_i=0}^1 \left[\prod_{i=1}^{36} \binom{n_i}{p_i} \right] a_a \left(\sum_{i=1}^{11} n_i - \sum_{i=1}^{11} p_i + \sum_{i=2}^{12} p_i \right) b_a \left(\sum_{i=2}^{12} n_i - \sum_{i=2}^{12} p_i + \sum_{i=1}^{11} p_i \right) \\
& a_b \left(\sum_{i=14}^{24} n_i - \sum_{i=14}^{24} p_i + \sum_{i=13}^{23} p_i \right) b_b \left(\sum_{i=13}^{23} n_i - \sum_{i=13}^{23} p_i + \sum_{i=14}^{24} p_i \right) \\
& a_c \left(\sum_{i=26}^{36} n_i - \sum_{i=26}^{36} p_i + \sum_{i=25}^{35} p_i \right) b_c \left(\sum_{i=25}^{35} n_i - \sum_{i=25}^{35} p_i + \sum_{i=26}^{36} p_i \right) \\
& \exp [K_s D_{x_1} (n_1 - 2p_1) + K_s D_{x_2} (n_2 - 2p_2) + (K_s D_{x_2} + \alpha K_s D_{y_1}) \\
& (n_3 - 2p_3) + (K_s D_{x_1} + \alpha K_s D_{y_2}) (n_4 - 2p_4) + \alpha K_s D_{y_1} (n_5 - 2p_5) + \\
& \alpha K_s D_{y_2} (n_6 - 2p_6) + (K D_{x_2} + \alpha K D_{y_1}) (n_7 - 2p_7) + (K D_{x_1} + \alpha K D_{y_2}) \\
& (n_8 - 2p_8) + \alpha K D_{y_1} (n_9 - 2p_9) + \alpha K D_{y_2} (n_{10} - 2p_{10}) + \alpha K D_{y_2} \\
& (n_{11} - 2p_{11}) \alpha K D_{y_1} (n_{12} - 2p_{12}) + (K D_{x_2} + \alpha K D_{y_1}) (n_{13} - 2p_{13}) + \\
& (K D_{x_1} + \alpha K D_{y_2}) (n_{14} - 2p_{14}) + \alpha K D_{y_1} (n_{15} - 2p_{15}) + \alpha K D_{y_2} (n_{16} - \\
& 2p_{16} + \alpha K D_{y_2}) (n_{17} - 2p_{17}) + \alpha K D_{y_1} (n_{18} - 2p_{18}) + \alpha K D_{y_2} (n_{19} - \\
& 2p_{19} + \alpha K D_{y_2}) (n_{20} - 2p_{20}) + \alpha K D_{y_3} (n_{21} - 2p_{21}) + \alpha K D_{y_3} (n_{22} - \\
& 2p_{22}) + \alpha K D_{y_4} (n_{23} - 2p_{23}) + \alpha K D_{y_4} (n_{24} - 2p_{24}) + (K D_{x_4} + \alpha K D_{y_1} \\
& + \alpha K D_{y_3}) (n_{25} - 2p_{25}) + (K D_{x_1} + \alpha K D_{y_2} + \alpha K D_{y_4}) (n_{26} - 2p_{26}) + \\
& (K D_{x_3} + \alpha K D_{y_2} + \alpha K D_{y_4}) (n_{27} - 2p_{27}) + (K D_{x_2} + \alpha K D_{y_3} + \alpha K D_{y_1}) \\
& (n_{28} - 2p_{28}) + \alpha K D_{y_1} (n_{29} - 2p_{29}) + \alpha K D_{y_1} (n_{30} - 2p_{30}) + \alpha K D_{y_2} \\
& (n_{31} - 2p_{31}) + \alpha K D_{y_2} (n_{32} - 2p_{32}) + \alpha K D_{y_3} (n_{33} - 2p_{33}) + \alpha K D_{y_3} \\
& (n_{34} - 2p_{34}) + \alpha K D_{y_4} (n_{35} - 2p_{35}) + \alpha K D_{y_4} (n_{36} - 2p_{36})] F(\vec{r}) |_{\vec{r}=\vec{0}}. \quad (4.28)
\end{aligned}$$

4.2.3 Estado Antiferromagnético

O Hamiltoniano para $N = 2$ sítios centrais para a fase AF, mostrado na Fig.(4.9), na aproximação axial, é dado por:

$$\mathcal{H}_2^{AF} = J[(1 - \Delta)(S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y) + S_1^z S_2^z] + J \sum_i \sigma_i^z S_1^z + J \sum_j \sigma_j^z S_2^z, \quad (4.29)$$

que é essencialmente o modelo F fazendo a substituição $K \rightarrow -K$ nas interações de primeiros vizinhos.

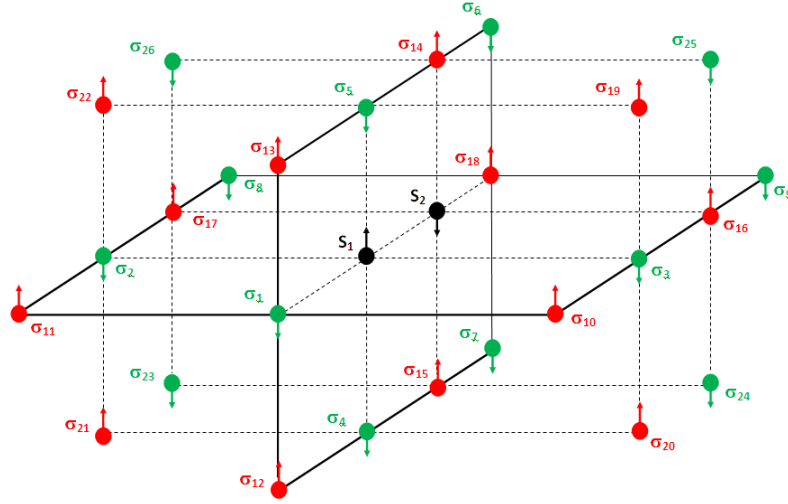


Figura 4.9: Arranjo de spins na fase AF mostrando a estrutura de sub-redes. Aqui consideramos $N = 2$ sítios centrais.

Para fins de simplificação da notação matemática, utilizaremos o Hamiltoniano reduzido $H_2^{AF} = -\beta \mathcal{H}_2^F$ dado por

$$H_2^{AF} = -K[(1 - \Delta)(S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y) + S_1^z S_2^z] + C_1 S_1^z + C_2 S_2^z, \quad (4.30)$$

onde o termo C_n contém todas as interações entre primeiros e segundos vizinhos dos sítios do aglomerado que para o caso AF é dado por:

$$C_n = -C_{x_n} - C_{y_n},$$

onde $n = 1, 2$ indica o sítio central.

De acordo com a Fig.(4.9), obtemos as seguintes relações:

$$\begin{aligned} C_{x_1} &= K_s \sum_{i=1}^3 \sigma_{ia}^B + K \sigma_{5b}^B + K \sigma_{4c}^B, \\ C_{y_1} &= \alpha K_s \sum_{i=10,11,16,17} \sigma_{ia}^A + \alpha K \sum_{i=13,14,19,22} \sigma_{ib}^A + \alpha K \sum_{i=12,15,20,21} \sigma_{ic}^A, \\ C_{x_2} &= K_s \sum_{i=16}^{18} \sigma_{ia}^A + K \sigma_{14b}^A + K \sigma_{15c}^A, \\ C_{y_2} &= \alpha K_s \sum_{i=2,3,8,9} \sigma_{ia}^B + \alpha K \sum_{i=5,6,25,26} \sigma_{ib}^B + \alpha K \sum_{i=4,7,23,24} \sigma_{ic}^B. \end{aligned}$$

A função de Partição Z_2^{AF} associada ao Hamiltoniano reduzido, dado pela Eq.(4.30), quando aplicado na base ortonormal própria, é dada por:

$$Z_2^{AF} = 2 [\exp(-K) \cosh(C_1 + C_2) + \exp(K) \cosh(\Gamma)],$$

onde

$$\Gamma = \sqrt{(C_1 - C_2)^2 + 4K^2(1 - \Delta)^2}.$$

Seguindo os mesmos procedimentos teóricos demonstrados para o caso F, obtemos a magnetização do sistema:

$$m_a^{AF2} = \left\langle \frac{\sinh(C_1 + C_2) + \exp(2K) \sinh(\Gamma) \frac{(C_1 - C_2)}{\Gamma}}{\cosh(C_1 + C_2) + \exp(2K) \cosh(\Gamma)} \right\rangle. \quad (4.31)$$

A aplicação da TOD na forma exponencial resulta em:

$$\begin{aligned}
m_a^{AF2} = & \sum_{p_1=0}^2 \sum_{p_2=0}^2 \sum_{p_3=0}^1 \sum_{p_4=0}^1 \sum_{p_5=0}^2 \sum_{p_6=0}^2 \sum_{p_7=0}^1 \sum_{p_8=0}^1 \sum_{p_9=0}^3 \sum_{p_{10}=0}^3 \sum_{p_{11}=0}^1 \sum_{p_{12}=0}^1 \sum_{p_{13}=0}^3 \sum_{p_{14}=0}^3 \left[\prod_{i=1}^{14} \binom{n_i}{p_i} \right] \\
& a_a \left(\sum_{i=1}^5 n_i - \sum_{i=1}^5 p_i + \sum_{i=2}^6 p_i \right) b_a \left(\sum_{i=2}^6 n_i - \sum_{i=2}^6 p_i + \sum_{i=1}^5 p_i \right) \\
& a_b \left(\sum_{i=7,9} n_i - \sum_{i=7,9} p_i + \sum_{i=8,10} p_i \right) b_b \left(\sum_{i=8,10} n_i - \sum_{i=8,10} p_i + \sum_{i=7,9} p_i \right) \\
& a_c \left(\sum_{i=11,13} n_i - \sum_{i=11,13} p_i + \sum_{i=12,14} p_i \right) b_c \left(\sum_{i=12,14} n_i - \sum_{i=12,14} p_i + \sum_{i=11,13} p_i \right) \\
& \exp [(K_s D_{x_2} + \alpha K_s D_{y_1}) (n_1 - 2p_1) + (K_s D_{x_1} + \alpha K_s D_{y_2}) (n_2 - 2p_2) + \\
& K_s D_{x_2} (n_3 - 2p_3) + K_s D_{x_1} (n_4 - 2p_4) + \alpha K_s D_{y_1} (n_5 - 2p_5) + \alpha K_s D_{y_2} \\
& (n_6 - 2p_6) + (K D_{x_2} + \alpha K D_{y_1}) (n_7 - 2p_7) + (K D_{x_1} + \alpha K D_{y_2}) \\
& (n_8 - 2p_8) + \alpha K D_{y_1} (n_9 - 2p_9) + \alpha K D_{y_2} (n_{10} - 2p_{10}) + (K D_{x_2} + \alpha K D_{y_1}) \\
& (n_{11} - 2p_{11}) + (K D_{x_1} + \alpha K D_{y_2}) (n_{12} - 2p_{12}) + \alpha K D_{y_1} (n_{13} - 2p_{13}) + \\
& \alpha K D_{y_2} (n_{14} - 2p_{14})] F(\vec{r}) \Big|_{\vec{r}=\vec{0}}. \tag{4.32}
\end{aligned}$$

4.2.4 Estado Superantiferromagnético

Partindo do estado AF e variando o parâmetro α , chegamos a uma nova ordem denominada superantiferromagnética - SAF, cujo arranjo está mostrado na Fig.(4.10). A alternância da orientação dos spins agora é dada em linhas, por isso essa fase em $3D$ também é conhecida como colinear.

