

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
(CONVÊNIO UFAM/UFSCar)**

**Transição de fase quântica e modelos de
spins frustrados**

por

José Roberto Viana Azevedo

Manaus-2007

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

Transição de fase quântica e modelos de spins
frustrados

por

José Roberto Viana Azevedo

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

Apoio financeiro:
FAPEAM

Fevereiro de 2007

Resumo

Nesta tese estudaremos a transição de fase quântica dos modelos de spins quânticos frustrados: i) Modelo de van Hemmen de spin $S=1$ com campo transversal e anisotropia biaxial; ii) modelo de Heisenberg de spin $\frac{1}{2}$ anisotrópico com interações competitivas entre primeiros e segundos vizinhos (modelo J_1 - J_2); iii) modelo de Ising com campo transversal e com interações de primeiros e segundos vizinhos. O primeiro modelo magnético é estudado para simular as propriedades de vidro de spin em sistemas reais, como, por exemplo, a cúspide da susceptibilidade magnética. Usamos as densidades de probabilidades bimodal e gaussiana nas ligações aleatórias. Aplicando a aproximação de primeira ordem para desacoplar o produto de exponenciais de operadores, calculamos a energia livre e parâmetro de ordem. Tanto o campo transversal quanto as anisotropias transversais, individualmente, atuam como agentes de destruição da ordem vidro de spin. Neste modelo são estudadas transições de fases quânticas de primeira e segunda ordem. No segundo modelo usamos o formalismo da teoria de campo efetivo via técnica do operador diferencial e grupo de renormalização na aproximação de campo efetivo (EFRG). São determinados diagramas de fases, onde observamos os estados ferromagnético (F), antiferromagnético (AF), superantiferromagnético (SAF) (denominado de colinear para uma rede quadrada e laminar para uma rede cúbica simples). No caso Heisenberg numa rede quadrada, em $T=0$ temos um estado paramagnético quântico que é sugerido a ser o estado spin-líquido (SL) discutido na literatura. Para a rede cúbica simples esse estado spin-líquido não foi observado, mostrando que o efeito da dimensionalidade no sistema influencia nas flutuações quânticas em $T=0$. Nos diagramas de fases temos as presenças de transições de primeira e segunda ordem. Finalmente, tratamos da criticalidade do modelo de Ising quântico frustrado, e em $T=0$ temos estados com gap de energia proporcional a intensidade do campo transversal, que dependendo do parâmetro de frustração o sistema presencia também transições de primeira e segunda ordem.

Abstract

In this thesis, we will study the quantum phase transition of frustrated quantum spin models: (i) van Hemmen model ($S = 1$) with transverse and anisotropic biaxial field (ii) Heisenberg model ($S = 1/2$) with competitive interaction first and second nearest neighbours (J1-J2 model) (iii) Ising model with transverse field and first magnetic model is studied to simulate the spin glass properties in real systems like the magnetic susceptibility cusp. We use the bimodal and gaussian probability distribution for random interactions. Applying the first-order approximation to decouple the products of exponential of operators, we calculate free energy and order parameter. Both, the transverse field and anisotropic transverse field destroy the spin glass order. In the second model, we use the effective field theory with differential operator technique and effective field renormalization group (EFRG) formalism. The phase diagrams are determined where are observe ferromagnetic (F), antiferromagnetic (AF) and superantiferromagnetic (SAF) states. In case of Heisenberg model in a square lattice at $T=0$, we have a quantum paramagnetic state that has been considered as a spin-liquid (SL) state in literature. For a simple cubic lattice, this spin-liquid state has not been observed. Which shows that the dimension of the system has influences on the quantum fluctuation at $T=0$. In the phase diagrams are the presence of first and second order phase transitions. Finally, are consider the critical behavior of the frustrated quantum Ising model and at $T=0$ we have the states with energy gap proportional to the transverse field intensity. Depending in the frustration parameter the system also shows first and second order transitions.

Sou grato

Primeiramente, a Deus e ao Nosso Senhor Jesus Cristo nos quais é baseado todos os meus princípios de amor e respeito ao próximo. Muito grato por nos dá a sua Guarnição Divina em cada dia de nossos aprendizados, trazendo para cada um de nós o fundamental para a nossa evolução espiritual, que é a luz, a paz e o amor.

Aos meus pais, Antônio e Maria Eulina pela educação familiar, ao grande amor que possuem pelos filhos e a grande luta para nos manter unidos.

Aos meus irmãos, Renildo, Angela, Arlena e Luis Alberto obrigado pelo convívio tranquilo e o respeito mútuo.

Aos meus novos amores, Fernanda minha linda e amável companheira que trouxe paz e amor, Yasmim filha que ganhei nesta vida e Maria Roberta minha princesinha que Deus me deu, me perdoem por não dar a atenção que vocês merecem.

Aos meus companheiros de luta acadêmica do Departamento de Física da UFAM.

Ao meu orientador, Dr. José Ricardo, pela amizade e instrução acadêmica, sem a sua orientação esta tese não teria o mesmo nível de informação, obrigado por lutar pelas questões acadêmicas, eis um grande homem.

Em memória de Raimunda Ribeiro Viana, acredito muito que um dia poderemos nos ver novamente, sempre estarás em minha memória e em meu coração.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Considerações Gerais	1
1.2	Modelagem teórica do magnetismo	11
1.3	Transição de Fase e Fenômenos Críticos	19
1.3.1	Expoentes Críticos	21
1.3.2	Hipótese de Widom e Universalidade	28
1.3.3	Argumento de Kadanoff	30
1.3.4	Teoria de Landau	31
1.4	Organização do presente trabalho	38
2	Aspectos gerais sobre transição de fase quântica	44
2.1	Considerações gerais	44
2.2	Grupo de Renormalização e relação de escala	47
2.3	Modelo de Ising com campo transversal	54
2.3.1	MICrT e interação de longo alcance	55
2.3.2	Transição de fase à temperatura finita	59
2.3.3	Transição de fase a $T = 0$	63
3	Vidro de Spin Quântico com Anisotropia Biaxial	68
3.1	Introdução	68
3.1.1	Modelos teóricos para explicar o vidro de spin	71

3.1.2	Teorias e experimentos sobre compostos vidro de spin anisotrópico	77
3.2	Modelo de Van Hemmen Quântico Anisotrópico Biaxial	86
3.3	Resultados e discussões	95
3.3.1	Discussões dos resultados	97
4	Modelo de Heisenberg quântico anisotrópico	134
4.1	Introdução	134
4.1.1	Técnica do operador diferencial	150
4.2	Modelos $J_1 - J_2$ numa rede quadrada	166
4.2.1	Aglomerado com $N = 1$ sítio central	167
4.2.2	Aglomerado com $N = 2$ spins	176
4.2.3	Aglomerado com $N = 4$ sítios centrais	185
4.3	Modelos $J_1 - J_2$ anisotrópico numa rede cúbica simples	192
4.3.1	Aglomerado com $N=1$ sítio central	193
4.3.2	Aglomerado com $N = 2$ sítios centrais	196
4.4	Discussão dos resultados	204
4.4.1	Caso Ising ($\Delta = 1$)	205
4.4.2	Caso Heisenberg	212
5	Modelo de Ising frustrado com campo transversal	227
5.1	Introdução	227
5.2	Modelos numa rede quadrada	231
5.2.1	Aglomerado com $N = 1$ sítio central	231
5.2.2	Aglomerado com $N = 2$ sítios centrais	233
5.3	Modelos J_1 - J_2 numa rede cúbica simples	235
5.3.1	Aglomerados com $N = 2$ sítios centrais	235
5.4	Resultado e discussões	236
6	Considerações finais e perspectivas	245

A	Procedimentos Numéricos	253
1.1	Métodos Numéricos de Newton-Raphson	253
1.2	Método da Quadratura Gaussiana	256
1.3	Solução Analítica para Polinômio de grau 3	259
1.4	Métodos de Newton-Raphson e de Briot-Ruffini	261
B	Determinação dos Operadores Componentes de Spin	268
C	Proposta de Implementação da Técnica do Operador Diferencial	271

Lista de Figuras

1.1	Comportamento das magnetiza ções espontâneas dos compostos formados por níquel (Ni), ferro (Fe) e cobalto (Co). As curvas teóricas são baseadas na teoria de Weiss.	2
1.2	Comportamento da magnetização total de um sistema ferrimagnético em função da temperatura.	5
1.3	Susceptibilidade do composto antiferromagnético $MnCl_2 \cdot 4H_2O$, obtido experimentalmente por Lasher, Van den Broek e Goerter (1958).	7
1.4	Diagrama de fase referente ao comportamento da temperatura T em função do campo H para o sal antiferromagnético $NiCl_2 \cdot 6H_2O$ [10].	8
1.5	Diagrama de fase da temperatura T em função do campo H para o composto $Dy_3Al_5O_{12}$ [13]. A curva contínua representa a linha de transição e a pontilhada uma linha de coexistência (transição de primeira ordem). O círculo cheio representa o ponto tricrítico.	10
1.6	(a) metamagneto fortemente anisotrópico, (b) metamagneto fracamente anisotrópico. As curvas cont ínuas são linhas de transição (segunda ordem). As curvas tracejadas e pontilhadas são linhas de coexist ência (primeira ordem).	10
1.7	Comportamento de $\ln(M_o)$ versus $\ln(-t)$, $\ln\chi^{-1}$ o versus $\ln t$ e $\ln M$ versus $\ln H$ para a liga metálica $Fe_{1-x}Al_x$ com $x = 0.10$. As inclinações das curvas determinam os expoentes críticos β, γ e δ , respectivamente [41].	24

1.8	(a) Capacidade térmica molar isobárica C_p do níquel como função da temperatura. (b) Gráfico $\log - \log$ de $\frac{dC_p}{dt}$ versus $ T - T_c $. A inclinação da reta ajustada aos dados vale -0.90 que representa um expoente $\alpha = -0.10$ [45].	25
1.9	Comportamento de $\frac{H}{ t ^\Delta}$ versus $\frac{M(t,H)}{ t ^\beta}$ para o composto ferromagneto CrBr_3 obtidos experimentalmente. Observe os colapsos das duas curvas, uma para $T > T_c$ e a outra para $T < T_c$ confirmando a hipótese de Widom. . .	30
1.10	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. PTC representa o ponto tricrítico.	34
1.11	Comportamento da energia livre no plano $a - b$. Sendo indicadas as regiões de transição de primeira e segunda ordem, além do ponto tricrítico. . . .	36
2.1	Poço duplo de potencial V ao qual o próton H^+ está sujeito no MICT. O campo transversal gera estados excitados, cuja energia é proporcional ao campo.	55
2.2	Comportamento da temperatura crítica $K_B T_c / J$ em função do campo transversal Ω / J	60
2.3	Comportamentos da magnetização em função da temperatura para valores diferentes do campo transversal.	61
2.4	Comportamento da relação $\log(m)$ versus $\log(t)$ para campo transversal nulo e não nulo. A inclinação das retas determinam o expoente crítico β	62
2.5	Comportamento da energia livre por spin reduzida no estado fundamental como função da magnetização. Na faixa $0 < \omega < \omega_c$ temos dupla degenerescência, enquanto que para $\omega \geq 1$ temos um estado singleto com mínimo de energia.	64
2.6	Comportamento das curvas da energia mínima e da energia do primeiro estado excitado em função do campo transversal aplicado no sistema. . .	65

3.1	Rede quadrada com ligações de sinais aleatórios para os vizinhos mais próximos. (a), temos uma plaqueta não frustrada. Nela podemos orientar os momentos magnéticos e todas as ligações são satisfeitas. (b) a plaqueta é frustrada. Neste caso nem todas as ligações foram satisfeitas, existe um spin frustrado. (c) temos uma configuração de equilíbrio de uma plaqueta frustrada no caso dos momentos poderem se orientar ao longo de qualquer direção no plano da figura.	76
3.2	(a) Comportamento da energia livre em função da magnetização para vários valores de temperatura, sendo observados os mínimos de energia em que o sistema se encontra em equilíbrio termodinâmico [31]. No ponto $\tau_c = 0.6$ o sistema sofre uma transição de fase de primeira ordem.(b) diagrama de fase no plano $T/J - \Delta/J$, o ponto A é um ponto tricrítico e o ponto $\Delta/J = 0.5$ é o valor crítico da anisotropia Δ/J , as linhas contínuas e descontínuas são de transição de primeira e segunda ordem, respectivamente.	79
3.3	Diagrama de fase experimental no plano $D/J - T/J$ obtido a partir dos pontos das cúspides referentes aos compostos ZnMn e CdMn obtido por[37]. Tamb ém são incluídos os resultados obtidos por [36]. As linhas contínuas servem como guia de referência nos últimos anos.	81
3.4	Comportamento da temperatura de congelamento versus o campo transversal, obtido experimentalmente para o composto $\text{LiHo}_{0.167}\text{Y}_{0.833}\text{F}_4$ [41].	84
3.5	Resultados do diagrama de fase no plano $T - \Omega$ obtidos para modelos referentes a sistemas vidro de spin que são comparados com o resultado experimental para o composto $\text{LiHo}_{0.167}\text{Y}_{0.833}\text{F}_4$ [41]. (a) Resultados obtidos por Viana e colaboradores [46] (linha), Goldschmidt [3] (pontos circulares) e os pontos experimentais (pontos triangulares). (b) Resultados obtidos por Continentino e colaboradores [42] e o resultado experimental obtido por Wu e colaboradores [41].	85

3.6	Comportamento da energia livre da fase SG em $T = 0$, para o modelo VH axial, em função do parâmetro de ordem q para vários valores de anisotropia D_z . (a) $D_z/J = -0.7$, (b) $D_z/J = -0.5$, (c) $D_z/J = -0.3$, (d) $D_z/J = 0.0$ e (e) $D_z/J = 0.1$, para a DPB aplicada no modelo.	98
3.7	Comportamento dos mínimos das energias livres das fase SG e o nível de energia do primeiro estado excitado (estado P) em função da anisotropia D_z/J no estado fundamental. Para o modelo VH axial com DPB.	100
3.8	Comportamento da energia livre da fase SG em $T = 0$, para o modelo de VH transversal, em função do parâmetro q . (a) $\Omega/J = 0.0$, (b) $\Omega/J = 0.5$, (c) $\Omega/J = 0.7$ e (d) $\Omega/J = 1.0$. Para o caso da DPB.	101
3.9	Comportamentos da magnetização induzida transversa (m_x) e do parâmetro vidro de spin (q) em função do campo transversal no estado fundamental, para o modelo VH transversal usando a DPB.	103
3.10	Comportamento dos mínimos das energias livres das fase SG e o nível de energia do primeiro estado excitado (estado P) em função do campo transversal no estado fundamental, para o modelo VH transversal com DPB.	104
3.11	Comportamento da energia livre da fase SG em $T = 0$ para o modelo VH axial em função do parâmetro de ordem q para vários valores de anisotropia D_z . (a) $D_z/J = -0.7$, (b) $D_z/J = -0.413$, (c) $D_z/J = -0.3$, (d) $D_z/J = 0.0$ e (e) $D_z/J = 0.1$, para o caso da DPG.	105
3.12	Comportamento da energia livre da fase SG para o modelo VH axial em função do parâmetro de ordem q para o caso anisotropia crítica no estado fundamental, usando a DPG.	106

3.13	Fig.(a) Diagrama de fase do estado fundamental do modelo VH quântico axial no plano $\Omega/J - D_z/J$ obtida a partir das aplicações das distribuições de probabilidades bimodal (linha superior) e gaussiana (linha inferior). As linhas contínuas são de transição de segunda ordem e que as linhas descontínuas são de transições de primeira ordem. Na Fig.(b) temos em detalhe a reentrância observada na linha de transição obtida a partir da DPG.	108
3.14	(a) Diagrama de fase do estado fundamental no plano $\Omega - d$ para o modelo VH quântico biaxial para os casos de DPB (curva superior) e DPG (curva inferior). (b) Detalhe em menor escala na região de baixas temperaturas onde é observado o comportamento reentrante da linha de transição para o caso DPG.	111
3.15	Comportamento do parâmetro de ordem vidro de spin q em função do campo transversal no estado fundamental para vários valores de $D_x/J = D_y/J$ usando DPB. As linhas tracejadas são soluções instáveis.	112
3.16	(a) comportamento da temperatura de congelamento T_g em função da anisotropia d para diversos valores de campo transversal, indicados na figura, para o modelo VH quântico biaxial DPB. As linhas contínuas e tracejada são de transições de segunda e primeira ordem, respectivamente. (b) ampliação do comportamento T_g/J em função da anisotropia d na região de baixa temperatura, onde é observado a reentrância na linha de transição para $\Omega/J = 0.5$	114
3.17	(a) comportamento da energia livre da fase vidro de spin em função do parâmetro de ordem q para várias temperaturas. (a) $T/J = 0.01$, (b) $T/J = 0.2$, (c) $T/J = 0.4$, (d) $T_g/J = 2/3$ e (e) $T/J = 0.8$, para o caso em que $d = 0$ e $\Omega = 0$. (b) para o caso $d = 0.48$ e $\Omega/J = 0$, para as temperaturas a) $T/J = 0.001$, (b) $T/J = 0.1$, (c) $T/J = 0.2$, (d) $T/J = 0.229$, (e) $T/J = 0.3$, usando a DPB.	116

3.18	(a) Comportamento da entropia S em função da temperatura T/J para campo $\Omega/J = 0$ e anisotropias $D/J = 0.48$ e $D/J = 0.4$, a seta indica a temperatura de congelamento T_g/J .(b) Comportamento do parâmetro de ordem vidro de spin q em função da temperatura T/J para essas intensidades de anisotropias	118
3.19	Comportamento da temperatura de congelamento em função do campo transversal para diferentes intensidades de anisotropia. As linhas contínuas e tracejadas indicam transições de segunda e primeira ordem, respectivamente	119
3.20	Comportamento da temperatura de congelamento em função da anisotropia transversal D_x/J no modelo VH quântico biaxial com $D_y = 0$ para diversos valores do campo transversal. Fixando em $D_x = 0$, a temperatura diminui com aumento do campo transversal.	121
3.21	(a) Comportamento da energia livre f/J do sistema magnético em função do parâmetro de ordem q , para várias intensidades de anisotropias D_x/J positivas e com $\Omega = 0$ usando a DPB no estado fundamental. (b) Detalhe em menor escala para a anisotropia crítica $D_x/J = 1.94$, sendo observado um estado triplamente degenerado o que indica uma transição de primeira ordem.	123
3.22	Comportamento da energia livre f/J do sistema magnético em função do parâmetro de ordem q , para várias intensidades de anisotropias D_x/J negativas, $\Omega = 0$ e $D_y/J = 0$ usando a DPB no estado fundamental. . .	124
3.23	Diagrama de fase do estado fundamental no plano $\Omega/J - D_x/J$ para o modelo de VH quântico biaxial com $D_y = 0$ usando a DPB. As linhas contínuas e tracejadas correspondem a transições de segunda e primeira ordem, respectivamente. A figura menor corresponde ao caso em $D_x/J < 0.127$	

3.24	Comportamento da temperatura de congelamento em função do anisotropia transversal D_x/J para várias intensidades de anisotropias D_y/J e $\Omega/J = 0$ usando a DPB.	128
3.25	Diagrama de fase do estado fundamental no plano $D_x/J - D_y/J$ para o modelo VH quântico biaxial com $\Omega = 0$ usando a DPB. As linhas contínua e tracejada correspondem a transições de segunda e primeira ordem, respectivamente.	129
4.1	Ordenamento magnético de um modelo de Ising frustrado numa rede quadrada. (a) ordem de Néel ou antiferromagnética, (b) ordem colinear.	136
4.2	Ilustração do estado fundamental do modelo de Ising frustrado, numa rede cúbica simples, onde temos planos ordenados ferromagneticamente e alternados em direções opostas da magnetização ao longo do eixo y . Este estado é denominado de laminar	137
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 [8], os pontos triangulares pelo método de Monte Carlo[5] e os pontos circulares pela expansão em série [4].	138
4.4	Exemplo de esquema da proposta de ordem spin-líquido dadas pela configuração das subredes A e B. Caso (a) subrede A; caso (b) subrede B e no caso (c) a configuração com as redes A e B.	143
4.5	Esquema de uma rede pyrochlore. Os sítios são localizados nos vértices dos tetraedros.	144
4.6	A esquerda temos o diagrama de fase esquemático do modelo $J_1 - J_2$ para uma rede quadrada. Na região $0.35 \leq \alpha \leq 0.65$ a natureza do estado fundamental (RVB?) não é bem estabelecido. A direita temos a estrutura dos compostos de óxidos de vanádio projetado ao longo da direção [001].	145

4.7	Diagrama de fase no plano $T - H$ para o composto $\text{Li}_2\text{VO}\text{SiO}_4$. A temperatura crítica T_c foi estimada da medida susceptibilidade (círculos brancos) ou da relaxação de RMN (círculos pretos) [29].	146
4.8	Dependência da magnetização normalizada de sub-rede com a temperatura reduzida T/T_c para os compostos VOMoO_4 , $\text{Li}_2\text{VO}\text{SiO}_4$ e $\text{Li}_2\text{VOGeO}_4$. A curva contínua mostra o comportamento da magnetização para um expoente crítico $\beta = 0.235$ do modelo $J_1 - J_2$ quase-2d.	147
4.9	Diagrama de fase no plano $T - J_2/J_1$. As regiões I, II, e III correspondem as fase antiferromagnética (AF), laminar (L) e paramagnética (P). Os pontos vazados para $J_2/J_1 < 0.25$ indicam transição de segunda ordem, enquanto que os pontos pretos indicam transição de primeira ordem na região $J_2/J_1 > 0.25$. A linha pontilhada o valor crítico $J_2/J_1 = 0.25$ da transição entre as fases AF e L.	148
4.10	Diagrama da temperatura crítica em função da intensidade do campo externo. É proposto a existência do estado spin líquido, a partir dos resultados experimentais para o material Cs_2CuCl_4 [41].	149
4.11	Estrutura topológica das redes: (a) kagomé, (b) quadrada, (c) triangular e (d) cúbica simples.	159
4.12	Configurações dos spins no estado fundamental do estado ferrromagnético numa rede quadrada para aglomerado com $N = 1$ sítio central.	168
4.13	Configurações dos spins no estado fundamental da fase SAF numa rede quadrada para aglomerado com $N = 1$	174
4.14	Configuração dos spins da fase SAF no estado fundamental para um aglomerado com $N = 2$ sítios centrais numa rede quadrada.	177
4.15	Configuração para os spins da fase colinear (SAF) numa rede quadrada para um aglomerado com $N = 4$ sítios centrais.	186

4.16	Configurações dos spins no estado fundamental da fase superantiferromagnético numa rede cúbica simples para aglomerado com $N = 1$ sítio central.	194
4.17	Configuração da fase SAF no estado fundamental para um aglomerado de $N = 2$ sítios centrais numa rede cúbica simples.	197
4.18	Diagrama de fase no plano $T - \alpha$ para o modelo de Ising frustrado numa rede quadrada. As linhas tracejadas representa transições de primeira ordem, as contínuas transição de segunda ordem e os pontos correspondem a pontos tricríticos. As linhas foram obtidas a partir da EFT-1, EFT-2 e EFT-4.	206
4.19	Comportamento da magnetização em função da temperatura para transições de primeira e segunda ordem. T_{1c} e T_{2c} representam as temperaturas de transição de primeira e segunda ordem. T_D é temperatura de transição de primeira ordem via divergência da derivada da magnetização em relação a temperatura.	208
4.20	Diagrama de fase no plano $T - \alpha$ do modelo de Ising frustrado na rede quadra obtido via EFT-4. A linha de transição de fase de primeira ordem SAF-P encontrada pela energia livre é menor que a obtida da divergência da derivada da magnetização.	209
4.21	Diagrama de fase no plano $T - \alpha$ para o modelo de Ising frustrado numa rede cúbica simples obtido por EFT-1 (a) e EFT-2 (b). As linhas contínuas representam transições de segunda ordem e as linhas tracejadas transições de primeira ordem.	211
4.22	Comportamento da temperatura crítica em função do parâmetro de frustração para o modelo $J_1 - J_2$ anisotrópico ferromagnético num rede quadrada, para diferentes valores do parâmetro Δ	212

4.23	Comportamento da temperatura crítica em função do parâmetro de frustração para o modelo $J_1 - J_2$ anisotrópico antiferromagnético numa rede quadrada para diferentes valores do parâmetro de anisotropia Δ	215
4.24	Diagrama de fase no estado fundamental no plano $\Delta - \alpha_c$ para o modelo $J_1 - J_2$ anisotrópico na rede quadrada. As linhas contínuas e tracejadas correspondem as transições de primeira e segunda ordem, respectivamente.	216
4.25	Comportamento da temperatura crítica em função do parâmetro de frustração para o modelo $J_1 - J_2$ anisotrópico antiferromagnético numa rede cúbica simples.	218
4.26	Comportamento da temperatura crítica em função do parâmetro de frustração para o modelo $J_1 - J_2$ anisotrópico antiferromagnético numa rede cúbica simples.	219
4.27	Diagrama de fase no estado fundamental no plano $\Delta - \alpha_c$ para o modelo $J_1 - J_2$ anisotrópico antiferromagnético numa rede cúbica simples. A linha tracejada corresponde a transição de primeira ordem.	220
5.1	Diagrama de fase no plano do campo transversal em função do parâmetro de frustração, para o MICT com interações competitivas numa rede unidimensional em $T = 0$. Sendo que F correspondente a fase ferromagnética e A (ou SAF) e a anti-fase, que corresponde dois spins para cima dois para baixo, etc.	230
5.2	Comportamento da temperatura crítica em função do parâmetro de frustração para o modelo de Ising quântico frustrado numa rede quadrada na.(a) $\Omega/J = 0$, (b) $\Omega/J = 1.0$, (c) $\Omega/J = 2.0$ e (d) $\Omega/J = 3.0$. As linhas contínuas e tracejadas correspondem as linhas de segunda e primeira ordem, respectivamente. O círculo corresponde ao ponto tricrítico.	237

5.3	Diagrama de fase do estado fundamental no plano $\Omega - \alpha$ para o modelo de Ising quântico frustrado numa rede quadrada. As linhas contínua e tracejada correspondem as transições de segunda e primeira ordem, respectivamente. O círculo representa o ponto tricrítico (PTC).	238
5.4	Comportamento da temperatura crítica em função do parâmetro de frustração para o modelo de Ising quântico frustrado numa rede cúbica simples. (a) $\Omega/J = 0$, (b) $\Omega/J = 1.0$, (c) $\Omega/J = 2.0$, e (d) $\Omega/J = 3.0$. As linhas contínuas e tracejadas correspondem as transições de segunda e primeira ordem, respectivamente. O círculo preto representa o ponto crítico terminal.	240
5.5	Diagrama de fase do estado fundamental no plano $\Omega - \alpha$ para o modelo de Ising quântico frustrado numa rede cúbica simples. As linhas contínua e tracejada correspondem as transições de segunda e primeira ordem, respectivamente. O círculo representa o ponto crítico terminal.	241
1.1	Comportamento da temperatura de congelamento em função da anisotropia D_x/J para intensidade de campo transversal $\Omega/J = 0.2$ e $D_y/J = 0$ aplicando a DPB no modelo. Resultados obtidos a partir de soluções numérica (pontos) e exata (linha).	264
1.2	Comportamento do campo transversal em função da anisotropia D_x/J no estado fundamental com $D_y/J = 0$ aplicando a DPB no modelo. Resultados obtidos a partir de soluções numérica (pontos) e exata (linha),	265

Lista de Tabelas

1.1	Valores teóricos e experimentais dos expoentes críticos	26
4.1	Valores da temperaturas 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).	161
4.2	Valores da temperatura crítica obtidas por MFRG [54] EFRG [56] para o modelo de Ising-1/2 em diversas topologias de redes, que são comparadas com soluções exatas e de Monte Carlo.	163
4.3	Valores do expoente crítico obtidas por MFRG [54] EFRG [56] para o modelo de Ising-1/2 em diversas topologias de redes, que são comparadas com soluções exatas e de Monte Carlo.	164
4.4	Valores da temeperatura crítica e expoente crítico obtidas por MFRG [54] EFRG [56]para o modelo de Ising-1/2 numa rede quadrada usando tamanhos de aglomerados diferentes.	165

Capítulo 1

Introdução

1.1 Considerações Gerais

As propriedades magnéticas de algumas substâncias têm sido tema de investigações científicas desde a antiguidade, e hoje são amplamente utilizadas no desenvolvimento de novas tecnologias, como, por exemplo, geração e distribuição de energia elétrica, telecomunicações, equipamento hospitalar, etc. Porém, somente a partir do início do século XX que o magnetismo foi interpretado do ponto de vista qualitativo por Pierre Weiss [1], em 1907. Weiss apresentou uma teoria fenomenológica que era capaz de explicar qualitativamente o comportamento das propriedades dos materiais ferromagnéticos. Estes materiais têm magnetização espontânea (sem aplicação de campo externo no sistema magnético) abaixo de uma temperatura crítica T_c (temperatura de Curie) e se anula para $T > T_c$, tornando-se um material paramagnético. A idéia básica da teoria de Weiss (teoria de campo molecular) é que um único momento magnético, associado a um dado íon do material, interage com o restante do cristal através de um campo, a que ele chamou de campo molecular, que é proporcional a magnetização (média dos momentos magnéticos) do material. Mesmo sendo introduzido vários anos antes do modelo atômico de Bohr, a teoria de Weiss ainda representa o ponto de partida para investigações de sistemas magnéticos interagentes. Na Fig.(1.1) temos os comportamentos das magnetizações em

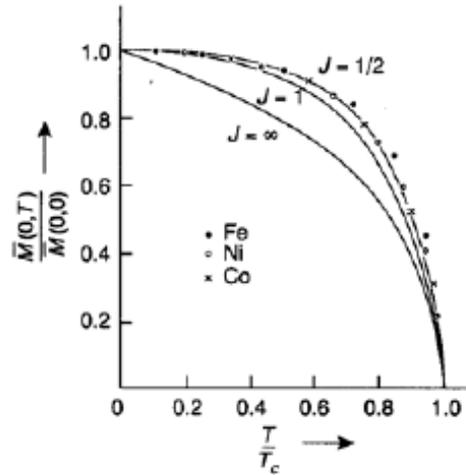


Figura 1.1: Comportamento das magnetizações espontâneas dos compostos formados por níquel (Ni), ferro (Fe) e cobalto (Co). As curvas teóricas são baseadas na teoria de Weiss.

função da temperatura reduzida T/T_c para os compostos ferromagnéticos constituídos pelo Ferro (Fe), Níquel (Ni) e Cobalto (Co). Comparamos os resultados experimentais com os obtidos teoricamente usando a teoria de Weiss [2] representada nesta figura pela linhas contínuas. Numa linguagem moderna, dizemos que quando atingimos a temperatura de Curie, como, por exemplo, $T_c(\text{Fe}) = 770^\circ\text{C}$, $T_c(\text{Ni}) = 358^\circ\text{C}$, $T_c(\text{Co}) = 1122^\circ\text{C}$, o sistema sofreu uma transição de fase, onde para $T < T_c$ temos uma fase ordenada (ferromagnética) e $T > T_c$ temos uma fase desordenada (paramagnética).

O estudo dos fenômenos magnéticos cria interface entre a Física e outras ciências, por exemplo, a Medicina. Medir os campos magnéticos produzidos por organismos vivos, pode ser útil no entendimento de sistemas biofísicos, diagnósticos e terapia de humanos. Tais campos têm origem nas correntes que são produzidas pela atividade de despolarização das células, de substâncias paramagnéticas (fígado), ferromagnética (pulmão). Os tecidos biológicos, em sua maioria, têm uma susceptibilidade magnética muito próxima da água, ou seja, são compostos por moléculas diamagnéticas (susceptibilidade negativa).

Só alguns poucos órgãos como o fígado, o baço e o coração apresentam propriedades magnéticas por causa da presença do composto de *ferritina* em seus tecidos [3].

Apesar da teoria de Weiss ser capaz de reproduzir, qualitativamente, várias propriedades magnéticas dos compostos ferromagnéticos (ex.: MnSb, CrTe, CrO₂, CrBr₃, EuO, EuS), esta teoria apresenta sérias inconsistências do ponto de vista quantitativa. Por exemplo, Weiss imaginava que os momentos magnéticos interagem no interior destes materiais, dando um ordenamento ferromagnético, cuja energia de interação era do tipo dipolo-dipolo. Esta energia dipolar $\Delta E_d \simeq \frac{\mu^2}{a^3}$ (sendo que μ é o momento magnético do íon e a é o parâmetro de rede cristalina) não é capaz de explicar fisicamente os altos valores de T_c .

Vejam os seguinte raciocínio qualitativo: suponhamos que nos compostos ferromagnéticos o ordenamento dos momentos magnéticos ocorre porque a energia de interação, aqui representada pela dipolar ΔE_d seja, suficientemente, maior do que a energia térmica $k_B T$ (k_B é a constante de Boltzmann), isto é, $\Delta E_d \gg k_B T$ para baixas temperaturas. A medida que a temperatura aumenta, a magnetização decresce conforme mostra a Fig.(1.1), e quando $T = T_c$ a ordem é destruída por causa, fundamentalmente, da energia térmica ser da mesma magnitude de ΔE_d , isto é, $\Delta E_d \simeq k_B T$. Portanto, usando $\mu \simeq \mu_B$ (magneton de Bohr), $a \simeq 10^{-10} m$ e o valor da constante k_B , estimamos que $T_c \simeq 10^{-1} K$ que é uma temperatura muito inferior quando comparada com os resultados experimentais onde $T_c \simeq 10^3 K$! Concluimos assim que a origem microscópica do forte magnetismo (altos valores de T_c) não deve-se à interação magnética entre os íons nos compostos ferromagnéticos ¹.

Foi somente com o advento da mecânica quântica, a partir do início do século XX, que a origem do magnetismo foi interpretado microscopicamente, introduzindo assim a idéia da energia de troca (*exchange*) de origem eletrostática, explicando os altos valores

¹Devemos salientar que nos compostos magnéticos a interação dipolar sempre está presente, porém por ser de natureza extremamente fraca ela sozinha não explica o forte magnetismo. Por outro lado, materiais orgânicos apresentam baixos valores para T_c o que torna a interação dipolar indispensável para descrever as propriedades magnéticas destes novos compostos.

para T_c dos compostos ferromagnéticos.