O Hamiltoniano para este estado é o mesmo do caso AF, dado pela Eq.(4.29). No entanto, aqui temos uma nova disposição dos spins, o que gera novas definições dos termos C_n . Assim temos:

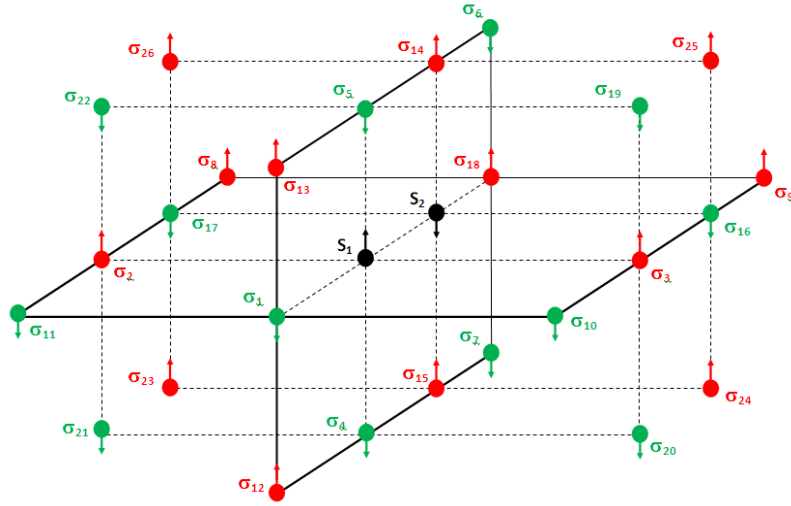


Figura 4.10: Arranjo SAF, mostrando a configuração dos spins alternados em linhas (fase colinear) para o caso $N = 2$.

$$C_{x_1} = K_s \sigma_{1a}^B + K_s \sum_{i=2}^3 \sigma_{ia}^A + K \sigma_{5b}^B + K \sigma_{4c}^B,$$

$$C_{y_1} = \alpha K_s \sum_{i=10,11,16,17} \sigma_{ia}^B + \alpha K \sum_{i=13,14} \sigma_{ib}^A + \alpha K \sum_{i=19,22} \sigma_{ib}^B + \alpha K \sum_{i=12,15} \sigma_{ic}^A + \alpha K \sum_{i=20,21} \sigma_{ic}^B,$$

$$C_{x_2} = K_s \sigma_{18a}^A + K_s \sum_{i=16}^{17} \sigma_{ia}^B + K \sigma_{14b}^A + K \sigma_{15c}^A,$$

$$C_{y_2} = \alpha K_s \sum_{i=2,3,8,9} \sigma_{ia}^A + \alpha K \sum_{i=5,6} \sigma_{ib}^B + \alpha K \sum_{i=25,26} \sigma_{ib}^A + \alpha K \sum_{i=4,7} \sigma_{ic}^B + \alpha K \sum_{i=23,24} \sigma_{ic}^A,$$

resultando na equação de estado:

$$\begin{aligned}
m_a^{SAF2} = & \prod_{i=1}^2 \sum_{p_i=0}^2 \prod_{j=3}^4 \sum_{p_j=0}^1 \prod_{k=5}^6 \sum_{p_k=0}^2 \prod_{l=7}^9 \sum_{p_l=0}^1 \prod_{m=10}^{11} \sum_{p_m=0}^2 \prod_{n=12}^{15} \sum_{p_n=0}^1 \prod_{p=16}^{17} \sum_{p_p=0}^2 \prod_{p_{18}=0}^1 \left[\prod_{i=1}^{18} \binom{n_i}{p_i} \right] \\
& a_a \binom{5}{i_i=1} n_i - \sum_{i_i=1}^5 p_i + \sum_{i_p=2}^6 p_i \binom{6}{i_p=2} \left(\sum_{i_p=2}^6 n_i - \sum_{i_p=2}^6 p_i + \sum_{i_i=1}^5 p_{ii} \right) \\
& a_b \binom{11}{i_i=7} n_i - \sum_{i_i=7}^{11} p_i + \sum_{i_p=8}^{12} p_i \binom{12}{i_p=8} \left(\sum_{i_p=8}^{12} n_i - \sum_{i_p=8}^{12} p_i + \sum_{i_i=7}^{11} p_i \right) \\
& a_c \binom{17}{i_i=13} n_i - \sum_{i_i=13}^{17} p_i + \sum_{i_p=14}^{18} p_i \binom{18}{i_p=14} \left(\sum_{i_p=14}^{18} n_i - \sum_{i_p=14}^{18} p_i + \sum_{i_i=13}^{17} p_i \right) \\
& \exp [(K_s D_{x_1} + \alpha K_s D_{y_2}) (n_1 - 2p_1) + (K_s D_{x_2} + \alpha K_s D_{y_1}) (n_2 - 2p_2) + \\
& K_s D_{x_2} (n_3 - 2p_3) + K_s D_{x_1} (n_4 - 2p_4) + \alpha K_s D_{y_2} (n_5 - 2p_5) + \alpha K_s D_{y_1} \\
& (n_6 - 2p_6) + (K D_{x_2} + \alpha K D_{y_1}) (n_7 - 2p_7) + (K D_{x_1} + \alpha K D_{y_2}) (n_8 - \\
& 2p_8) + \alpha K D_{y_1} (n_9 - 2p_9) + \alpha K D_{y_1} (n_{10} - 2p_{10}) + \alpha K D_{y_2} (n_{11} - 2p_{11}) + \\
& \alpha K D_{y_2} (n_{12} - 2p_{12}) + (K D_{x_2} + \alpha K D_{y_1}) (n_{13} - 2p_{13}) + (K D_{x_1} + \alpha K D_{y_2}) \\
& (n_{14} - 2p_{14}) + \alpha K D_{y_1} (n_{15} - 2p_{15}) + \alpha K D_{y_1} (n_{16} - 2p_{16}) + \alpha K D_{y_2} \\
& (n_{17} - 2p_{17}) + \alpha K D_{y_2} (n_{18} - 2p_{18})] F(\vec{r}) |_{\vec{r}=\vec{\sigma}}. \tag{4.33}
\end{aligned}$$

4.2.5 Modelagem Numérica

Apresentamos aqui a modelagem numérica desenvolvida para representar um sistema finito (filme fino) formado por ℓ camadas, constituídas por um plano infinito limitadas por duas superfícies livres, conforme mostrado na Fig.(4.11).

Para esta análise, construímos um sistema de equações ao aplicarmos a equação de estado, Eq.(4.2), juntamente com a equação associada à energia livre, Eq.(4.3), em cada camada do filme, onde condições de contorno apropriadas identificam cada uma delas. Assim temos:

1. Camada $L = 1$:

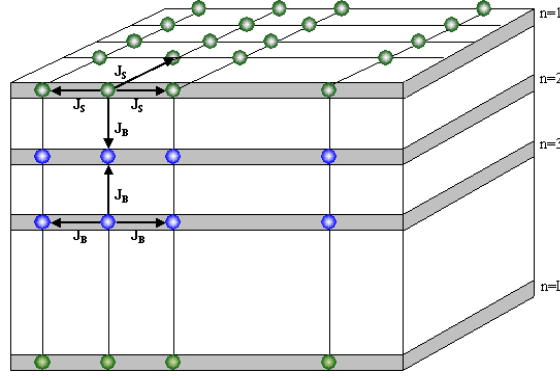


Figura 4.11: Figura representativa de um filme fino com ℓ camadas e interações de superfície J_s e do *bulk* $J_b = J$ em uma rede cúbica simples ferromagnética.

Trata-se da camada localizada na superfície superior do filme. Consideramos na camada central o parâmetro de superfície K_s e interação com apenas uma camada adjacente. Assim, aplicamos na estrutura geral de construção dos coeficientes as seguintes condições de contorno:

$$m_a = m_1, \quad m_c = m_2.$$

As equações de estado(f_1) e energia(Φ_1) ficam então:

$$m_1 = \sum_i A_i m_1^i \Rightarrow f_1(m_1, m_2, x, \alpha, t) = m_1 - \sum_i A_i m_1^i, \quad (4.34)$$

$$\Phi_1(m_1, m_2, x, \alpha, t). \quad (4.35)$$

2. Camada $L = 2$:

Não sendo uma camada da superfície, fazemos então as interações na camada central $K_s = K$ e consideramos duas camadas adjacentes. Assim temos:

$$m_a = m_2, m_b = m_1, m_c = m_3, K_s = K.$$

As equações de estado (f_2) e energia(Φ_2):

$$m_2 = \sum_i A_i m_2^i \Rightarrow f_2(m_1, m_2, m_3, \alpha, t) = m_2 - \sum_i A_i m_2^i, \quad (4.36)$$

$$\Phi_2(m_1, m_2, m_3, \alpha, t). \quad (4.37)$$

3. Camada $L = n$:

Corresponde a n -ésima camada localizada no interior do filme (*bulk*), resultando em:

$$m_a = m_n, m_b = m_{n-1}, m_c = m_{n+1}, K_s = K.$$

As equações de estado de estado(f_n) e energia(Φ_n):

$$m_n = \sum_i A_i m_n^i \Rightarrow f_n(m_{n-1}, m_n, m_{n+1}, \alpha, t) = m_n - \sum_i A_i m_n^i, \quad (4.38)$$

$$\Phi_n(m_{n-1}, m_n, m_{n+1}, \alpha, t). \quad (4.39)$$

4. Camada $L = \ell$:

Corresponde à superfície inferior do sistema de camadas. Semelhante ao tratamento dado para a primeira superfície, temos:

$$m_a = m_\ell, m_c = m_{\ell-1}.$$

As equações de estado de estado(f_ℓ) e energia(Φ_ℓ):

$$m_\ell = \sum_i A_i m_\ell^i \Rightarrow f_\ell(m_{\ell-1}, m_\ell, x, \alpha, t) = m_\ell - \sum_i A_i m_\ell^i, \quad (4.40)$$

$$\Phi_\ell(m_{\ell-1}, m_\ell, x, \alpha, t). \quad (4.41)$$

Para que o número de equações seja igual ao número de variáveis para um filme com qualquer número de camadas, verificamos ser mais adequado trabalhar com uma função energia para todo o sistema de ℓ camadas que aqui será dado pela soma total das funções energia de cada camada, ou seja:

$$\Phi = \sum_{L=1}^{\ell} \Phi_L. \quad (4.42)$$

A magnetização total do filme será dada pela média das magnetizações de cada camada, ou seja,

$$m = \frac{1}{\ell} \sum_{L=1}^{\ell} m_L. \quad (4.43)$$

Assim, teremos um total de $\ell + 1$ variáveis, em acordo com o número de equações obtidas para a descrição do comportamento do diagrama $t(\alpha)$.

4.2.6 Resultados

Apresentamos nesta seção os resultados encontrados para o comportamento do diagrama de fases $t - \alpha$, nos modelos Ising e Heisenberg, quando variamos o número de camadas L do filme. Os resultados para o sistema infinito 3D foram obtidos por Viana e de Sousa[49], e aqui inseridas para efeito de comparação.

Tratando inicialmente o modelo de Ising através de EFT-2, temos na Fig.(4.12) o comportamento da grandeza α_c em função do número de camadas L do filme, cuja relação é dada pela Eq.(4.5), para vários valores do parâmetro de interação x no estado

fundamental. Observa-se que o aumento no número de camadas tende a diminuir o valor de α_c passando do valor $\alpha_c = 0.5$, para o caso 2D ($L = 1$), tendendo para o valor $\alpha_c = 0.25$, encontrado para o caso 3D ($L \rightarrow \infty$). Na Fig.(4.12), temos o comportamento do diagrama de fases $t - \alpha$ para vários valores do número L de camadas, onde as linhas de transição separam as fases F/AF-P-SF/SAF. Os pontos cheios indicam transição de segunda ordem, enquanto que os pontos vazados indicam transição de primeira ordem, observados nas curvas para os casos 2D ($L = 1$), tratado via EFT-4, e 3D. Um PTC foi encontrado para o caso bidimensional para $\alpha = 0.75$ e $t = 1.92$, sendo a linha de transição entre as fases P-SF/SAF para 3D inteiramente de primeira ordem. Em geral, não temos observado transição de primeira ordem para valores de L diferentes desses dois casos, mesmo para o modelo de Heisenberg. O aumento do número de camadas do filme, gerou linhas de transição com comportamento intermediário entre os casos limites 2D e 3D. A linha de transição entre as fases F/AF-P toca o eixo horizontal no valor α_c e os resultados encontrados através do processo numérico de Newton-Raphson para o cálculo das raízes, coincidem com os obtidos através da análise do estado fundamental no caso $x = 1.0$, mostrado na Fig.(4.12). Esses resultados mostram que o procedimento de construção do filme tem gerado resultados dentro do esperado. A simetria existente nas equações de estado quando utilizamos o modelo de Ising entre as fases F/SF e AF/SAF, resulta no mesmo comportamento do diagrama de fases.

Para o modelo de Heisenberg isotrópico, tratado somente via EFT-2, não é possível fazer a análise do estado fundamental para uma predição do valor de α_c , e devido a forma assimétrica do Hamiltoniano, temos agora comportamentos diferenciados para as fases F e AF. Mostramos na Fig.(4.14) o diagrama para as fases AF-P-SAF e na Fig.(4.15), para as fases F-P-SF. É observado um comportamento semelhante ao caso Ising sendo que para $L = 1$ o valor de α_c não coincide mais para as diferentes fases indicando a provável existência de uma fase intermediária.

Em ambos os casos (Ising e Heisenberg), as linhas de transição apresentam uma região (ponto) a partir da qual ocorre uma inversão no comportamento da temperatura de tal

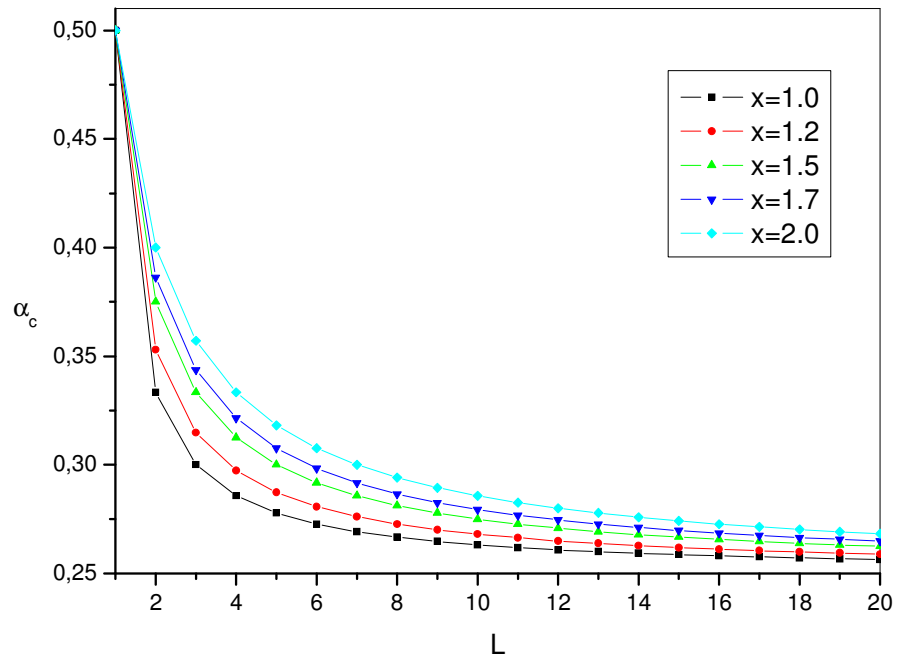


Figura 4.12: Comportamento do parâmetro α_c em função do número de camadas L para diferentes valores do parâmetro $x = \frac{J_s}{J}$, feito no estado fundamental para o modelo de Ising.

forma que $t_{2D} > t_{3D}$ e vice-versa.

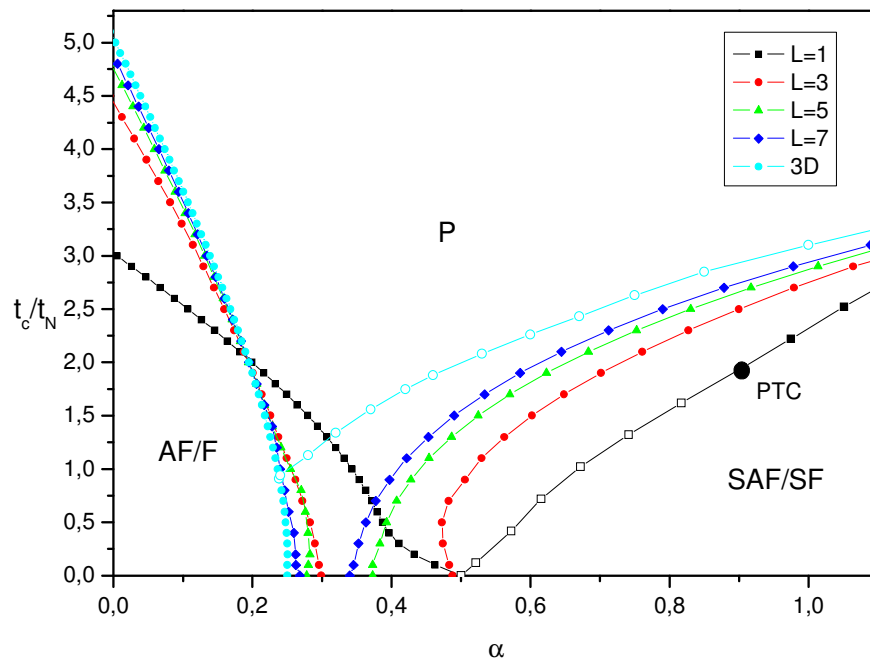


Figura 4.13: Comportamento da temperatura de transição $t_c(t_N)$ em função do parâmetro α considerando o modelo de Ising ($\Delta = 1.0$) para vários valores do número de camadas L . Para $L = 1$ consideramos EFT-4 para obter melhores resultados. As figuras vazadas indicam transição de primeira ordem, enquanto que as figuras cheias indicam transição de segunda ordem.

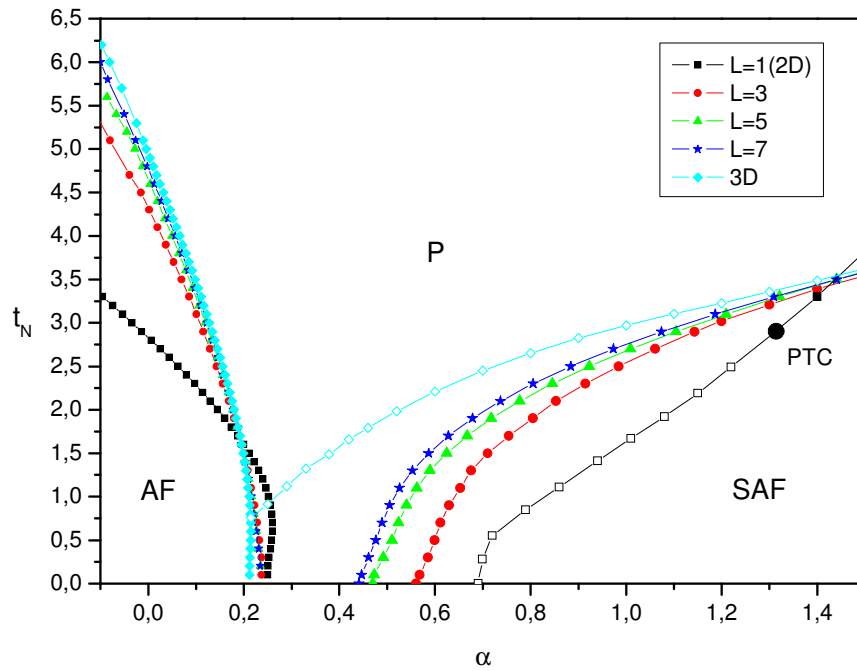


Figura 4.14: Comportamento do diagrama de fases $t - \alpha$ para o modelo de Heisenberg para vários valores da quantidade L de camadas, entre as fases AF/P/SAF. As figuras vazadas indicam transição de primeira ordem, enquanto que as figuras cheias indicam transição de segunda ordem.