Atualmente, sabemos que as propriedades magnéticas das substâncias isolantes estão associadas aos momentos magnéticos localizados nos íons. O elétron é o responsável pelo magnetismo, com o seu momento angular intrínseco, o spin. A existência de um momento magnético permanente tem sua origem nas camadas eletrônicas internas d ou f quando estas se encontram incompletas [5]. Cinco grupos de elementos na tabela periódica apresentam essas características. São os grupos do ferro (camada $3d$), paládio (camada $4d$), lantânio (camada $4f$), platina (camada $5d$) e actíneo (camada $5f$). No caso de metais, o magnetismo é explicado pela interação $s - d$. Esse elétron itinerante, torna-se temporariamente residente no átomo em um estado tipo d antes de tunelar de volta ao estado delocalizado [6].

Outra característica marcante nos materiais ferromagnéticos é apresentar divergência na grandeza susceptibilidade magnética à campo nulo, definida por $\chi = \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_{H=0}$, quando a temperatura crítica T_c é atingida. Por outro lado, existem materiais que apresentam divergência de χ em $T = T_c$ mas não são ferromagnéticos, como, por exemplo, a magnetita (Fe_3O_4), o mineral conhecido desde a antiguidade, assim como outros óxidos de ferro com a estrutura cristalina do espinélio, materiais tais como, o MgFe_2O_4 , MnFe_2O_4 , NiFe_2O_4 , CoFe_2O_4 e CuFe_2O_4 , apesar de apresentarem uma magnetização espontânea à temperatura ambiente, são na realidade classificados como *ferrimagnéticos*. Estes compostos têm spins ordenados antiparalelamente com valores distintos (S_1 e S_2 , por exemplo), com este desbalanceamento dos spins na rede cristalina, faz com que os ferrimagnetos com estrutura cristalina da granada apresentem um comportamento diferente da magnetização total do apresentado na Fig.(1.1) para os compostos ferromagnéticos. A medida que a temperatura cresce nos compostos ferrimagnéticos, as magnetizações das sub-redes M_1 (íons com spin- S_1 apontados para cima) e M_2 (íons com spin- S_2 apontados para baixo, com $S_2 < S_1$), decrescem monotonicamente e atinge uma temperatura de compensação (T_{comp}), onde a magnetização total $M = M_1 + M_2$ ($M_1 > 0$ e $M_2 < 0$) se anula, mas não caracteriza uma transição de fase propriamente dita. Para $T > T_{comp}$, a

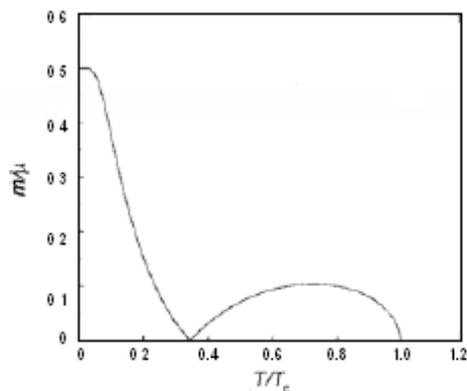


Figura 1.2: Comportamento da magnetização total de um sistema ferrimagnético em função da temperatura.

magnetização total cresce e a medida que a temperatura aumenta, porém M atinge um ponto de máximo e a partir dessa temperatura M decrescerá até finalmente se anular novamente na temperatura crítica T_c , onde para $T > T_c$ não temos mais ordem magnética e o sistema torna-se paramagnético, este comportamento é ilustrado na Fig.(1.2). Dizemos então que em $T = T_c$ o sistema sofre uma transição de fase.

Os ferrimagnéticos com esta característica marcante da existência da temperatura de compensação são descritos pela fórmula química $A_3(Fe_5O_{12})$, onde A é um metal trivalente. Vejamos alguns exemplos de materiais ferrimagnéticos: $Yb_3Fe_5O_{12}$ [$T_{comp} \simeq 0$ K, $T_c = 548$ K], $Er_3Fe_5O_{12}$ [$T_{comp} = 83$ K, $T_c = 556$ K], $Ho_3Fe_5O_{12}$ [$T_{comp} = 137$ K, $T_c = 567$ K], $Dy_3Fe_5O_{12}$ [$T_{comp} = 226$ K, $T_c = 563$ K], $Tb_3Fe_5O_{12}$ [$T_{comp} = 246$ K, $T_c = 568$ K], $Gd_3Fe_5O_{12}$ [$T_{comp} = 286$ K, $T_c = 564$ K]. Na Fig.(1.2) apresentamos os comportamentos da magnetização espontânea em função da temperatura para as granadas de ferro do tipo $A_3Fe_5O_{12}$ (A é um dos elementos dos metais das terras-raras) obtidos experimentalmente por Pauthenet [7].

Existem, porém, outros materiais, como, por exemplo, a hematita (Fe_2O_3) e os óxidos CoO e Cr_2O_3 , que na ausência de campo externo apresentam magnetização total zero e não são propriamente paramagnéticos. Estes materiais são denominados de anti-

ferromagnéticos (AF) abaixo de uma dada temperatura característica, conhecida como temperatura de Néel (T_N). Para temperaturas altas, ou seja, $T > T_N$, os dipolos apontam em direções aleatórias destruindo assim a ordem magnética AF. No estado AF, os dipolos magnéticos na rede cristalina interagem de tal maneira a orientarem (mínimo de energia) antiparalelamente. Os compostos antiferromagnéticos mais simples são os fluoretos FeF_2 [$T_N = 90 \text{ K}$] e MnF_2 [$T_N = 75 \text{ K}$] que apresentam uma estrutura cristalina de corpo centrado, e os KMnF_3 [$T_N = 95 \text{ K}$], KNiF_3 [$T_N = 275 \text{ K}$] e RbMnF_3 [$T_N = 82 \text{ K}$] com estrutura de uma rede cúbica simples. A estrutura cristalina desses materiais é constituída por uma rede magnética que se divide em apenas duas subredes equivalentes (A e B) e interpenetrantes. Devido a interação entre os íons magnético (*exchange*) negativa ($J < 0$), os momentos magnéticos são orientados antiparalelamente sobre toda a rede cristalina, e na ausência de campo externo temos $m_B = -m_A$ (m_A e m_B são as magnetizações das subredes *A-up* e *B-down*, respectivamente). Por outro lado, existem outros antiferromagnetos que possuem estruturas mais complexas, constituídas por várias subredes magnéticas como, por exemplo, os compostos magnéticos de face centrada MnO ($T_N = 120 \text{ K}$), FeO ($T_N = 198 \text{ K}$), CoO ($T_N = 291 \text{ K}$) e NiO ($T_N = 530 \text{ K}$), cujas as magnetizações das subredes são todas colineares. Esses compostos antiferromagnéticos apresentam em comum a propriedade da susceptibilidade magnética total $\chi = \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_{H=0}$, com $M = M_A + M_B$, exibir um ponto de máximo na temperatura T_N , diferindo drasticamente dos materiais ferromagnéticos que em $T = T_c$ têm uma divergência de χ .

Na Fig.1.3 mostramos os resultados experimentais de χ versus T para o composto antiferromagnético $\text{MnCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ obtido por Lasher, van der Broek e Gorter [8]. As curvas correspondem χ de um monocristal obtidos ao longo do campo aplicado paralelo e perpendicular ao eixo fácil de magnetização. Rigorosamente, falando segundo Fisher, T_N não corresponde ao valor máximo de χ e sim ao ponto de inflexão, que ocorre ligeiramente abaixo deste máximo, conforme pode ser visto na curva à direita da Fig.1.3. Por outro lado, diferente dos compostos ferromagnéticos, que na presença de campo magnético externo na direção do eixo fácil da magnetização a transição de fase é destruída, ou seja, não

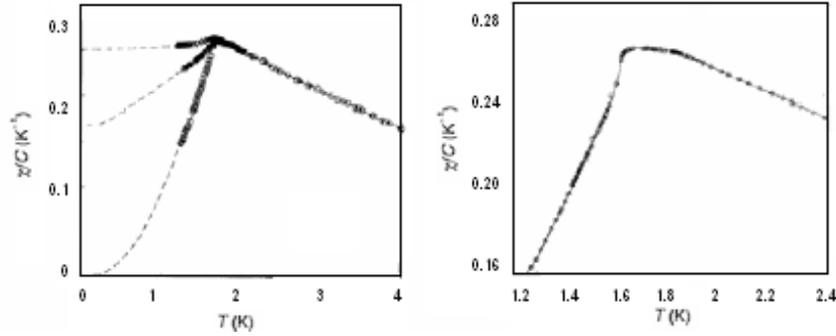


Figura 1.3: Susceptibilidade do composto antiferromagnético $\text{MnCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$, obtido experimentalmente por Lasher, Van den Broek e Goerter (1958).

existe T_c , pois na presença deste tipo de campo a magnetização se anula com $T = \infty$, já os antiferromagnetos na presença do campo externo podem exibir diversos tipos de ordenamento magnético no diagrama de fase no plano $T - H$, que indica que o sistema sofre transição de fase na presença do campo H . Do ponto de vista teórico, os primeiros estudos das propriedades magnéticas em compostos antiferromagnéticos foram desenvolvidos por Néel [9]. A teoria de Néel corresponde à aplicação da teoria do campo molecular de Weiss, onde dividimos o sistema antiferromagnético em duas ou mais subredes interpenetrantes. Com esta teoria é possível explicar qualitativamente os comportamentos da susceptibilidade apresentadas na Fig.(1.3).

O comportamento de materiais antiferromagnéticos uniaxiais em campos externos depende fortemente das intensidades relativas de suas energias de anisotropia e de intercâmbio. Existe àqueles que são fracamente anisotrópicos permitindo assim a rotação dos spins em torno do eixo de fácil magnetização, e, tipicamente, as transições de fase nestes sistemas são acompanhados de uma rotação nas direções dos spins. O diagrama de fase no plano $T - H$ apresenta três fases distintas: *i*) antiferromagnética (AF), *ii*) spin-flop (SP), *iii*) paramagnética (P). A uma temperatura abaixo da temperatura de Néel e para pequenos valores do campo, a direção média dos spins nas duas subredes é paralela (subrede A) e antiparalela (subrede B), isto corresponde a fase AF. Quando o

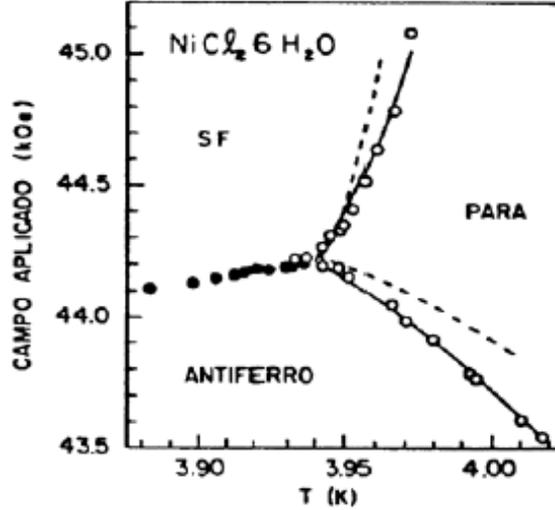


Figura 1.4: Diagrama de fase referente ao comportamento da temperatura T em função do campo H para o sal antiferromagnético $\text{NiCl}_2\cdot 6\text{H}_2\text{O}$ [10].

campo é aumentado acima de um valor característico, o sistema experimenta uma transição de fase de primeira ordem para a fase SF, onde os spins nas duas subredes são orientados segundo um ângulo de flop com a direção do campo. Aumentando ainda mais o campo nesta região SF, o ângulo de flop vai continuamente a zero, ocorrendo então uma transição de fase de segunda ordem (ou contínua) para a fase paramagnética.

Este fenômeno de flop dos spins foi previsto teoricamente por Néel [9] e tem sido observado experimentalmente num grande número de materiais com pequena anisotropia. Por exemplo, na Fig.(1.4) apresentamos os resultados do diagrama de fase $T - H$ para o composto antiferromagnético $\text{NiCl}_2\cdot 6\text{H}_2\text{O}$ obtido por Oliveira, Paduan e Salinas [10]. O ponto de interseção das três fronteiras de fase foi identificado por Fisher e Nelson [11] como sendo o *ponto bicrítico*.

Existem, porém, outros materiais antiferromagnéticos que são fortemente anisotrópicos, o que vincula os spins a permanecerem orientados paralelamente ou antiparalelamente ao eixo de fácil magnetização espontânea do material, tal que as transições nestes

materiais são geralmente caracterizadas por simples reversões nas direções dos spins. Estes materiais, denominados de *metamagnéticos* apresentam apenas transição de fase AF diretamente para a fase P em todo o intervalo de temperatura. Observe que o termo metamagnetismo que usamos tem o significado mais amplo dado por Stryjewski e Giordano [12]. Como exemplos de materiais metamagnéticos temos os compostos CrSb, MnTe, CrCl₂, FeCl₂, CoCl₂, Dy₃Al₅O₁₂, e são constituídos por uma sucessão de camadas ferromagnéticas que se alternam em sinais.

Para estes compostos metamagnéticos, a anisotropia faz com que a fase SF não apareça no diagrama de fase no plano $T - H$, observando apenas as fases AF e P. As camadas (planos) nestes compostos estão ordenados ferromagneticamente e alternadas em direções opostas. Teoricamente dizemos que os spins nas camadas interagem ferromagneticamente (J_1) e entre camadas antiferromagneticamente (J_2). Com esta competição, o diagrama de fase apresenta uma transição contínua AF-P para baixos campos e altas temperaturas e de primeira ordem para altos campos e baixas temperaturas. Existe um ponto, denominado de ponto tricrítico [13], que separa as transições contínuas e descontínuas. Na Fig.(1.5) apresentamos os resultados experimentais do diagrama de fase no plano $T - H$ para o composto Dy₃Al₅O₁₂ obtido por Landau, Keen, Schneider e Wolf [14]. Vale a pena mencionar, que o ponto tricrítico indicado na Fig.(1.5) só foi denominado posteriormente logo após o trabalho teórico de Griffiths [13].

Do ponto de vista teórico, os diagramas de fases experimentais mostrados nas Fig.(1.4) e Fig.(1.5) para os metamagnetos com fraca e forte anisotropia, respectivamente, podem ser analisados qualitativamente usando a teoria de Néel [9]. Na Fig.(1.6), mostramos os resultados obtidos nesta aproximação de campo molecular (teoria de Néel). Vimos que devido aos arranjos dos momentos magnéticos numa rede cristalina, onde leva-se em consideração os valores dos spins, anisotropias, topologia da rede, etc, podemos ter diversos tipos de ordenamentos magnéticos [14].

Todas as transições de fases até agora mencionados estão associadas a presença de grandes flutuações térmicas e para descrever, teoricamente, todos estes tipos de dia-

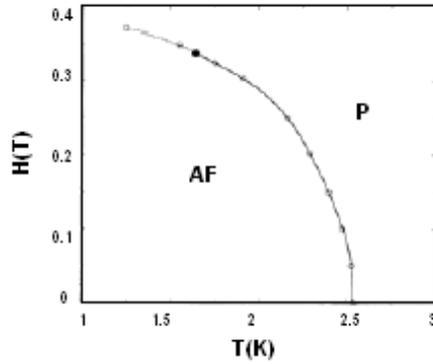


Figura 1.5: Diagrama de fase da temperatura T em função do campo H para o composto $\text{Dy}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ [13]. A curva contínua representa a linha de transição e a pontilhada uma linha de coexistência (transição de primeira ordem). O círculo cheio representa o ponto tricrítico.

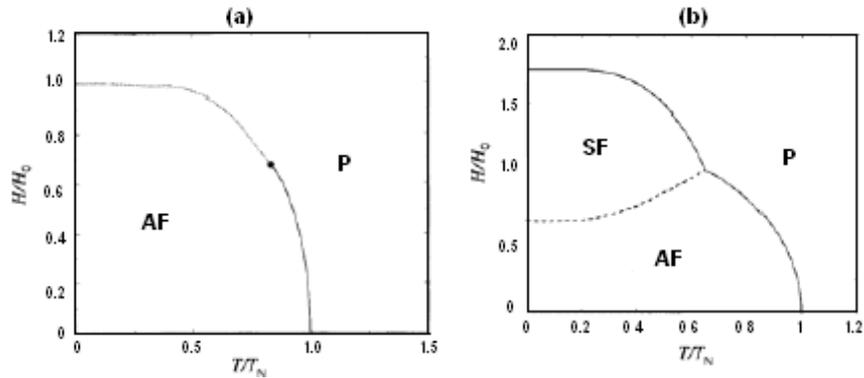


Figura 1.6: (a) metamagneto fortemente anisotrópico, (b) metamagneto fracamente anisotrópico. As curvas contínuas são linhas de transição (segunda ordem). As curvas tracejadas e pontilhadas são linhas de coexistência (primeira ordem).

gramas de fases faz-se necessário a formulação de modelos microscópicos de partículas interagentes. Para o caso das propriedades magnéticas em compostos isolantes, modelos de spins localizados são amplamente utilizados.

1.2 Modelagem teórica do magnetismo

Na seção anterior, apresentamos de forma sucinta alguns tipos de ordenamento magnéticos na matéria, bem como discutimos diagramas de fases induzidos por campo magnético externo em compostos antiferromagnéticos. Para explicar o forte magnetismo do ponto de vista microscópico, Heisenberg [16] propôs que o alinhamento dos spins decorria de seus vizinhos mais próximos. A interação eletrostática entre elétrons das camadas externas de íons adjacentes, tratada quanticamente via teoria de perturbação, produz uma separação dos níveis de energia eletrônicos, que pode ser entendida como a quantidade de energia necessária para trocar os elétrons do átomo. Por exemplo, para um sistema de dois elétrons [15], o princípio de exclusão de Pauli exige que as auto-funções dos dois elétrons (férmions) sejam antisimétricas, e usando teoria de perturbação degenerada obtém-se as auto-energias dadas por

$$E_{\pm} = E_o \pm J_{12}, \quad (1.1)$$

com

$$J_{12} = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \phi_1^*(\mathbf{r}_1) \phi_2^*(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \phi_1(\mathbf{r}_1) \phi_2(\mathbf{r}_2), \quad (1.2)$$

onde E_o é a auto-energia na ausência da perturbação coulombiana, $\phi_i(\mathbf{r}_i)$ é a autofunção da partícula $i = 1, 2$ para um estado l não perturbado. A energia de troca (*exchange*) $J_{12} = E_{\uparrow\downarrow}(S = 0) - E_{\uparrow\uparrow}(S = 1)$ (sendo que $E_{\uparrow\uparrow}(S = 1)$ e $E_{\uparrow\downarrow}(S = 0)$ são as auto-energias dos estados tripleto e singleto, respectivamente) foi proposta independentemente por Frenkel [18] e Dorfman [19]. Quando $J_{12} > 0$, o estado de menor energia é o tripleto, portanto,

prevalece a orientação dos spins paralelos (estado ferromagnético) e se $J_{12} < 0$ o estado de menor energia é o singlete, prevalecendo a orientação dos spins antiparalelos (estado antiferromagnético). A energia de troca J_{12} tem a propriedade de decrescer rapidamente com a distância entre os íons (decaimento exponencial), em contraste com a interação coulombiana que decresce mais lentamente ($\Delta E_c \approx 1/r$). A razão é que J_{12} , dado pela Eq.(1.2), contém o produto de funções de onda de elétrons ligados em diferentes núcleos, portanto, J_{12} dependerá do envolvimento (*overlap*) das funções de onda, e este *overlap* decresce, exponencialmente, com a distância r . Desta maneira, a interação de troca corresponde a uma *interação de curto-alcance*, diferindo da interação dipolar que é de natureza de interação de longo alcance ($\approx 1/r^3$).

Usando as relações dos operadores de spin \vec{S}^2 , onde $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$ (com $S = 0, 1$), e com base nas auto-funções correspondentes as auto-energias dadas pela Eq.(1.1), Dirac [20] propôs o seguinte Hamiltoniano efetivo de spins:

$$\mathcal{H}_{12} = E_o - \frac{J_{12}}{2} \left(1 + 4 \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \right), \quad (1.3)$$

pois, de fato temos que $\mathcal{H}_{12} |\phi_{\pm}\rangle = E_{\pm} |\phi_{\pm}\rangle$, sendo $|\phi_{+}\rangle$ e $|\phi_{-}\rangle$ os auto-estados associados aos estados singlete e tripleto, respectivamente. Generalizando para uma rede cristalina de N spins localizados, o Hamiltoniano efetivo entre spin-spin predominante (*exchange*) é descrito por

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (1.4)$$

onde $\sum_{\langle i,j \rangle}$ representa o somatório sobre todos os pares de spins i e j com interação J_{ij} de troca entre primeiro, segundo, etc ... vizinhos, $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ indica o operador de spin no sítio i . A Eq.(1.4) é conhecida na literatura como modelo de Dirac-Heisenberg, sendo que para $J_{ij} > 0$ e $J_{ij} < 0$ esse Hamiltoniano é denominado de Heisenberg ferromagnético e Heisenberg antiferromagnético, respectivamente.

Os materiais magnéticos isolantes encontrados na natureza são, com raras exceções,

antiferromagnéticos [20,21]. O estado fundamental do Hamiltoniano Heisenberg ferromagnético corresponde a todos os spins alinhados paralelamente. Por outro lado, o estado fundamental deste mesmo Hamiltoniano antiferromagnético não corresponde a todos os spins orientados antiparalelamente (estado Néel), pois este não é auto-estado do Hamiltoniano. Existe uma infinidade de estados de spin total nulo ($S^z = 0$), que deve ser combinados para formar o estado fundamental do sistema antiferromagnético no modelo de Heisenberg [23]. A dificuldade em estabelecer um estado fundamental é o maior problema teórico que surge no estudo do antiferromagnetismo do modelo de Heisenberg.

A interação de troca (*exchange*) se caracteriza pelo fato de ser independente da orientação dos spins, ou seja, o Hamiltoniano de Heisenberg, Eq.(1.4), apresenta simetria de rotação dos spins. Esta transformação implica que o Hamiltoniano de Heisenberg deve conter apenas pares de operadores S_i^μ , com $\mu = x, y, z$, onde a forma aproximada dada pela Eq.(1.4) representa o Hamiltoniano bilinear [17]. Vários outros termos de interações (origem de interação coulombiana) podem ser deduzidas via teoria de perturbação de ordem superior, como, por exemplo, o termo biquadrático dado pelo seguinte

Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_{BQ} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \left(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \right)^2, \quad (1.5)$$

ou interação entre quatro spins

$$\mathcal{H}_4 = - \sum_{\langle i,j,l,k \rangle} J_{ij} \left(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \right) \left(\vec{S}_l \cdot \vec{S}_k \right), \quad (1.6)$$

etc.

O tipo de estrutura cristalmagnética é determinada pela natureza e magnitude das interações entre os momentos magnéticos dos íons que formam o cristal. A interação de troca, de origem eletrostática mais o princípio de exclusão de Pauli são responsáveis pelo ordenamento magnético na matéria, é de natureza isotrópica, não sendo capaz de definir alguma orientação dos momentos magnéticos com respeito aos eixos cristalográficos, mas

ela produz um ordenamento mútuo dos spins em vários sítios da rede. O fato de que a distribuição de spins ordenados é sempre orientada numa dada direção (eixo de fácil magnetização), definida com respeito ao eixo cristalino, devemos assim ter algum outro tipo de interação que torne o Hamiltoniano de Heisenberg anisotrópico. Fisicamente, as interações magnéticas (dipolar, quadrupolar, etc) são responsáveis pela existência da anisotropia magnetocristalina, que se manifesta com a dependência da energia do cristal nas orientações dos momentos magnéticos dos íons com relação ao eixo cristalino.

Podemos dizer que num cristal existem campos magnéticos efetivos internos que tendem a orientar os momentos magnéticos em uma dada direção privilegiada. Este campo pode alterar algumas vezes as orientações mútuas dos momentos magnéticos dos átomos, desta forma distorcendo assim a estrutura magnetocristalina. Um primeiro tipo de anisotropia adicional na Eq.(1.5) é a interação dipolar, que é representada pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_{dipolar} = -4\mu_B^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \left\{ \frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - 3 \left(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{S}_i \right) \left(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{S}_j \right)}{r_{ij}^3} \right\}, \quad (1.7)$$

onde $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$ é o vetor posição que separa os íons i e j , $\hat{r}_{ij} = \vec{r}_{ij}/r_{ij}$ e μ_B é o magneton de Bohr. Note que o somatório acima é feito sobre todos os pares i e j de spins sobre a rede cristalina, e representa uma *interação de longo alcance*. Devido a simetria rotacional do Hamiltoniano de Heisenberg, Eq.(1.4), tem sido provado que numa rede bidimensional as interações (*exchange*) bilineares entre primeiros vizinhos não são capazes de ordenar os momentos magnéticos em temperatura finita, ou seja, a magnetização espontânea é nula [24]. A presença da interação de longo alcance, tipo dipolar variando com a distância $1/r_{ij}^3$, no Hamiltoniano de Heisenberg, Eq.(1.4), pode induzir ordenamento magnético em $T > 0$ numa rede em $2d$ [25].

O magnetismo dos elementos de transição do grupo do ferro é sempre associado ao momento magnético dos spins. Isto ocorre porque nos cristais, formados por estes elementos, o campo cristalino geralmente remove a degenerescência orbital do estado eletrônico

responsável pelo magnetismo. Como o valor esperado do momento orbital de um estado não degenerado é zero, verifica-se o que se convencionou chamar *quenching* do momento orbital, isto é, numa primeira aproximação a susceptibilidade estática não recebe contribuição do momento orbital. Esta contribuição apenas aparece se levarmos em conta a interação *spin-órbita*, que é descrita pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_{LS} = -\sum_i \xi_i \left(\vec{L}_i \cdot \vec{S}_i \right)^2, \quad (1.8)$$

sendo que

$$\xi_i = \frac{1}{2m^2 r_i} \frac{dV}{dr_i}, \quad (1.9)$$

com $V(r_i)$ sendo a energia potencial elétrica (núcleo-elétron), \vec{L}_i e \vec{S}_i são os operadores de momento angular orbital e spin, respectivamente, no sítio i . Usando teoria de perturbação de 2ª ordem para a energia spin-órbita, a Eq.(1.8), pode ser reescrita na forma

$$\mathcal{H}_{LS} = -\sum_i \sum_{\alpha, \beta} \Lambda_i^{\alpha\beta} S_i^\alpha S_i^\beta, \quad (1.10)$$

sendo

$$\Lambda_i^{\alpha\beta} = -2\xi_i^2 \sum_l \frac{\langle p | L_i^\alpha | l \rangle \langle l | L_i^\beta | p \rangle}{E_o^p - E_o^l}, \quad (1.11)$$

o tensor de anisotropia spin-órbita, $\xi^2 = \langle \xi^2(\vec{r}_i) \rangle$ e E_o^n é a auto-energia do Hamiltoniano não perturbado. O Hamiltoniano usado habitualmente para descrever anisotropia ortorrômbicas leva em conta apenas os termos diagonais, assim sendo, a Eq.(1.10) ficará reduzido na seguinte forma:

$$\mathcal{H}_o = -D_z \sum_i (S_i^z)^2 + E \sum_i \left[(S_i^x)^2 - (S_i^y)^2 \right], \quad (1.12)$$

onde para $E = 0$ reduz-se ao caso da anisotropia uniaxial. Observe que o Hamiltoniano dado pela Eq.(1.12) representa a interação do sítio i com ele mesmo (auto-interação), que é uma interação denominada de *anisotropia de íon-único*. A Eq.(1.12) só é relevante para

sistemas com spin $S > 1/2$, pois o caso particular de spin $S = 1/2$ temos $(S_i^\nu)^2 = 1/4$ ($\hbar \equiv 1$) para qualquer componente $\nu = x, y, z$ e, conseqüentemente, este Hamiltoniano se reduz a uma constante não sendo relevante nos cálculos das propriedades magnéticas.

A interação spin-órbita também pode induzir anisotropia no *exchange*, Eq.(1.13). Segundo van Vleck [26], a anisotropia uniaxial deste tipo tem origem no acoplamento dos momentos orbitais dos átomos adjacentes, que depende não só da orientação relativa dos dois momentos, como também da orientação destes com relação ao eixo que une os dois átomos. Em termos dos spins, esse acoplamento pode ser simulado por uma interação dipolar, cujo coeficiente é inteiramente disposto do coeficiente da interação magnética real dada pela Eq.(1.7). Neste caso, a perturbação é dada por $W_{ij} = \xi(\vec{r}_i)\vec{L}_i \cdot \vec{S}_j + \lambda\vec{L}_i \cdot \vec{S}_j$, então o Hamiltoniano efetivo será escrito por

$$\mathcal{H} = -\sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\alpha,\beta} J_{ij}^{\alpha\beta} S_i^\alpha S_j^\beta, \quad (1.13)$$

onde $J_{ij}^{\alpha,\beta}$ é a interação entre os sítios i e j associados às direções α e β dos spins. O Hamiltoniano generalizado dado pela Eq.(1.13) contém a parte simétrica $J_{ij}^\alpha(\alpha = \beta) = J_{ji}^\alpha$ e anti-simétrica com $\alpha \neq \beta$ e $J_{ij}^{\alpha\beta} \neq J_{ji}^{\alpha\beta}$. O termo anti-simétrico surge em redes com baixa simetria [27], sendo responsável em alguns compostos antiferromagnéticos pela existência de um pequeno valor de magnetização (pequeno ferromagnetismo), que é conhecido na literatura como a interação Dzyuloshinski-Morya (DM) [28] .

Dependendo dos valores das interações $J_{ij}^{\alpha\beta}$ que aparecem no Hamiltoniano dado na Eq.(1.13), podemos três casos de modelos de spins:

a) Modelo de Ising

Corresponde ao caso em que uma das interações J_{ij}^α das componentes dos spins S_i^α , por exemplo J_{ij}^z , seja a mais intensa, ou seja, $J_{ij}^z \gg J_{ij}^{x,y}$, desta forma o Hamiltoniano dado pela Eq.(1.13) corresponderá ao modelo de *Ising* expresso por

$$\mathcal{H}_I = -\sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij}^z S_i^z S_j^z, \quad (1.14)$$

O Hamiltoniano (1.14) é o sistema mais simples da mecânica estatística e apresenta solução exata para redes unidimensional e bidimensional (sem campo externo) [29]. Contrário ao caso do modelo Heisenberg antiferromagnético, o estado Néel, representado por spins alternados em direções alternadas sobre a rede cristalina, é auto-estado do Hamiltoniano de Ising antiferromagnético. Temos, ainda, que na ausência de campo externo, as propriedades termodinâmicas do modelo de Ising ferromagnético são equivalentes ao caso antiferromagnético, isto porque temos a invariância da função de partição $Z_F(J_{ij}) = Z_{AF}(-J_{ij})$. A inclusão do campo magnético (não transverso) quebra esta invariância, $Z_{AF}(-J_{ij}) \neq Z_F(J_{ij})$, e como vimos anteriormente, o caso ferromagnético não apresenta singularidade (ou descontinuidade) nas grandezas termodinâmicas quando o campo não é nulo, dizemos então que o sistema ferromagnético não sofre transição de fase, porém o caso antiferromagnético apresenta uma transição de fase induzida por campo externo.

Este modelo descreve muito bem sistemas magnéticos com simetria axial (ou forte anisotropia), como, por exemplo, os compostos DyAlO_3 , DyPO_4 , FeCl_2 , FeBr_2 , Rb_2CoF_4 , é também útil para simular as transições de fase gás-líquido para fluidos de uma componente e para ligas binárias. O modelo (1.14) foi, inicialmente, proposto Wilhelm Lenz como parte da tese de doutorado para o seu estudante Ernest Ising, em 1920, cujo o objetivo era estudar a termodinâmica numa rede bidimensional. Por outro lado Ising obteve todas as propriedades termodinâmica e verificou o resultado frustrante da ausência de ordem de longo-alcance (i.e. $M(T, H = 0) = 0$), não podendo assim explicar, teoricamente, o magnetismo observado experimentalmente, como é apresentado na Fig.(1.1). Em 1936 Peierls apresentou um argumento fenomenológico provando que o modelo de Ising em duas dimensões apresenta ordem de longo-alcance para $T < T_c$, retornando-se desta forma o estudo deste modelo. Em 1941, os físicos holandeses Kramers e Wannier conseguiram de forma exata determinar a temperatura crítica T_c do modelo de Ising numa rede quadrada.

Apesar de todos os resultados teóricos conhecidos na época, nenhum estudo foi capaz

de reproduzir de forma exata uma expressão para a magnetização espontânea afim de reproduzir o resultado experimental da figura (1.1). Foi somente em 28 de Fevereiro de 1942, numa reunião da Academia de Ciências de Nova York, que o químico norueguês-norte-americano Lars Onsager [30] anunciava ter resolvido, exatamente, o modelo de Ising numa rede quadrada sem campo externo. Certamente, esta solução exata representou um marco significativo na história da mecânica estatística, em especial no estudo de fenômenos críticos e transições de fases.

Para uma vasta aplicação do modelo de Ising em materiais reais, incluindo dinâmica, frustração, comportamento tricrítico, etc, ver trabalho de Wolf [31] que trata do modelo de Ising, e também as diversas referências do vol.30 do Brazilian Journal of Physical.

b) Modelo XY

Corresponde ao caso em que $J_{ij}^{x,y} \gg J_{ij}^z$, desta maneira podemos aproximar o Hamiltoniano dado pela Eq.(1.13) por um modelo (XY ou planar) com interações apenas entre as componentes dos spins x e y , ou seja:

$$\mathcal{H}_{XY} = - \sum_{\langle i,j \rangle} (J_{ij}^x S_i^x S_j^x + J_{ij}^y S_i^y S_j^y). \quad (1.15)$$

O modelo XY ou planar foi introduzido na literatura por Matsubara e Matsuda [32] e tem solução exata em uma dimensão [33]. Em duas dimensões este modelo não apresenta ordem magnética (magnetização espontânea) em temperatura não nula. Kosterlitz e Thouless [34] propuseram um tipo diferente de transição de fase, onde foi definido uma ordem de longo alcance topológica, caracterizada por uma súbita mudança na resposta do sistema a perturbações externas. Definiram uma temperatura de transição T_{KT} , no qual para $T > T_{KT}$ a função de correlação spin-spin decai exponencialmente com a distância entre os pares e $T < T_{KT}$ a função de correlação tem um decaimento segundo uma lei de potência. Acredita-se que esta transição de fase seja causada por um mecanismo de desligamento de pares de vórtice-antivórtice. Um vórtice (anti-vórtice) é uma excitação topológica na qual os spins em um caminho fechado ao redor do centro da excitação giram

por $2\pi(-2\pi)$ no mesmo sentido. Experimentalmente tem sido usado o modelo XY 3d para descrever as propriedades magnéticas dos compostos CoBr_2 e CoCl_2 [4] bem como para explicar as configurações de vórtices na fase superfluido no filme (monocamada) de He_4 [35].

c) Modelo de Heisenberg

Neste caso, os três termos de *exchange* J_{ij}^α ($\alpha = x, y, z$) são da mesma ordem. O Hamiltoniano anisotrópico (1.13) reduz-se ao modelo de *Heisenberg isotrópico* descrito pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_H = -\sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij}^\alpha S_i^\alpha S_j^\beta. \quad (1.16)$$

O estado fundamental ($T = 0$), e algumas excitações elementares do Hamiltoniano (1.16) numa rede unidimensional com spin $S = 1/2$, foi resolvido exatamente por Bethe [36] e Hulthen [37]. A generalização para incluir anisotropia do tipo: $J_{ij}^x = J_{ij}^y = \eta J$ e $J_{ij}^z = J$ foi feita anos mais tarde por Walker [38]. Outro resultado exato para o modelo de Heisenberg numa rede d-dimensional ($d = 1, 2$) é o teorema de Mermin e Wagner [24], que afirma que este sistema não apresenta ordem de longo-alcance a $T > 0$ no limite isotrópico.