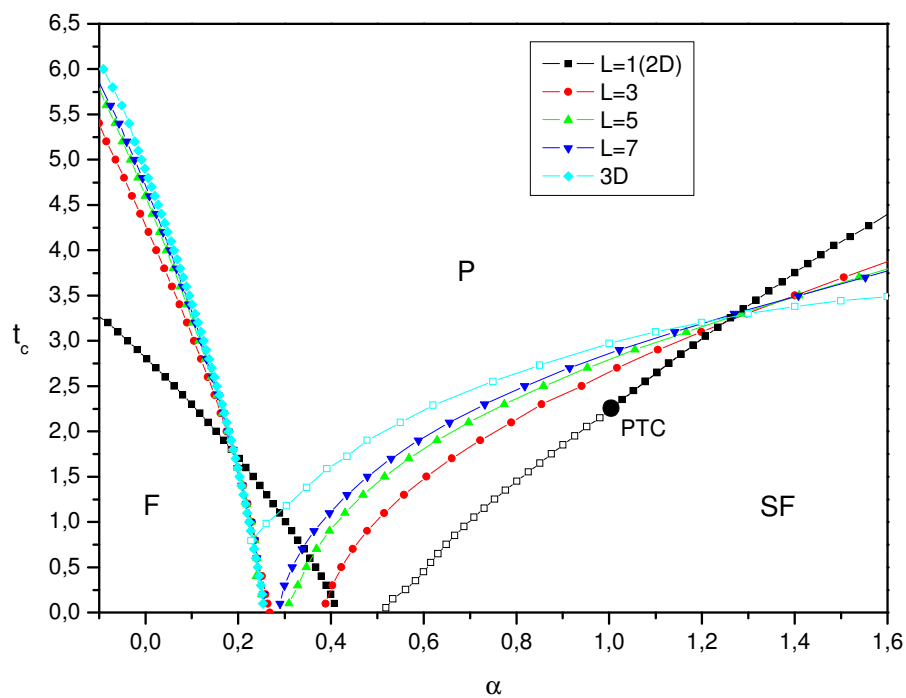


Figura 4.15: Comportamento do diagrama de fases $t - \alpha$ considerando o modelo de Heisenberg para vários valores da quantidade L de camadas, nas fases F/P/SF. As figuras vazadas indicam transição de primeira ordem, enquanto que as figuras cheias indicam transição de segunda ordem.

4.3 Grupo de Renormalização e Expoentes Críticos

Do ponto de vista teórico, filmes-finos representam um valioso teste para a compreensão do magnetismo em 2D bem como na região de cruzamento de dimensionalidade (*crossover*), quando o sistema passa para um comportamento 3D com o aumento da espessura do filme (número de camadas). Em sistemas com a dimensionalidade reduzida, anisotropias magnéticas desempenham um papel fundamental no estabelecimento da ordem de longo alcance, o que modifica drasticamente a dependência da magnetização com a temperatura.

Podemos observar que a temperatura crítica do sistema sofre forte influência da espessura do filme, principalmente na região de *crossover* de dimensionalidade. Podemos então supor uma lei de escala que represente T_c como um parâmetro dependente da espessura do filme, onde agora $T_c(\ell)$ (2D) chega à temperatura do *bulk* $T_c(\infty)$ (3D) fazendo $\ell \rightarrow \infty$. Esta relação pode ser mostrada através de uma simples lei de potência[66] caracterizada por um expoente crítico λ definido por:

$$T_c(\ell) = T_c(\infty)\left(1 - \frac{A}{\ell^\lambda}\right) \quad (4.44)$$

onde A e λ dependem da espessura. A constante A é da ordem de 1 a 10, medida em vários experimentos.

A teoria de escala representada pela Eq.(4.44) é resultado de uma classe de universalidade encontrada para os expoentes críticos onde λ pode ser expresso por $1/\nu$ sendo ν o expoente de correlação de longo alcance do *bulk*. Técnicas rigorosas mediram o valor do expoente λ para sistemas Ising 3D, XY e Heisenberg obtendo respectivamente os valores: $\lambda = 1.586$, $\lambda = 1.492$, $\lambda = 1.413$ [67]. Laosiritaworn[36] utilizando simulação de Monte Carlo e usando o método do cumulante e análise de campo médio obteve o valor de λ para o caso Ising em função do tipo de arranjo cristalino obtendo os valores mostrados nas Tabelas 4.1 e 4.2 para Monte Carlo e Campo Médio respectivamente.

Os estudos teóricos desenvolvidos por Wilson[68], Domb, Rushbrooke e Fisher[69]

Tabela IV.1: Resultados para Monte Carlo

	T_c	λ
sc(001)	4.54	1.58
bcc(111)	6.39	1.62
fcc(111)	9.86	1.62

Tabela IV.2: Resultados para Campo Médio

	T_c	λ
sc(001)	6.00	2.00
bcc(111)	8.03	2.00
fcc(111)	12.05	2.00

mostraram a existência dos expoentes críticos para as grandezas termodinâmicas, os quais obedecem uma classe de universalidade definida por um pequeno número de parâmetros tais como a dimensionalidade do sistema ($d = 1D, 2D, 3D$) e a simetria do parâmetro de ordem. Isso faz com que possamos classificar as transições de fase de segunda ordem dentro das classes de universalidade.

Um fenômeno tipicamente coberto pela hipótese de universalidade é a transição do estado ferro para o paramagnético onde os expoentes críticos mostraram assumir diferentes valores dependendo onde os spins estão localizados na rede tridimensional de um sólido semi-infinito, ou seja, na superfície ou no *bulk*. Em sistemas magnéticos bidimensionais, argumentos teóricos sugerem que o parâmetro de ordem de longo alcance é sempre zero em uma temperatura finita (teorema de Mermin-Wagner, para interações magnéticas de curto alcance isotrópicas) ou desaparece a temperatura finita T_c de acordo com:

$$m \propto \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^\beta,$$

sendo β o expoente crítico associado à magnetização, que para aplicações de campo médio em sistemas Ising resulta no valor $\beta = \frac{1}{2}$ para qualquer dimensão.

As primeiras medidas experimentais desse expoente foram realizadas por Heller e Benedek[70] em um sistema Ising antiferromagnético com magnetos do tipo FeF_x , obtendo o valor $\beta = 0.335 \pm 0.005$. Para sistemas Heisenberg obtidos através de magnetos

formados por *Ni* e *Fe*, Giullou[71] encontrou o valor $\beta = 0.365$. Uma revisão das medidas experimentais desse expoente foi feita para vários compostos por Suter e Hohenemser[72], onde procuraram eliminar a imprecisão nas medidas pois em muitos casos os dados eram coletados em regiões distantes do ponto crítico. As medidas encontradas diferem ligeiramente do estabelecido para sistemas Heisenberg mas confirmam o valor para sistemas Ising. Em geral temos que $\beta_{HS} > \beta_{IS}$.

A realização física de uma transição de fase ideal para filmes de monocamadas ainda está longe do ideal. A agudez da transição de fase depende crucialmente da perfeição da amostra. Defeitos estruturais e impurezas são obstáculos para a flutuação de longo alcance o que faz com que o parâmetro de ordem não se comporte de acordo com uma lei de potência na região de uma temperatura bem definida T_c . Como consequência desses efeitos de tamanho finito, ocorre um arredondamento na transição, com o parâmetro de ordem mostrando uma curva característica acima de T_c .

Sistemas 3D estão bem estabelecidos, medidas recentes em Ising 2D[73] tem encontrado o valor $\beta = 0.22 \pm 0.05$ considerando filmes com 1 e 3 camadas, um valor maior que o obtido para a classe de universalidade 2D entre 0.1 – 0.15. Este valor, no entanto, está fora da região 3D.

Além desses dois casos, temos também o expoente β obtido para a superfície do filme (β_1). Através de teorias de escala, Binder e Hohenberg[74] encontraram o valor $\beta_1 = \frac{2}{3}$. Eles utilizaram expansão em série considerando um sistema com interação de exchange J_s na superfície e J para o bulk, sendo $J_s = xJ$. Para sistemas Heisenberg clássico, os autores encontraram, usando Monte Carlo, o valor $\beta = 0.75$.

Em média, o número de primeiros vizinhos e também a energia total de *exchange* por *spin* aumenta com a espessura do filme. Isto causa um aumento de T_c com a espessura do filme, assim T_c não é uma quantidade física universal para o sistema. Em contraste, o expoente crítico β não apresenta mudança com a variação da força de acoplamento total por *spin*, sendo então uma quantidade física universal, sensível apenas à topologia e a dimensionalidade do *spin*. No entanto, a independência de β com a espessura pode ser

utilizada como prova da natureza bi ou tri-dimensional da transição de fase.

A observação do comportamento do expoente β com a espessura do filme foi feita por Li e Baberschke[16] onde obtiveram filmes ultrafinos de $Ni(111)$ e $W(110)$. Os resultados encontrados são mostrados na Fig.(4.16).

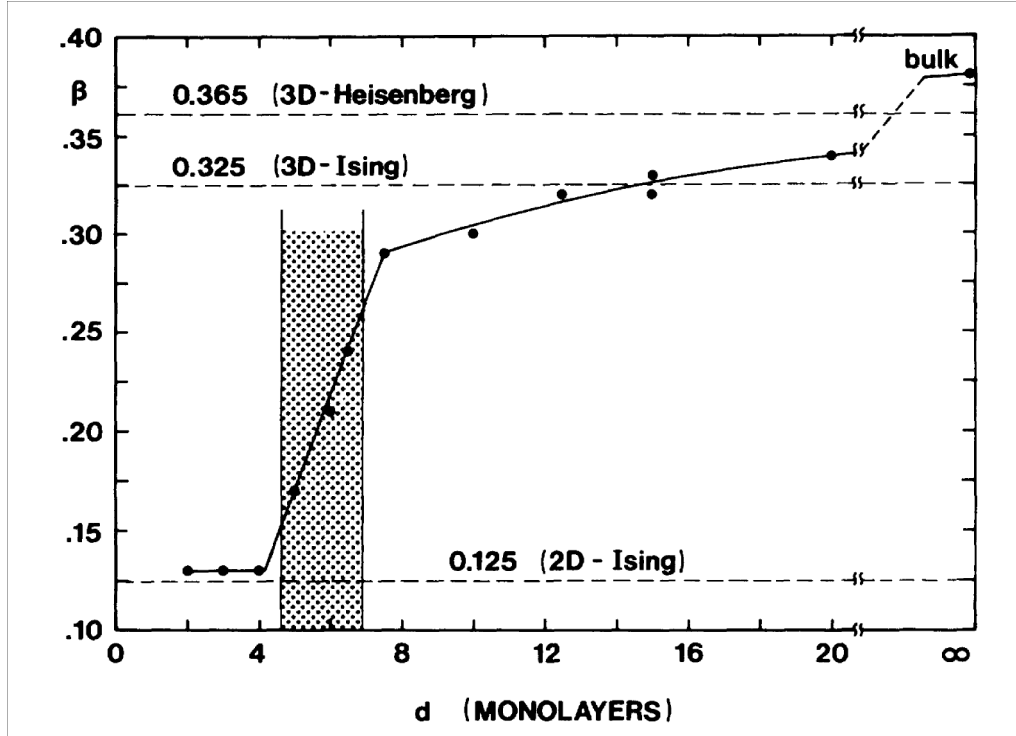


Figura 4.16: Comportamento do expoente β em função do número de camadas para um filme de Ni mostrando a região do *crossover* de dimensionalidade. Fonte: Yi Li e K. Baberschke.