O estudo do modelo de Heisenberg antiferromagnético de spin $1/2$ tem sido motivado sobretudo por causa da possível conexão com os compostos supercondutores de altas temperaturas formadas por planos de CuO_2 [39],[40], como, por exemplo, os compostos $\text{YBa}_3\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ e $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$. São compostos fortemente anisotrópicos, havendo um forte acoplamento entre os íons de cobre pertencentes ao plano de CuO_2 e um fraco acoplamento entre os planos. Em baixas temperaturas, as flutuações quânticas antiferromagnéticas são relevantes comparadas com as térmicas.

1.3 Transição de Fase e Fenômenos Críticos

A origem da teoria de transição de fase e fenômenos críticos ocorreu no século XX na década de 60, quando os conceitos básicos de classe de universalidade e escala de funções

termodinâmicas foram introduzidas, além dos princípios de cálculo associado ao grupo de renormalização.

Podemos classificar a ordem de uma transição através da descontinuidade da 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 a transição de segunda ordem, no caso da transição de fase de primeira ordem chamamos apenas de ponto de transição. A medida que $T \rightarrow T_c$, o sistema simplesmente começa a ajustar-se sobre uma escala microscópica. Estes ajustes aparecem sob a forma de flutuações térmicas os quais tornam-se muitos grandes nas proximidades destes pontos. Por exemplo, a susceptibilidade está associada a flutuação da magnetização, o calor específico a flutuação da energia interna do sistema (Hamiltoniano do ponto visto teórico).

Segundo o teorema de Yang e Lee, numa transição contínua (2^a 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 no ferromagneto pode ser entendido devido 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 (magneti-

zação espontânea). A medida que diminui a temperatura, a interação de troca começa a ficar relevante e os spins a curtas distâncias (\leq ao comprimento de correlação ξ) ficam correlacionados. Quando $K_B T \simeq J$, 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.

1.3.1 Expoentes Críticos

De uma maneira geral, a transição de fase de um sistema é caracterizada por existências de singularidades nas potenciais termodinâmicas e suas derivadas. Defini-se o parâmetro de ordem como sendo a grandeza que é nula acima de uma temperatura crítica (fase desordenada). No sistema ferromagnético a magnetização é o parâmetro de ordem, no antiferromagneto o parâmetro de ordem é a diferença das magnetizações das sub-redes A e B, $m_S = (m_A - m_B)/2$. 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:

i) Magnetização

$$M(T, H) = -\frac{\partial g}{\partial H} = \begin{cases} M(t, H = 0) \approx (-t)^\beta, (t \rightarrow 0^-) \\ M(t = 0, H) \approx H^{1/\delta}, (H \rightarrow 0^+) \end{cases} \quad (1.17)$$

onde $t = (T - T_c)/T_c$ e $g(t, H)$ é a energia livre de Gibbs. Note que $M(T, H)$ é a grandeza canonicamente conjugada ao campo H , assim sendo, para o antiferromagnético m_s está acoplada (conjugada) com o campo *staggered* H_s .

ii) Susceptibilidade

$$\chi_o(t) = -\left(\frac{\partial^2 g}{\partial H^2}\right)_{H=0} \approx |t|^{-\gamma} \quad (1.18)$$

iii) Calor específico

$$C_o(t) = -T \left(\frac{\partial^2 g}{\partial T^2}\right) \approx |t|^{-\alpha} \quad (1.19)$$

iii) Função de correlação

$$G_c(r) = \langle \vec{\sigma}(0) \bullet \vec{\sigma}(\vec{r}) \rangle - \langle \vec{\sigma}(0) \rangle \bullet \langle \vec{\sigma}(\vec{r}) \rangle \quad (1.20)$$

$$G_c(r) \approx \frac{\exp(-r/\xi)}{r^{d-2+\eta}}, \quad (r \rightarrow \infty), \quad (1.21)$$

onde $\xi \approx |t|^{-\gamma}$ 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:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \alpha + 2\beta + \gamma \geq 2 & \text{(Rushbrooke,1963)} \\ \alpha + \beta(1 + \delta) \geq 2 & \text{(Griffiths,1965)} \\ \nu d \geq 2 - \alpha & \text{(Josephson,1967)} \\ (2 - \eta)\nu \geq \gamma & \text{(Fisher,1969).} \end{array} \right. \quad (1.22)$$

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 fortemente é 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 térmicas². Para sistemas magnéticos escolhe-se para região crítica $|t| \simeq 10^{-3}$, enquanto que para supercondutores temos $|t| \simeq 10^{-10}$, transição lambda (H_e^4) $|t| \simeq 10^{-7}$, e assim por diante. 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. Na Fig.(1.7), apresentamos os comportamentos assintóticos das grandezas magnetização espontânea e sus-

²Do 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).

ceptibilidade magnética para determinar os expoentes críticos β , δ e γ , respectivamente da liga metálica $\text{Fe}_{1-x}\text{Al}_x$ obtido experimentalmente por Salazar [41]. Para concentração $x = 0.10$ encontra-se $\beta = 0.409$, $\gamma = 1.325$ e $\delta = 4.280$, e pouco varia com a concentração indicando ser esta liga descrita por um Hamiltoniano tipo Heisenberg.

Podemos, ainda, ter uma singularidade para o calor específico com $\alpha = 0$. Esta singularidade ocorre na solução exata do modelo de Ising 2d [30], que determina próximo de $T \simeq T_c$ o seguinte comportamento assintótico para C_o .

$$\frac{C_o}{K_B} = -0.4945 \ln|t| + cte. \quad (1.23)$$

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.(1.22), assim sendo esperamos para quaisquer sistemas que os expoentes críticos não sejam independentes entre si mas guardam certas relações ³ que postulamos a serem dadas por

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha + 2\beta + \gamma = 2 \\ \alpha + \beta(\delta + 1) = 2 \\ \gamma = \beta(\delta - 1) \\ \nu d = 2 - \alpha \\ (2 - \eta)\nu = \gamma \end{array} \right. \quad (1.24)$$

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

Quando $\alpha \geq 0$, o calor específico diverge em $T = T_c$, por exemplo, o metamagneto uniaxial (Ising) FeF_2 que tem $\alpha \simeq 0.14$. Por outro lado, quando $\alpha < 0$, por exemplo, o metamagneto Heisenberg RbMnF_3 que tem $\alpha \simeq -0.1$, o calor específico não diverge em $T = T_c$ sofre apenas descontinuidade. Porém para $\alpha < 0$, próximo do ponto crítico o

³Estas relações postuladas são baseadas nas desigualdades eq.(1.22) que para o modelo de Ising 2d temos a igualdade exata.

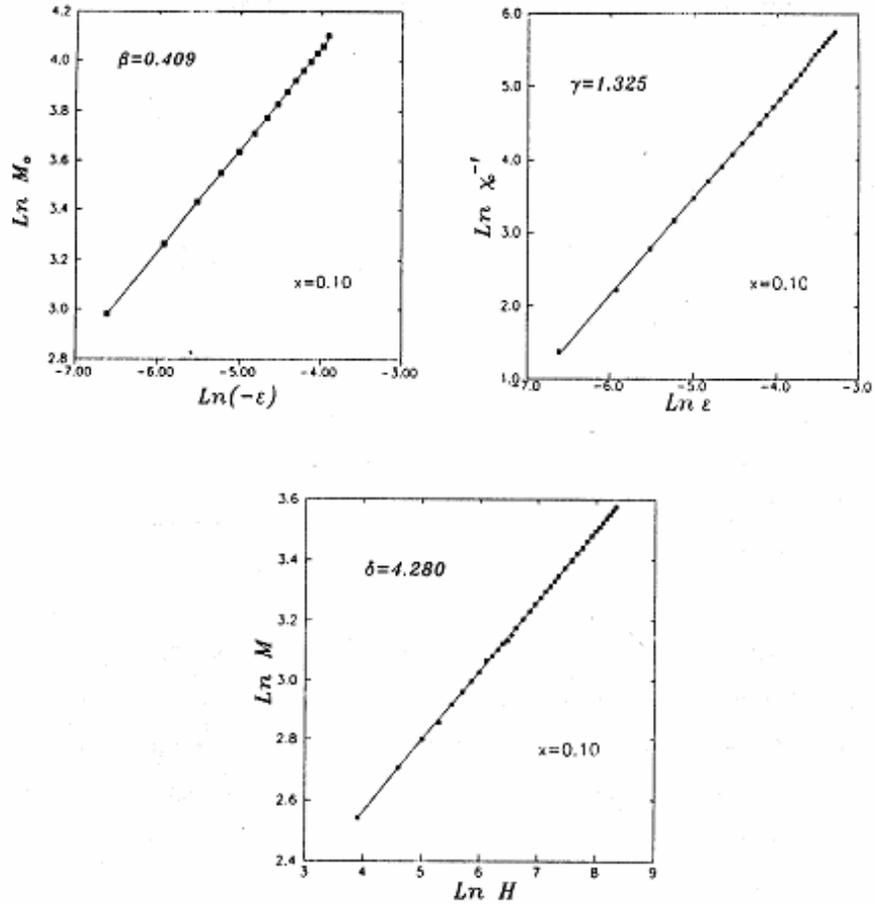


Figura 1.7: Comportamento de $\ln(M_o)$ versus $\ln(-t)$, $\ln\chi^{-1}$ o versus $\ln t$ e $\ln M$ versus $\ln H$ para a liga metálica $\text{Fe}_{1-x}\text{Al}_x$ com $x = 0.10$. As inclinações das curvas determinam os expoentes críticos β , γ e δ , respectivamente [41].

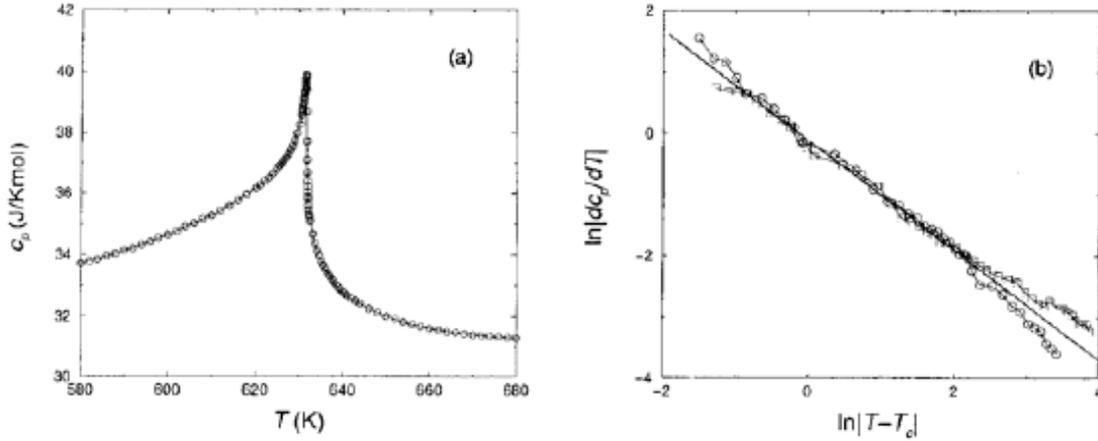


Figura 1.8: (a) Capacidade térmica molar isobárica C_p do níquel como função da temperatura. (b) Gráfico $\log - \log$ de $\frac{dC_p}{dt}$ versus $|T - T_c|$. A inclinação da reta ajustada aos dados vale -0.90 que representa um expoente $\alpha = -0.10$ [45].

calor específico apresenta ainda o comportamento na forma

$$C_o(t) = C_o(0) + A_{\pm}|t|^{-\alpha}. \quad (1.25)$$

Para determinar o expoente crítico α é mais apropriado analisar a grandeza derivada dada

$$dC_o(t)/dt \simeq A_{\pm}|t|^{-\alpha-1}, \quad (1.26)$$

eliminando assim a constante $C_o(0)$. A Fig.(1.8) mostra a capacidade molar do níquel cujo expoente α é negativo obtido experimentalmente por Connelly, Loomis e Mapother [42].

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, independem da dimensão e simetria do Hamiltoniano. Na Tabela1.1, observamos que para a simetria Ising os expoentes

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 1.1: Valores teóricos e experimentais dos expoentes críticos

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 (conhecido como crítico de Ginzburg [43]) 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, está relacionado com as universalidades dos expoentes δ e η para os três modelos analisados, e têm corroborados com os cálculos de grupo de renormalização no espaço real [44].

Dos resultados apresentados para os expoentes críticos na Tabela-1.1, vemos que estes expoentes não são independentes entre si, satisfazem as igualdades das relações dadas na Eq.(1.24), e pertencem a uma certa classe de universalidade que de uma maneira geral é caracterizada pelos seguintes critérios:

- i*) Dependência do número de componentes do Hamiltoniano (simetria), por exemplo,

para os modelos Ising, XY e Heisenberg são caracterizados por $n = 1$, $n = 2$, $n = 3$, respectivamente, que representa o número de componentes do parâmetro de ordem (ou componentes de interações no Hamiltoniano);

ii) Dependência da dimensão espacial (d) do sistema, porém não depende da topologia da rede;

iii) Alcance das interações. Para sistemas com interações de longo-alcance os expoentes críticos são universais e equivalentes aos de campo médio.

A princípio, os expoentes críticos, definido (d, n) e o alcance das interações, são independentes dos detalhes microscópicos do Hamiltoniano. Por exemplo, os expoentes críticos do modelo de Ising numa rede quadrada anisotrópica apresentam expoentes críticos independentes dos valores de J_x (interação ao longo eixo- x) e J_y (interação ao longo do eixo- y) [30]. Portanto, os critérios i), ii) e iii) mencionados acima para definir a classe de universalidade é uma hipótese que é aceita para grande parte de sistemas cooperativos [41]. Porém, existem alguns modelos que violam este critério de universalidade. O primeiro exemplo que temos é o modelo de oito vértices, que apresenta solução exata [29]. Este modelo tem uma linha crítica no diagrama de fase definido pelos parâmetros do modelo, no qual os expoentes críticos variam continuamente. Definindo o parâmetro μ no modelo, tem-se $\alpha = 2 - \frac{\pi}{\mu}$, $\beta = \frac{\pi}{16\mu}$ e $\nu = \frac{\pi}{2\mu}$ que viola claramente os critérios i), ii) e iii), mas satisfazem as relações de escala dadas pela Eq.(1.24).

Um outro modelo que viola a hipótese da universalidade é o de Ising numa rede quadrada com interações entre primeiros J_1 (ferro ou antiferromagnético) e segundo J_2 (antiferromagnética) vizinhos. Para $(J_2/J_1)_c = 0.5$, este modelo não apresenta ordem de longo alcance e tem um comportamento para o calor específico semelhante ao do modelo de Ising 1d. Para $J_2/J_1 < (J_2/J_1)_c$ temos a classe de universalidade do modelo de Ising 2d, e quando $(J_2/J_1) > (J_2/J_1)_c$ temos os expoentes críticos variando continuamente com o parâmetro de frustração definido pela razão J_2/J_1 .

1.3.2 Hipótese de Widom e Universalidade

A solução exata do modelo de Ising em duas dimensões sem campo externo [30], representa o marco da época moderna do estudo de transição de fase e fenômenos críticos. Com conhecimento prévio desta solução exata, Widom [46], e Domb e Hunter [47], observaram que quando os parâmetros que caracterizam a região crítica $t = (T - T_c) / T_c$ 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

$$g_{sing}(\lambda^x t, \lambda^y H) = \lambda g_{sing}(t, H), \quad (1.27)$$

onde os dois parâmetros x e y definem o grau de homogeneidade, fazendo com que a Eq.(1.27) 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,

$$\left\{ \begin{array}{l} \beta = \frac{1-y}{x} \\ \gamma = \frac{2y-1}{x} \\ \delta = \frac{y}{1-y} \\ \alpha = \frac{2x-1}{x} \end{array} \right. \quad (1.28)$$

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.(1.28), a hipótese de escala Eq.(1.27) faz previsões específicas com relação a equação de estado magnética.

Diferenciando ambos os lados da Eq.(1.27) na variável H , obtemos que

$$M(\lambda^x t, \lambda^y H) = \lambda^{1-y} M(t, H), \quad (1.29)$$

escolhendo $\lambda^x |t| = 1$, obtemos

$$\frac{M(t, H)}{|t|^\beta} = M\left(1, \frac{H}{|t|^\Delta}\right) \quad (1.30)$$

onde temos usado as relações (1.30), 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, e a Eq. (1.30) pode ser reescrita na forma reduzida

$$m = F_\pm(h) \quad (1.31)$$

onde o lado direito da Eq.(1.31) é uma função apenas da variável renormalizada h e o sinal \pm está relacionado com $T \rightarrow T_c^\pm$. A Eq.(1.31) 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.(1.9) temos os resultados experimentais para o ferromagneto CrBr_3 [49].

Resultados análogos para a susceptibilidade $\chi(t, H)$ e calor específico à campo constante $C_H(t, H)$ podem ser obtidos a partir de diferenciação da Eq.(1.27) e escolhendo também $\lambda^x |t| = 1$. Assim sendo, encontramos os seguintes resultados:

$$\frac{\chi(t, H)}{|t|^{-\gamma}} = \chi\left(\frac{t}{|t|}, \frac{H}{|t|}\right) = G_\pm(h) \quad (1.32)$$

$$\frac{C_H(t, H)}{|t|^{-\alpha}} = C_H\left(\frac{t}{|t|}, \frac{H}{|t|}\right) = Y_\pm(h) \quad (1.33)$$

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

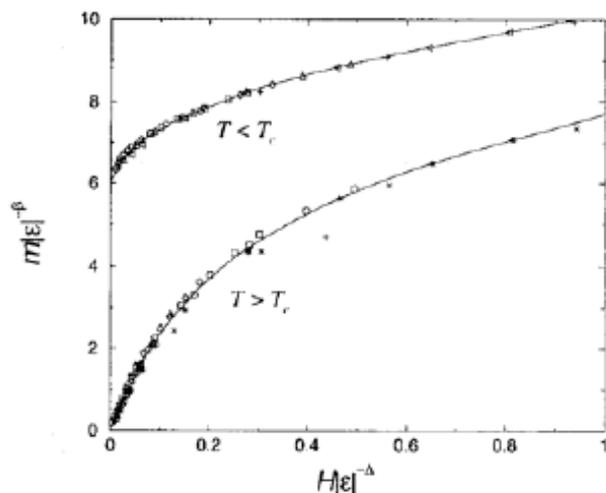


Figura 1.9: Comportamento de $\frac{H}{|t|^\Delta}$ versus $\frac{M(t,H)}{|t|^\beta}$ para o composto ferromagneto CrBr_3 obtidos experimentalmente. Observe os colapsos das duas curvas, uma para $T > T_c$ e a outra para $T < T_c$ confirmando a hipótese de Widom.

1.3.3 Argumento de Kadanoff

Certificando que a hipótese de escala Eq.(1.27) 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[48] apresentou um argumento heurístico para chegar a Eq.(1.27). 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'^d (onde $a'^d = la$ e $a \ll la \ll \xi$ perto de T_c). 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.(1.27) 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 criticidade a função de partição fica invariante

na renormalização, ou seja,

$$Z_{N'}(t', H) = Z_N(t, H), \quad (1.34)$$

onde $t' = l^{Y_t} t$ e $l = (N/N')^{1/d}$ sendo d a dimensão do espaço. Com a relação física acima a hipótese de Widon fica completamente justificada. As determinações de Y_h e Y_t (expoentes 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 Widon) dada por

$$g_N(t, H) = l^d g_{N'}(t', H'), \quad (1.35)$$

sendo

$$g_N(t, H) = -\frac{K_B T}{N} \ln [Z_N(t, H)]. \quad (1.36)$$

1.3.4 Teoria de Landau

A teoria de Landau [45] nos 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 a seguir 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,

$$\rho_j = - \left(\frac{\partial \phi}{\partial H_j} \right)_{H_i} \quad \text{com } i \neq j. \quad (1.37)$$

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 deseja-se saber quanto de energia esta 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. Seguindo a notação de Gibbs, uma fase ordinária é representada pela letra A; uma fase crítica (duas fases ordinárias se tornam idênticas), pela letra B; uma fase tricrítica, em que três fases ordinárias se tornam idênticas, pela letra C, e assim por diante. Um estado composto por duas fases ordinárias em coexistência é representado por A^2 , o ponto triplo por A^3 , um ponto crítico terminal por AB , um ponto bicrítico por B^2 , etc. Em geral, um ponto multicrítico é representado por $A^{m_1}B^{m_2}C^{m_3}D^{m_4}\dots$. De acordo com as regras de Gibbs, o número mínimo de componentes necessário para observar este ponto multicrítico é dado por

$$c = m_1 + 3m_2 + 5m_3 + 7m_4 + \dots - 2 \quad (1.38)$$

Nesta tese nos deteremos ao estudo de ponto tricrítico (ver Fig.(1.10)), que corresponde o ponto onde três fases se tornam idênticas ou três linhas críticas que se interceptam. Na Fig.(1.10) 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 [13] de ponto tricrítico.

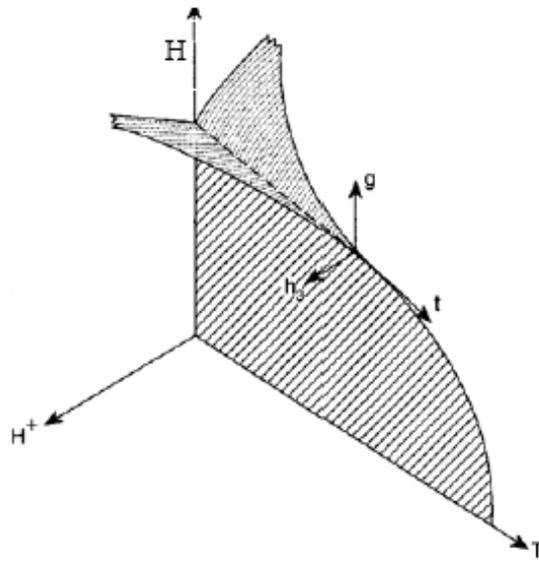


Figura 1.10: Diagrama de fase referente a um sistema antiferromagnético no espaço de parâmetro (T, H, H_s) . S_1 e S_2 representam as superfícies de primeira ordem. PTC representa o ponto tricrítico.

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, para o caso de um sistema ferromagnético o parâmetro de ordem é a magnetização. Assim sendo, ficaremos com a seguinte expressão para a energia livre:

$$F = \frac{a}{2}m^2 + \frac{b}{2}m^4 + \frac{c}{2}m^6 + \dots, \quad (1.39)$$

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 $F'(m) = 0$, ficaremos com os seguintes resultados para a primeira derivada até o termo de sexta potência na Eq.(1.39)

$$\frac{\partial F}{\partial m} = ma + bm^3 + cm^5 = 0 \quad (1.40)$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial m^2} = a + 3bm^2 + 5cm^4 < 0. \quad (1.41)$$

Da Eq.(1.40) 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 máximo, então apenas as soluções $\pm m_{\pm}$ são fisicamente aceitáveis, assim sendo a Eq.(1.41) ficará reescrita nesta solução por

$$\left(\frac{\partial^2 F}{\partial m^2}\right)_{m=m_{\pm}} = \frac{1}{c}\sqrt{b^2 - 4ac}m_{\pm}^2 \quad (1.42)$$

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,

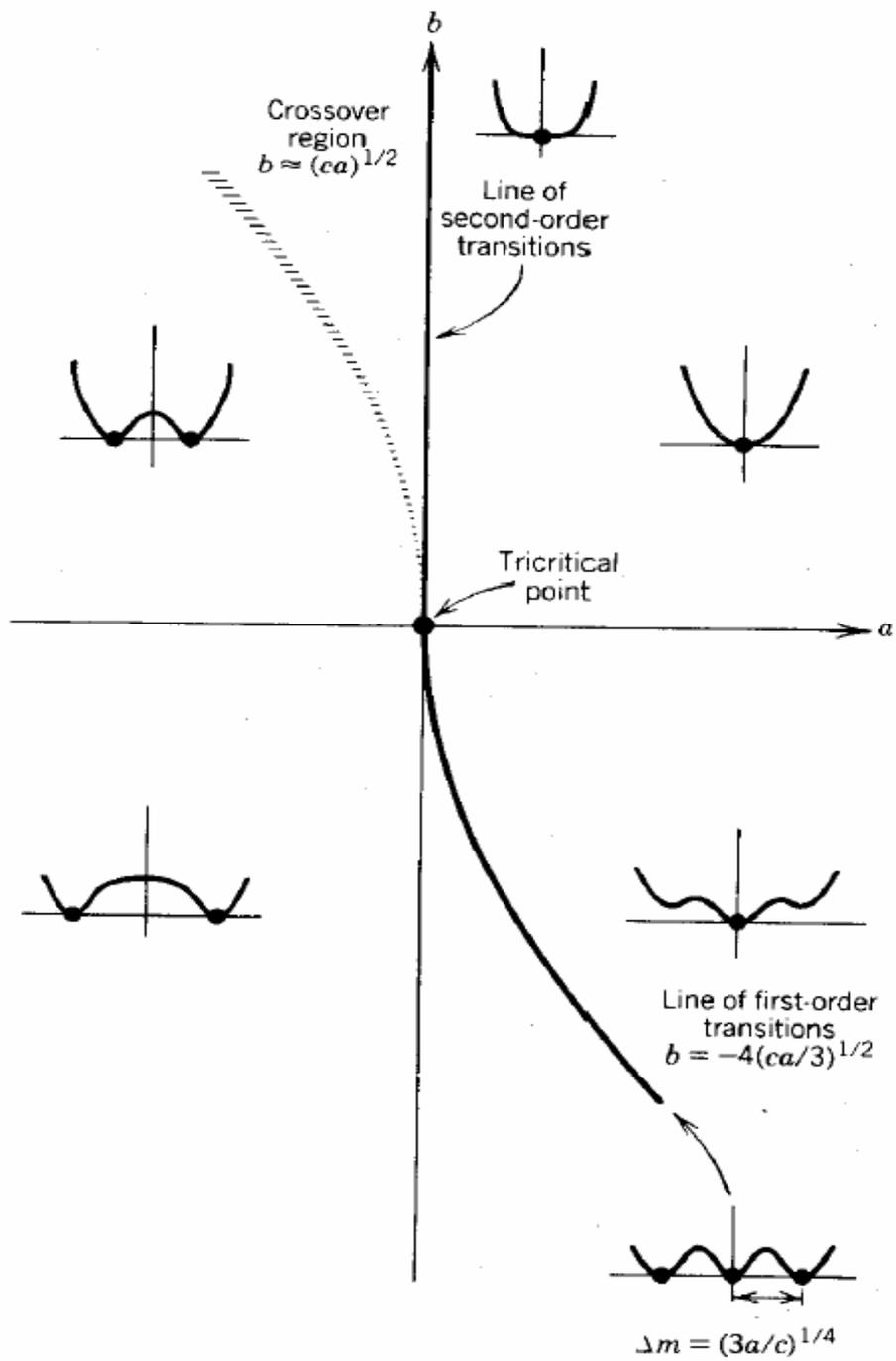


Figura 1.11: Comportamento da energia livre no plano $a - b$. Sendo indicadas as regiões de transição de primeira e segunda ordem, além do ponto tricrítico.

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 $m = 0, \pm m_{\pm}$ são pontos de mínimos, ou seja, o sistema se encontra num estado triplamente degenerado. Escolhemos como referência $F(T, 0) = 0$, obtemos da Eq.(1.40) o seguinte resultado:

$$m_{\pm}^2 = -\frac{4a}{b} \quad (1.43)$$

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

$$b = -4\sqrt{\frac{ac}{3}} \quad (1.44)$$

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

$$m = \left(\frac{3a}{c}\right)^{1/4} \quad (1.45)$$

da Eq.(1.45) obtemos 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 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.(1.11).

1.4 Organização do presente trabalho

Estudos da criticalidade e termodinâmica de modelos de spins clássicos e quânticos com interações competitivas puras e aleatórias têm motivado os teóricos, por causa sobretudo do surgimento de diversos tipos de ordenamentos (fases moduladas, colinear, spin-líquido, vidro de spin, etc.) e pontos multicríticos (bicríticos, tricríticos, Liffshitz, etc.). Nesta tese são estudados modelos com interações competitivas que apresentam diversos comportamentos multicríticos e fases, onde particularmente estaremos focalizando as transições de fase quântica ($T = 0$). Para tratar esses modelos iremos utilizar vários métodos aproximativos, tais como a Aproximação de Campo Médio (MFA) com interação de longo alcance, Teoria do Campo Efetivo (EFT) e Grupo de Renormalização na aproximação de Campo Efetivo (EFRG).

No capítulo-2 será feita uma abordagem sobre transições de fases quântica para sistemas magnéticos, cujo objetivo é apresentar informações necessárias para o tratamento dos modelos quânticos estudados nesta tese. Para ilustração estudaremos a transição de fase do modelo de Ising ferromagnético com interação de longo-alcance na presença de um campo transversal.

No capítulo-3 estudaremos o modelo de van Hemmen generalizado, onde os efeitos quânticos serão investigados através da inclusão de um campo transversal e de anisotropias biaxiais. Este modelo simplificado, que não faz uso das réplicas reproduz algumas propriedades qualitativas da fase vidro de spin, como, por exemplo, a cúspide da susceptibilidade. Rigorosamente falando, o modelo de van Hemmen não representa um modelo para um vidro de spin genuíno, pois este não é capaz de reproduzir a grande multiplicidade de estados (metaestáveis) em baixas temperaturas características fundamental da frustração. Recentemente, a transição de fase em vidro de spin quântico, em especial o vidro de spin de Ising com campo transversal, tem sido tema de muitas investigações teóricas motivado pelos resultados experimentais como no caso do composto $\text{LiHo}_{0.167}\text{Y}_{0.833}\text{F}_4$ [50]. Além disso, a forma de como ocorre a transição de fase no regime quântico, quando o sistema é submetido ao campo transversal ou então quando o sistema apresenta anisotropias

transversais, são bem distintos e ricos em informações, possibilitando compreender melhor de como funciona esse tipo de transição para diferentes agentes que proporcionam a destruição da ordem magnética do sistema. Estas são as maiores motivações para estudar a versão do modelo de van Hemmen quântico anisotrópico biaxial.

No capítulo-4, estudaremos os diagramas de fases do modelo Heisenberg anisotrópico com interações ferromagnéticas e antiferromagnéticas entre primeiros (J_1) e segundos vizinhos (J_2) nas redes quadrada e cúbica simples na ausência de campo externo. Os modelos propostos para determinação desses diagramas de fases são discutidos através dos métodos aproximativos Teoria do Campo Efetivo (EFT) e Grupo de Renormalização na aproximação de Campo Efetivo (EFRG), via formalismo da técnica do operador diferencial. No estado fundamental destes modelos são apresentados tipos diferentes de ordenamento de spins, ou seja, podemos ter ordenamento ferromagnético ou antiferromagnético e os estado superantiferromagnético. Serão determinados vários diagramas em função do parâmetro de frustração $\alpha = J_2/J_1$. A presença da interação J_2 é induz a frustração, destruindo assim a fase ferro ou antiferromagnética (F ou AF) ($\alpha < \alpha_c$). Para $\alpha > \alpha_c$, temos ordenamento dos spins alternados paralelamente e antiparalelamente entre cadeias (rede quadrada) e planos (rede cúbica simples), que correspondem as fases colineares e laminar, respectivamente. Vários trabalhos foram realizados para estudar esses tipos de sistemas magnéticos, nos limites de Ising [58,59] e de Heisenberg [51-54,56] referente a uma rede quadrada. Contudo em nenhum desses trabalhos o caso Heisenberg em 3 dimensões tem sido analisado.

No capítulo-5 a transição de fase quântica será estudada através do modelo de Ising-1/2 na presença de um campo transversal com interações para um sistema ferromagnético com interações entre primeiros e segundo vizinhos. Usaremos os métodos aproximativos desenvolvidos capítulo-4. Finalmente, no capítulo-6 apresentaremos as conclusões e perspectivas futuras.

Referências

- [1] P. Weiss, *J. Phys. Radium* **4**, 661 (1907).
- [2] S. J. Barnett, *Proc. Am. Acad. Arts and Sci.* **75**, 109 (1944).
- [3] A.A.O. Carneiro, A. Ferreira, E.R. Moraes, D.B. Araújo, M. Rosa e O. Baffa, *Rev. Bras. Ens. Física* **22**,324 (2000).
- [4] L. de Jongh e A. R. Miedema, *Adv. Phys.* **23**, 1 (1974).
- [5] P. S. Allen, *Contemp. Phys.* **17**, 387 (1976).
- [6] A. E. Bell e A. D. Caplin, *Contemp. Phys.* **16**, 375 (1975).
- [7] R. Pauthenit, *Ann. Physique* **3**, 424 (1958).
- [8] M. A. Lasher, J. van der Broek e C. J. Garter, *Physica* **24**, 1061 (1958).
- [9] L. Néel, *Ann. Physique* **18**, 5 (1932).
- [10] N. F. Oliveira, A. Paduan-Filho e S. R. Salinas, *AIP Conference Proceedings* **29**, 463 (1975).
- [11] M. E. Fisher e D. R. Nelson, *Phys. Rev.Lett.* **32**, 1350 (1974).
- [12] E. Stryjewski e N. Giordano, *Adv. Phys.* **26**, 487 (1977).
- [13] R. B. Griffiths, *Phys. Rev.B* **7**, 545 (1973).

- [14] D. P. Landau, B. E. Keen, B. Schneider, e W. P. Wolf, *Phys. Rev. B* **3**, 2310 (1970).
- [15] D. C. Malttis, *The Theory of Magnetism I - Springer-Verlag, New York* (1985).
- [16] W. K. Heisenberg, *Z. Phys.* **49**, 619 (1928).
- [17] J. G. Ramos, *II Simpósio Brasileiro de Física Teórica - Rio de Janeiro-RJ* (1969).
- [18] Y. Frenkel, *Z. Phys.* **49**, 619 (1928).
- [19] Y. Dorfman, *Nature* **119**, 353 (1928).
- [20] P. A. M. Dirac, *The Principles of quantum mechanics* (1958).
- [21] L. J. de Jongh e A.R.Miedema, *Experiments on simple magnetic model systems - Taylor and Francis Ltd., London*, Pag.133 (1974).
- [22] E. J. Samuelsen, et al., *Phys. Rev. B* **3**, 157 (1971).
- [23] K. Yosida, *Theory of Magnetism - Springer-Verlag, New York*, Pag.125 (1996).
- [24] N. D. Mermin e H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **22**, 1133 (1966).
- [25] J. Ricardo. de Sousa e N. S. Branco, *Phys. Rev. B* **72**, 13442 (2005).
- [26] J. H. van Vleck, *J.Phys. Rad.*, **12**, 262 (1931); *Phys.Rev.* **52**, 1178 (1937).
- [27] T. Moryia, *Magnetism vol 1 - Ed. G. T. Rado e H. Suhl* (1963).
- [28] I. E. Dzyoloshinski, *J. Phys. Chem. Solids* **4**, 241 (1958).
T. Moriya, *Phys, Rev. Lett* **4**, 228 (1960).
- [29] R. J. Baxter, *Exactly solved models in statistical mechanics - Academic Press, New York* (1982).
- [30] L. Onsager, *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944).

- [31] W. P. Wolf, The Ising Model and Real Magnetic Materials, *Braz. J. Phys.* **30**, 794 (2000).
- [32] T. Matsubara e H. Matsuda, *Progr. Theor. Phys.* **16**, 416 (1956).
- [33] E. H. Lieb, *Phys. Rev. Lett.* **18**, 1046 (1967).
- [34] J. M. Kosterlitz e D. J. Thouless, *J. Phys. C* **6**, 1181 (1973).
- [35] A. N. Berker e D. R. Nelson, *Phys. Rev. B*, **19**, 2488 (1979).
- [36] H. Bethe, *Z. Phys.* **71**, 205 (1931).
- [37] H. Hulthén, *Arkiv. Nat. Astron. Fys.* **26A**, 11 (1938).
- [38] P. Walker, *Phys. Rev.* **116**, 1089 (1959).
- [39] G. Shirane, Y. Endoh, R. J. Birgeneau, M. A. Kastner, Y. Hidaka, M. Oda, M. Suzuki, e T. Murakami, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 1613 (1987).
- [40] Y. Endoh, et.al., *Phys. Rev. B* **37**, 7443 (1988).
- [41] N. M. Salazar, *Propriedades magnéticas intrínsecas e comportamento crítico da liga metálica Fe_{1-x}Al_x*, *dissertação de mestrado*, UFPE (1994).
- [42] D. L. Connelly, J. S. Loomis e D. E. Mapother, *Phys. Rev. B*, **3**, 924 (1971).
- [43] V. L. Ginzburg, *Sov. Phys. Solid State* **2**, 1824 (1960).
- [44] J. Ricardo. de Sousa, *Phys. Rev. Lett. A* (1997).
- [45] H. E. Stanley, *Introduction to phase transitions and critical phenomena* (1971).
- [46] B. Widom, *J. Chem. Phys.* **43**, 3892 (1965).
- [47] C. Domb e D. L. Hunter, *Proc. Phys. Soc.* **86**, 1147 (1965).
- [48] L. P. Kadanoff, *Physics* **2**, 263 (1966), *Ann. Phys.* **100**, 559 (1976).

- [49] J. T. Ho e J. D. Lister, *Phys. Rev. Lett.* **22**, 603 (1969).
- [50] Wu, W. Bitko, D., Rosenbaum, T.F. e Aeppli, G. *Phys. Rev. Lett.* **67**, 2076 (1991).
- [51] V. Kalmeyer e R.B. Laughlin, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 2095 (1987).
- [52] D. Poilblanc, *Phys. Rev. B* **42**, 4049 (1990).
- [53] P. Chandra e B. Douçout, *Phys. Rev. B* **38**, 9335 (1988).
- [54] M. Kohmoto e J. Friedel, *Phys. Rev. B* **38**, 7054 (1988).
- [55] D. L. Bergman, G. A. Fiete e L. Balents, *Phys. Rev. B* **73**, 134402 (2006).
- [56] R. B. Laughlin e Z. Zou, *Phys. Rev. B* **41**, 664 (1989).
- [57] P.W. Anderson, *Mater. Res. Bull.* **8**, 153 (1973).
- [58] J. L. Morán, F.G. Aguilera e J. M. Sanchez, *Phys. Rev. B* **48**, 5 (1993).
- [59] N. M. Emilio e A. Pelizzola, *Phys. Rev. E* **55**, R17 (1997).

Capítulo 2

Aspectos gerais sobre transição de fase quântica

2.1 Considerações gerais

Estudar transições de fases de sistemas quânticos em baixas dimensões é bastante interessante, pois podemos aprender a respeito de outros fatores, além das flutuações térmicas, que podem proporcionar uma transição de fase do tipo ordem/desordem.

O modelo de Ising com campo transversal (MICT) é um modelo quântico que tem sido bastante utilizado para estudar as transições de fases que ocorrem em temperatura nula (estado fundamental). Este modelo foi proposto, inicialmente, por de Gennes (1963) [1] para tratar de sistemas ferroelétricos do tipo KH_2PO_4 . Neste modelo quando as interações entre os spins fixos (modelo puro), uma transição de fase de segunda ordem no estado fundamental ($T = 0$) ocorre num certo valor crítico do campo transversal (Ω_c), que neste regime de temperatura é o agente responsável pela desordem da fase ordenada. Em seguida Elliott-Pfeuty [2] desenvolveram um estudo deste sistema ferromagnético em uma dimensão na presença de um campo transversal, neste modelo foi obtida transição de fase de segunda ordem no estado fundamental ($T = 0$) quando o sistema magnético é submetido a um valor crítico do campo transversal.

Um outro aspecto importante do MICT é o fato dos expoentes críticos associados ao campo (Ω) em d dimensão a $T = 0$ serem iguais aos expoentes críticos à temperatura finita do modelo de Ising sem campo transversal em $d+1$ dimensão [3]. Isto ocorre quando o termo de acoplamento entre os spins primeiros vizinhos além de não ser aleatória, ainda é constante. O MICT tem solução exata em $d = 1$ dimensão [3], haja visto que o modelo de Ising sem campo transversal tem solução exata em $d = 2$ dimensões [4]. Temos ainda que grande parte dos resultados obtidos a partir de técnicas de grupo de renormalização se referem à temperatura nula [5,6,7,8].

Outro modelo estudado que também apresenta transição de fase quântica é o modelo de Blume-Capel [9,10] na presença de um campo transversal Ω . A anisotropia uniaxial aplicada no modelo de Ising é na mesma direção da magnetização espontânea do sistema, sendo que esta anisotropia pode ser ou não agente de destruição da ordem magnética, dependendo do regime de valores assumido por esta anisotropia. Diferentemente, do campo transversal que é, absolutamente, um agente de destruição da ordem magnética. Os resultados obtidos do modelo de Blume-Capel se referem a um sistema magnético de spin $S \geq 1$. Uma das formas mais modernas do modelo Quântico de Blume-Capel é dado através do seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{N} \sum_{i \neq j} \sigma_i^z \sigma_j^z + D_z \sum_i (\sigma_i^z)^2 - H \sum_i \sigma_i^z - \Omega \sum_i \sigma_i^x, \quad (2.1)$$

onde $J > 0$ é a interação de troca, D_z é o parâmetro de anisotropia uniaxial, H é o campo longitudinal e Ω é o campo transversal. A primeira soma é feita sobre todos os sítios da rede (interação de longo-alcance), portando o Hamiltoniano (2.1) apresenta solução exata e corresponde ao resultados da aproximação de campo médio.

Do modelo original proposto Blume e Capel ($\Omega = 0$) temos que o sistema magnético em $T = 0$ sofre uma transição de primeira ordem para uma anisotropia crítica $(D_z/J)_c = 0.5$. Lembrando que uma transição de fase de primeira ordem é caracterizada pela presença de uma calor latente, dado por $Q_L = T_c \Delta S$, onde ΔS corresponde a vari-

ação da entropia das fase ordenada e desordenada na temperatura crítica, e ainda pelo comportamento de parâmetro de ordem magnética que se anula de modo descontínuo na temperatura crítica, ou seja, a ordem magnética apresenta um valor finito e nulo na temperatura crítica. Em transições de fase que ocorrem em baixas temperaturas ($T_c = 0$), proporciona um calor latente pequeno ($Q_L \simeq 0$), desta forma não sendo o melhor indicador do tipo de transição de fase, haja visto que se $Q_L = 0$ temos uma transição de fase de segunda ordem, portanto, em baixa temperatura o melhor indicativo de transição de fase de primeira é o comportamento da ordem magnética se anular de modo descontínuo.

As transições de fase quântica se deve ao comportamento dado pelo deslocamento dos mínimos de energia (tunelamento), em que o sistema magnético se encontra no equilíbrio termodinâmico [9], devido a ação de um campo transverso Ω que é responsável pela destruição da ordem magnética. Existe um *gap* de energia entre os estados ordenado ($m \neq 0$) e o desordenado ($m = 0$), que diminui a medida que aumenta a intensidade do campo Ω , haja visto que esse campo gera níveis de energia entre os estados ordenado e desordenado, desta forma os spins que fazem parte da ordem magnética podem tunelar para o mínimo de energia em que o estado é desordenado.

Recentemente, vários trabalhos têm sido propostos aplicando o campo transverso em sistema magnéticos dos mais variados tipos, como por exemplo, o trabalho desenvolvido por J. Roberto Viana, J. Ricardo de Sousa [11,12] para um sistema vidro de spin, Colares [13] referente ao estudo quântico de um sistema antiferromagnético com interações competitivas em $d = 1, 2$ dimensões, Rosenbaum [14] analisou o comportamento da susceptibilidade de um sistema magnético $LiHoF_4$ em função da aplicação de um campo transverso, Goldschmidt [15] desenvolveu um trabalho para sistema magnético diluído vidro de spin, no qual faz um tratamento do comportamento termodinâmico em altas e baixas temperaturas, obtendo uma transição de fase de segunda ordem em baixa temperatura.

Do ponto de vista experimental, podemos observar também uma transição de fase de segunda ordem para os materiais de férmions pesados do tipo $CeCu_{6-x}Au_x$ [16] que

tem um ordenamento magnético em $T \simeq 0$ dependente da concentração x . Os momentos magnéticos nos íons de Ce são arranjados numa função densidade de spin (SDW) com um período incomensurável (o valor médio do operador de spin oscila tipo de uma onda com período que não é um número racional de um período da rede cristalina). Este ordenamento está presente para altas concentrações. Com a diminuição do valor de x se aproximando de um valor característico x_c , a ordem magnética é diminuída sofrendo uma transição de fase quântica de segunda ordem quando atingimos o valor $x = x_c$. O estado fundamental é um líquido de Fermi com uma larga massa efetiva para as quase-partículas fermiônicas.

2.2 Grupo de Renormalização e relação de escala

O modelo de Ising na presença de um campo transversal externo proposto por de Gennes [2], representa o modelo mais simples para fazer um tratamento da transição de fase quântica. Este modelo é caracterizado pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i \neq j} \sigma_i^z \sigma_j^z - H \sum_i \sigma_i^z - \Omega \sum_i \sigma_i^x, \quad (2.2)$$

onde J é o termo de interação entre os primeiros vizinhos do sistema magnético, H e Ω são os campos longitudinal (direção- z) e transversal (direção- x), respectivamente, em relação a direção da ordem magnética do sistema magnético que é tomada na direção- z . Para $H = 0$ é obtido deste modelo que para $T = 0$ e $\Omega = 0$ a ordem magnética é diferente de zero, porém para $T = 0$ e $\Omega = \infty$ a ordem magnética é destruída. No estado fundamental ($T = 0$) existe um ponto crítico quântico (PCQ) correspondente a $(\Omega/J)_c$ no qual a ordem magnética $\langle \sigma^z \rangle$ é destruída, ou seja, $\langle \sigma^z \rangle = 0$.

Próximo da região do ponto PCQ numa transição de fase de segunda ordem, para temperatura finita ou nula, são observados vários comportamentos das grandezas magnéticas, caracterizados por expoentes críticos dados a partir do termo $g = [\Omega/J - (\Omega/J)_c] / (\Omega/J)_c$

pelas seguintes relações (para um estudo mais aprofundado ver [17]):

$$\begin{aligned}
 f &\propto |g|^{2-\alpha} \\
 \xi &\propto |g|^{-\nu} \\
 m &\propto |g|^\beta \\
 \chi &\propto |g|^{-\gamma} \\
 \tau &\propto |g|^{-\nu z} \\
 m(H, g = 0) &\propto H^{1/\delta},
 \end{aligned} \tag{2.3}$$

obtidas para quando $g \rightarrow 0$, sendo que f é a energia livre, ξ é o comprimento de correlação, m é a magnetização e τ é o tempo de relaxação crítico do sistema magnético. O expoente crítico dinâmico z apresenta uma relação de universalidade quando multiplicamos pelo expoente crítico ν . Temos ainda que no ponto crítico a temperatura finita o parâmetro de correlação é relacionado com o expoente crítico η , decaindo com a distância r entre os sítios, a partir da seguinte relação:

$$G(r) \propto \frac{1}{r^{d-2+\eta}} \quad (T_c \neq 0). \tag{2.4}$$

Sendo que para $g = 0$ teremos que o comprimento de correlação ficará infinito. Na região próxima da transição de fase quântica, ou seja, $T = 0$ e $g \rightarrow 0$ o comportamento assintótico do parâmetro de correlação envolve o expoente z , ou seja:

$$G(r) \propto \frac{1}{r^{d+z-2+\eta}}, \quad (T = 0, g \rightarrow 0), \tag{2.5}$$

definindo portanto a dimensão efetiva por

$$d_{eff} = d + z. \tag{2.6}$$

Os expoentes críticos α , β , ν e δ estão relacionados entre si através das identidades

obtidas por grupo de renormalização em temperatura finita, que são válidas em $T = 0$, dadas por

$$\begin{aligned}\alpha + 2\beta + \gamma &= 2 \\ \beta + \gamma &= \beta\delta \\ \nu(2 - \eta) &= \gamma.\end{aligned}\tag{2.7}$$

A relação de hiperescala $2 - d = \nu d$ em temperatura é então modificada introduzindo o aspecto da dimensão efetiva (d_{eff}), ou seja,

$$2 - \alpha = \nu(d + z).\tag{2.8}$$

Essas expressões obtidas para os expoentes críticos são determinadas a partir do esquema do grupo de renormalização (GR). Salinas faz uma excelente abordagem sobre o esquema do grupo de renormalização para a criticalidade clássica de sistemas magnéticos, da qual é formada uma base conceitual para as idéias de universalidade e para as formas de escala, de tal forma que o esquema do GR fornece as bases microscópicas que estavam faltando nas teorias de escala. Um fator bastante importante obtido a partir do GR é que o mesmo proporciona um procedimento bastante eficiente para determinar os valores dos expoentes críticos. A aplicação do GR se dá a partir do fato de que nas proximidades do ponto crítico o comprimento de correlação ξ é muito maior do que a distância mínima entre os sítios que compõem a rede, representado pelo parâmetro de rede, desta forma segundo Kadanof é possível diminuir o número de graus de liberdade de um sistema em um modelo de spins.

Por exemplo, os spins situados dentro de um bloco de dimensão L , com $L \ll \xi$, teriam um comportamento coerente e seriam substituídos por uma nova variável efetiva de spin. Esta transformação de escala, envolvendo o fator $b = L/L'$ nas dimensões dos sistemas conduzirá ao novo Hamiltoniano \mathcal{H}' com a mesma forma do Hamiltoniano original dado por $\mathcal{H}' = R\mathcal{H}$, a transformação R deve preservar a função de partição, ou

seja:

$$Z_N[\mathcal{H}] = Tr \exp \left[-\frac{\mathcal{H}}{k_B T} \right] = Tr' \exp \left[-\frac{\mathcal{H}'}{k_B T} \right] = Z_{N'}[\mathcal{H}'], \quad (2.9)$$

sendo que $N = N'/b^d$ referente a quantidade de spins dos sistemas de comprimento L e L' .

Desta forma podem ser obtidas relações de recorrência analíticas, entre os parâmetros físicos obtidos dos Hamiltonianos \mathcal{H}' e \mathcal{H} . É feita uma determinada quantidade de transformações R , até que na criticalidade é atingido o ponto fixo $\mathcal{H}^* = R\mathcal{H}^*$ da transformação R , isto se verifica porque na criticalidade o comprimento de correlação ξ vai ao infinito, não se alterando com a mudança nas escalas de comprimentos.

Partindo do sistema representado pelo Hamiltoniano $\mathcal{H}[\sigma]$ obtemos então o Hamiltoniano $\mathcal{H}'[\sigma']$, para a transição de fase quântica em $T = 0$ (estado fundamental) teremos as seguintes transformações de escala:

$$\begin{aligned} J' &= b^{-y} J \\ \Omega'/J &= b^{-y} (\Omega/J) \\ g' &= b^\omega g \\ H' &= b^x H, \end{aligned} \quad (2.10)$$

onde aqui são introduzidos três novos expoentes y , x e ω . A densidade da energia livre ($f = F/L^d$) e o comprimento de correlação obtidas a partir do processo de renormalização ficam sendo dadas por

$$f' = b^d f = J' f(|g'|, H'/J') \quad (2.11)$$

$$\xi'(|g'|, H'/J') = b^{-1} \xi(|g|, H/J). \quad (2.12)$$

Usando as relações dadas pela Eq.(2.10) ficaremos com os seguintes resultados:

$$\frac{f(|g|, H/J)}{J} = b^{-(d+y)} f [b^\omega |g|, b^{(x+y)} H/J] \quad (2.13)$$

$$\xi(|g|, H/J) = b^{\xi'} [b^\omega |g|, b^{(x+y)} H/J], \quad (2.14)$$

escolhendo o fator de escala de modo que

$$b = |g|^{-1/\omega}, \quad (2.15)$$

ficaremos

$$f/J = |g|^{(d+y)/\omega} f \left[1, \frac{H/J}{|g|^{(x+y)/\omega}} \right] \quad (2.16)$$

$$\xi = |g|^{-1/\omega} \xi' \left[1, \frac{H/J}{|g|^{(x+y)/\omega}} \right], \quad (2.17)$$

do comprimento de correlação podemos identificar o expoente crítico $\nu = 1/\omega$ e observando a forma da energia livre dada Eq.(2.3) dada por $f = |g|^{2-\alpha}$ podemos obter a relação quântica de hiperescala dada por

$$2 - \alpha = \nu(d + y), \quad (2.18)$$

onde nesta expressão temos o expoente y obtido pelo processo de renormalização. Podemos observar que esta relação de hiperescala é diferente da expressão para ponto crítico em temperatura finita onde só aparece o termo de dimensão d , enquanto na relação de hiperescala temos um termo de dimensão efetiva dado por $d_{ef} = d + y$.

Da definição da ordem magnética $m = -\frac{\partial f}{\partial H}$, podemos obter apartir da Eq.(2.16)

$$m = - \left(\frac{\partial f}{\partial H} \right)_{H=0} \propto |g|^{\nu(d-x)}, \quad (2.19)$$

contudo, da relação dada pela Eq.(2.3), i.e., $m \propto |g|^\beta$, encontramos

$$\beta = \nu(d - x). \quad (2.20)$$

Na presença de um campo externo, devemos ter

$$m = - \left(\frac{\partial f}{\partial H} \right) = |g|^{\nu(d-x)} f' \left[1, \frac{H/J}{|g|^{(x+y)/\nu}} \right], \quad (2.21)$$

próximo do ponto crítico ($g = 0$), o parâmetro de ordem apresenta a seguinte expansão:

$$m = - \left(\frac{\partial f}{\partial H} \right) = |g|^{\nu(d-x)} \left[\frac{H/J}{|g|^{(x+y)/\alpha}} \right]^p, \quad (2.22)$$

sendo que o expoente é obtido pela condição de que a ordem magnética seja finita quando $|g| = 0$, isto ocorre se m não depender de $|g|$ então o expoente de $|g|$ deve ser nulo, ou seja,

$$\nu(d - x) - p(x + y)/\alpha = 0, \quad (2.23)$$

obtendo

$$p = \frac{d - x}{x + y} = \frac{\beta}{\Delta}, \quad (2.24)$$

onde introduzimos o expoente $\Delta = \nu(x + y)$. Agora de acordo com a Eq.(2.3) devemos ter $m(H, |g| = 0) \propto H^{1/\delta}$, desta forma o expoente crítico δ apresenta a seguinte relação:

$$\delta = 1/p = \frac{\Delta}{\beta}. \quad (2.25)$$

A susceptibilidade magnética definida por $\chi = - \left(\frac{\partial m}{\partial H} \right)_{H=0}$, como próximo do ponto crítico quântico $\chi \propto |g|^{-\gamma}$, desta forma obtemos que:

$$\gamma = \nu(2x + y - d). \quad (2.26)$$

A partir das equações Eqs. (2.18), (2.20), (2.24), (2.25) e (2.26) obtemos a relação já

conhecida entre os expoentes críticos, dada por

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad (2.27)$$

e ainda

$$\Delta = \beta + \gamma. \quad (2.28)$$

Em $T = 0$ temos que no ponto crítico ($|g| \rightarrow 0$) o tempo apresenta a seguinte relação de escala:

$$\tau' = b^z \tau, \quad (2.29)$$

onde aqui definimos o termo z como o expoente dinâmico. Na criticalidade, as flutuações quânticas são responsáveis por este tipo de transição de fase, desta forma ao tomarmos a flutuação de energia ΔE em $T = 0$ teremos a seguinte relação:

$$\Delta E' = b^{-y} \Delta E, \quad (2.30)$$

enquanto

$$\Delta \tau' = b^z \Delta \tau. \quad (2.31)$$

Do princípio da incerteza temos que $\Delta E \Delta \tau \geq \hbar$, que deve ser invariante na relação de escala, desta forma ficaremos com a seguinte relação de escala:

$$\Delta E' \Delta \tau' = b^{x-y} \Delta E \Delta \tau \geq \hbar, \quad (2.32)$$

e conseqüentemente, é obtido o seguinte resultado:

$$y = z. \quad (2.33)$$

Da relação quântica de hiperescala dada pela Eq.(2.18) pode ser reescrita da seguinte

forma:

$$2 - \alpha = \nu(d + z), \quad (2.34)$$

onde temos demonstrado que a dimensão efetiva é dada por $d_{eff} = d + z$. Esta mudança na dimensionalidade é bastante importante no estudo de transições de fase quântica de segunda ordem. Podemos citar, por exemplo, a seguinte influência da dimensão efetiva no modelo de Ising com campo transversal estudado por Pfeuty [2] em $d = 1$, no qual os expoentes críticos apresentam os seguintes valores: $\beta = 1/8$, $\alpha = 0$, $\nu = 1$ e $\gamma = 1.75$. Esses mesmos valores para esses expoentes foram encontrados por Onsager [4] no modelo de Ising clássico para $d = 2$ dimensões, sendo a temperatura o agente de destruição da ordem magnética com $g = [T - T_c]/T_c$. Portanto, neste caso o expoente dinâmico corresponde a $z = 1$, ou seja, podemos mapear a criticalidade referente transições de fase quântica em $d = 1$ na criticalidade das transições clássicas em $d = 2$ no que diz respeito aos expoentes críticos padrões, para o modelo de Ising aplicado para um sistema ferromagnético.

2.3 Modelo de Ising com campo transversal

Como já vimos, de Gennes (1963) [1] foi quem introduziu o MICT para descrever transições de fase ordem/desordem em materiais ferroelétricos do tipo KH_2PO_4 . Este modelo é caracterizado pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = -\sum_{i \neq j} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - \Omega \sum_i \sigma_i^x. \quad (2.35)$$

O Hamiltoniano da Eq.(2.35) corresponde a uma representação de pseudospins de um sistema de íons de Hidrogênio do tipo H^+ , sendo que esses prótons podem ocupar dois estados de mínima energia ($\sigma_i^z = \pm 1$), de um poço duplo de potencial, veja a ilustração dada na Fig.(2.1). O campo transversal é o responsável pela probabilidade de tunelamento dos prótons entre esse mínimo de energia e um estado excitado, que é

simulado pelo operador σ_i^x , fazendo a mudança de estado quântico.

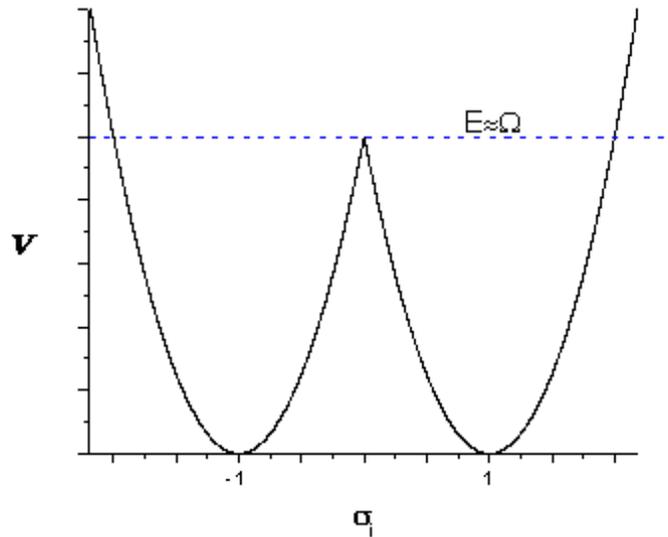


Figura 2.1: Poço duplo de potencial V ao qual o próton H^+ está sujeito no MICT. O campo transversal gera estados excitados, cuja energia é proporcional ao campo.

No MICT tanto o campo transversal quanto a temperatura podem ser os agentes responsáveis pela desordem do sistema magnético. No comportamento crítico do MICT, à temperatura finita, o papel do campo Ω é diminuir o valor da temperatura crítica $T_c(\Omega)$.

2.3.1 MICT e interação de longo alcance

Admitindo que as interações entre os spins seja constante e igual a $J_{ij} = J/N$, com esta hipótese é possível calcular exatamente a função de partição, que equivale a solução de campo médio. A razão de escolhermos este procedimento de interação de longo alcance, a princípio mais elaborado, será justificado adiante quando for feito o estudo do modelo de van Hemmen Quântico anisotrópico no capítulo-3, que é um dos objetivos deste trabalho.

O principal objetivo da Mecânica Estatística consiste na obtenção da função de par-

tição, que para o Hamiltoniano da Eq.(2.35) é dado por

$$Z_N = Tr \exp(-\beta H) = Tr \exp \left[\beta \left(\sum_{i \neq j} \frac{J}{N} \sigma_i^z \sigma_j^z + \sum_i \Omega \sigma_i^x \right) \right]. \quad (2.36)$$

Perceba que os operadores σ_i^z e σ_i^x não comutam, desta forma devemos tomar cuidado com as propriedades operacionais da exponencial da expressão anterior. É necessário aqui usarmos alguma aproximação. Várias aproximações têm sido propostas [19,20], onde expansões espectrais são muito utilizadas, como por exemplo, a expansão dada a seguir

$$\exp(xA) \exp(xB) = \exp \left[x(A+B) + \frac{x^2}{2} [A, B] + \dots \right]. \quad (2.37)$$

Em vários modelos quanto maior for a quantidade de termos dado pela Eq.(2.37) piores serão os resultados obtidos, que é o que ocorre para este modelo, desta forma neste trabalho vamos tomar somente o termo linear desta aproximação, então a função de partição pode ser reescrita na forma aproximada

$$Z_N \simeq Tr \exp \left[\frac{k_1}{N} \sum_{i \neq j} \sigma_i^z \sigma_j^z \right] \exp \left[k_2 \sum_i \sigma_i^x \right], \quad (2.38)$$

onde $k_1 = \beta J$ e $k_2 = \beta \Omega$.

Usando o fato de que $\sum_{i \neq j} \sigma_i^z \sigma_j^z = \frac{1}{2} \left[\left(\sum_i \sigma_i^z \right)^2 - \sum_i (\sigma_i^z)^2 \right]$, então a Eq.(2.38) ficará sendo dada por

$$Z_N \simeq Tr \exp \left[\frac{k_1}{2N} \left(\sum_i \sigma_i^z \right)^2 \right] \exp \left[-\frac{k_1}{2N} \sum_i (\sigma_i^z)^2 \right] \exp \left[k_2 \sum_i \sigma_i^x \right].$$

O primeiro termo quadrático da expressão acima pode ser reescrito usando a identidade

gaussiana dada a seguir

$$\exp(\lambda a^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{2} + a\sqrt{2\lambda}x\right) dx, \quad (2.39)$$

e fazendo a seguinte mudança de variável $x = \sqrt{N}y$ ficaremos com

$$Z_N \simeq \sqrt{\frac{N}{2\pi}} Tr \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{N}{2}y^2\right) \exp\left[\sum_i \left(\sqrt{k_1}y\sigma_i^z - \frac{k_1}{2N}(\sigma_i^z)^2 + k_2\sigma_i^x\right)\right] dy. \quad (2.40)$$

Finalmente, para determinar uma expressão para a função de partição Eq.(2.40), é necessário diagonalizar a matriz presente na segunda exponencial para obter assim o traço, ou seja,

$$Tr \left\{ \exp \left[\sum_i \left(K\sigma_i^z + L(\sigma_i^z)^2 + k_2\sigma_i^x \right) \right] \right\} = \left[Tr \left\{ \exp \left(K\sigma_i^z + L(\sigma_i^z)^2 + k_2\sigma_i^x \right) \right\} \right]^N \quad (2.41)$$

onde $K = \sqrt{k_1}y$ e $L = -\frac{k_1}{2N}$. Definindo a matriz $A = K\sigma_i^z + L(\sigma_i^z)^2 + k_2\sigma_i^x$, teremos que os autovalores da matriz A são: $\lambda_{1,2} = L \pm \sqrt{K^2 + k_2^2}$, então obtemos

$$Tr \{ \exp [A] \} = \sum_{j=1}^2 \exp(\lambda_j) = 2 \exp(L) \cosh \left(\sqrt{K^2 + k_2^2} \right). \quad (2.42)$$

Substituindo este resultado na Eq.(2.40), ficaremos

$$Z_N \simeq \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{N}{2}y^2\right) \left[2 \exp(L) \cosh \left(\sqrt{K^2 + k_2^2} \right) \right]^N dy, \quad (2.43)$$

usando a propriedade $\exp(\ln(a)) = a$, teremos

$$Z_N \simeq \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{N}{2}y^2\right) \exp \left[\ln \left[\left(2 \exp(L) \cosh \left(\sqrt{K^2 + k_2^2} \right) \right)^N \right] \right] dy. \quad (2.44)$$

Para resolver a integral acima vamos usar o método do ponto de sela, ou seja:

$$\int_{-\infty}^{\infty} c \exp(bf(y)) dy \approx c \underset{-\infty < y < \infty}{\text{máx}} \{ \exp(bf(y)) \}. \quad (2.45)$$

Aplicando esse método na Eq.(2.44) ficaremos com a seguinte expressão:

$$Z_N \simeq \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \underset{-\infty < y < \infty}{\text{máx}} \left\{ \exp\left(-\frac{N}{2}y^2\right) \exp\left[N \ln \left[2 \exp(L) \cosh\left(\sqrt{K^2 + k_2^2}\right) \right] \right] \right\}, \quad (2.46)$$

e ainda usando de que $\ln \left[\underset{-\infty < y < \infty}{\text{máx}} (bf(y)) \right] = \underset{-\infty < y < \infty}{\text{máx}} \ln (bf(y))$, ficaremos então com a seguinte expressão:

$$\frac{1}{N} \ln Z_N \simeq \frac{1}{N} \left\{ \ln \left(\sqrt{\frac{N}{2\pi}} \right) + \underset{-\infty < y < \infty}{\text{máx}} N \left\{ -\frac{1}{2}y^2 + \ln \left[2 \exp(L) \cosh\left(\sqrt{K^2 + k_2^2}\right) \right] \right\} \right\}. \quad (2.47)$$

No limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$), temos que $\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\ln(N/2\pi)}{N} \rightarrow 0$, $\underset{-\infty < y < \infty}{\text{máx}} (Nf(y)) = Nf(y)$ e que $L \rightarrow 0$. Portanto, neste limite obtemos da Eq.(2.47) o seguinte resultado:

$$\frac{1}{N} \ln Z_N = -\frac{1}{2}y^2 + \ln \left[2 \cosh\left(\sqrt{K^2 + k_2^2}\right) \right]. \quad (2.48)$$

No ensemble canônico utilizamos a energia livre de Helmholtz para fazer a conexão da termodinâmica com a Mecânica Estatística, essa energia livre por spin é definida por

$$f = -\frac{1}{\beta N} \ln Z. \quad (2.49)$$

Substituindo a Eq.(2.48) em Eq.(2.49), a energia livre por spin ficará sendo dado por

$$f = \frac{1}{\beta} \left\{ \frac{1}{2}y^2 - \ln \left[2 \cosh\left(\sqrt{K^2 + k_2^2}\right) \right] \right\}. \quad (2.50)$$

Da Mecânica Estatística temos que a partir da energia livre podemos obter todas as

grandezas magnéticas do sistema. A magnetização por spin do sistema é definido por

$$m = \langle \sigma_i^z \rangle = \frac{\text{Tr} \sigma_i^z \exp(-\beta H)}{\text{Tr} \exp(-\beta H)} = \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial K} (\ln Z_N) = -\frac{\partial}{\partial K} (\beta f), \quad (2.51)$$

desta forma, a partir da Eq.(2.50) vamos obter a seguinte expressão para a magnetização:

$$m = \frac{K}{\sqrt{K^2 + k_2^2}} \tanh \left(\sqrt{K^2 + k_2^2} \right). \quad (2.52)$$

Para verificar qual é a relação da variável y , é só encontrar o mínimo valor da energia livre f para essa variável, desta forma ficaremos com

$$\frac{\partial f}{\partial y} = y - \sqrt{k_1} m = 0 \quad \Rightarrow \quad y = \sqrt{k_1} m = \sqrt{\beta J} m. \quad (2.53)$$

Assim sendo ficaremos com a seguinte expressão para a energia livre

$$f = \frac{1}{\beta} \left\{ \frac{1}{2} \beta J m^2 - \ln \left[2 \cosh \left(\beta J \sqrt{m^2 + (\Omega/J)^2} \right) \right] \right\}, \quad (2.54)$$

e a partir da equação da magnetização obtemos a seguinte expressão:

$$\sqrt{m^2 + (\Omega/J)^2} = \tanh \left(\beta J \sqrt{m^2 + (\Omega/J)^2} \right) \quad (2.55)$$

2.3.2 Transição de fase à temperatura finita

Na Fig.(2.2) temos o diagrama de fase referente ao comportamento da temperatura em função do campo transversal obtida a partir da Eq.(2.55), a linha de transição é toda de segunda ordem. Na transição de fase a temperatura crítica é obtida a partir da Eq.(2.55) no limite de $m \rightarrow 0$, onde a linha de transição é de segunda ordem é dada por

$$T_c = \Omega / (k_B \text{arctanh}(\Omega/J)). \quad (2.56)$$

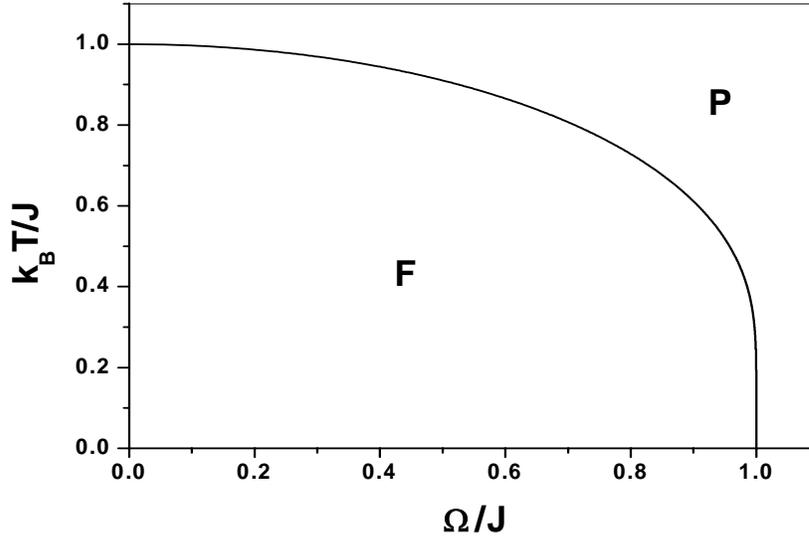


Figura 2.2: Comportamento da temperatura crítica $k_B T_c / J$ em função do campo transversal Ω / J .