Podemos observar nesta figura, a descontinuidade no comportamento de β com a espessura em um filme de Ni . Basicamente temos a passagem do sistema Ising 2D (entre $L = 1$ e 4 ML) para Ising 3D (entre 16 e 20 ML) com o expoente passando de 0.13 para 0.32, tendo em seguida um novo salto para 0.365 (região do *bulk*) indicando o caso Heisenberg 3D.

Nosso objetivo nesta seção é aplicar o Grupo de Renormalização em campo médio (MFRG) no Hamiltoniano anisotrópico de Heisenberg com a presença de um campo

externo H dado por:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} [(1 - \Delta) (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z] + H \sum_i S_i^z. \quad (4.45)$$

Inicialmente aplicamos as relações de escala entre $N = 1$ e 2 para obter a temperatura crítica e em seguida os expoentes críticos térmico (y_t), magnético (y_h) e o expoente β , dado pelas relações apresentadas no Capítulo 1 desta tese.

4.3.1 Caso $N' = 1$

Aplicamos a teoria de aglomerados finitos na Eq. (4.45) obtendo o Hamiltoniano \mathcal{H}'_n para o caso em que temos 1 sítio central no aglomerado ($N' = 1$) para a n -ésima camada:

$$\mathcal{H}'_n = \left(-J_n \sum_i \sigma_{ni}^z + H' \right) S_1^z, \quad (4.46)$$

onde o índice i estende-se sobre todos os primeiros vizinhos ao operador de spin S_{1n}^z .

O Hamiltoniano reduzido aplicado na n -ésima camada, $H'_n = -\beta' \mathcal{H}'_n$, é dado por

$$H'_n = C'_n S_1^z, \quad (4.47)$$

onde

$$C'_n = K'_n \left(\sum_i \sigma_{ni}^z - h'_n \right),$$

e $\beta' = 1/k_B T'$, $h'_n = \frac{H'}{J_n}$ e $K'_n = \beta' J_n$.

A função de partição:

$$Z'_n = \sum_{i=1}^2 \exp(-\beta' \lambda_i), \quad (4.48)$$

que para a base de 1 spin $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ já encontra-se diagonalizada. A magnetização por spin é definida como:

$$m'_n = \left\langle \frac{1}{Z'_n} \frac{\partial}{\partial C'_n} \ln [Z'_n] \right\rangle, \quad (4.49)$$

resultando em

$$m'_n = \langle \tanh [C'_n] \rangle.$$

Da aplicação de campo médio temos que

$$\langle F(\sigma_i^z, \sigma_j^z) \rangle = F(\langle \sigma_i^z, \sigma_j^z \rangle),$$

onde $\langle \sigma_i^z \rangle = m_i$, resultando em:

$$m'_n = \tanh [C'_n],$$

onde C'_n agora é dado pela aplicação da média térmica nos operadores de spin, aqui separados para cada camada do filme. Assim temos:

$$C'_n = z_o K'_n m'_n + z_1 K'_{n-1} m'_{n-1} + z_1 K'_{n+1} m'_{n+1} - K'_n h'_n,$$

onde z_1 e z_o especificam o número de vizinhos ao sítio central no mesmo plano e nos planos adjacentes respectivamente. Aqui faremos a aplicação para uma rede cúbica, assim teremos $z_1 = 1$ e $z_o = 4$.

Na região próxima da criticalidade, temos que $m_n \rightarrow 0$, $t \rightarrow t_c$. Aplicando essas condições na Eq.(m'_n) resulta em:

$$m'_n = z_o K'_n m'_n + z_1 K'_{n-1} m'_{n-1} + z_1 K'_{n+1} m'_{n+1} - K'_n h'_n. \quad (4.50)$$

4.3.2 Caso $N = 2$

Aplicando ao caso em que temos $N = 2$ sítios centrais, no Hamiltoniano dado pela Eq.(4.45) obtemos:

$$\mathcal{H}_n = -J_n [(1 - \Delta) (S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y) + S_1^z S_2^z] + \left(-J_n \sum_i \sigma_{ni}^z + H \right) (S_1^z + S_2^z), \quad (4.51)$$

onde n indica a camada do filme. Utilizando o Hamiltoniano reduzido $H_n = -\beta \mathcal{H}_n$ fica:

$$H_n = K_n [(1 - \Delta) (S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y) + S_1^z S_2^z] + C_n (S_1^z + S_2^z), \quad (4.52)$$

onde o termo associado com as interações do sítio central agora é dado por:

$$C_n = K_n \left(\sum_i \sigma_{ni}^z - h_n \right).$$

A Função de Partição é dada por

$$Z_n = \sum_{i=1}^4 \exp(-\beta \lambda_i), \quad (4.53)$$

sendo λ_i o autovalor obtido a partir da diagonalização da matriz Hamiltoniana do sistema.

Usando a base canônica

$$\{|1\rangle = |++\rangle, |2\rangle = |+-\rangle, |3\rangle = |-+\rangle, |4\rangle = |--\rangle\},$$

obtemos:

$$Z_n = 2 [\exp(K_n) \cosh(2C_n) + \exp(-K_n) \cosh(2K_n(1 - \Delta))]. \quad (4.54)$$

A magnetização é definida por:

$$m_n = \frac{1}{2} \left\langle \frac{\partial}{\partial C_n} \ln [Z_n] \right\rangle. \quad (4.55)$$

Aplicando na Eq.(4.55) a relação dada pela Eq.(4.54), obtemos:

$$m_n = \frac{\sinh(2C_n)}{\cosh(2C_n) + \exp(-2K_n) \cosh[2K_n(1 - \Delta)]}. \quad (4.56)$$

Após a aplicação da média aos argumentos das funções na Eq.(4.56), o termo C_n fica relacionado com as magnetizações em cada camada do filme, sendo dado por:

$$C_n = (z_o - 1) K_n m_n + z_1 K_{n-1} m_{n-1} + z_1 K_{n+1} m_{n+1} - K_n h_n. \quad (4.57)$$

Analisando a Eq.(4.56) na região próxima da criticalidade aplicamos as condições: $m_n \rightarrow 0$ e $t \rightarrow t_c$, o que resulta em:

$$m_n = \Phi_n [(z_o - 1) K_n m_n + z_1 K_{n-1} m_{n-1} + z_1 K_{n+1} m_{n+1} - K_n h_n], \quad (4.58)$$

onde aplicamos o fato que nessa região temos $\sinh(2C_n) \approx 2C_n$ e $\cosh(2C_n) \approx 1$. A função Φ_n é dada por:

$$\Phi_n = \frac{2}{1 + \exp(-2K_n) \cosh[2K_n(1 - \Delta)]}. \quad (4.59)$$

4.3.3 Relações de Escala para o Filme Fino

Aplicamos as relações de escala dadas pelo Grupo de Renormalização entre as grandezas obtidas para $N = 1$ (m'_n, K'_n, h'_n) e $N = 2$ (m_n, K_n, h_n). Assim temos:

$$\begin{aligned} m'_n &= m_n l^{(d-y_h)}, \\ K'_n &= K_n l^{y_t}, \end{aligned}$$

onde d indica a dimensionalidade do sistema em estudo.

Aplicando as Eqs.(4.50) e (4.58) nestas relações obtemos:

$$K_n z_o \left[\Phi_n \frac{(z_o - 1)}{z_o} - l^{y_t} \right] m_n + K_{n-1} z_1 [\Phi_n - l^{y_t}] m_{n-1} + K_{n+1} z_1 [\Phi_n - l^{y_t}] m_{n+1} + \Gamma_h = 0, \quad (4.60)$$

onde $\Gamma_h = K'_n h'_n - l^{d-y_h} \Phi_n K_n h_n$ é o termo associado aos campos.

Inicialmente aplicaremos a Eq.(4.60) para obter a temperatura crítica reduzida t_c do sistema e o expoente y_t considerando campo nulo, i.e. $\Gamma_h = 0$.

Considerando um filme com interações J_s nas camadas localizadas nas duas superfícies do filme e J para as demais camadas fica:

$$\frac{[\Phi_n (z_o - 1) - z_o l^{y_t}]}{z_1 [\Phi_n - l^{y_t}]} \left(\frac{J_n}{J} \right) m_n + m_{n-1} + m_{n+1} = 0. \quad (4.61)$$

Ao aplicarmos a Eq.(4.61) na superfície temos que $J_n = J_s = xJ$ obtendo o coeficiente:

$$a = \frac{x [\Phi_s (z_o - 1) - z_o l^{y_t}]}{z_1 [\Phi_s - l^{y_t}]} \quad (4.62)$$

Para as demais camadas temos que $J_n = J$ obtendo assim um segundo coeficiente dado por:

$$b = \frac{[\Phi_b (z_o - 1) - z_o l^{y_t}]}{z_1 [\Phi_b - l^{y_t}]} \quad (4.63)$$

Com isso, formamos o seguinte sistema:

$$\left\{ \begin{array}{l} am_1 + m_2 + 0m_3 + 0m_4 + \dots + 0m_\ell = 0, \\ m_1 + bm_2 + m_3 + 0m_4 + \dots + 0m_\ell = 0, \\ 0m_1 + m_2 + bm_3 + m_4 + \dots + 0m_\ell = 0, \\ \dots\dots\dots \\ 0m_1 + 0m_2 + m_3 + 0m_4 + \dots + am_\ell = 0, \end{array} \right. \quad (4.64)$$

Reescrevendo o sistema (4.64) na forma matricial fica:

$$\begin{pmatrix} a & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & b & 1 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & b & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & a \end{pmatrix}_\ell \cdot \begin{pmatrix} m_1 \\ m_2 \\ m_3 \\ m_4 \\ \dots \\ m_\ell \end{pmatrix}_\ell = 0, \quad (4.65)$$

ou seja,

$$A_\ell \cdot M_\ell = 0, \quad (4.66)$$

onde A_ℓ é a matriz formada pelos coeficientes a e b e M_ℓ a matriz das magnetizações de cada camada. O comportamento crítico do sistema encontra-se todo descrito pela matriz A_ℓ e seus valores críticos são encontrados a partir da solução não trivial da Eq.(4.66), ou seja, $\det A_\ell = 0$.

Devido o sistema ser composto de equações acopladas, encontramos os valores de t_c através de métodos numéricos para calcular as raízes na Eq.(4.66). Nosso objetivo agora é encontrar uma relação generalizada para o determinante da matriz A_ℓ , e assim encontrar uma relação entre a temperatura crítica do filme e o número de camadas que ele possui. Através do método de Laplace com o cálculo de cofatores encontramos por meio de indução matemática a seguinte relação para a matriz A_ℓ :

$$\det A_\ell = (ab - 1)^2 B_{\ell-4} - 2a(ab - 1)B_{\ell-5} + a^2 B_{\ell-6}, \quad (4.67)$$

sendo B_ℓ o determinante da matriz interna que apresenta somente coeficientes b , definido por

$$B_\ell = \begin{vmatrix} b & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & b & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & b \end{vmatrix}.$$

Encontramos novamente uma relação generalizada para o determinante B_ℓ através do mesmo procedimento utilizado para a matriz A_ℓ . Obtemos então o seguinte resultado

$$B_\ell = bB_{\ell-1} - B_{\ell-2}. \quad (4.68)$$

Utilizando o software MAPLE V aplicamos o comando **rsolve** na relação (4.68) para encontrarmos sua relação de recorrência, ou seja,

$$\text{rsolve}(\{bB(\ell-1) - B(\ell-2) - B(\ell) = 0; B(0) = 0, B(1) = 1\}, B), \quad (4.69)$$

com as condições iniciais $B_0 = 0$ e $B_1 = 1$ chegamos então, após agruparmos o resultado obtido em (4.69), à seguinte relação

$$B_\ell = \frac{1}{\sqrt{b^2-4}} \left\{ \left[\frac{b + \sqrt{b^2-4}}{2} \right]^{\ell+1} - \left[\frac{b - \sqrt{b^2-4}}{2} \right]^{\ell+1} \right\}, \quad (4.70)$$

equação válida apenas para o caso em que $b^2 > 4$. Para $b^2 < 4$ realizamos a seguinte substituição na Eq.(4.70): $\sqrt{b^2-4} \longrightarrow i\sqrt{(4-b^2)}$ dando como resultado:

$$B_\ell = \frac{\sin[\theta(\ell+1)]}{\sin \theta}, \quad (4.71)$$

onde $\theta = \cos^{-1}(\frac{b}{2})$.

De posse dessas relações, resolvemos numericamente usando o método de interpolação de raízes para encontrarmos todos os valores de T_c que satisfaçam

$$\det A_\ell = 0. \quad (4.72)$$

4.3.4 Resultados

Temperatura Crítica

A aproximação axial⁷ na teoria de campo efetivo, introduz no sistema uma anisotropia responsável pela ocorrência de transição de fase no modelo de Heisenberg, mesmo para sistemas bidimensionais, em desacordo com o teorema de Mermin-Wagner[62], que prevê ausência de ordem de longo alcance em 2D a temperatura finita. No entanto, a aplicação de MFRG em filmes finos tem previsto o valor correto de $t_c = 0$ para $L = 1$.

Para análise da temperatura crítica de um sistema de camadas, inicialmente mostramos na Fig.(4.17) os resultados obtidos por Amazonas[75] para a magnetização de um sistema com $\ell = 10$ camadas aplicando campo médio, onde temos a magnetização de cada camada tratada separadamente. Observamos que as curvas apresentam comportamentos semelhantes para camadas simétricas do filme. No entanto, próximo do estado fundamental e da região de transição de fase, todas as curvas convergem para um mesmo valor, o que justifica a aplicação da condição $m_n \rightarrow 0$ na região da criticalidade para todas as camadas.

Para a determinação do comportamento da temperatura crítica, aplicamos a condição $K'_n = K_n = K_c$ na Eq.(4.61). Com essa condição, resolvemos numericamente a Eq.(4.70) através do método de Newton-Raphson para a determinação de raízes.

Mostramos na Fig.(4.18) o comportamento da temperatura crítica em função do número de camadas para vários valores do parâmetro Δ . Os casos Ising ($\Delta = 1.0$) e Heisenberg ($\Delta = 0.0$) são mostrados e obedecem ao comportamento esperado $t_c(IS) > t_c(HS)$. O caso Heisenberg, em particular, mostra que para $L = 1$ camada temos $t_c = 0.0$ em concordância com o teorema de Mermin-Wagner. Tais comportamentos também são

⁷Quando as interações dos spins do aglomerado com seus spins vizinhos ocorrem somente em uma dada direção (eixo z).

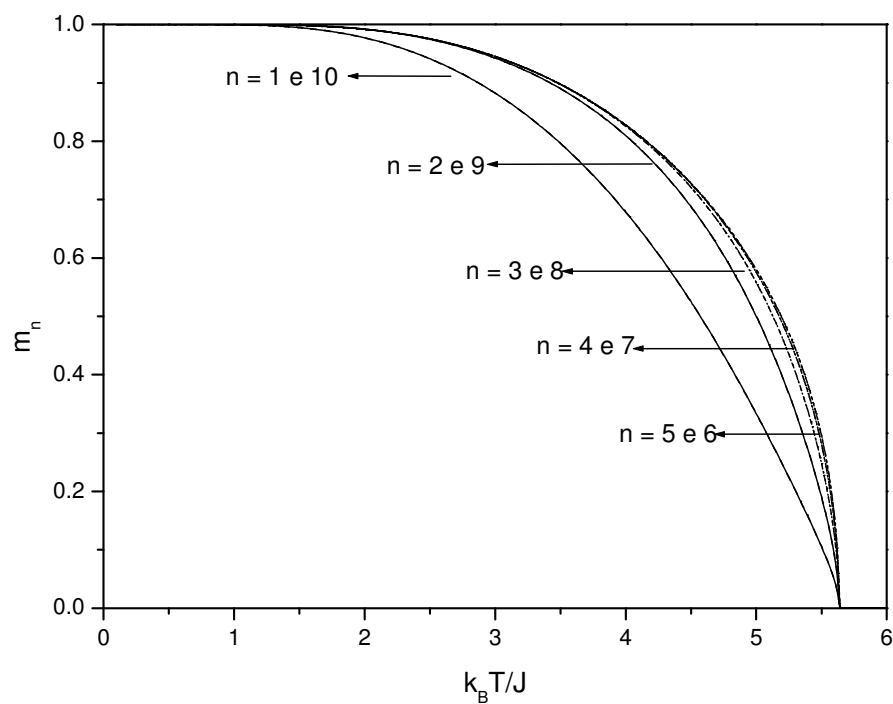


Figura 4.17: Comportamento da magnetização em função da temperatura reduzida $t = k_B T/J$ para cada camada n de um filme fino Heisenberg na rede cúbica simples e parâmetro $x = 0.0$.

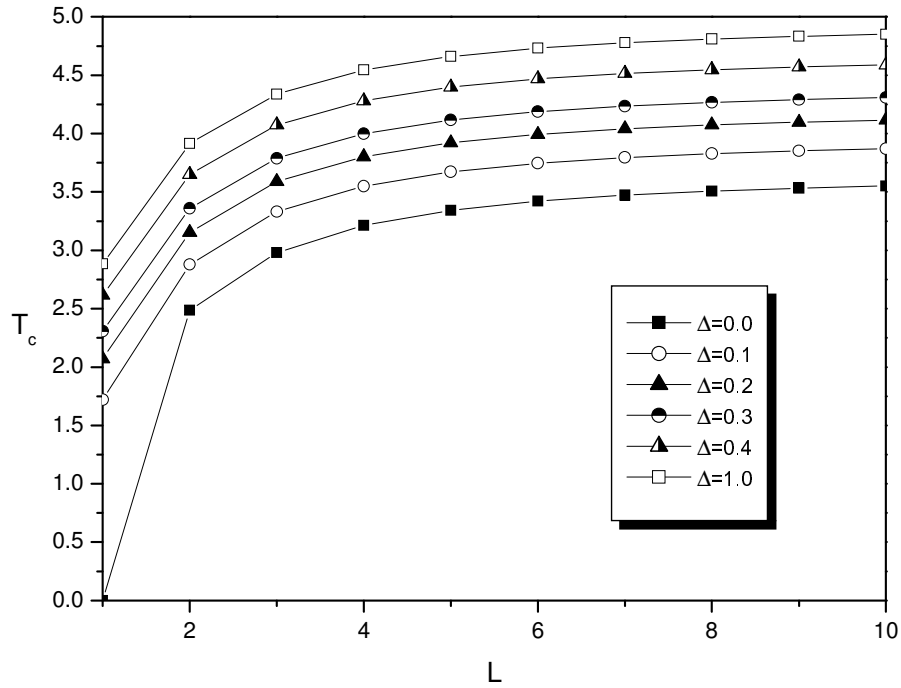


Figura 4.18: Comportamento da temperatura crítica t_c em função do número de camadas do filme para diferentes valores do parâmetro de anisotropia Δ .

observados na Fig.(4.19) onde temos agora a temperatura crítica em função do parâmetro Δ , agora considerando várias camadas do filme, tendendo para o caso 3D quando $L \rightarrow \infty$. A temperatura crítica exibe forte variação na região de crossover, localizada entre $L = 1$ e 2 camadas.

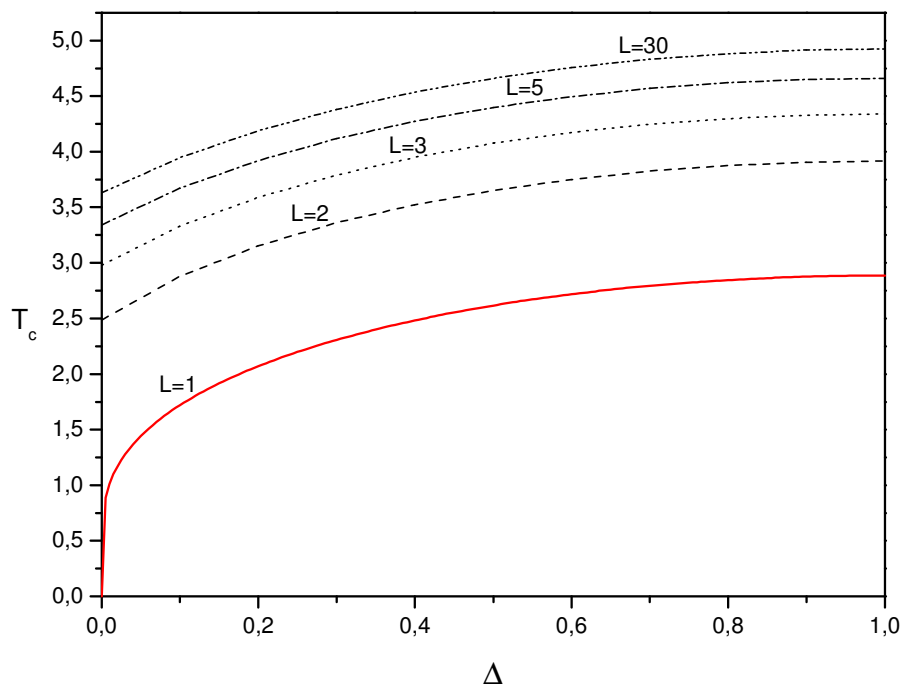


Figura 4.19: Comportamento da temperatura crítica t_c em função do parâmetro de anisotropia Δ para diferentes valores do número de camadas do filme.