A Eq.(2.56) é semelhante a obtida por outros autores [16,17], ela nos fornece informação referente ao comportamento da temperatura crítica com o campo transversal. Note que no limite clássico ($\Omega \rightarrow 0$), temos que $\text{arctanh}(\Omega/J) \simeq \Omega/J$, logo $k_B T_c = J$, que já era um resultado conhecido quando a transição de fase ocorre sob influência térmica, e que corresponde ao resultado de campo médio (teoria de Weiss) fazendo J em zJ (z é o número de primeiros vizinhos). A medida que o campo transversal aumenta, a temperatura crítica T_c diminui, se anulando finalmente no PCQ $\Omega_c = J$.

Na Fig.(2.3) temos o comportamento da magnetização m do sistema em função da temperatura $k_B T / J$ para várias intensidades do campo Ω / J . O comportamento da magnetização é afetado em $T \simeq 0$, a medida que o valor do campo transversal Ω / J é modificado, pois a magnetização diminui a medida que Ω / J aumenta em $T \simeq 0$, como é mostrado na fig.(2.3). Isto indica que ocorre uma diminuição da ordem dos spins na direção z no regime quântico ($T \rightarrow 0$), devido a presença do campo transversal na di-

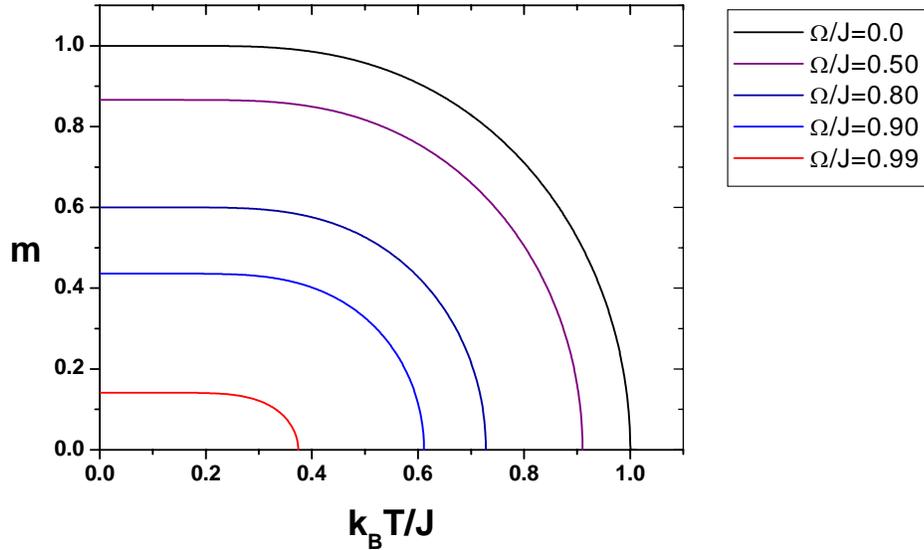


Figura 2.3: Comportamentos da magnetização em função da temperatura para valores diferentes do campo transverso.

reção x , que aumenta o valor médio da magnetização transversal induzida pelo campo Ω . Temos ainda que as temperaturas críticas são alteradas com o aumento do campo Ω/J , onde os resultados destas temperaturas críticas para cada valor do campo estão de acordo com os resultados apresentados na Fig.(2.2). Esta modificação da temperatura crítica ocorre devido o fato do sistema em $T \simeq 0$ já apresentar uma diminuição em sua ordem (magnetização do sistema), devido a presença do campo transverso, e desta forma será necessário menos energia térmica para proporcionar a transição de fase ordem/desordem.

Na Fig.(2.4) temos a determinação do expoente crítico $\beta(\Omega/J) \simeq 0.5$ que é aproximadamente o resultado já conhecido a partir da teoria de campo médio. Como já era previsto a determinação do valor preciso do expoente crítico β é bastante minucioso sendo necessário usar $|t|$ bem pequeno no caso foi usado $|t| = 10^{-4}$.

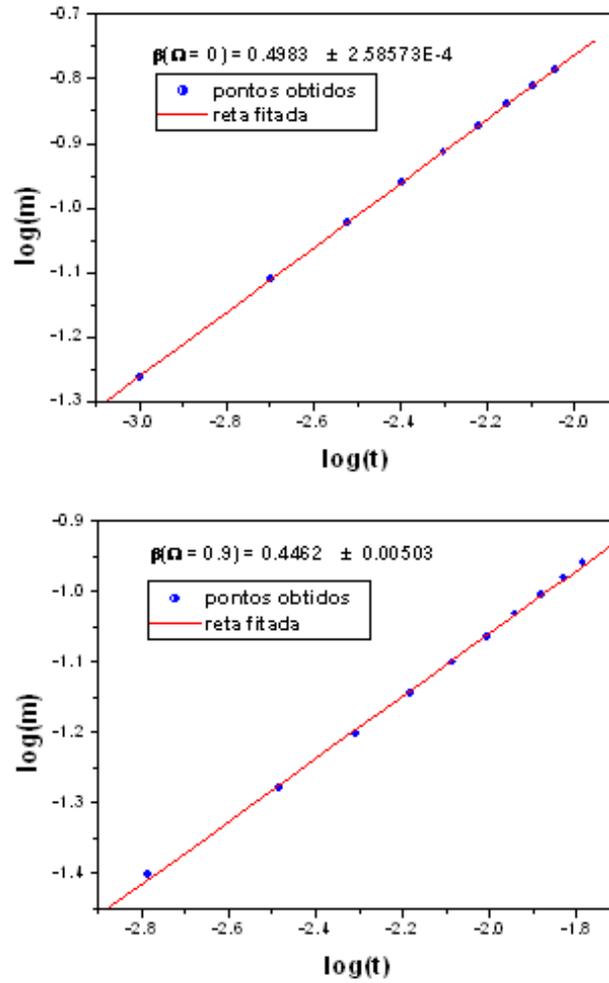


Figura 2.4: Comportamento da relação $\log(m)$ versus $\log(t)$ para campo transverso nulo e não nulo. A inclinação das retas determinam o expoente crítico β .

2.3.3 Transição de fase a $T = 0$

No limite de $T_c \rightarrow 0$, temos que $\tanh(\Omega/(k_B T_c)) = 1$, e da Eq.(2.56) obtemos $\Omega_C = J$. Este resultado nos informa que a transição de fase para $T_C \rightarrow 0$ é influenciada por fatores quânticos, aqui representados pelo termo Ω_C como o agente responsável pela desordem do sistema em baixas temperaturas.

Vamos detalhar melhor a transição de fase no estado fundamental. Em primeiro lugar vamos analisar o que ocorre com a energia livre neste regime de temperatura. Para isto vamos recorrer do fato que $\cosh(x) \simeq \exp(x)/2$, ($x \rightarrow \infty$). Então da Eq.(2.54) com $T \rightarrow 0$ obtemos a seguinte expressão:

$$f_o = \frac{1}{2}m^2 - \sqrt{m^2 + \omega^2}, \quad (2.57)$$

onde $f_o = f/J$ e $\omega = \Omega/J$. Da Eq.(2.57) vamos analisar os pontos de mínimo da energia livre em relação a magnetização, desta forma vamos obter os seguintes resultados:

$$\frac{\partial f_o}{\partial m} = m - \frac{m}{\sqrt{m^2 + \omega^2}} = 0 \Rightarrow \begin{cases} m = 0 \\ m = \pm\sqrt{1 - \omega^2} \end{cases}. \quad (2.58)$$

Para $m = 0$ (estado desordenado) a energia livre do sistema no estado fundamental é dada por

$$f_o(m = 0) = -\omega, \quad (2.59)$$

enquanto que para $m = \pm\sqrt{1 - \omega^2}$ (estado ordenado) obtemos a seguinte expressão para os mínimos de energia referentes aos estados ordenados (excitados):

$$f_o(m = \pm\sqrt{1 - \omega^2}) = -\frac{1}{2}\omega^2 - \frac{1}{2} \quad (2.60)$$

Da Eq.(2.58) observamos que temos duas soluções para a magnetização por spin correspondente a um mínimo de energia livre (a segunda derivada de f_o é positiva para esses valores de m). Portanto, temos dois estados degenerados com um mínimo de energia,

e isto é válido somente na faixa de valores $0 \leq \omega \leq 1$, tal que $\omega_c = 1.0$ é justamente o valor crítico do campo transverso ω , quando $m = 0$. Quando o campo transverso assume valores acima de ω_c temos um estado singlete ($m = 0$) com mínimo de energia. É importante observar que o primeiro estado excitado corresponde a energia dada pela Eq.(2.59). Estas observações são ilustradas na fig.(2.5).

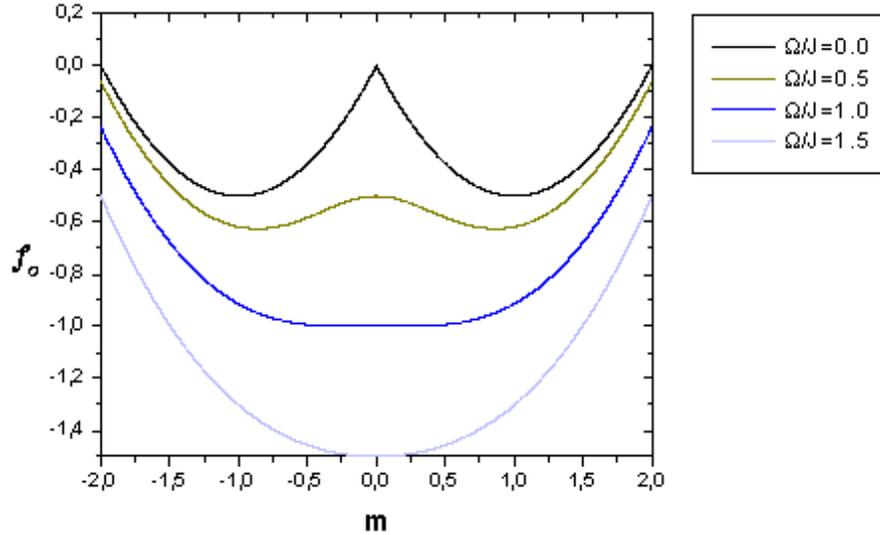


Figura 2.5: Comportamento da energia livre por spin reduzida no estado fundamental como função da magnetização. Na faixa $0 < \omega < \omega_c$ temos dupla degenerescência, enquanto que para $\omega \geq 1$ temos um estado singlete com mínimo de energia.

Na fig.(2.5) podemos observar que a medida que aumenta a intensidade do campo transverso os mínimos de energia dos estados ordenado ($m \neq 0$) e desordenado ($m = 0$) são deslocados para níveis mais estáveis, em relação aos mínimos desses estados para quando esse campo é nulo. Temos ainda que a ordem magnética do sistema diminui, gradativamente, com o aumento do campo transverso, de tal forma que no valor crítico do campo $\Omega_c/J = 1.0$ o sistema se encontra com um mínimo de energia referente ao estado singlete desordenado ($m = 0$), indicando que o sistema sofre uma transição de fase de segunda ordem.

Na fig.(2.6) é ilustrado os comportamentos da energia livre mínima dos estados or-

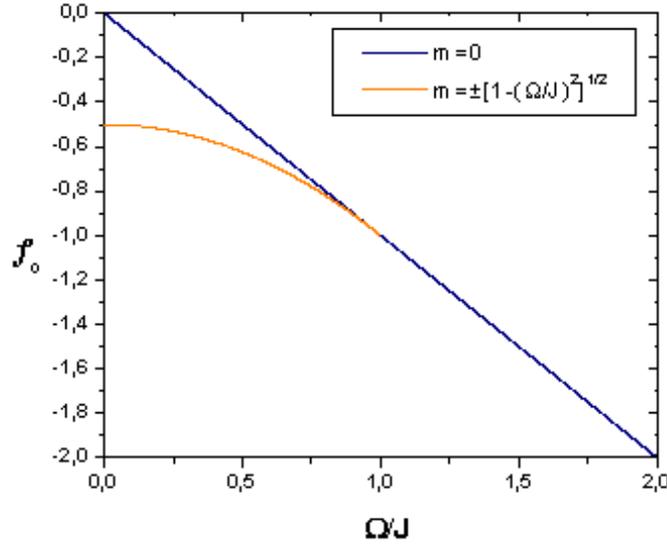


Figura 2.6: Comportamento das curvas da energia mínima e da energia do primeiro estado excitado em função do campo transversal aplicado no sistema.

denados (referente a fase F) (curva abaixo) e desordenados (referente a fase P) (curva acima) em função do campo transversal aplicado no sistema magnético no estado fundamental. Observamos que o $gap = abs(f_F) - abs(f_P)$ de energia entre os mínimos de energia e os estados excitados é atenuado à medida que o campo transversal aumenta, pois ocorre uma dispersão dos spins para a banda de estado excitado, de tal modo que no ponto crítico $\omega = \omega_c = 1$ ($\omega = \Omega/J$), ocorre o colapso das duas curvas e o gap se anula. A diminuição do gap de energia, devido ao aumento do campo, permite que os spins tunelem entre os mínimos de energia e os primeiros estados excitados, proporcionando a diminuição da magnetização m do sistema no estado fundamental. No ponto crítico $\omega = \omega_c$ o gap é nulo e o mínimo de energia passa a ser singlete ($m = 0$). Para $\omega > \omega_c$ o gap de energia continua nulo, mas agora o mínimo de energia é dado pela Eq.(2.18), como pode ser observado na fig.(2.6) para o caso em $\omega = 1,5$, por exemplo, o primeiro estado excitado é desconhecido e ainda o mínimo de energia continua sendo singlete ($m = 0$), desta forma o estado fundamental continua sendo desordenado.

Referências

- [1] P.G. de Gennes, *Solid State Commum.* **1** 132 (1963).
- [2] R. J. Elliott , P. Pfeuty e C. Wood, *Phys. Rev.Lett.* **25**, ,(1970).
- [3] R. R.dos Santos e L. Sneddon, *Phys. Rev. B* **23**, 3541 (1981).
- [4] L. Onsager, *Physical Review* **65**, 117-149, (1944).
- [5] S. D. Drell, M. Weistein, *Phys. Rev. D* **14**, 487, (1976).
- [6] Z. Friedman, *Phys. Rev. Lett.* **36**, 1326 (1976).
- [7] Z. Friedman, *Phys. Rev. B* **17**, 1429 (1978).
- [8] R. Jullien, P. Pfeuty e J. N. Fields, *Phys. Rev. B* **18**, 3568, (1978).
- [9] M. Blume, *Phys. Rev.* **141**, 517 (1966).
- [10] W. Capel, *Physica* **32**, 966 (1966).
- [11] J. Roberto Viana, J. Ricardo de Sousa e Y. Nogueira, *Phys. Rev. B* **66**,113307 (2002).
- [12] J. Roberto Viana, J. Ricardo de Sousa e Y. Nogueira, *Phys. Lett. A* **311**, 480 (2003).
- [13] P.R. Colares, Tese de Doutorado: *Dinâmica e Termodinâmica do Modelo de Ising a Campo Transverso com Interações de Segundos Vizinhos*, **Universidade Federal de Minas-Gerais** (2002).

- [14] D. Bitko e T.F. Rosenbaum, *Phys. Rev. Lett* **77**, 940 (1996).
- [15] Y.Y. Goldschmidt, *Phys. Rev. B* **41**, 4858 (1998).
- [16] A. Rosch, A. Schroder, O. Stockert e H. Lohneysen, *Phys. Rev. Lett.*, **79** 159 (1997);
H. von Lohneysen, A. Neubert, A. Schorder, O. Stockert, U. Tutsh, M. Loewenhaupt,
A. Rosch e P. Wolffe, *Eur. Phys. J. B* **5**, 447 (1998).
- [17] M. A. Continentino, *Quantum Scaling in Many-Body Systems*, *World Scientific*
(2001).
- [18] F.C. Sá Barreto, *Braz. J. of Phys.* **30**, no. 4, (2000).
- [19] P. E. Kaufmam, Kluzinger, e Khurana A., *Phys. Rev. B* **34**, 4766, (1986).
- [20] M. Suzuki, *General Theory of Exponential Product Formulas* (1995).
- [21] M. Suzuki, *Physica A* **194**, 432, (1993).
- [22] A. L. Stella e F. Toigo, *Physical A* **89**, 175, (1977).
- [23] R. M. Zorzenon dos Santos, Tese de doutorado, PUC, Dezembro (1986).

Capítulo 3

Vidro de Spin Quântico com Anisotropia Biaxial

3.1 Introdução

Os comportamentos coletivos e isolados dos átomos em materiais magnéticos são observados, experimentalmente, a partir das respostas destes materiais, quando são submetidos a variações de temperatura e/ou do campo magnético, como, por exemplo, do calor específico e/ou da susceptibilidade magnética [1]. Enquanto que, no tratamento teórico podemos usar o auxílio dos diagramas de fase, das energias livres, etc.

Inicialmente, os pesquisadores buscaram compreender como se dava as interações coletivas. Vários modelos foram propostos para justificar observações experimentais (como a divergência na susceptibilidade no caso do sistema ferromagnético, indicando uma mudança de fase), entre esses modelos podemos citar o de Heisenberg, de Ising, etc. São ainda usadas aproximações matemáticas, como, por exemplo, Campo Molecular de Weiss [2], e também as técnicas do Grupo de Renormalização [3] foram propostos para tratar esses modelos. Porém, outros pesquisadores procuravam entender o comportamento dos átomos de forma isolada. Então passaram a investigar como ocorrem, individualmente, as interações entre os sítios magnéticos [4,5]. Para isso é necessário isolá-los, de modo a

impedir efeitos cooperativos. Foram então desenvolvidas ligas a partir de átomos magnéticos (impurezas) diluídos em matrizes não magnéticas, ligas como, por exemplo, CuFe, AuCr, AgMn, AuFe, CuMn, etc.

É interessante saber, que sistemas magnéticos puros apresentam o grau de desordem desprezível na rede cristalina. Porém, os materiais reais sempre apresentam algum tipo de desordem, o que modifica as propriedades do material hospedeiro. Experimentalmente, a desordem pode ser introduzida num material magnético substituindo, aleatoriamente, átomos magnéticos do cristal, por átomos magnéticos de outro tipo ou ainda não magnético na rede cristalina. O resultando deste processo é conhecido como *diluição por sítios*. A diluição faz com que as interações de troca J_{ij} , entre pares de momentos magnéticos, variem aleatoriamente a cada par. No caso ideal as interações de troca para diferentes pares possuem valores independentes, distribuídos probabilisticamente segunda uma determinada lei, que é comum a todas interações que geram uma desordem “congelada” [1]. Quando os átomos diluidores não são magnéticos diz-se que o composto formado é um *magneto diluído*, como, exemplos típicos, podemos citar os cristais antiferromagnéticos aleatoriamente diluídos, tais como $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$, $\text{Mn}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$ e $\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$. Entretanto, se os átomos diluidores são magnéticos o composto formado é denominado *magneto misto*, tais como os compostos cristalinos $\text{Fe}_x\text{Mn}_{1-x}\text{F}_2$ e $\text{Fe}_x\text{Mn}_{1-x}\text{TiO}_3$.

A partir de resultados experimentais da liga CuFe magnética, estudada por Bitter e Kaufmann-1939 [4], foi observada que a susceptibilidade exibia uma cúspide em altas temperaturas, o que é diferente do comportamento Curie-Weiss a campo externo nulo. Estas observações precisavam ser cuidadosamente analisadas, despertando o interesse de grande parcela da comunidade científica. Buscaram conhecer, por exemplo, o efeito da concentração de sítios magnéticos nas respostas das amostras.

Experimentalmente, isto é obtido procurando tornar o composto mais homogêneo possível, submetendo os constituintes a uma alta temperatura, e depois de determinado tempo de “cozimento” (*annealing*) baixa-se a temperatura bruscamente. Este tempo de “cozimento” é fundamental para o grau de homogeneidade, aumentando a aleatoriedade

da localização das impurezas magnéticas. O baixar brusco da temperatura torna o sistema “temperado” (*quenched*). Desta forma, no sistema *quenched* as impurezas estão fixas e distribuídas aleatoriamente por todo o cristal, gerando desordem magnética [6].

Zimmermann e Hoare [7] perceberam em seus experimentos, que da adição de manganês numa matriz de cobre aparece uma cúspide na susceptibilidade linear para uma certa temperatura T_o , que depende da concentração da impureza. E ainda mais abaixo desta temperatura T_o , a susceptibilidade apresenta um valor finito em baixa temperatura. Outras experiências foram feitas, inclusive para algumas outras ligas como o caso de Cannella e Mydosh [8] que realizaram experiências usando a liga AuFe, apresentando os mesmos resultados qualitativos, e ainda neste caso foi observado que na presença de um campo externo o pico em T_o ficava arredondado. A justificativa mais aceita era a existência de uma transição gradual, para um novo tipo de antiferromagnetismo, já que não havia magnetização no sistema [9,10,11,12].

Em todos estes resultados o mais surpreendente é a reprodução de T_o para a susceptibilidade obtida a partir da A.C. (corrente alternada), independentemente da frequência de oscilação do campo externo aplicado. Este mesmo resultados é também observado por Rivera [1]. Ficando caracterizado então, um comportamento crítico observado em transições de fase ordinárias. Acreditou-se então, na existência de um fenômeno coletivo, como uma transição para uma fase inteiramente diferente do que até então se conhecia.

No final da década de sessenta é que surgem as primeiras certezas de que os momentos magnéticos das impurezas nestas ligas, abaixo de T_o , estariam orientados aleatoriamente, não havendo qualquer tipo de ordenamento antiferromagnético. Bryan Coles fez a comparação entre o desordenamento magnético das impurezas, com a estrutura dos vidros ordinários. Sendo que no vidro as posições de seus constituintes não tem uma ordem espacial definida, como ocorre em outros sólidos, e desta forma Bryan Coles sugeriu o termo vidro de spin (*spin glass*) para este tipo de composto magnético. A temperatura de mudança para esta fase ficou conhecida como temperatura de congelamento T_f (*freezing temperature*), abaixo da qual os spins estariam congelados com orientações

completamente aleatórias.

As teorias que viessem explicar as observações experimentais, a respeito de compostos que possuem ordem vidro de spin, devem levar em consideração os seguintes resultados obtidos em experiências [1] :

1. A susceptibilidade exhibe um pico na temperatura T_f . Tal pico se torna cada vez mais redondo à medida que o valor da frequência do campo aumenta.

2. Para $T \gg T_f$, altas temperaturas, na fase paramagnética a susceptibilidade sofre desvio da lei de Curie, que é dada por

$$\chi = \frac{C}{T - \theta} \quad (3.1)$$

de onde $C = Dg^2\mu_B^2 J(J + 1)/3k_B$, tal que D é densidade de átomos magnéticos e θ é temperatura de Curie.

3. Nenhuma anomalia forte pode ser observada no calor específico próximo ou em outra temperatura, que indique a existência de uma transição de fase convencional, observa-se apenas a existência de um máximo arredondado em $T < T_f$.

3.1.1 Modelos teóricos para explicar o vidro de spin

Primeiramente, devemos observar que a grandeza apropriada para dar a resposta do sistema na região de transição vidro de spin é a susceptibilidade não linear. Esta susceptibilidade é obtida da expansão obtida da magnetização, tal que a mesma é o coeficiente da parcela h^3 como mostra a seguinte expressão:

$$M = \chi h - \chi_{nl} h^3 + \dots \quad (3.2)$$

A partir desta susceptibilidade não linear (χ_{nl}) encontra-se a singularidade em T_f similar à observada na susceptibilidade linear na transição de fase ferromagnética, e assim indicando uma transição de fase. Historicamente deve ter sido a maior evidência de uma nova transição [6].

Edwards e Anderson [13], apresentaram uma proposta teórica, usando a teoria de campo molecular, de um modelo de interação de alcance infinito (Modelo EA). Tendo em vista a desordem que certamente está presente no sistema, esses autores propuseram um modelo regido pelo seguinte Hamiltoniano

$$\mathcal{H}_{EA} = -\sum_{i \neq j} J_{ij} S_i S_j - H \sum_i S_i \quad (3.3)$$

onde (ij) indica um par de interações, J_{ij} é aleatória e H é o campo externo. As ligações J_{ij} são tomadas como independentes entre si, com distribuição de probabilidade idênticas e simétricas, de modo que seu valor médio $\langle J_{ij} \rangle_c$ (média configuracional) seja nulo. Ou seja, se $P(J_{ij})$ é a distribuição de probabilidade, temos que

$$\langle J_{ij} \rangle_c = \int_{-\infty}^{\infty} P(J_{ij}) J_{ij} dJ_{ij} = 0 \quad (3.4)$$

Para fins de discussões teóricas é mais conveniente usar a distribuição de probabilidade gaussiana dada a seguir

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi J}} \exp(-J_{ij}/2J^2) \quad (3.5)$$

onde a variância J determina a largura da distribuição.

O parâmetro que caracteriza a fase vidro de spin proposto para o Modelo EA, leva em conta a aleatoriedade da orientação individual dos spins. Este parâmetro é definido por

$$q_{EA} = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N \langle S_i \rangle_T^2 \right\rangle_c \quad (3.6)$$

onde $\langle \dots \rangle_T$ é a média térmica e $\langle \dots \rangle_c$ a média configuracional. Em altas temperaturas o sistema se torna paramagnético com $q = 0$, e para $T < T_f$ temos $q \neq 0$.

Este modelo no entanto apresentava um problema matemático para os autores, que era de calcular médias de logaritmos de funções, obtidas a partir da função de partição que é a conexão com a termodinâmica. Eles então propuseram a aplicação do truque das

réplicas, que consiste na construção de n réplicas do sistema original com n funções de partição, usando a seguinte expressão

$$\ln Z = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial n} (\exp(n \ln Z)) = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial n} (Z^n) \quad (3.7)$$

O Modelo EA apresenta um problema de simetria *up-down* quando o campo é nulo, ou seja, $H_{EA}\{S_i\} = H_{EA}\{-S_i\}$. Então o número de spins para cima (*up*) é o mesmo que para baixo (*down*). Assim $\langle S_i \rangle$ é nulo e conseqüentemente o parâmetro q_{EA} também o será. Para um ferromagneto contorna-se este problema aplicando um campo externo pequeno, tornando inválido o argumento de simetria, de modo que o sistema se define no estado fundamental. Os resultados encontrados por Edwardas e Anderson foi o fato da susceptibilidade linear apresentar um valor finito em $T = 0$, e também observar uma cúspide no calor específico que não era confirmada experimentalmente.

Sherrington e Kirkpatrick [14] propuseram um modelo de campo médio com alcance infinito (Modelo SK) utilizando o método de réplicas simétricas, onde as n réplicas eram suposta como equivalentes. Este modelo consiste na aplicação das idéias do Modelo EA a um sistema de spins de Ising, com interações de troca entre os spins de alcance infinito, aleatórias e obedecendo a uma distribuição de probabilidade gaussiana dada por

$$P(J_{ij}) = \left(\frac{N}{2\pi J^2} \right)^{1/2} \exp \left[-N \left(J_{ij} - \frac{J_o}{N} \right)^2 / 2J^2 \right] \quad (3.8)$$

onde a presença do termo N tem como objetivo evitar problemas de ordem técnica no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$). O modelo SK é dado a partir do seguinte Hamiltoniano

$$\mathcal{H}_{EA} = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} S_i S_j \quad (3.9)$$

Como ocorre nos modelos de alcance infinito, os cálculos se tornaram mais simples e se espera que houvesse um grande melhoramento no conhecimento teórico dos vidro de spins, e também a cerca dos resultados obtidos a partir do Modelo EA. De fato os

resultados obtidos a partir do Modelo de SK foram melhores, pois a campo nulo é possível obter ordem vidro de spins. Porém, este modelo apresenta uma entropia negativa para a fase vidro de spin a $T = 0$, indicando assim um comportamento não físico para o modelo. Os mesmos autores do modelo propuseram que esse comportamento era proveniente da troca dos limites $N \rightarrow \infty$ e $n \rightarrow 0$. Posteriormente van Hemmen e Palmer [15] provaram que a proposta era falsa, mostrando que o responsável era a não unicidade do limite $n \rightarrow 0$.

Em 1978, de Almeida e Thouless [16] estudaram a estabilidade da solução encontrada por SK e provaram que o modelo SK é instável para baixa temperatura, tanto na fase vidro de spin quanto na fase ferromagnética. Então permutaram o limite termodinâmico pelo limite $n \rightarrow 0$, obtendo o resultado da instabilidade das fases citadas em baixa temperatura. Apesar do trabalho desses autores não resolverem o problema do modelo SK, demonstram a existência de uma linha que estabelece o limite da estabilidade da solução do modelo SK, conhecida como linha de Almeida-Thouless (AT).

De Almeida e Thouless chegam a conclusão de que não é adequado caracterizar a fase vidro de spins através de um simples parâmetro de ordem q . Essa fase deve então ser caracterizada por uma grandeza dependente do par de réplicas, sugerindo que a simetria no grupo de permutação das réplicas deveria ser quebrada na fase vidro de spins. Para esta quebra de simetria muitos esquemas foram sugeridas [17,18,19,20], mas o melhor sucedido foi o sugerido por Parisi [21,22,23,24], que transforma o parâmetro q em uma função $q(x)$, com x variando no intervalo $[0, -1]$ e dessa forma a entropia para $T = 0$ foi obtida como sendo nula. Os resultados obtidos por Parisi também confirmam a linha de Almeida e Thouless. Resultado semelhante foi obtido por Sompolinsky [25] que estudou as propriedades estáticas do modelo SK através de uma aproximação dinâmica.

A sofisticação da matemática da teoria proposta por Parisi impediu sua plena interpretação e isto perdurou por alguns anos. Em meio a estas sugestões tão complicadas, matematicamente, alguns autores propõem modelos mais simples, com solução exata, como, por exemplo, Mattis [26] propôs um modelo de campo médio definido pelo seguinte

Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_M = -\sum_{i \neq j} J_{ij} S_i S_j - H \sum_i S_i \quad (3.10)$$

onde S_i são as variáveis de Ising, $S_i = \pm 1$ e $J_{ij} = J(R_{ij})\varepsilon_i\varepsilon_j$, $\varepsilon_i = \pm 1$, sendo R_{ij} é a distância que separa os sítios i e j . Os cálculos indicam uma descontinuidade na segunda derivada da energia livre em relação ao campo H , mostrando uma transição de fase a temperatura finita. Mattis sugere em seu trabalho uma transformação, conhecida como a transformação de Mattis, dada a seguir

$$S_i \rightarrow S_i \varepsilon_i . \quad (3.11)$$

Isto foi determinante pois com $H = 0$ o Hamiltoniano passa a representar um ferromagneto simples, com transição de fase conhecida. Na realidade este modelo apresenta apenas uma desordem regular [26], pois a transição ocorre de uma fase paramagnética para uma fase desordenada regular, onde ligações positivas e negativas estão dispostas aleatoriamente na rede. Contudo esta desordem não gera um efeito fundamental para a existência de ordem vidro de spin que é a *frustração*.