Expoentes Críticos

O expoente crítico térmico y_t é obtido através da resolução numérica da Eq.(4.70) considerando o valor de t_c encontrado para cada par de valor (Δ, L) . Isso é feito através da leitura do arquivo que contém os dados de t_c utilizados para a construção das curvas mostradas nas Figs.(4.18) e (4.19).

Para o expoente crítico y_t , faremos uso da relação de escala para os campos dada por:

$$h'_n = h_n l^{y_h}.$$

Próximo a t_c todos os coeficientes $m_n \rightarrow 0$ e $K_n = K'_n = K_c$. Aplicamos essas condições na Eq.(4.60), ficando apenas o termo Γ_h relacionado aos campos. Isso resulta na expressão para y_h dada por:

$$y_h = \frac{1}{2} \left[d + \frac{\ln(\Phi_c)}{\ln(l)} \right], \quad (4.73)$$

onde $\Phi_c = \Phi_n|_{K_n=K_c}$ e considerando o caso $x = 1.0$ para a superfície. O fator de escala l é melhor definido através da relação de Slotte aplicada no tratamento de GR entre $N = 1$ e 2 dada por:

$$l_{1-2} = 3 \sqrt{\frac{d}{(9d - 5)}}. \quad (4.74)$$

Devemos tomar cuidado ao utilizarmos a Eq.(4.73), pois o valor da dimensão d deve estar de acordo com o número de camadas utilizadas.

Encontramos a relação entre os expoentes y_t e y_h com β a partir das relações de escala para a energia livre, ou seja:

$$G(\lambda^{y_t} \varepsilon, \lambda^{y_h} H) = \lambda G(\varepsilon, H). \quad (4.75)$$

Após diferenciarmos os dois lados dessa equação com relação a H e fazendo $H = 0$ e $\varepsilon \rightarrow 0$ obtemos, para um sistema com uma dimensão d qualquer:

$$\beta = \frac{d - y_h}{y_t}. \quad (4.76)$$

Mostramos nas Figs.(4.20) e (4.21) o comportamento para os expoentes críticos y_t , y_h e β nos casos Ising e Heisenberg em função do número de camadas do filme. O comportamento encontrado para β é semelhante ao resultado experimental mostrado na Fig.(4.16), obtido por Li e Baberschke, sendo $\beta_{IS} = 0.345$ e $\beta_{HS} = 0.341$ para $L = 10$, próximos dos encontrados experimentalmente, no entanto, sendo $\beta_{IS} < \beta_{HS}$, resultante do número de spins considerados em cada aglomerado. O comportamento de y_t e y_h apresentam comportamentos diferenciados para cada caso, tendo uma descontinuidade observada para $L \leq 3$ no modelo de Heisenberg, região onde notamos o *crossover* de dimensionalidade, marcado pela súbita variação da temperatura crítica do sistema.

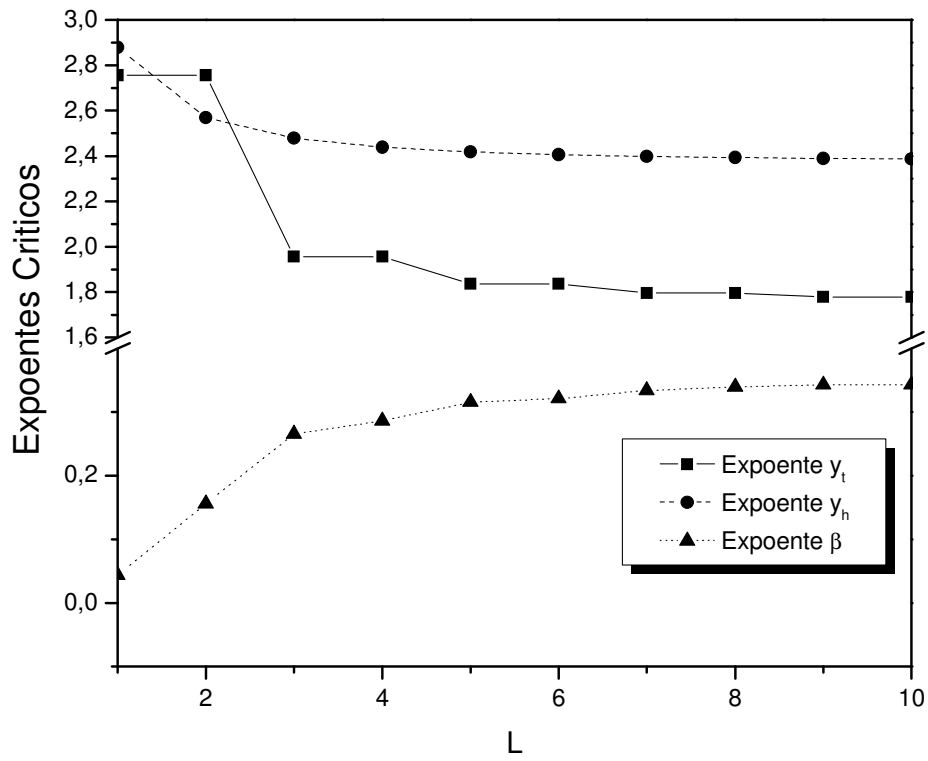


Figura 4.20: Comportamento dos expoentes críticos térmico (y_t), magnético (y_h) e β como função do número de camadas do filme considerando o modelo de Ising ($\Delta = 1.0$).

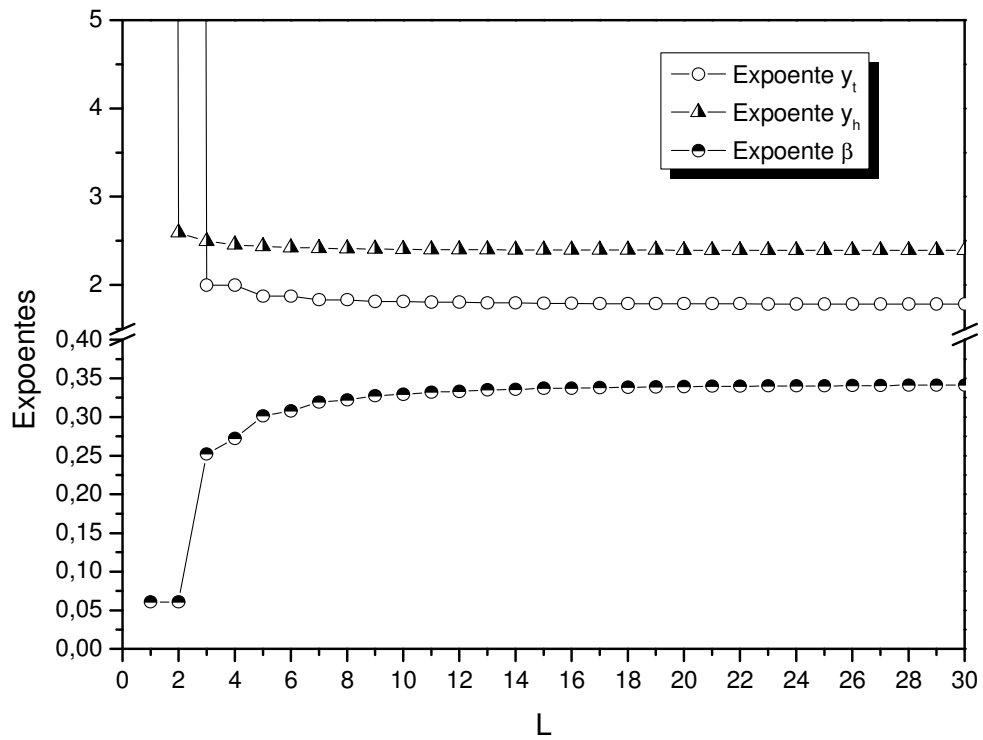


Figura 4.21: Comportamento dos expoentes críticos térmico (y_t), magnético (y_h) e β como função do número de camadas do filme considerando o modelo de Heisenberg ($\Delta = 0.0$).

Referências

- [1] F. Gomory, M. Solovyov, J. Souc, C. Navau, J. Prat-Camps, A. Sanchez, *Science*, **335**,1466 (2012).
- [2] Y. Tsai, T. Tyler, N. M. Jokerst, D. R. Smith, *Nature Materials*, Publicação online (2012).
- [3] S. Khatua, W. Chang, P. Swanglap, J. Olson, S. Link, *Nano Letters*, **11**, 3797 (2011).
- [4] T. Ergin, J. Fischer, M. Wegener, *CLEO 2011 Proceedings*, Seção QTuG5 (2011).
- [5] F. Huang, M. T. Kief, G. J. Mankey, R. F. Willis, *Phys. Rev. B* **49**, 3962 (1994).
- [6] T.A. Ostler, J. Barker, R.F.L. Evans, R.W. Chantrell, U. Atxitia, O. Chubykalo-Fesenko, S. El Moussaoui, L. Le Guyader, E. Mengotti, L.J. Heyderman, F. Nolting, A. Tsukamoto, A. Itoh, D. Afanasiev, B.A. Ivanov, A.M. Kalashnikova, K. Vahaplar, J. Mentink, A. Kirilyuk, Th. Rasing, A.V. Kimel, *Nature Communications*, **3**, 666 (2012).
- [7] W. Schindler, J. Kirschner, *Phys. Rev. B*, **55**, 1989 (1997).
- [8] J.G. Borges, Tese de Doutorado, UFRGS, (2007).
- [9] J. L. Bubendorff, E. Beaurepaire, C. Mény, *Phys. Rev. B*, **56**, R7120 (1997).
- [10] M. D. Stiles, Jiang Xiao, A. Zangwill, *Phys. Rev. B*, **69**, 054408 (2004)
- [11] S. Bader, *J. Magn. and Magn. Mat.*, **100**, 440 (1991).