Para entender o que é frustração, vamos fazer o seguinte comentário: é notável que a distribuição para interação aleatória J_{ij} é formada por ligações positivas (ferromagnéticas) e negativas (antiferromagnéticas), isto é, interações competitivas. Neste caso há possibilidade que essas interações J_{ij} do sistema não sejam todas, simultaneamente, satisfeitas. Esta propriedade é denominada de frustração, conceito que foi introduzido por Toulouse [27] para fenomenologia de vidros de spins. Na Fig.(3.1) temos a ilustração para uma rede quadrada. Sistema que exibem desordem e frustração nas interações de troca entre os spins são chamados vidro de spin. A combinação de desordem e frustração leva ao surgimento de multi-degenerescência no estado fundamental, isto é, várias configurações de quase equilíbrio associadas à mínimos de energia separados por barreiras energéticas que podem eventualmente ser superadas pelo efeito da energia térmica [1].

Toulouse discutiu o problema da frustração e apresentou uma proposta com interpre-

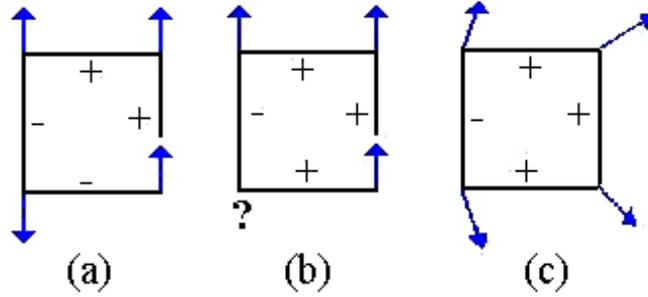


Figura 3.1: Rede quadrada com ligações de sinais aleatórios para os vizinhos mais próximos. (a), temos uma plaqueta não frustrada. Nela podemos orientar os momentos magnéticos e todas as ligações são satisfeitas. (b) a plaqueta é frustrada. Neste caso nem todas as ligações foram satisfeitas, existe um spin frustrado. (c) temos uma configuração de equilíbrio de uma plaqueta frustrada no caso dos momentos poderem se orientar ao longo de qualquer direção no plano da figura.

tação geométrica, definindo a função Φ , denominada de função frustração, dada por

$$\Phi = \prod_C J_{ij} \quad (3.12)$$

onde C é um contorno fechado escolhido na rede, os J_{ij} são ligações que fazem parte deste contorno. Se $\Phi > 0$ não há frustração nos dois sentidos do contorno, caso contrário se $\Phi < 0$ existe frustração. No primeiro caso o número de ligações negativas deve ser par, e no segundo caso esse número deve ser ímpar. Apenas neste último caso, existe então a possibilidade de haver a fase vidro de spin.

Seguindo as características de um vidro de spin, J. L. van Hemmen [28,29] sugere um modelo de alcance infinito com solução exata, que contém aleatoriedade e frustração. Parte desta tese é justamente baseado neste modelo, e faremos uma explanação a respeito do mesmo no capítulo-3. Este modelo apesar de apresentar frustração, não satisfaz o conceito de metaestabilidade, que é bem discutido no trabalho de Choy e Sherrington [30]. O mérito do modelo de van Hemmem se deve ao fato do processo matemático

utilizado ser mais simples do que o processo utilizado nos Modelos de SK e de Parisi, obtendo como resultados uma susceptibilidade finita da fase vidro de spin em $T = 0$, e uma cúspide na transição de fase vidro de spin e fase paramagnética. Este modelo ainda apresenta um comportamento qualitativo da magnetização da fase vidro de spin em relação a temperatura, semelhante aos resultados experimentais obtidos na liga AuFe [1], por exemplo. Além de uma entropia positiva em $T = 0$, fato que não ocorre no Modelo de SK, o modelo de van Hemmen é extremamente eficiente para descrever as propriedades estáticas dos vidros de spins.

3.1.2 Teorias e experimentos sobre compostos vidro de spin anisotrópico

Blume e Capel [31,32] foram os pioneiros a desenvolver trabalhos teóricos para sistemas magnéticos com anisotropia uniaxial no modelo Ising ferromagnético. Um aspecto atual do modelo proposto por Blume e Capel é dado pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i \neq j} S_i^z S_j^z - H \sum_i S_i^z + \Delta \sum_i (S_i^z)^2, \quad (3.13)$$

sendo que este Hamiltoniano é referente a um sistema de spins $S = 1$, onde J é o termo de interação de troca entre os primeiros vizinhos, H é o campo magnético externo longitudinal e D é o parâmetro da anisotropia de cada spin i .

O termo biquadrado que aparece na Eq.(3.13) é típico nos Hamiltonianos que usam a influência da energia da interação spin-órbita ($\vec{L}_i \cdot \vec{S}_i$) do sítio i , sendo que desta interação aparece um campo cristalizado $\vec{\Delta} = (\Delta_x, \Delta_y, \Delta_z)$ do próprio sistema. Os parâmetros Δ_x , Δ_y e Δ_z componentes da anisotropia são relacionados as componentes S_i^x , S_i^y e S_i^z do spin \vec{S}_i . No caso do modelo de Blume e Capel é tomado somente a componente $\Delta_z = \Delta$, caracterizando o modelo com anisotropia uniaxial, se tomar duas componentes temos um modelo anisotrópico biaxial e três componentes triaxial.

Um dos méritos do modelo de Blume-Capel é de obter uma transição de fase de

primeira ordem no estado fundamental. Este fator já era observado, experimentalmente, por Frazer [33] para o composto UO_2 na transição de fase ferromagnética-paramagnética numa temperatura crítica $T_c = 30 \text{ K}$. A transição de fase de primeira ordem ocorre devido ao fato de que na temperatura crítica (T_c), o sistema se encontra no equilíbrio termodinâmico (ET) com um mínimo de energia triplamente degenerado, ou seja, a ordem magnética apresenta três valores com mínimo de energia.

Na Fig.(3.2) temos o comportamento da energia livre em função da magnetização (a), e o diagrama de fase da temperatura crítica em função da anisotropia, para um sistema ferromagnético, obtida dos trabalho originais de Blume [31] (a) e [34] (b). Na figura (a) podemos observar os mínimos de energia relacionados com valores da magnetização, que determinam o ET do sistema para cada temperatura T , sendo que aqui é tomado $\tau = k_B T / \Delta$. É observado que fixando o valor de $\Delta \neq 0$, obtemos para $\tau = 0.58$ o estado com mínimo de energia duplo ($M \simeq \pm 0.76$) e, portanto, ordenado, neste caso existe um *gap* de energia entre os estados ordenados ($M \neq 0$) e desordenados ($M = 0$). A criticalidade do sistema ocorre no ponto $\tau_c = 0.6$ que está relacionada a temperatura crítica T_c , onde podemos observar o estado com mínimo de energia triplamente degenerado ($M = 0$ e $M \simeq \pm 0.7$). Desta forma a magnetização apresenta descontinuidade na temperatura crítica, o que caracteriza uma transição de segunda ordem. Para $\tau > \tau_c$, ou seja, para $T > T_c$, o estado com mínimo de energia é completamente desordenado ($M = 0$). Na figura (b) podemos observar que a criticalidade é composta de uma linha mista de transições de primeira e segunda ordem, sendo que o ponto $A(\Delta_t, T_t)$ é um ponto tricrítico, e ainda no estado fundamental temos o valor crítico da anisotropia $(\Delta/J)_c = 0.5$ que é exato.

No modelo de Blume-Capel, se o parâmetro da anisotropia for $\Delta > 0$ o mesmo funciona como um agente de destruição da ordem magnética, de tal forma que para $\Delta = +\infty$ os estados $S = \pm 1$ são suprimidos e o sistema se comporta como um paramagnético, qualquer que seja a temperatura. Porém, se $\Delta < 0$ este parâmetro se comporta como um agente que reforça a ordem ferromagnética, de modo que para $\Delta = -\infty$ o estado $S = 0$ é suprimido, tornando o modelo de Blume-Capel equivalente ao modelo de Ising de spin

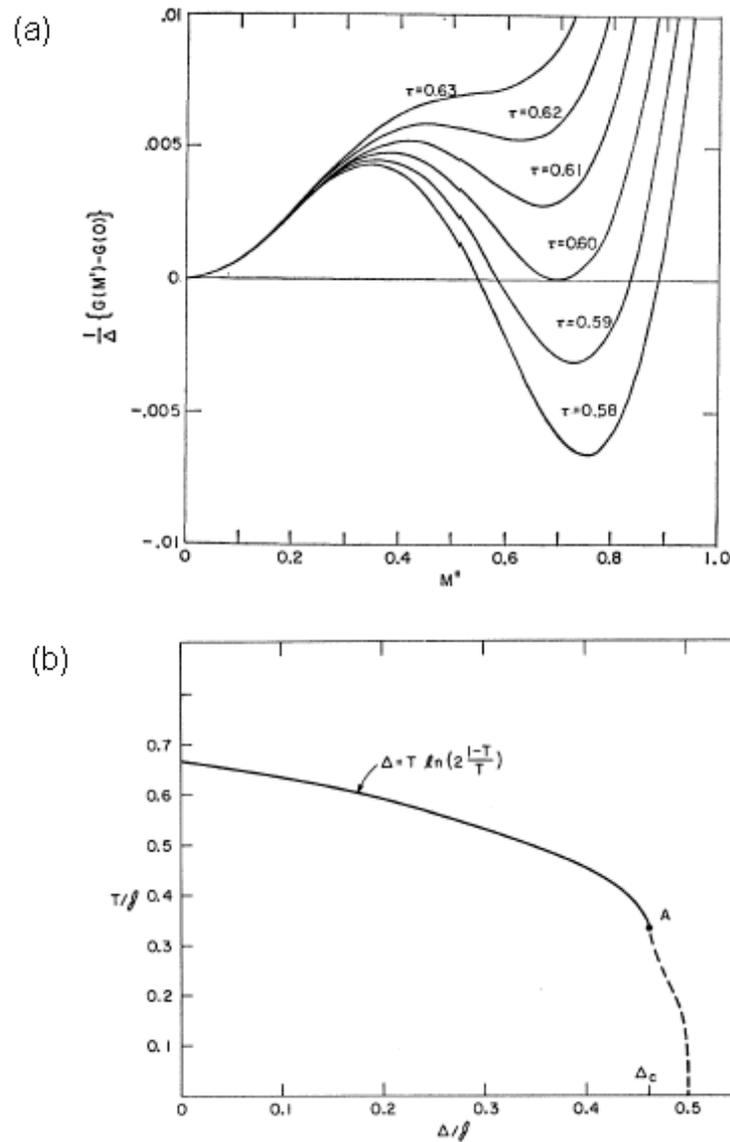


Figura 3.2: (a) Comportamento da energia livre em função da magnetização para vários valores de temperatura, sendo observados os mínimos de energia em que o sistema se encontra em equilíbrio termodinâmico [31]. No ponto $\tau_c = 0.6$ o sistema sofre uma transição de fase de primeira ordem. (b) diagrama de fase no plano $T/J - \Delta/J$, o ponto A é um ponto tricrítico e o ponto $\Delta/J = 0.5$ é o valor crítico da anisotropia Δ/J , as linhas contínuas e descontínuas são de transição de primeira e segunda ordem, respectivamente.

1/2.

Recentemente, Zhang e colaboradores [35] têm estudado o modelo de Ising ferromagnético com anisotropia biaxial de íon único, aplicando as anisotropias transversais D_x e D_y no modelo, resultando no seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i \neq j} S_i^z S_j^z - \sum_i \left[D_x (S_i^x)^2 + D_y (S_i^y)^2 \right], \quad (3.14)$$

sendo que o caso uniaxial é mapeado para quando $D_x = D_y = -D_z$. Os resultados deste trabalho foram obtidos a partir de uma rede honeycomb, sendo que o desenvolvimento do modelo foi feito a partir do formalismo da teoria de campo efetivo (EFT). Foi obtido diagramas de fases que apresentam transições de fase de primeira e segunda ordem, dependendo dos valores das anisotropias D_x e D_y .

Para o vidro de spin, as propriedades magnética com anisotropia uniaxial de íon único, foram amplamente estudadas por Albrecht e colaboradores [36] para os compostos diluídos ZnMn, CdMn e MgMn. Neste trabalho foi concluído que o comportamento de um composto diluído depende do parâmetro D , que corresponde ao campo cristalizado do material, de tal forma que se $D > 0$ temos um comportamento tipo Ising (composto ZnMn), se $D < 0$ o comportamento é do tipo XY (composto CdMn), enquanto que se $D \simeq 0$ temos um comportamento tipo Heisenberg isotrópico (composto MgMn). Murayama [37] desenvolveu um trabalho experimental referente aos compostos ZnMn e CdMn, onde a partir da observação da cúspide da susceptibilidade são observadas sucessivas transições de fases para estes compostos. Na Fig.(3.3) temos o comportamento do parâmetro de anisotropia D em função da temperatura de congelamento T , referentes ao resultados obtidos experimentalmente por Murayama [37] para os compostos diluídos ZnMn e CdMn do tipo vidro de spin .

Recentemente, Kopec [38] fez o estudo do modelo de vidro de spin com anisotropia biaxial, mostrando haver uma equivalência entre os modelos para anisotrópico biaxial

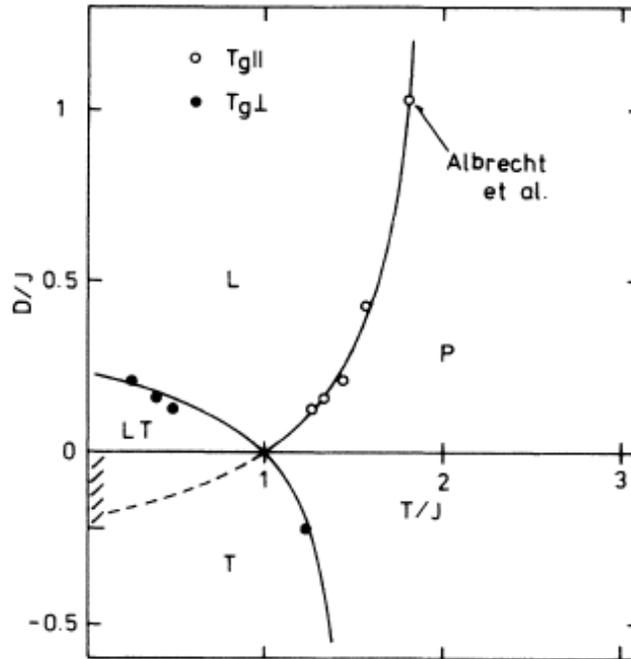


Figura 3.3: Diagrama de fase experimental no plano $D/J - T/J$ obtido a partir dos pontos das cúspides referentes aos compostos $ZnMn$ e $CdMn$ obtido por [37]. Também são incluídos os resultados obtidos por [36]. As linhas contínuas servem como guia de referência nos últimos anos.

dado por

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N J_{ij} S_i^z S_j^z - \sum_i^N \left[D_x (S_i^x)^2 + D_y (S_i^y)^2 \right], \quad (3.15)$$

e o modelo anitrópico uniaxial dado por

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N J_{ij} S_i^z S_j^z + \sum_i^N D_z (S_i^z)^2, \quad (3.16)$$

fazendo $D_x = D_y = -D_z$. O Hamiltoniano dado pela 3.16 foi, inicialmente, desenvolvido por Sherrington [39].

Jiang e Wang [40] desenvolveram um estudo sobre o modelo de Ising ferromagnético de spin $S = 1$ com anisotropia biaxial, na presença de um campo transverso. Esse trabalho foi baseado no seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i \neq j} \sigma_i^z \sigma_j^z - D_x \sum_i (\sigma_i^x)^2 - D_y \sum_i (\sigma_i^y)^2 - \Omega \sum_i \sigma_i^x. \quad (3.17)$$

Esse modelo foi desenvolvido a partir da teoria do campo efetivo para uma rede honeycomb. Neste trabalho são obtidos vários diagramas de fase nos planos $T/J - D_x/J$ e $T/J - \Omega/J$, onde são observadas somente transições de segunda ordem.

O trabalho desenvolvido por Jiang e Wang [40] serviu de motivação como tema deste capítulo. Neste capítulo vamos estudar o modelo anisotrópico biaxial com campo transverso para um sistema vidro de spin puro, na generalização do modelo de van Hemen . O objetivo será determinar diagramas de fases nos planos $T/J - D_{x,y}/J$, $T/J - \Omega/J$ e $\Omega/J - D_{x,y}/J$ no estado fundamental a fim de verificar o comportamento das linhas de transições entre as fases SG e P, como, por exemplo, se as linhas são de primeira ou segunda ordem, se existem pontos tricríticos, nas transições entre as fases SG e P. Além do que verificar, quais as influências da anisotropia D_x e D_y nas linhas críticas obtidas nos diagramas, principalmente, nas transições de fases no estado estado fundamental.

Ao contrário das transições de fases tradicionais (clássicas) que são governadas por flutuações térmicas, uma transição de fase quântica está relacionada à flutuações quân-

ticas, associadas aos estados com mínimos de energia que o sistema físico se encontra no equilíbrio termodinâmico no estado fundamental ($T = 0$). Este tipo de transição ocorre quando algum parâmetro não térmico alcança um certo valor crítico. Uma realização experimental de transição de fase quântica é no composto dipolar LiHoF_4 , que pode ser representado pelo modelo de Ising aleatório na presença de um campo transversal e anisotropia de íon único. A transição de fase neste composto ocorre por causa da anisotropia positiva, mesmo em baixas temperaturas ($T \simeq 1 \text{ mK}$), mas para o caso da anisotropia negativa haverá uma competição com os spins da ordem vidro de spin, desta forma a temperatura de transição de fase sofre diminuição.

Recentemente, Viana e colaboradores [46,47], estudaram o modelo de van Hemmen [28] na presença de um campo transversal. Com o objetivo de descrever a termodinâmica e criticalidade do vidro de spin quântico, tomando como referência o resultado experimental obtido por Wu e colaboradores [41], que obteve resultados termodinâmicos para o material $\text{LiHo}_{0.167}\text{Y}_{0.833}\text{F}_4$ na presença de um campo transversal Ω .

Na Fig.(3.4) temos o resultado experimental obtido por Wu e colaboradores, a curva contínua apresentada nessa figura é a curva fitada a partir da seguinte expressão $T_g(H_t) = T_g(0) \left[1 - (H_t/H_c)^\beta \right]$, sendo que no caso $\beta = 1.7 \pm 0.1$, com $T_g(0) = 0.133 \pm 0.005 \text{ K}$ e $H_c = 12.0 \pm 0.4 \text{ kOe}$ para $T_g(H_c) = 0.025 \text{ K}$. Porém, o Hamiltoniano adotado para obter este resultado experimental é da forma

$$\mathcal{H} = -\sum_{i \neq j} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - \Omega \sum_i \sigma_i^x, \quad (3.18)$$

tal que $\Omega \propto H_t^2$.

Vários autores, como, por exemplo, Continentino e colaboradores [42] usando grupo de renormalização no modelo de Ising aleatório com campo transversal, Goldschmidt [43] usando o modelo com interações entre p -spins na presença de um campo transversal e Viana e colaboradores [46] usando o modelo de van Hemmen Quântico, desenvolveram trabalhos como o objetivo de simular o resultado obtido, experimentalmente, por Wu e

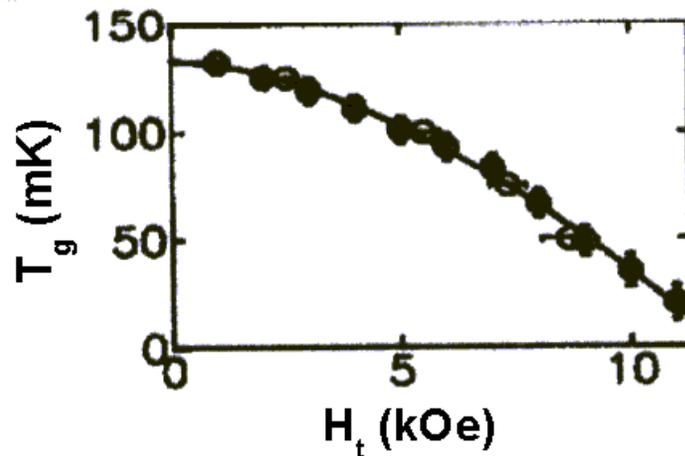


Figura 3.4: Comportamento da temperatura de congelamento versus o campo transverso, obtido experimentalmente para o composto $\text{LiHo}_{0.167}\text{Y}_{0.833}\text{F}_4$ [41].

colaboradores. Na Fig.(3.5) temos vários resultados, obtidos para sistemas vidro de spin na presença de um campo transverso.

Neste capítulo, vamos analisar os comportamentos termodinâmicos a partir de diagramas de fase, no modelo de van Hemmen Quântico Anisotrópico Biaxial para um sistema de spin $S = 1$, tendo como objetivo simular os comportamentos dos materiais vidro de spin. Infelizmente, pela extensão deste tese, não é discutido aqui os comportamentos a respeito da susceptibilidade magnética, assim bem como do calor específico, ficando para futuros trabalhos. Contudo, no trabalho desenvolvido por Viana [48], temos uma grande noção do que esperar a respeito dos comportamentos dessas grandezas na presença de um campo transverso aplicado no modelo de van Hemmen. Além é claro, de podermos comparar os nossos resultados com aqueles obtidos em outros trabalhos.

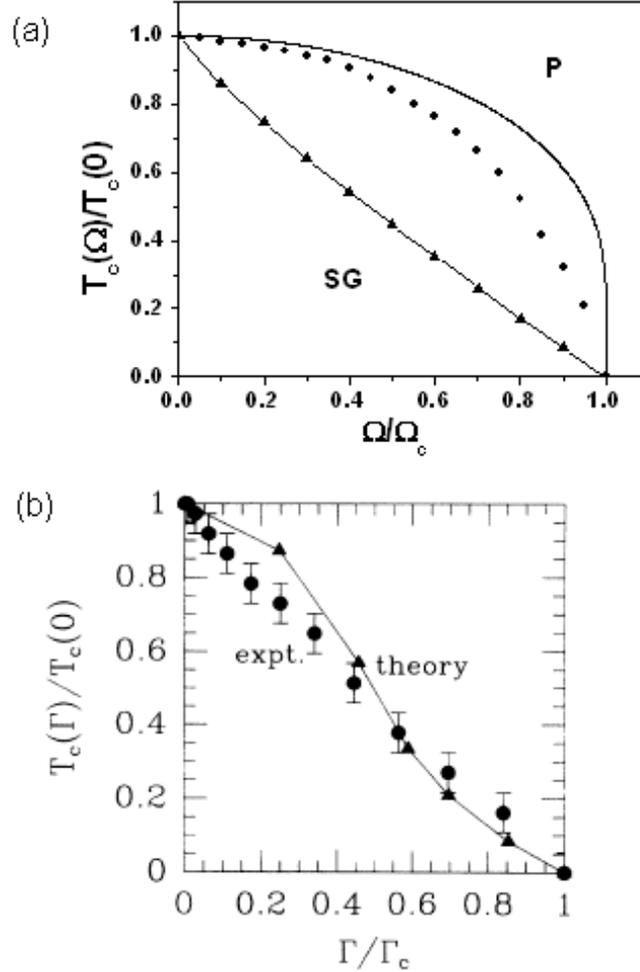


Figura 3.5: Resultados do diagrama de fase no plano $T - \Omega$ obtidos para modelos referentes a sistemas vidro de spin que são comparados com o resultado experimental para o composto $\text{LiHo}_{0.167}\text{Y}_{0.833}\text{F}_4$ [41]. (a) Resultados obtidos por Viana e colaboradores [46] (linha), Goldschmidt [3] (pontos circulares) e os pontos experimentais (pontos triangulares). (b) Resultados obtidos por Continentino e colaboradores [42] e o resultado experimental obtido por Wu e colaboradores [41].

3.2 Modelo de Van Hemmen Quântico Anisotrópico Biaxial

A partir do modelo de van Hemmen original [28], acrescentamos os termos de energia referentes ao campo transversal Ω (adotado na direção x) e das duas anisotropias de íon único (D_x e D_y) transversais à direção da magnetização do sistema magnético, que aqui denotamos de modelo de van Hemmen Quântico Anisotrópico Biaxial, que é descrito pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_N = -\frac{J_o}{N} \sum_{i \neq j} \sigma_i^z \sigma_j^z - \sum_{i \neq j} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - H \sum_i \sigma_i^z - \Omega \sum_i \sigma_i^x - D_x \sum_i (\sigma_i^x)^2 - D_y \sum_i (\sigma_i^y)^2 \quad (3.19)$$

onde J_o é o acoplamento de *exchange* ferromagnético e antiferromagnético, $J_o > 0$ e $J_o < 0$, respectivamente, σ_i^z , σ_i^x e σ_i^y são as matrizes operadoras de spin $S = 1$ nos sítios i , H é a magnitude do campo externo, $J_{ij} = \frac{J}{N} (\xi_i \eta_j + \xi_j \eta_i)$ é o termo da interação aleatória entre os sítios que compõem o sistema, sendo que ξ_i e η_i são variáveis aleatórias sujeitas a uma dada distribuição de probabilidade $P(\xi_i, \eta_i)$, cujo valor médio desta variável seja nula, isto é, $\langle \xi_i \rangle = \langle \eta_i \rangle = 0$, Ω é a intensidade do campo transversal orientado na direção- x e D_x e D_y são os parâmetros das anisotropias transversais do sistema.

A base de cálculos das propriedades termodinâmicas na Mecânica Estatística, consiste na obtenção da função de partição do sistema físico estudado, que é expressa como função de um dado Hamiltoniano, que simula microscopicamente as interações entre as partículas. O modelo de van Hemmen utiliza a função de partição canônica, desta forma

a partir da Eq.(3.19) ficaremos com seguinte expressão:

$$Z_N = Tr \exp(-\beta \mathcal{H}_N) \quad (3.20)$$

$$Z_N = Tr \exp \left[\frac{k_1}{N} \sum_{i \neq j} \sigma_i^z \sigma_j^z + \frac{k_2}{N} \sum_{i \neq j} (\xi_i \eta_j + \xi_j \eta_i) \sigma_i^z \sigma_j^z + k_3 \sum_i \sigma_i^z + \right. \\ \left. k_4 \sum_i \sigma_i^x + k_5 \sum_i (\sigma_i^x)^2 + k_6 \sum_i (\sigma_i^y)^2 \right], \quad (3.21)$$

onde $k_1 = \beta J_o$, $k_2 = \beta J$, $k_3 = \beta H$, $k_4 = \beta \Omega$, $k_5 = \beta D_x$ e $k_6 = \beta D_y$. Na aproximação de interação de longo alcance, normalmente, é usado para o processo de desacoplamento do sistema, os procedimentos dado a seguir:

$$i) \sum_{i \neq j} \sigma_i^z \sigma_j^z = \frac{1}{2} \left[\left(\sum_i \sigma_i^z \right)^2 - \sum_i (\sigma_i^z)^2 \right], \quad (3.22)$$

e ainda

$$ii) \sum_{i \neq j} (\xi_i \eta_j + \xi_j \eta_i) \sigma_i^z \sigma_j^z = \frac{1}{2} \left\{ \left[\sum_i (\xi_i + \eta_i) \sigma_i^z \right]^2 - \left(\sum_i \xi_i \sigma_i^z \right)^2 - \right. \\ \left. \left(\sum_i \eta_i \sigma_i^z \right)^2 - 2 \sum_i \xi_i \eta_i (\sigma_i^z)^2 \right\}. \quad (3.23)$$

Neste procedimento adotado para o desacoplamento do sistema, infelizmente a topologia da rede não pode ser definida, pois nenhum parâmetro aparece neste processo para indicar a quantidade de vizinhos de cada sítio do sistema (tipo campo médio). Aplicando os resultados do processo de desacoplamento na Eq.(3.21) vamos obter a seguinte expressão:

$$\begin{aligned}
Z_N = \text{Tr} \exp & \left\{ \frac{k_1}{2N} \left[\left(\sum_i \sigma_i^z \right)^2 - \sum_i (\sigma_i^z)^2 \right] + \frac{k_2}{2N} \left[\left(\sum_i (\xi_i + \eta_i) \sigma_i^z \right)^2 \right. \right. \\
& \left. \left. - \left(\sum_i \xi_i \sigma_i^z \right)^2 - \left(\sum_i \eta_i \sigma_i^z \right)^2 - 2 \sum_i \xi_i \eta_i (\sigma_i^z)^2 \right] + k_3 \sum_i \sigma_i^z + \right. \\
& \left. k_4 \sum_i \sigma_i^x + k_5 \sum_i (\sigma_i^x)^2 + k_6 \sum_i (\sigma_i^y)^2 \right\}. \tag{3.24}
\end{aligned}$$

Os operadores σ_i^z e σ_i^x não comutam, desta forma devemos tomar cuidado com as propriedades operacionais da exponencial que aparece na Eq.(3.24). Portanto, é necessário usarmos alguma aproximação para resolução de exponenciais com operações de operadores quânticos. Várias aproximações têm sido propostas como a feita por Overhauser [49], onde expansões espectrais são muito utilizadas, como, por exemplo, a aproximação de Suzuki [50]], ou seja:

$$\exp(xA) \exp(xB) = \exp \left[x(A+B) + \frac{x^2}{2} [A, B] + \dots \right]. \tag{3.25}$$

Desta expressão temos que para alguns sistemas, quanto mais termos é utilizado da expansão piores são os resultados obtidos, no caso do modelo de van Hemmen isto também acontece. Contudo usando esta expansão até a primeira ordem os resultados obtidos no modelo original de van Hemmen são muito bons. Aplicando a expansão de

Suzuki até a primeira ordem na Eq.(3.24), ficaremos com a expressão dada por

$$\begin{aligned}
Z_N \simeq & Tr \exp \left[\sum_i L_i (\sigma_i^z)^2 \right] \exp \left[\frac{k_1}{2N} \left(\sum_i \sigma_i^z \right)^2 \right] \\
& \exp \left[\frac{k_2}{2N} \left[\sum_i (\xi_i + \eta_i) \sigma_i^z \right]^2 \right] \exp \left[-\frac{k_2}{2N} \left(\sum_i \xi_i \sigma_i^z \right)^2 \right] \\
& \exp \left[-\frac{k_2}{2N} \left(\sum_i \eta_i \sigma_i^z \right)^2 \right] \exp \left(k_3 \sum_i \sigma_i^z \right) \exp \left(k_4 \sum_i \sigma_i^x \right) \\
& \exp \left(k_5 \sum_i (\sigma_i^x)^2 \right) \exp \left(k_6 \sum_i (\sigma_i^y)^2 \right)
\end{aligned} \tag{3.26}$$

onde $L_i = -\frac{k_1}{2N} - \frac{k_2}{N} \xi_i \eta_i$. Os termos quadráticos da expressão acima podem ser reescritos usando a identidade gaussiana dada por

$$\exp(\lambda a^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-\frac{x^2}{2} + a\sqrt{2\lambda}x \right) dx, \tag{3.27}$$

assim sendo, a Eq.(3.26) ficará reescrita na forma

$$\begin{aligned}
Z_N \simeq & \frac{N^2}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-\frac{N}{2} (x^2 + y^2 + z^2 + v^2) \right] \\
& Tr \exp \left[\sum_i M_{\mathcal{H}} \right] dx dy dz dv,
\end{aligned} \tag{3.28}$$

sendo que a matriz (3x3) que os termos $M_{\mathcal{H}}$, dado por

$$M_{\mathcal{H}} = L_i (\sigma_i^z)^2 + K_i \sigma_i^z + k_4 \sigma_i^x + k_5 (\sigma^x)^2 + k_6 (\sigma^y)^2, \tag{3.29}$$

onde

$$L_i = -\frac{k_1}{2N} - \frac{k_2}{N}\xi_i\eta_i, K_i = \sqrt{k_1}x + \sqrt{k_2}[(\xi_i + \eta_i)y + j(\xi_i z + \eta_i v)] + k_3 \quad (3.30)$$

$$j = \sqrt{-1}. \quad (3.31)$$

Do traço da exponencial $\exp(M_{\mathcal{H}})$ que aparece na Eq.(3.28) podemos reescrevê-lo da seguinte forma:

$$Tr \exp \left(\sum_i M_{\mathcal{H}} \right) = \prod_i Tr \exp(M_{\mathcal{H}}) = \prod_i \sum_{n=1}^3 \exp(\lambda_n), \quad (3.32)$$

onde λ_n são os autovalores da matriz $M_{\mathcal{H}_N}$. Utilizando as propriedades $\exp(\ln(a)) = a$ e $\ln \left(\prod_i b_i \right) = \sum_i \ln(b_i)$ vamos obter da Eq.(3.32) a seguinte expressão:

$$Tr \exp \left[\sum_i M_{\mathcal{H}} \right] = \exp \left[\ln \left(\prod_i \sum_{n=1}^3 \exp(\lambda_n) \right) \right] = \exp \left[\sum_i \ln \left(\sum_{n=1}^3 \exp(\lambda_n) \right) \right], \quad (3.33)$$

substituindo a Eq.(3.33) na Eq.(3.28), obtemos o seguinte resultado para a função de partição dada a partir da Eq.(3.28):

$$Z_N \simeq \frac{N^2}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-\frac{N}{2} (x^2 + y^2 + z^2 + v^2) \right] \exp \left[\sum_i \ln \left(\sum_{n=1}^3 \exp(\lambda_n) \right) \right] dx dy dz dv. \quad (3.34)$$

Nos modelos referentes a sistemas de vidro de spins devemos fazer um tratamento probabilístico do modelo usado, devido a necessidade da resolução das variáveis aleatórias. No caso do presente modelo, as variáveis ξ_i e η_i podem ser tratadas como contínuas ou discretas, dependendo da distribuição de probabilidade aplicada. Desta forma vamos tomar a média configuracional no modelo a partir da Eq.(3.34), que consiste na seguinte definição:

$$\langle f(x_1, x_2, \dots, x_n) \rangle_c = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} f(x_1, x_2, \dots, x_n) P(x_1, x_2, \dots, x_n) dx_1 dx_2, \dots dx_n, \quad (3.35)$$

onde x_i são as variáveis aleatórias e $P(x_1, x_2, \dots, x_n)$ corresponde a distribuição de probabilidade. Estamos trabalhando com um sistema de muitos corpos, vamos então limitar o sistema a uma quantidade de N sítios i . Como cada sítio i está relacionada com as variáveis aleatórias ξ_i e η_i , teremos N integrais duplas em relação as variáveis ξ_i e η_i , no cálculo da média configuracional na função de partição. Desta forma, aplicando a transformação dada a seguir

$$\sum_i f(\xi_i, \eta_i) \implies N \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi, \eta) P(\xi, \eta) d\xi d\eta, \quad (3.36)$$

na Eq.(3.34) teremos a média configuracional de Z_N dada pela seguinte expressão:

$$\begin{aligned} \bar{Z}_N \simeq & \frac{N^2}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-\frac{N}{2} (x^2 + y^2 + z^2 + v^2) \right] \\ & \exp \left[N \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \ln \left(\sum_{n=1}^3 \exp(\lambda_n) \right) P(\xi, \eta) d\xi d\eta \right] dx dy dz dv. \end{aligned} \quad (3.37)$$

Para resolver as integrais para as variáveis x, y, z e v acima vamos usar o método do ponto de sela, que é dado pela seguinte expressão:

$$\int_{-\infty}^{\infty} c \exp(bf(y)) dy \approx c \max_{-\infty < y < \infty} \{ \exp(bf(y)) \}. \quad (3.38)$$

Portanto, da Eq.(3.37) obtemos que

$$\begin{aligned} \bar{Z}_N \simeq & \frac{N^2}{4\pi^2} \max_{-\infty < X_i < \infty} \exp \left[-\frac{N}{2} (x^2 + y^2 + z^2 + v^2) \right] \\ & \exp \left[N \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \ln \left(\sum_{n=1}^3 \exp(\lambda_n) \right) P(\xi, \eta) d\xi d\eta \right], \end{aligned} \quad (3.39)$$

onde $X_i = x, y, z$ e v . Tomando $\frac{1}{N} \ln(\bar{Z}_N)$ e usando a relação $\ln \left[\underset{-\infty < X < \infty}{\text{máx}} (bf(X)) \right] = \underset{-\infty < X < \infty}{\text{máx}} \ln bf(X)$, obtemos da Eq.(3.39) a seguinte expressão:

$$\frac{1}{N} \ln(\bar{Z}_N) \simeq \frac{1}{N} \left\{ \ln \left(\frac{N}{4\pi} \right)^2 + \underset{-\infty < X_i < \infty}{\text{máx}} N \left[-\frac{1}{2} (x^2 + y^2 + z^2 + v^2) + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \ln \left(\sum_{n=1}^3 \exp(\lambda_n) \right) P(\xi, \eta) d\xi d\eta \right] \right\}. \quad (3.40)$$

No limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$) ficaremos com a seguinte expressão:

$$\frac{1}{N} \ln(\bar{Z}_N) = -\frac{1}{2} (x^2 + y^2 + z^2 + v^2) + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \ln \left(\sum_{n=1}^3 \exp(\lambda_n) \right) P(\xi, \eta) d\xi d\eta. \quad (3.41)$$

Da definição da energia livre de Helmholtz por spin dado por

$$f = -\frac{1}{\beta N} \ln(\bar{Z}_N), \quad (3.42)$$

para este caso obtemos

$$f = \frac{1}{\beta} \left[\frac{1}{2} (x^2 + y^2 + z^2 + v^2) - \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \ln \left(\sum_{n=1}^3 \exp(\lambda_n) \right) P(\xi, \eta) d\xi d\eta \right]. \quad (3.43)$$

Vamos agora calcular a magnetização por spin definida por

$$m = \frac{1}{N} \sum_i \langle \sigma_i^z \rangle = \frac{1}{N} \frac{\text{Tr} \sum_i \sigma_i^z \exp(-\beta \mathcal{H}_N)}{\text{Tr} \exp(-\beta \mathcal{H}_N)}, \quad (3.44)$$

que pode ser reescrita como derivada da função de partição, ou seja,

$$m = \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial K} (\ln Z_N), \quad (3.45)$$

a partir da Eq.(3.43) com a seguinte expressão para a magnetização m :

$$m = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\Gamma} \frac{\partial \Gamma}{\partial K} P(\xi, \eta) d\xi d\eta, \quad (3.46)$$

onde $\Gamma = \sum_{n=1}^3 \exp(\lambda_n)$.

De acordo com trabalho original do modelo de van Hemmen, temos que os parâmetros de ordem da fase vidro de spin são definidos pelas seguintes expressões:

$$q_1 = \frac{1}{N} \sum_i \xi_i \langle \sigma_i^z \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \langle \xi_i \sigma_i^z \rangle = \frac{1}{N} \frac{\text{Tr} \sum_i \xi_i \sigma_i^z \exp(-\beta H_N)}{\text{Tr} \exp(-\beta H_N)} = -\frac{\partial}{\partial \varphi_1} (\beta f), \quad (3.47)$$

e

$$q_2 = \frac{1}{N} \sum_i \eta_i \langle \sigma_i^z \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \langle \eta_i \sigma_i^z \rangle = \frac{1}{N} \frac{\text{Tr} \sum_i \eta_i \sigma_i^z \exp(-\beta H_N)}{\text{Tr} \exp(-\beta H_N)} = -\frac{\partial}{\partial \varphi_2} (\beta f), \quad (3.48)$$

onde $\varphi_1 = \sqrt{k_2} (y + jz)$ e $\varphi_2 = \sqrt{k_2} (y + jv)$. Sendo

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial \varphi_1} = \frac{\partial \Gamma}{\partial K} \frac{\partial K}{\partial \varphi_1} = \frac{\partial \Gamma}{\partial K} \xi \quad (3.49)$$

obtemos

$$q_1 = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\xi}{\Gamma} \frac{\partial \Gamma}{\partial K} P(\xi, \eta) d\xi d\eta, \quad (3.50)$$

e sendo

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial \varphi_2} = \frac{\partial \Gamma}{\partial K} \frac{\partial K}{\partial \varphi_2} = \frac{\partial \Gamma}{\partial K} \eta, \quad (3.51)$$

ficaremos com

$$q_2 = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\eta}{\Gamma} \frac{\partial \Gamma}{\partial K} P(\xi, \eta) d\xi d\eta. \quad (3.52)$$

Para determinar as relações das variáveis x , y , w e v , devemos considerar a condição de equilíbrio termodinâmico do sistema, isto é, de que a energia livre deve ser mínima. Desta forma, vamos tomar a derivada da energia livre do modelo dada pela Eq.(3.43) em relação as variáveis x , y , w e v , ou seja,

$$i) \quad \frac{\partial}{\partial x} (\beta f) = x - \sqrt{k_1} m = 0 \quad \Rightarrow \quad x = \sqrt{k_1} m. \quad (3.53)$$

$$ii) \quad \frac{\partial}{\partial y} (\beta f) = y - \sqrt{k_2} (q_1 + q_2) = 0 \quad \Rightarrow \quad y = \sqrt{k_2} (q_1 + q_2). \quad (3.54)$$

$$iii) \quad \frac{\partial}{\partial z} (\beta f) = z - j \sqrt{k_2} q_1 = 0 \quad \Rightarrow \quad z = j \sqrt{k_2} q_1. \quad (3.55)$$

$$v) \quad \frac{\partial}{\partial w} (\beta f) = v - j \sqrt{k_2} q_2 = 0 \quad \Rightarrow \quad v = j \sqrt{k_2} q_2. \quad (3.56)$$

A partir destes resultados das Eqs.(3.53),(3.54),(3.55),(3.56) a Eq.(3.43) ficará reescrita por

$$f = \frac{1}{\beta} \left[\frac{1}{2} (k_1 m^2 + 2k_2 q_1 q_2) - \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \ln (\Gamma) P (\xi, \eta) d\xi d\eta \right], \quad (3.57)$$

onde $K = k_1 m + k_2 [(\xi + \eta) (q_1 + q_2) - (\xi q_1 + \eta q_2)] + k_3$. Temos ainda, de acordo com análise feita no trabalho original de van Hemmen a energia livre será mínima se $q_1 = q_2 = q$, portanto a Eq.(3.57) será simplificada na forma

$$f = \frac{1}{\beta} \left[\frac{1}{2} (k_1 m^2 + 2k_2 q^2) - \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \ln (\Gamma) P (\xi, \eta) d\xi d\eta \right]. \quad (3.58)$$

O parâmetro de ordem de vidro de spin será dado pela soma das Eqs.(3.50) e (3.52), obtendo desta forma a seguinte expressão:

$$q = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(\xi + \eta)}{\Gamma} \frac{\partial \Gamma}{\partial K} P (\xi, \eta) d\xi d\eta. \quad (3.59)$$

Enquanto que, e a magnetização do sistema continua sendo determinada pela Eq.(3.46), porém agora temos uma nova expressão para o termo K dada por

$$K = k_1 m + k_2 q (\xi + \eta) + k_3, \quad (3.60)$$

sendo

$$\Gamma = \sum_{n=1}^3 \exp(\lambda_n) = \Gamma(m, q, T, J_o, J, H, D_x, D_y, \Omega). \quad (3.61)$$

3.3 Resultados e discussões

Os resultados obtidos do modelo estudado neste trabalho é referente a um sistema magnético anisotrópico de spin $S = 1$. Uma das consequências obtidas do modelo é que a matriz $M_{\mathcal{H}}$ dada na Eq.(3.29) não está diagonalizada, logo devemos usar o processo de diagonalização dessa matriz, sendo que o processo de diagonalização da matriz $M_{\mathcal{H}}$ é desenvolvido no apêndice-A. Todos os resultados foram obtidos a partir das expressões da energia livre dada pela Eq.(3.58) e dos parâmetros de ordem q e m dados pelas Eqs.(3.59) e (3.46). Lembrando que o cálculo da média configuracional será desenvolvido a partir de duas distribuições de probabilidades: a densidade bimodal (**DPB**) e a densidade gaussiana (**DPG**), que são dadas pelas seguintes expressões, respectivamente:

$$P_B(\xi, \eta) = P_B(\xi) P_B(\eta) = \left\{ \frac{1}{2} [\delta(\xi - 1) + \delta(\xi + 1)] \right\} \left\{ \frac{1}{2} [\delta(\eta - 1) + \delta(\eta + 1)] \right\}, \quad (3.62)$$

e

$$P_G(\xi, \eta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\phi_1^2}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2\phi_1^2}\right) \frac{1}{\sqrt{2\pi\phi_2^2}} \exp\left(-\frac{\eta^2}{2\phi_2^2}\right). \quad (3.63)$$

a) Distribuição bimodal

Usando a distribuição dada pela Eq.(3.62) nas Eqs.(3.58) e (3.59) ficaremos com

$$f = \frac{1}{\beta} \left[\frac{1}{2} (k_1 m^2 + 2k_2 q^2) - \frac{1}{4} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \ln(\Gamma) [\delta(\xi - 1) + \delta(\xi + [\delta(\eta - 1) + \delta(\eta + 1)] 1)] d\xi d\eta \right] \quad (3.64)$$

$$m = \frac{1}{4} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\Gamma} \frac{\partial \Gamma}{\partial K} [\delta(\xi - 1) + \delta(\xi + 1)] [\delta(\eta - 1) + \delta(\eta + 1)] d\xi d\eta \quad (3.65)$$

$$q = \frac{1}{8} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(\xi + \eta)}{\Gamma} \frac{\partial \Gamma}{\partial K} [\delta(\xi - 1) + \delta(\xi + 1)] [\delta(\eta - 1) + \delta(\eta + 1)] d\xi d\eta \quad (3.66)$$

Para resoluções das Eqs.(3.64,3.65,3.66) é necessário usar a propriedade da função delta de Dirac

$$\int f(x) \delta(x - x_o) dx = f(x_o). \quad (3.67)$$

b) Distribuição gaussiana

Usando a distribuição dada pela Eq.(3.63) nas Eqs.(3.58) e (3.59) ficaremos com

$$f = \frac{1}{\beta} \left\{ \frac{1}{2} (k_1 m^2 + 2k_2 q^2) - \frac{1}{2\pi\phi_1\phi_2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \ln(\Gamma) \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\xi^2}{\phi_1^2} + \frac{\eta^2}{\phi_2^2} \right) \right] d\xi d\eta \right\} \quad (3.68)$$

$$m = \frac{1}{2\pi\phi_1\phi_2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\Gamma} \frac{\partial \Gamma}{\partial K} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\xi^2}{\phi_1^2} + \frac{\eta^2}{\phi_2^2} \right) \right] d\xi d\eta \quad (3.69)$$

$$q = \frac{1}{4\pi\phi_1\phi_2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(\xi + \eta)}{\Gamma} \frac{\partial \Gamma}{\partial K} \tanh(K) \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\xi^2}{\phi_1^2} + \frac{\eta^2}{\phi_2^2} \right) \right] d\xi d\eta \quad (3.70)$$

A aplicação da distribuição de probabilidade gaussiana, necessita de ser usado processos numéricos (soluções de equações integrais) para obtermos resultados a partir das equações da energia livre, da magnetização e do parâmetro de ordem da fase vidro de spin. A implementação numérica está descrita no apêndice-A desta tese.

Todos os resultados de diagramas de fases, do comportamento da grandezas magnéti-

cas e termodinâmicas, obtidos neste capítulo, são dadas a partir da resolução de sistema de equações composto pela equações da magnetização, do parâmetro q e da energia livre tomando o campo longitudinal como $H = 0$. Sendo tomado o caso do *vidro de spin puro* ($J_o = 0$), ou seja a presença de ordem ferromagnética.

3.3.1 Discussões dos resultados

A) Caso da anisotropia uniaxial

Inicialmente, vamos analisar os resultados obtidos para um sistema vidro de spin quântico anisotrópico uniaxial, com a anisotropia do sistema sendo dado pelo parâmetro D_z . Desta forma o Hamiltoniano para este caso pode ser dado por

$$\mathcal{H}_N = -\sum_{i \neq j} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - D_z \sum_i (\sigma_i^z)^2 - \Omega \sum_i \sigma_i^x. \quad (3.71)$$

A Eq.(3.71) descreve o Hamiltoniano de um sistema magnético frustrado com anisotropia uniaxial de íon único na presença de um campo transversal. Sendo que para $D_z > 0$ a ordem do sistema é reforçada favorecendo o estado ordenado ($q \neq 0$) do sistema no estado fundamental. Enquanto que, se $D_z < 0$ a ordem do sistema diminui, pois desta forma $D_z < 0$ funciona como um agente de destruição da ordem do sistema, elevando a energia do sistema para o estado desordenado ($q = 0$).

No caso do modelo de van Hemmen com anisotropia uniaxial dado pela Eq.(3.71), para o caso em que $\Omega = 0$, teremos que o Hamiltoniano (denotamos modelo VH axial) é diagonalizado sendo que os estados $\sigma_i^z = \pm 1$ correspondem aos autovalores $\lambda_{\pm} = (D_z/J \pm k)/t$, com $t = K_B T/J$ e $k = q(\xi + \eta)$. Enquanto que o estado $\sigma_i^z = 0$ corresponde ao autovalor $\lambda_o = 0$. Realizando o mesmo procedimento usado no caso biaxial, obtemos o seguinte resultado para o termo Γ dado pela Eq.(3.61):

$$\Gamma = 2 \exp(D_z/T) \cosh(-q(\xi + \eta)/T) + 1 \quad (3.72)$$

A partir energia livre de Helmholtz do sistema, podemos determinar o mínimo global de energia em que o sistema magnético se encontra no equilíbrio termodinâmico. Sendo assim, vamos utilizar a equação da energia livre dada pelas Eqs.(3.64) e (3.68), para as devidas análise para o modelo VH quântico axial dado pela Eq.(3.71) usando as distribuições de probabilidade bimodal e gaussiana para o vidro de **spin puro** ($J_o = 0$).

Assim sendo, o sistema apresenta-se no estado fundamental ordenado ($q \neq 0$) e é duplamente degenerado, e também apresenta o estado desordenado ($q = 0$). Os mínimos de energia dos estados ordenados e desordenados dependem da intensidade da anisotropia D_z/J , onde o estado do sistema é correspondente ao estado que apresentar o mínimo global. Estes fatores são observados na Fig.(3.6).

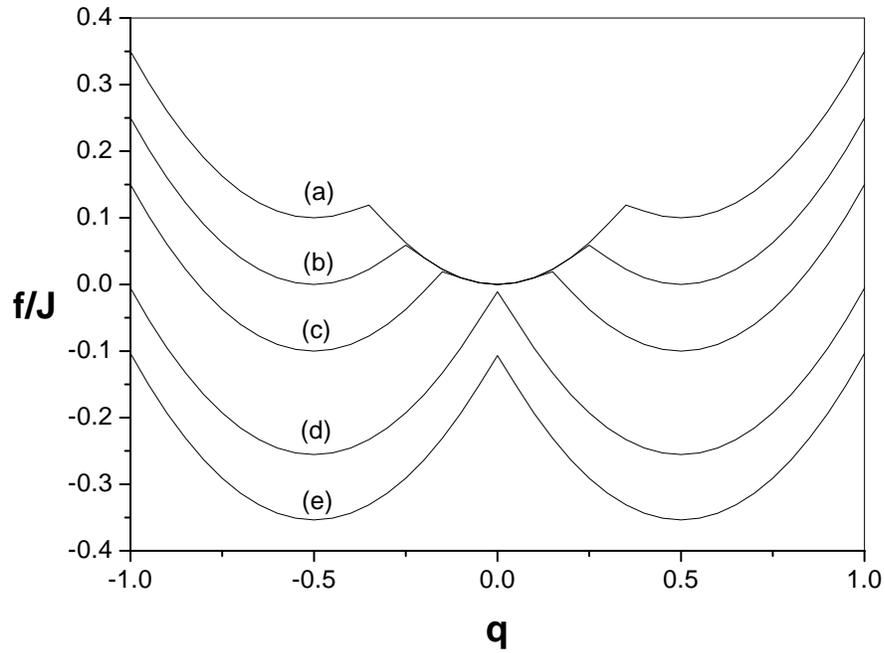


Figura 3.6: Comportamento da energia livre da fase SG em $T = 0$, para o modelo VH axial, em função do parâmetro de ordem q para vários valores de anisotropia D_z . (a) $D_z/J = -0.7$, (b) $D_z/J = -0.5$, (c) $D_z/J = -0.3$, (d) $D_z/J = 0.0$ e (e) $D_z/J = 0.1$, para a DPB aplicada no modelo.

Na Fig.(3.6) temos o comportamento da energia livre da fase SG em função do parâmetro q no estado fundamental ($T = 0$) para o modelo dado pela Eq.(3.71). As curvas são dadas para os seguintes valores da anisotropia D_z/J : (a) $D_z/J = -0.7$, (b) $D_z/J = -0.5$, (c) $D_z/J = -0.3$, (d) $D_z/J = 0.0$ e (e) $D_z/J = 0.1$, com campo transversal nulo ($\Omega = 0$) usando distribuição de probabilidade bimodal (DPB).

Observamos que para $D_z/J > 0$ o mínimo de energia do sistema é duplamente degenerado (em $q = \pm 0.5$), haja visto que de acordo com trabalho original de van Hemmen [28], somente a metade dos spins que compõem o sistema magnético geram ordem da fase vidro de spin. Portanto, para $D_z/J > 0$ a ordem magnética é reforçada, pois os mínimos de energia do sistema diminuem (ou ainda se deslocam para níveis mais estáveis), com aumento da intensidade de D_z/J . No limite $D_z/J \rightarrow \infty$ o estado ordenado ($q \neq 0$) é privilegiado, que é um resultado semelhante ao obtido por Blume-Capel para um sistema ferromagnético anisotrópico.

No caso $D_z/J < 0$ podemos observar que o mínimo de energia do sistema tende a aumentar (ou tende para níveis menos estáveis), tal que no valor crítico $(D_z/J)_c = -0.5$ o mínimo de energia tem valor nulo. O estado com mínimo de energia no ponto crítico $(D_z/J)_c = -0.5$ é um estado triplamente degenerado ($q = \pm 0.5$ e $q = 0.0$), proporcionando ao sistema magnético uma transição de fase SG-P de primeira ordem no estado fundamental, caracterizado pelo fato de que na transição de fase o parâmetro de ordem (q) não ser absolutamente nulo. Para $D_z/J < -0.5$ é observado que o mínimo de energia permanece nulo, favorecendo o estado desordenado ($q = 0$), este resultado também é semelhante ao obtido por [31,32] para um sistema ferromagnético.

A função da anisotropia negativa ($D_z/J < 0$) é proporcionar a destruição da ordem do sistema vidro de spin. Sendo que no estado fundamental a transição de fase SG-P, ocorre devido ao fator clássico referente à diminuição do *gap* de energia ($g = f_p - f_{SG}$), entre o mínimo de energia do estado ordenado e o estado desordenado, como podemos observar na Fig.(3.7). Na criticalidade do sistema (ponto $(D_z/J)_c = -0.5$) temos a igualdade das energias ($f_{SG} = f_P$), tornando $g = 0$, e desta forma acontecendo a transição de fase SG-P

no estado fundamental.

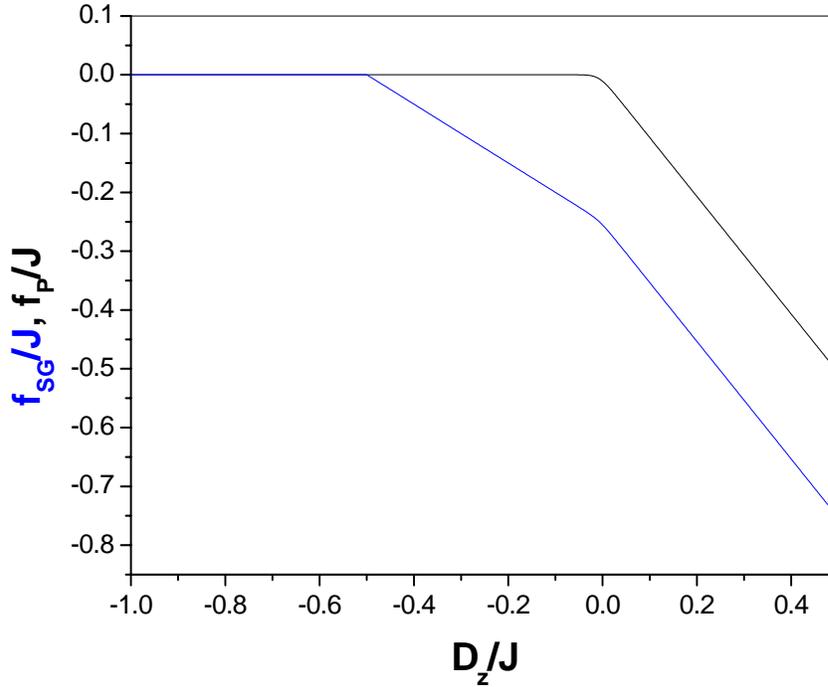


Figura 3.7: Comportamento dos mínimos das energias livres das fase SG e o nível de energia do primeiro estado excitado (estado P) em função da anisotropia D_z/J no estado fundamental. Para o modelo VH axial com DPB.

Na Fig.(3.8) temos o comportamento da energia livre da fase SG em função do parâmetro q , quando o sistema é submetido às seguintes intensidade de campo transversal: (a) $\Omega/J = 0.0$, (b) $\Omega/J = 0.5$, (c) $\Omega/J = 0.7$ e (d) $\Omega/J = 1.0$, com a anisotropia $D_z/J = 0.0$ no estado fundamental (denotamos de modelo de VH transversal). Os resultados obtidos na Fig.(3.8) são referentes à aplicação da DPB no modelo. Observamos que o campo transversal destrói a ordem do sistema magnético, de modo completamente diferente da forma como acontece com a anisotropia $D_z/J < 0$. A diferença de comportamento pode ser observada, primeiramente, no comportamento do valor mínimo da energia livre, isto é, enquanto que o campo transversal Ω desloca o mínimo da energia

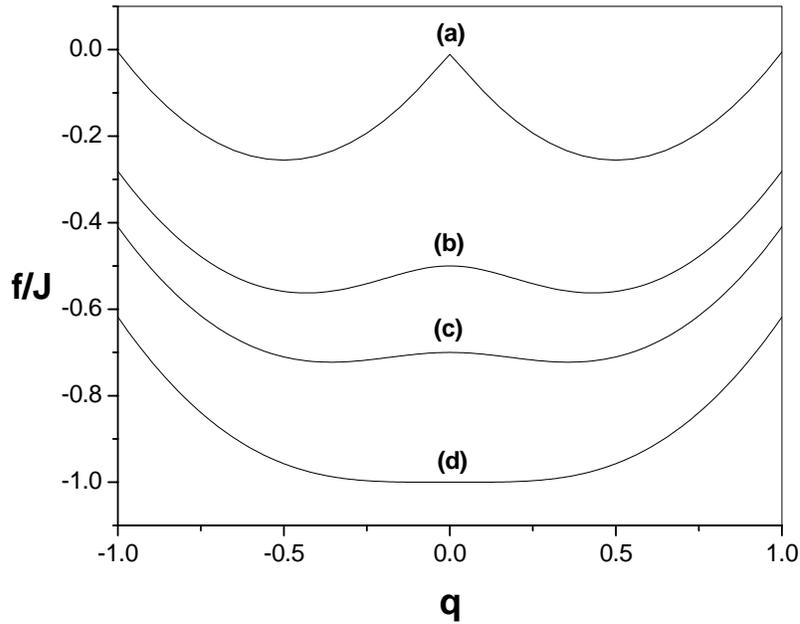


Figura 3.8: Comportamento da energia livre da fase SG em $T = 0$, para o modelo de VH transversal, em função do parâmetro q . (a) $\Omega/J = 0.0$, (b) $\Omega/J = 0.5$, (c) $\Omega/J = 0.7$ e (d) $\Omega/J = 1.0$. Para o caso da DPB.

livre, gradativamente, para um valor mais negativo (ou mais estáveis), a anisotropia negativa desloca o mínimo de energia do sistema para maiores valores (ou menos estáveis). Outra diferença de comportamento, refere-se à diminuição da ordem magnética (q) nos pontos mínimos de energia, a medida que o campo transversal aumenta, o que é diferente do que ocorre com o aumento da intensidade da anisotropia $D_z/J < 0$, onde a ordem magnética permanece congelada até a anisotropia crítica $(D_z/J)_c = -0.5$.

A explicação para o comportamento do campo transversal diminuir a ordem magnética, gradativamente, com aumento de sua intensidade, é pelo fato de que os spins do sistema magnético sentem, fortemente, a presença deste campo, de tal forma que os seus momentos magnéticos sofrem uma reorientação na direção deste campo. Os spins reorientados na direção do campo Ω passam a configurar uma magnetização induzida

(m_x) por este campo, sendo que esta magnetização é definida por

$$m_x = \frac{1}{N} \sum_i \langle \sigma_i^x \rangle, \quad (3.73)$$

de onde resulta que

$$m_x = \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial k_4} (\ln Z_N) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\Gamma} \frac{\partial \Gamma}{\partial k_4} P(\xi, \eta) d\xi d\eta, \quad (3.74)$$

onde $k_4 = \beta\Omega$.

Na Fig.(3.9) temos os comportamentos do parâmetro de ordem q e da magnetização induzida m_x , onde a curva em superior refere-se à magnetização m_x e a curva inferior refere-se a ordem vidro de spin q . Observamos que no campo crítico $\Omega_c/J = 1.0$ a ordem vidro de spin é destruída, enquanto que a magnetização induzida é saturada, e o sistema sofre uma transição de fase SG-P de segunda ordem, pois a ordem magnética do sistema se anula absolutamente no ponto crítico. Os spins que caracterizam a ordem induzida na direção do campo transversal tunelam, gradativamente, para o estado desordenado ($q = 0$) a medida que aumenta a intensidade do campo transversal, e os níveis de energia em que se encontram esses dois estados são dependentes da intensidade do campo transversal, como podemos observar na Fig.(3.8).

Portanto, o campo transversal Ω aplicado num sistema vidro de spin, cria novos níveis de energia na região proibida entre o mínimo de energia do estado ordenado ($q \neq 0$) e desordenado ($q = 0$). A consequência da criação de novos níveis de energia é que os mínimos de energia dos estados ordenado e desordenado são deslocados para níveis mais estáveis, e o *gap* de energia ($g = f_p - f_{SG}$) entre esses dois estados diminui, gradativamente, com o aumento da intensidade do campo transversal. Diminuindo esse *gap* de energia os spins do estado ordenado tunelam para um novo nível de energia (que é o novo estado desordenado), de tal forma que na criticalidade do sistema ($\Omega_c/J = 1.0$) todos os spins tunelaram para o estado desordenado ($q = 0$). Vale ressaltar que os spins que tunelaram não ficam desordenados no novo nível de energia, os mesmos ficam ordenados

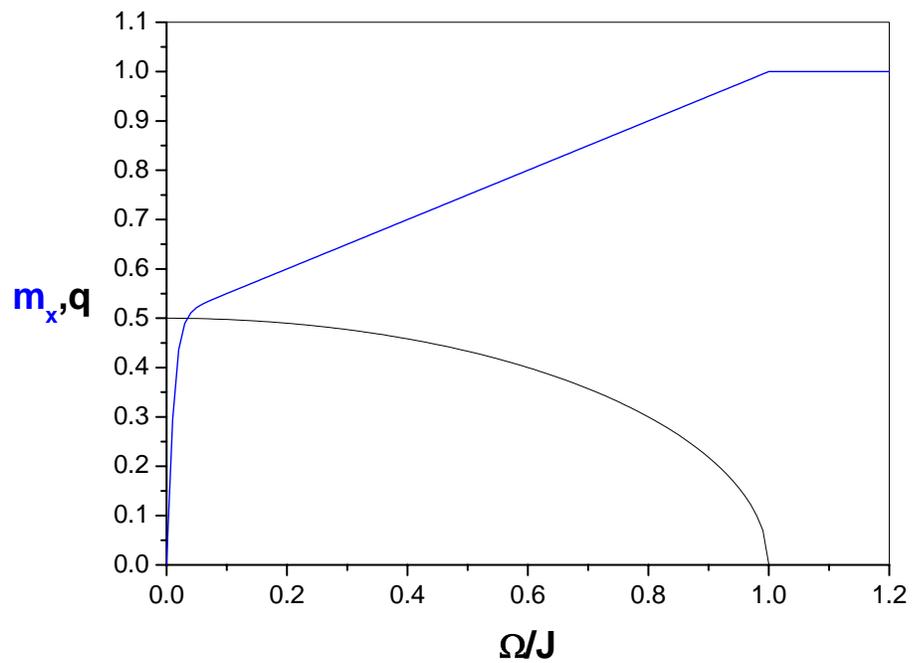


Figura 3.9: Comportamentos da magnetização induzida transversa (m_x) e do parâmetro vidro de spin (q) em função do campo transverso no estado fundamental, para o modelo VH transversal usando a DPB.

na direção do campo transversal e desta forma não configuram mais a ordem vidro de spin. A influência do campo transversal em diminuir o gap de energia, entre os estados ordenados e desordenados, pode ser observada na Fig.(3.10). Para campo $\Omega/J > \Omega_c/J = 1.0$ o sistema se encontra com mínimos de energia referente ao estado paramagnético, porém fortemente induzido pelo campo, sendo que esses mínimos continuam se deslocando para menores níveis a medida que o campo transversal cresce.

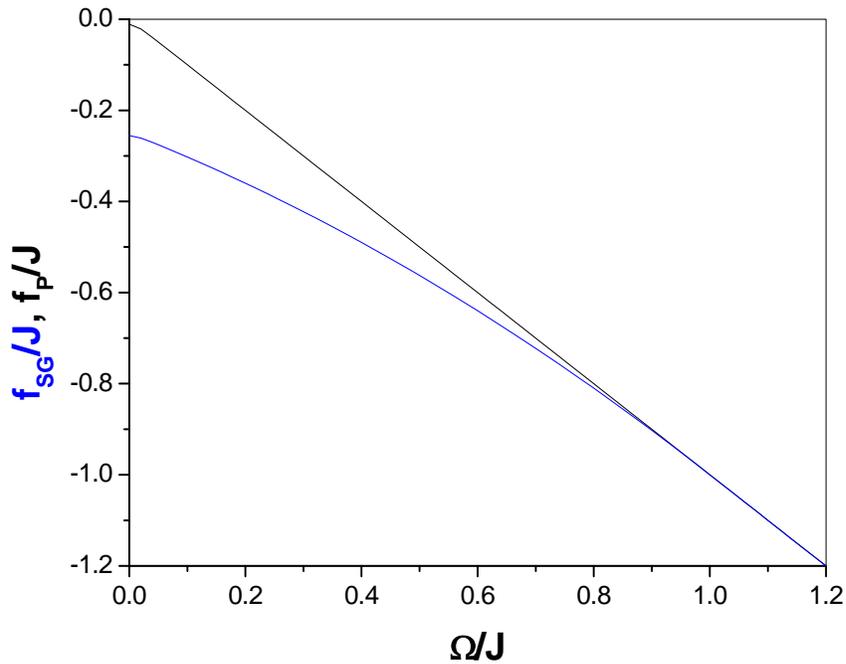


Figura 3.10: Comportamento dos mínimos das energias livres das fase SG e o nível de energia do primeiro estado excitado (estado P) em função do campo transversal no estado fundamental, para o modelo VH transversal com DPB.

Os resultados qualitativos obtidos usando a DPG no modelo são os mesmos que foram obtidos usando a DPB para o caso em que $\Omega/J \neq 0$ e $D_z/J = 0$ no estado fundamental. Todavia, os resultados obtidos para o caso em que $\Omega/J = 0$ e $D_z/J \neq 0$ são diferentes nas aplicações das duas distribuições de probabilidades. Na Fig.(3.11)

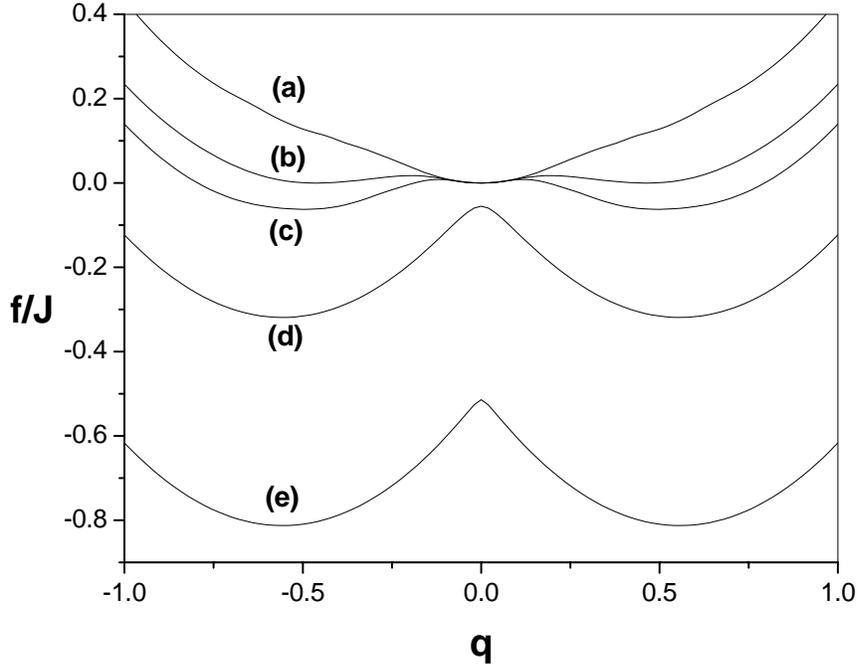


Figura 3.11: Comportamento da energia livre da fase SG em $T = 0$ para o modelo VH axial em função do parâmetro de ordem q para vários valores de anisotropia D_z . (a) $D_z/J = -0.7$, (b) $D_z/J = -0.413$, (c) $D_z/J = -0.3$, (d) $D_z/J = 0.0$ e (e) $D_z/J = 0.1$, para o caso da DPG.

temos o comportamento da energia livre do sistema em função do parâmetro de ordem magnética q no estado fundamental para as seguintes intensidades de anisotropia: (a) $D_z/J = -0.7$, (b) $D_z/J = -0.413$ (intensidade crítica), (c) $D_z/J = -0.3$, (d) $D_z/J = 0.0$ e (e) $D_z/J = 0.1$, usando DPG. Observamos que a medida que aumenta a intensidade da anisotropia negativa ($D_z/J < 0$), os mínimos de energias do sistema são deslocados para maiores níveis, contudo a ordem magnética q diminui, fato que não acontecia com a aplicação da distribuição bimodal (DPB).