- [12] J. Camarero, J. J. Miguel, R. Miranda, A. Hernando, *Phys. Rev. B*, **64**, 125406 (2001).
- [13] C. W. Chen, *Journ. of Mater. Sc.*, **26**, 1705 (1991).
- [14] S. Iwasaki, K. Takemura, *IEEE Transac. on Magnetism*, **11**, 1173 (1975).
- [15] Alfred Ludwig, *App. Surf. Sc.*, **223**, 78 (2004).
- [16] Y. Li and K. Baberschke, *Phys. Rev. Lett.*, **68**, 1208 (1992).
- [17] M. Sorescu, A. Grabiasa, D. Tarabasanu, L. Diamandescu, *App. Surf. Sc.*, **217**, 233 (2003).
- [18] R. Allenspach, A. Bischof, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 3385 (1992).
- [19] C. Santamaria, H.T. Diep, *J. Magn. and Magn. Mat.*, 212, 23 (2000).
- [20] D. Li, M. Freitag, Z. Q. Qiu, S. D. Bader, *Phys. Review. Lett.* **72**, 3112 (1994).
- [21] F. Baudelet, M. T. Lin, W. Kuch, K. Meinel, C. Schneider, J. Kirscher, *Phys. Rev. B* **51**, 1256 (1995).
- [22] M. Speckman, H. P. Oepen, H. Ibach, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 2035 (1995).
- [23] T. W. Capeheart, M. E. Fisher, *Phys. Rev. B*, **13**, 5021 (1976).
- [24] L. Craco, L. De Cesare, I. Rabuffo, I.P. Takov, *Phys. A*, **270**, 486 (1999).
- [25] J.A. Bray, M.A. Moore, *J. Phys. A*, **11** 715 (1978).
- [26] I.D. Lawrie, *J. Phys. C*, **11** 3857 (1978).
- [27] D.I. Uzunov, M. Suzuki, *Phys. A*, **216** 489 (1995).
- [28] T.C. Lubensky, M.H. Rubin, *Phys. Rev. B*, **12** 3885 (1975).

- [29] M.E. Fisher, in: M.S. Green (Ed.), *Critical Phenomena, Proceedings of the 51th Enrico Fermi Summer School*, Academic Press, New York (1971).
- [30] M.E. Fisher, M.N. Barber, *Phys. Rev. Lett.*, **28**, 1512 (1972).
- [31] M.N. Barber, C. Domb, J.L. Lebowitz, *Phase Transitions and Critical Phenomena*, **8**, Academic Press, London, p. 145 (1983).
- [32] D.J. Mills, *Phys. Rev. B*, **3**, 3887 (1971).
- [33] R.A. Weiner, *Phys. Rev. B*, **8**, 4427 (1973).
- [34] C. Cucci, M.G. Pini, P. Politi, A. Rettori, *J. Magn. and Magn. Mat.*, **231**, 98 (2001).
- [35] D.P. Landau, K. Binder, *J. Magn. and Magn. Mat.*, **104**, 841 (1992).
- [36] Y. Laosiritaworn, J. Poulter, J. B. Staunton, *Phys. Rev. B*, **70**, 104413 (2004)
- [37] J. T. Ou, F. Wang, D. L. Lin, *Phys. Rev. E* **56**, 3 (1997).
- [38] D. L. Lin, H. Che, W. Lai, T. F. George, *Phys. Rev. E* **49**, 2155 (1994).
- [39] J. C. Neto, J. R. de Sousa, *Phys. Stat. Sol.* **225**, 223 (2001).
- [40] J. C. Neto, J. R. de Sousa, *Phys. Stat. Sol.* **212**, 343 (1999).
- [41] M. S. Amazonas, J. C. Neto, J. R. de Sousa, *J. Magn. and Magn. Mat.*, **270**, 119 (2003).
- [42] M. S. Amazonas, J. C. Neto, J. R. de Sousa, *Phys. A*, **331**, 198 (2003).
- [43] D. S. Ritchie, M. E. Fisher, *Phys. Rev. B* **7**, 480 (1973).
- [44] R. Zhang, Roy F. Willis, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2665 (2001).
- [45] G. T. Rade, *Bull. Am. Phys. Soc.* **112**, 127 (1957).
- [46] D. L. Mills, A. A. Maraduddin, *J. Phys. Chem. Solids* **28**, 1855 (1967).

- [47] J. Cabral Neto, J. R. de Sousa, J. A. Plascak, *Phys. Rev. B* **66**, 644 (2002).
- [48] G. Thoulouse, *Commun. Phys.*, **2**, 115 (1977).
- [49] J. R. Viana, *Tese de Doutorado*, UFAM-UFSCar, pg. 134 (2007).
- [50] M. N. Barber, *J. Phys. A: Math. Gem.*, **12**, 679 (1979).
- [51] F.Y. Wu, *Phys. Rev. B*, **4**, 2312 (1971); J. Oitmara, *J. Pys. A: Math Gem.*, **14**, 1159 (1981).
- [52] R. H. Swendsen, S. Krinsky, *Phys. Rev. Lett.*, **43**, 177 (1979); D. P. Landau, K. Binder, *Phys. Rev. B*, **31**, 5946 (1985).
- [53] K. Tanaka, T. Horiguchi, T. Morita, *Phys. Lett. A*, **165**, 266 (1992).
- [54] J. A. Plascak, *Phys. A*, **183**, 563 (1992); P. M. Oliveira, C. Tsallis, G. Scwacheinn, *Phys. Rev. B*, **29**, 2755 (1984); M. P. Nightingale, *Phys. Lett. A*, **59**, 486 (1977); H. W. Blote, M. P. Nightingale, *Phys. A*, **143**, 274 (1985).
- [55] F. Aguilera-Granja, J. L. Morán-Lopez, *J. Phys. Cond. Matter*, **5**, A195 (1993).
- [56] D. P. Landau, R. H. Swendsen, *Phys. Rev. B*, **33**, 7700 (1986).
- [57] A. Malakis, P. Kalozoumis e N. Tyraskis, *Eur. Phys. J. B*, **50**, 63 (2006).
- [58] M. Suzuki, *Coherent Anomaly Method: Mean Field, Fluctuations and Systematics*, World Scientific (1995).
- [59] A. Pelizzola, *Phys. Rev. E*, **49**, R2503 (1994).
- [60] J.G. Berdnorz, K.A. Muller, *Z. Phys. B*, **64**, 189 (1986).
- [61] E. Manousakis, *Rev. Mod. Phys.*, **63**,1 (1991).
- [62] N. D. Mermin, H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.*, **22**, 1133 (1966).

- [63] N. S. Branco, J. R. de Sousa, *Phys. Rev. B*, **62**, 5745 (2002); I. G. Araújo, J. R. de Sousa, *Solid. St. Comm.*, **115**, 265 (2000); I. G. Araújo, J. R. de Sousa, N. S. Branco, *Phys. A*, **305**, 585 (2002); J. R. de Sousa, N.S. Branco, B. Boechat, C. Cordeiro, *Phys. A*, **328**, 167 (2003); A. M. C. de Sousa, *Phys. Rev. B*, **48**, 3744 (1993); V. E. Sinitsyn, A. S. Boyarchenkov, A. S. Ovchinnikov, I. G. Bostrem, *J. Exp. Theor. Phys.*, **101**, 472 (2005).
- [64] L. Siurakshina, D. Ihle, R. Hayn, *Phys. Rev. B*, **61**, 14601 (2000).
- [65] W. A. S. Nunes, J. R. de Sousa, *Tese de Doutorado*, UFSCar (2012).
- [66] C. Domb, *J. Phys. A*, **6**, 1296 (1973).
- [67] J. Zinn Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*, Oxford University Press, Oxford (1989).
- [68] K. G. Wilson, *Phys. Rev. B* **4**, 3174 (1971).
- [69] C. Domb, D. L. Hunter, *Proc. Phys. Soc.*, **86**, 1147 (1965).
- [70] P. Heller, G. B. Benedek, *Phys. Rev. Lett.*, **8**, 428 (1962).
- [71] J. C. Le Guillou, J. Zinn-Justin, *Phys. Rev. Lett.*, **12.**, 95 (1977).
- [72] R. M. Suter, C. Hohenemser, *J. Appl. Phys.*, **50**, 1814 (1979).
- [73] W. Durr, M. Taborelli, O. Paul, R. Germar, W. Gudat, D. Pescia, M. Landolt, *Phys. Rev. Lett.*, **62**, 206 (1989).
- [74] K. Binder, P. C. Hohenberg, *Phys. Rev. B*, **9**, 2194 (1974).
- [75] M. S. Amazonas, *Tese de Mestrado*, UFAM (2003).

Capítulo 5

Considerações Finais e Perspectivas

Os resultados encontrados para o modelo de Ising puro através da nova proposta de energia livre, juntamente com a implementação numérica da TOD, permitiu tratar sistemas com aglomerados maiores ($N \geq 4$) e mais complexos.

Para o RFIM, o aumento no tamanho do aglomerado mostrou, para o caso 3D ferromagnético, a tendência da linha de transição de fase em ser inteiramente de 1ª ordem para o caso real ($N \rightarrow \infty$), eliminando a presença de um PTC nesse diagrama. Por outro lado, a análise o comportamento do campo crítico h_c mostra uma tendência dessa grandeza em se anular com o aumento de N , o que indica ser essa a dimensão crítica d_c superior desse modelo, abaixo da qual não temos ordem de longo alcance. No caso AF, analisado pela primeira vez neste trabalho, constatamos que o campo aleatório não elimina a ordem magnética do sistema 2D ou 3D e assim temos evidenciado o comportamento diferenciado F-AF.

O tipo de distribuição de probabilidade adotada mostrou uma diferença significativa nos resultados encontrados, confirmando trabalhos anteriores, bem como a influência da aleatoriedade no diagrama de fases, expresso pela dispersão σ no caso da distribuição gaussiana duplo-pico.

Além desses resultados, a nova formulação da energia livre permitiu, pela primeira vez, obter as propriedades termodinâmicas do RFIM nas duas regiões de transição de

fases, evidenciado o salto característico no caso de 1^a ordem, devido a presença de calor latente. O comportamento da energia livre obtido tanto em função da temperatura como em função do parâmetro de ordem está de acordo com o previsto por métodos rigorosos como a expansão de Landau, corroborando o uso de tal metodologia.

A aplicação do modelo de spins frustrados $J_1 - J_2$ em filmes finos, mostrou a influência do aumento na dimensionalidade do sistema no comportamento do diagrama de fases $t - \alpha$, resultado também inédito na literatura.

A aplicação do Grupo de Renormalização de campo médio nesse sistema, possibilitou a reprodução dos resultados experimentais para o expoente β com aumento do número de camadas, sendo afetado pela região de transição de dimensionalidade. No entanto, o comportamento $\beta_{IS} < \beta_{HS}$ mostra a necessidade de se trabalhar com aglomerados maiores.

Nossa perspectiva é que, com base no sucesso dessas aplicações, possamos tratar outros modelos como o de Blume-Capel para spin 1, bem como melhorar o procedimento numérico para crescer o sistema ainda mais para assim observar melhor o comportamento do diagrama de fases para o RFIM ferromagnético 3D.