O comportamento da Fig.(3.11) nos informa que a partir dos novos níveis de energia criados pela influência da anisotropia, permite que spins do estado ordenado ($q \neq 0$)

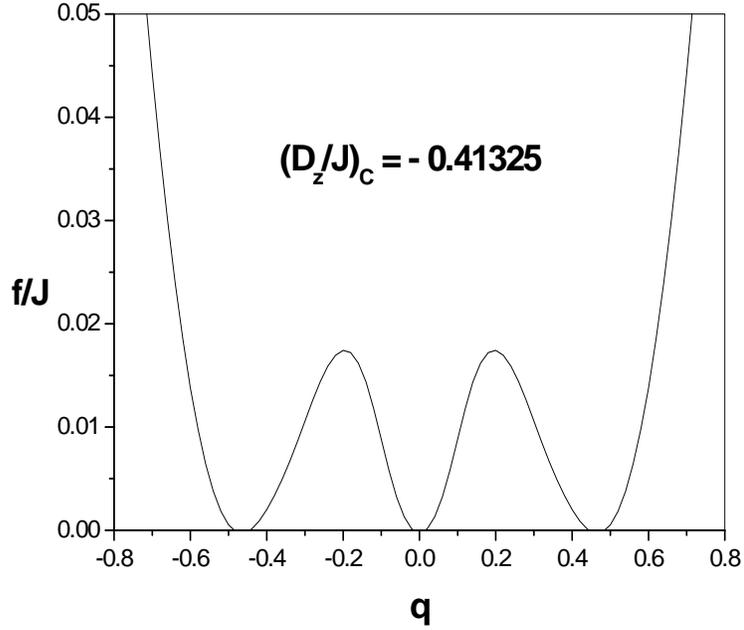


Figura 3.12: Comportamento da energia livre da fase SG para o modelo VH axial em função do parâmetro de ordem q para o caso anisotropia crítica no estado fundamental, usando a DPG.

tunelam para os novos níveis de energia do estado desordenado ($q = 0$). Contudo, para o valor da anisotropia crítica $(D_z/J)_c \simeq -0.41325$ o sistema sofre uma transição de fase SG-P de primeira ordem, como podemos observar na Fig.(3.12). Na Fig.(3.12) temos o estado com mínimo de energia triplamente degenerado, indicando que nem todos os spins do estado ordenado tunelaram para o estado desordenado na criticalidade do sistema, no estado fundamental.

Na Fig.(3.13) temos o diagrama de fase no estado fundamental no plano $\Omega - D_z$ para o modelo VH quântico axial. Nesta figura as linhas críticas são obtidas a partir da aplicação das distribuição de probalidades bimodal (linha superior) e gaussiana (linha inferior). São observados os pontos críticos para anistropia $(D_z/J)_c = -0.5$ para o caso da DPB e $(D_z/J)_c \simeq -0.413$ para o caso DPG, e para o campo transversal $(\Omega/J)_c =$

1.0 em ambas distribuições de probabilidade. Também observamos os pontos tricríticos $PTC(D_z/J \simeq -0.29; \Omega_c/J \simeq 0.6)_{DPB}$ e $PTC(D_z/J \simeq -0.294; \Omega_c/J \simeq 0.596)_{DPG}$ que diferem muito pouco entre si. As linhas contínuas correspondem a transição de segunda ordem, enquanto as linhas descontínuas correspondem a transições de primeira ordem. Na Fig.(b) temos o detalhe da reentrância observada no caso da aplicação da DPG.

B) Caso da anisotropia biaxial simétrica ($D_x/J = D_y/J$)

Vamos fazer uma análise a respeito dos resultados obtidos para o caso em que $D_x = D_y$. De acordo com o trabalho realizado por Kopec e Domanski [38], é demonstrado que quando $D_x = D_y$ os modelos para casos com anisotropia uniaxial e biaxial dados a seguir:

$$\mathcal{H}_{UNIAXIAL} = -\sum_{i \neq j} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z + D_z \sum_i (\sigma_i^z)^2 - \Omega \sum_i \sigma_i^x, \quad (3.75)$$

e

$$\mathcal{H}_{BIAXIAL} = -\sum_{i \neq j} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - D_x \sum_i (\sigma_i^x)^2 - D_y \sum_i (\sigma_i^y)^2 - \Omega \sum_i \sigma_i^x, \quad (3.76)$$

são equivalentes.

Os resultados obtidos nesta seção irão nos permitir comprovar, a equivalência entre os modelos dados pelos Hamiltonianos dos casos uniaxial Eq.(3.75) e biaxial Eq.(3.76), observado analiticamente por Kopec e Domanski [38]. Esta análise é bastante importante, pois as anisotropias D_x e D_y são orientadas no espaço em direções transversais em relação às orientações dos spins, que caracterizam a ordem magnética do vidro de spin. Deste foma, a presença dessas anisotropias no sistema magnético, num primeiro momento nos levaria a afirmar que sempre funcionariam como agentes de destruição da ordem magnética. Porém, no caso em que $D_x = D_y$, dependendo do valor que ambas assumam, essas anisotropias funcionam no sistema como agentes que aumentam a ordem magnética. Este fato se deve a uma influência quântica, que é comprovada teoricamente a partir de um formalismo quântico realizado por Kopec e Domanski [38]. Portanto, o

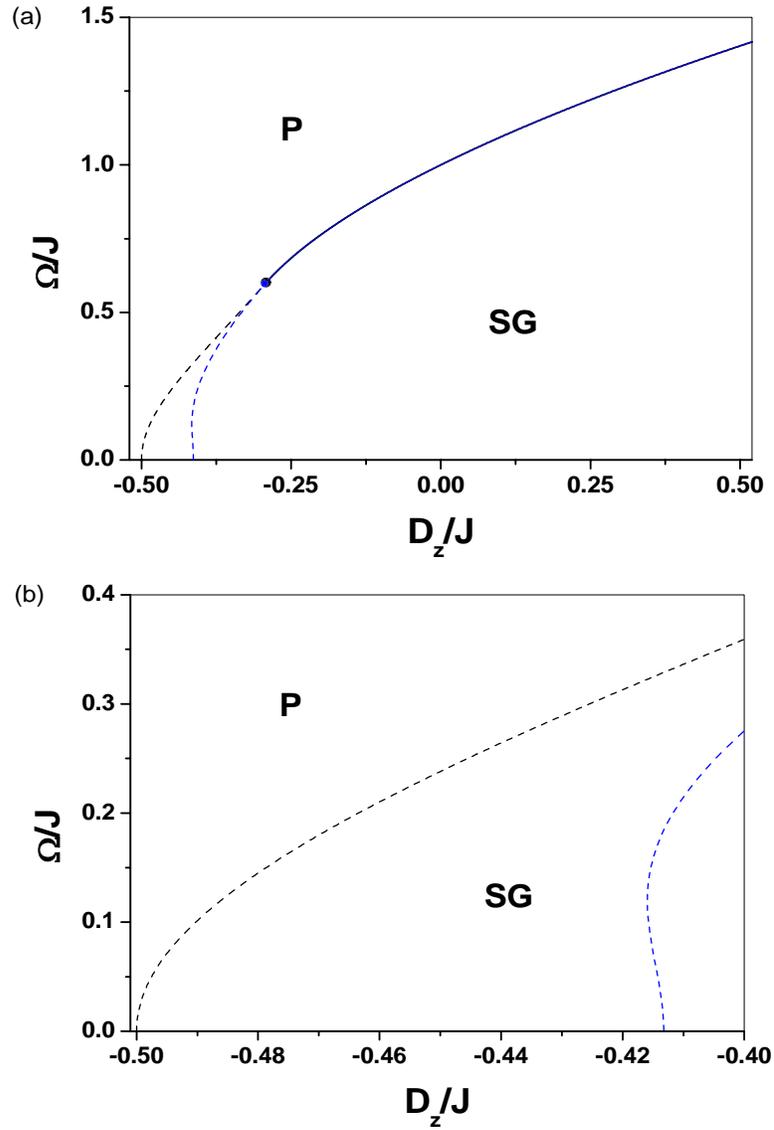


Figura 3.13: Fig.(a) Diagrama de fase do estado fundamental do modelo VH quântico axial no plano $\Omega/J - D_z/J$ obtida a partir das aplicações das distribuições de probabilidades bimodal (linha superior) e gaussiana (linha inferior). As linhas contínuas são de transição de segunda ordem e que as linhas descontínuas são de transições de primeira ordem. Na Fig.(b) temos em detalhe a reentrância observada na linha de transição obtida a partir da DPG.

estudo realizado neste capítulo é bastante oportuno, para que possamos compreender melhor a respeito da orden magnética de compostos observados na natureza, devido a influência de anisotropias ou campo internos que esses compostos possuam.

Na Fig.(3.14) temos o diagrama de fase no estado fundamental no plano $\Omega - d$ ($d = D_x/J = D_y/J$), para o modelo VH quântico biaxial. Observamos uma linha de transição de fase entre as fases vidro de spin (SG) e a paramagnética (P), a partir das aplicações das distribuições de probabilidade DPB e DPG. Temos dois tipos de transições, uma dada pelas linhas contínuas que são de transições de segunda ordem, enquanto que as linhas descontínuas são de transições de primeira ordem ¹.

Podemos observar que os resultados apresentados na Fig.(3.14) estão de acordo com aqueles obtidos na Fig.(3.13), bastando fazer a mudança $D_z \rightarrow -D_z^2$. O que confirma a equivalência entre os modelos dados pelas Eqs.(3.75) e (3.76) para os casos anisotrópicos uniaxial e biaxial. Nesta figura temos os pontos críticos $d_c = 0.5$ para a DPB e $d_c = 0.41325$ para a DPG, enquanto que para o campo transversal temos $(\Omega/J)_c = 1.0$. Temos, ainda, os mesmos pontos tricríticos $PTC(d_t \simeq 0.29; \Omega_c/J \simeq 0.6)_{DPB}$ e $PTC(d_t \simeq 0.294; \Omega_c/J \simeq 0.596)_{DPG}$. Podemos observar que para $d > 0$ é necessário menor intensidade de campo transversal, porém para $D_x/J = D_z/J < 0$ é necessário maior intensidade do campo transversal, para que o sistema sofra a transição de fase SG-P. Isto indica que na faixa de valores $d > 0$ essas anisotropias se comportam como agentes de destruição

¹A transição de fase de primeira ordem é caracterizada pela presença de calor latente sendo determinado por $Q_L = T_c \cdot \Delta S$, onde ΔS é a variação da entropia na temperatura de transição. Esta transição pode também ser verificada pelo comportamento do parâmetro de ordem magnética, quando o mesmo se anula de modo descontínuo em T_c . Já a transição de segunda ordem é caracterizada pela ausência de calor latente na temperatura de transição de fase e o parâmetro de ordem magnética se anula de forma contínua.

²Esta transformação é necessária porque o modelo do qual foi obtido a Fig.(3.13) é dado por

$$\mathcal{H} = -\sum_{i \neq j} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - D_z \sum_i (\sigma_i^z)^2 - \Omega \sum_i \sigma_i^x,$$

enquanto que, o modelo uniaxial que é equivalente para o modelo biaxial no caso em que $D_x/J = D_y/J$, é dado por

$$\mathcal{H} = -\sum_{i \neq j} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z + D_z \sum_i (\sigma_i^z)^2 - \Omega \sum_i \sigma_i^x,$$

da ordem vidro de spin, enquanto que se $d < 0$ essas anisotropias se comportam como agentes que aumenta a ordem magnética do vidro de spin.

Na Fig.(3.15) temos o comportamento do parâmetro de ordem vidro de spin q em $T = 0$ em função ao campo transversal, para vários valores de anisotropia do sistema magnético, indicados na figura. As curvas foram obtidas para o caso $D_x/J = D_y/J$ na aplicação da DPB. Esta Fig.(3.15) refere-se a Fig.(3.14), onde podemos observar o fato de que em transições de primeira ordem o parâmetro da ordem vidro de spin q se torna nulo de forma descontínua no valor crítico do campo, como pode ser observado nos casos (a), (b), (c) e (d).

No caso (e) a intensidade da anisotropia é relacionada com um campo crítico na região de transição de segunda ordem, de acordo com a Fig.(3.14), e observamos que o parâmetro q se torna nulo de forma contínua no campo crítico. Os resultados obtidos para o caso da aplicação da DPG são semelhantes na questão da descontinuidade e continuidade do parâmetro de ordem magnética na regiões de primeira e segunda ordem, respectivamente, portanto, omitimos aqui discutir os resultados.

C) Efeito da temperatura

Conforme foi mostrado anteriormente a equivalência entre os modelos VH quântico axial e biaxial com $D_x/J = D_y/J$, bastando fazer uma simples inversão da anisotropia, então estudaremos a seguir apenas um dos casos para $T \neq 0$.

Na Fig.(3.16) temos o diagrama de fase no plano $T - d$, para várias intensidades do campo transversal usando a DPB. Os resultados foram obtidos a partir da normalização $k_B \equiv 1$. As linhas descontínuas são referentes às transições de primeira ordem, enquanto que as linhas contínuas são de segunda ordem, e os círculos pretos são os pontos tricríticos (PTC).

Para anisotropia positiva $d > 0$ a temperatura de congelamento (T_g) diminui, pois neste caso a anisotropia é um agente de destruição da ordem magnética. Agora para a anisotropia $d < 0$ temos que a anisotropia neste regime de valores se comporta como

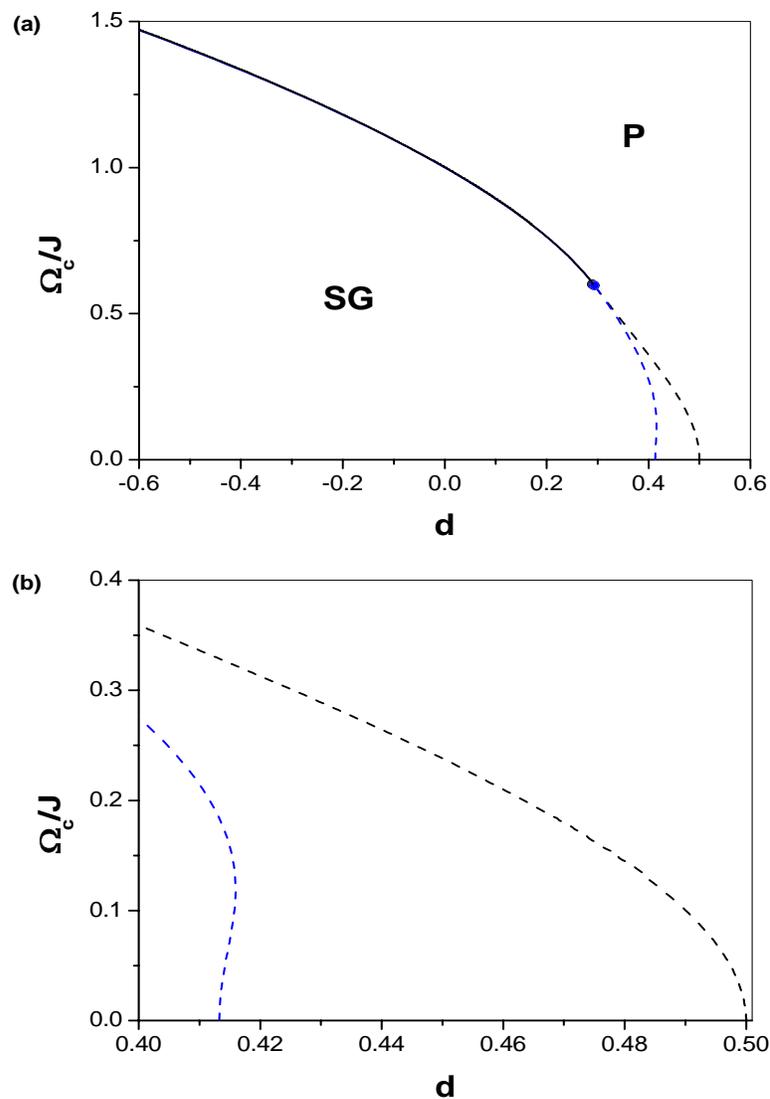


Figura 3.14: (a) Diagrama de fase do estado fundamental no plano $\Omega - d$ para o modelo VH quântico biaxial para os casos de DPB (curva superior) e DPG (curva inferior). (b) Detalhe em menor escala na região de baixas temperaturas onde é observado o comportamento reentrante da linha de transição para o caso DPG.

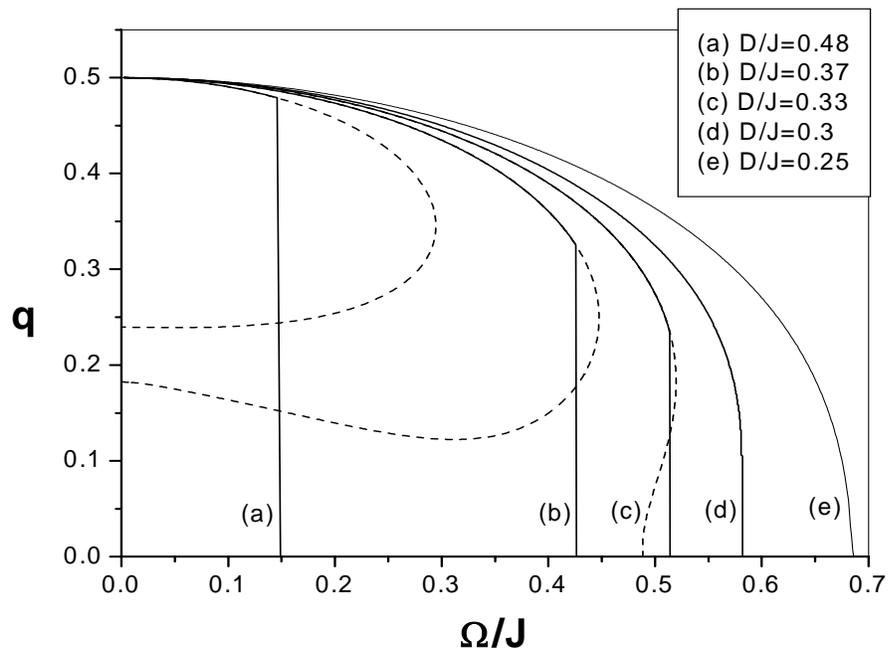


Figura 3.15: Comportamento do parâmetro de ordem vidro de spin q em função do campo transversal no estado fundamental para vários valores de $D_x/J = D_y/J$ usando DPB. As linhas tracejadas são soluções instáveis.

um agente que reforça a ordem magnética, desta forma a medida que aumenta a intensidade da anisotropia nesta faixa de valores é necessário mais energia térmica para destruir a ordem magnética do sistema. Fixando o valor da anisotropia, podemos observar que é necessário menor energia térmica, quando aumentamos a intensidade do campo transversal, para que ocorra a transição de fase SG-P. Este efeito é o esperado, haja visto que aumentando a intensidade do campo transversal a ordem magnética diminui, como podemos observar na Fig.(3.15), sendo então necessário menor energia térmica para que a criticalidade do sistema seja atingida.

Observamos que, fazendo $d \rightarrow -\infty$ o resultado obtido corresponde ao limite do modelo Ising de spin $S = 1/2$, ou seja, temperatura de congelamento tende para $T_g/J = 1.0$ para todas as linhas de transição. Este é o resultado obtido do modelo de van Hemmen para spin $S = 1/2$ com $\Omega/J = 0.0$. Este resultado é semelhante ao obtido por Blume-Capel [31,32] para um sistema ferromagnético anisotrópico. Nossos resultados estão de acordo também, com os resultados obtidos experimentalmente na Fig.(3.3), que é referente a compostos do tipo vidro de spin anisotrópico uniaxial, na qual temos que quando $D/J \rightarrow \infty$ a temperatura de congelamento do sistema tende a convergir para um único valor, do modelo de Ising-1/2 .

Dependendo do valor do campo transversal, na região de baixas temperaturas temos a presença de comportamento reentrante. Na Fig.(3.16b) podemos observar o fenômeno da reentrância na linha de transição para campo transversal $\Omega/J = 0.5$. Este fenômeno é observado quando o campo transversal é aproximado do ponto tricrítico no estado fundamental observado na Fig.(3.14). A medida que o campo transversal se afasta deste ponto crítico ($\Omega_c/J \simeq 0.6$) as linhas críticas não apresentam reentrância, como podemos observar para os casos $\Omega/J = 0.3$ e $\Omega/J = 0.0$.

Na Fig.(3.17) temos o comportamento da energia livre do sistema em função do parâmetro magnético q , referente à Fig.(3.16). Nosso objetivo é analisar o comportamento dos mínimos de energia do sistema, a partir de várias temperaturas. Na Fig.(a) adotamos $d = 0.0$ e $\Omega/J = 0.0$ para verificar a influência da temperatura no comportamento dos

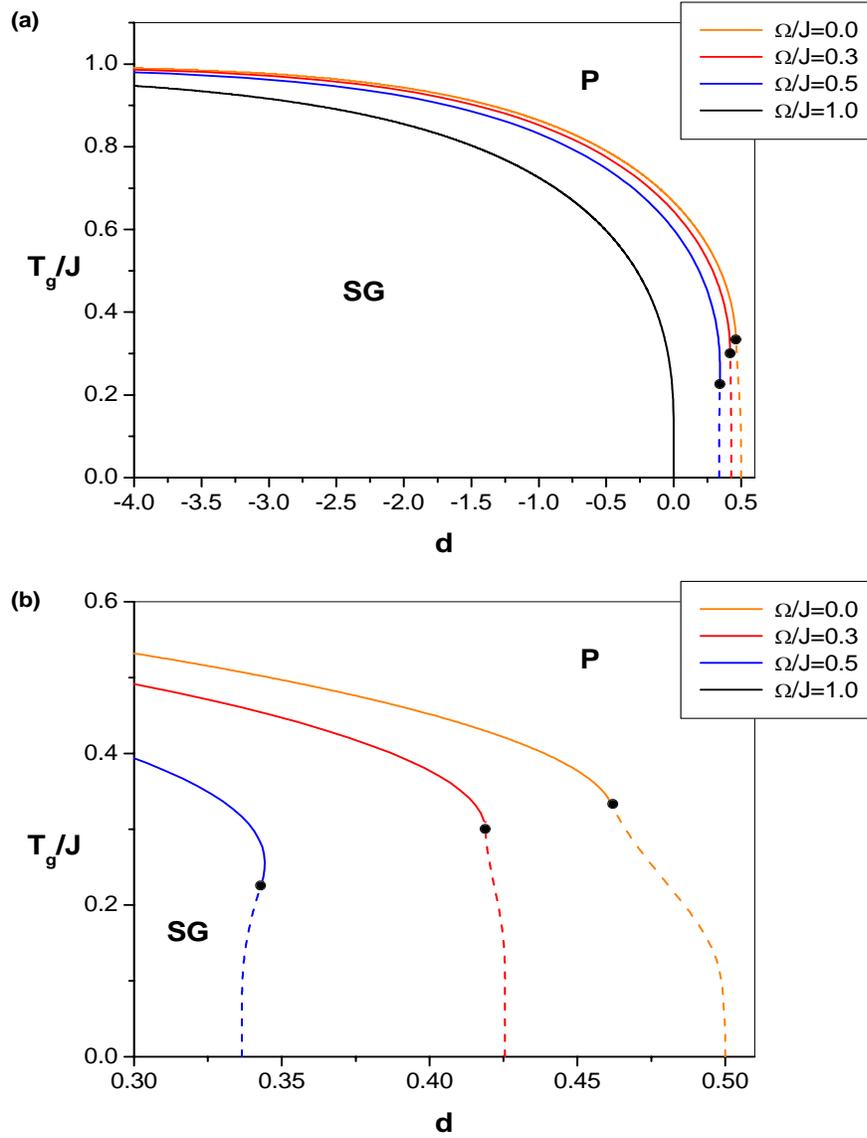


Figura 3.16: (a) comportamento da temperatura de congelamento T_g em função da anisotropia d para diversos valores de campo transversal, indicados na figura, para o modelo VH quântico biaxial DPB. As linhas contínuas e tracejada são de transições de segunda e primeira ordem, respectivamente. (b) ampliação do comportamento T_g/J em função da anisotropia d na região de baixa temperatura, onde é observado a reentrância na linha de transição para $\Omega/J = 0.5$.

mínimos de energia, variando a temperatura nos seguintes valores: (a) $T/J = 0.01$, (b) $T/J = 0.2$, (c) $T/J = 0.4$, (d) $T_g/J = 2/3$ e (e) $T/J = 0.8$.

Observamos que a medida que a temperatura aumenta os mínimos de energia se tornam, gradativamente, menores (níveis mais estáveis), diminuindo também a intensidade da ordem magnética (q) do sistema. Quando é atingida a temperatura de congelamento ($T_g/J = 2/3$) o sistema sofre uma transição de fase SG-P de segunda ordem, pois o estado com mínimo de energia é desordenado ($q = 0$), o que está de acordo com a Fig.(3.16). Este processo de transição de fase é semelhante ao que acontece com a ação do campo transversal, como foi visto, anteriormente, no estado fundamental.

Na caso da Fig.(3.17.b) escolhemos $d = 0.48$ e $\Omega/J = 0.0$, e que de acordo com a Fig.(3.16) a transição de fase se dá na temperatura de congelamento $T_g/J \simeq 0.229$, sendo uma transição de primeira ordem. Observamos que ao variar a temperatura nos valores (a) $T/J = 0.001$, (b) $T/J = 0.1$, (c) $T/J = 0.2$, a ordem magnética do sistema é atenuada, até que na temperatura de congelamento (d) $T_g/J \simeq 0.229$ o sistema sofre uma transição de fase de primeira ordem, haja visto que o estado com mínimo de energia em T_g é um estado triplamente degenerado (dois estados simétricos $q \neq 0$ e o estado $q = 0$). Portanto, a energia térmica não foi capaz de desorientar todos os spins que configuram a ordem magnética, na temperatura de congelamento, e desta forma a ordem do sistema cai a zero de modo descontínuo, o que caracteriza que o sistema sofreu uma transição de primeira ordem. No caso da curva (e) o mínimo de energia apresenta apenas o estado desordenado ($q = 0$).

Na Fig.(3.18) temos os comportamentos da entropia na Fig.(3.18-a) e do parâmetro de ordem vidro de spin na Fig.(3.18-b) em função da temperatura. Estas curvas foram obtidas a partir de dois valores para as anisotropias $d = 0.4$ e $d = 0.48$ com o campo transversal $\Omega/J = 0.0$. A determinação destas curvas é importante para reforçar os argumentos a respeito das transições de fase de primeira e segunda ordem apresentadas na Fig.(3.16).

No figura (3.18-a) temos que a seta indica a temperatura de congelamento T_g/J ,

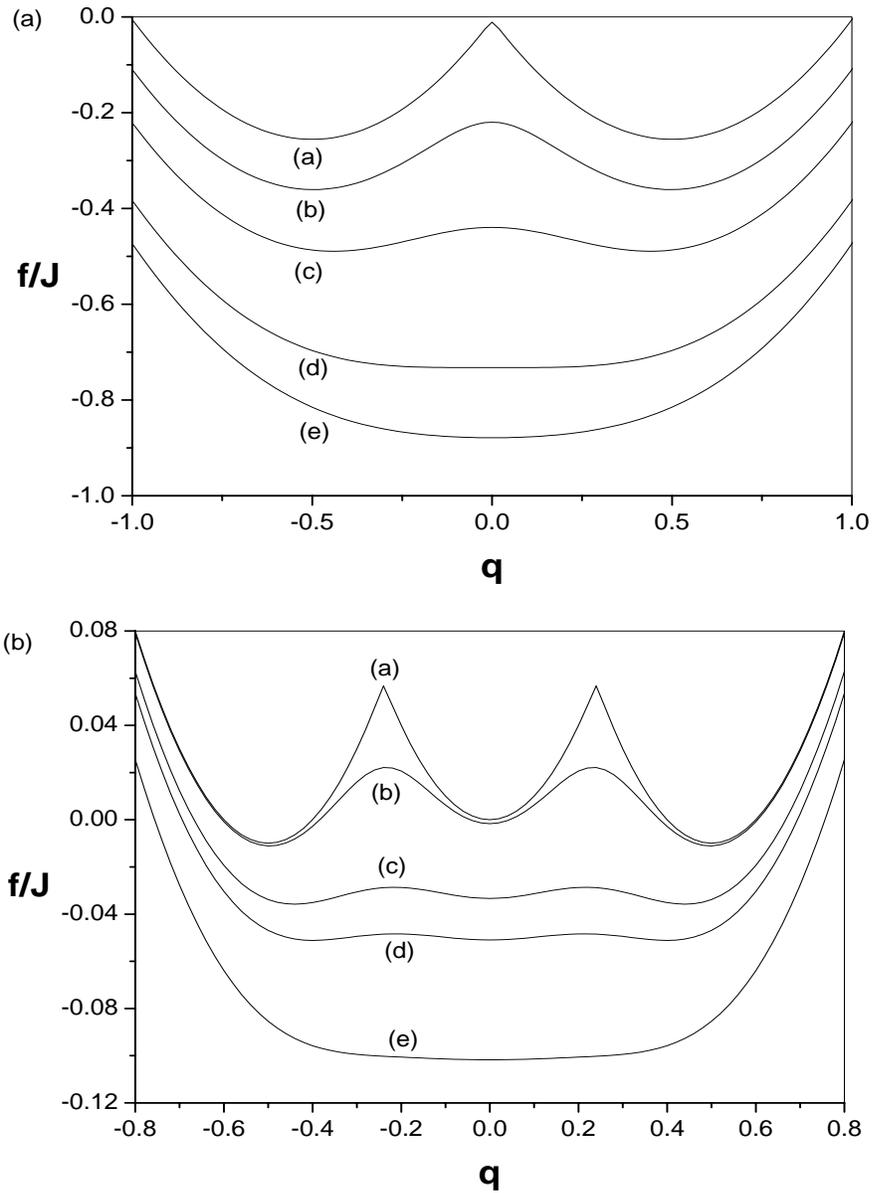


Figura 3.17: (a) comportamento da energia livre da fase vidro de spin em função do parâmetro de ordem q para várias temperaturas. (a) $T/J = 0.01$, (b) $T/J = 0.2$, (c) $T/J = 0.4$, (d) $T_g/J = 2/3$ e (e) $T/J = 0.8$, para o caso em que $d = 0$ e $\Omega = 0$. (b) para o caso $d = 0.48$ e $\Omega/J = 0$, para as temperaturas a) $T/J = 0.001$, (b) $T/J = 0.1$, (c) $T/J = 0.2$, (d) $T/J = 0.229$, (e) $T/J = 0.3$, usando a DPB.

para $d = 0.48$ é observado $T_g/J \simeq 0.229$ que corresponde a uma transição de primeira ordem, pois nesta temperatura temos uma descontinuidade da entropia com $\Delta S \neq 0$ (logo existe calor latente na transição de fase que é dado por $Q_L = T\Delta S$), enquanto que para $d = 0.4$ temos $T_g/J \simeq 0.452$ que corresponde a uma transição de segunda ordem, pois temos uma transição de fase com $\Delta S = 0$. Este comportamento a respeito do tipo de transição (primeira ou segunda ordem) para estes dois pontos de transição, corresponde ao observado na Fig.(3.18).

Na figura (3.18-b) temos outro fator que caracteriza os comportamentos das transições de fase de primeira e segunda ordem referente a Fig.(3.16), que é o comportamento do parâmetro de ordem magnética vidro de spin. Podemos observar na curva dada para $d = 0.4$, que o parâmetro de ordem se anula de modo contínuo na temperatura de congelamento $T_g/J \simeq 0.452$, o que caracteriza uma transição de segunda ordem, enquanto que para $d = 0.48$ o parâmetro se torna nulo de modo descontínuo na temperatura de congelamento $T_g/J \simeq 0.229$, caracterizando uma transição de primeira ordem.

Na Fig.(3.19) temos o diagrama de transição SG-P no plano $T - \Omega$ para diferentes intensidades de anisotropia d . Nas linhas críticas (d) e (e) são observados pontos tríticos, indicando que as linhas de transições são mistas, ou seja, existem transições de primeira (linhas descontínuas) e de segunda ordem (linhas contínuas). As linhas de primeira ordem só são observados para intensidades de anisotropia abaixo do valor da anisotropia crítica $d_c \simeq 0.29$, observado na Fig.(3.14). Observamos que independente do regime dos valores das anisotropias positivas $d > 0$, teremos que a medida que a intensidade do campo transversal aumenta, a temperatura de congelamento diminui para cada anisotropia que o sistema magnético apresenta, que é um resultado esperado.

No caso das linhas (a) e (b) podemos perceber, novamente, que para $d < 0$, à medida que a intensidade dessas anisotropias aumenta é necessário mais energia térmica ou então maior intensidade do campo transversal para que o sistema sofra a transição de fase SG-P, como já havíamos argumentado, anteriormente, em relação a Fig.(3.16).

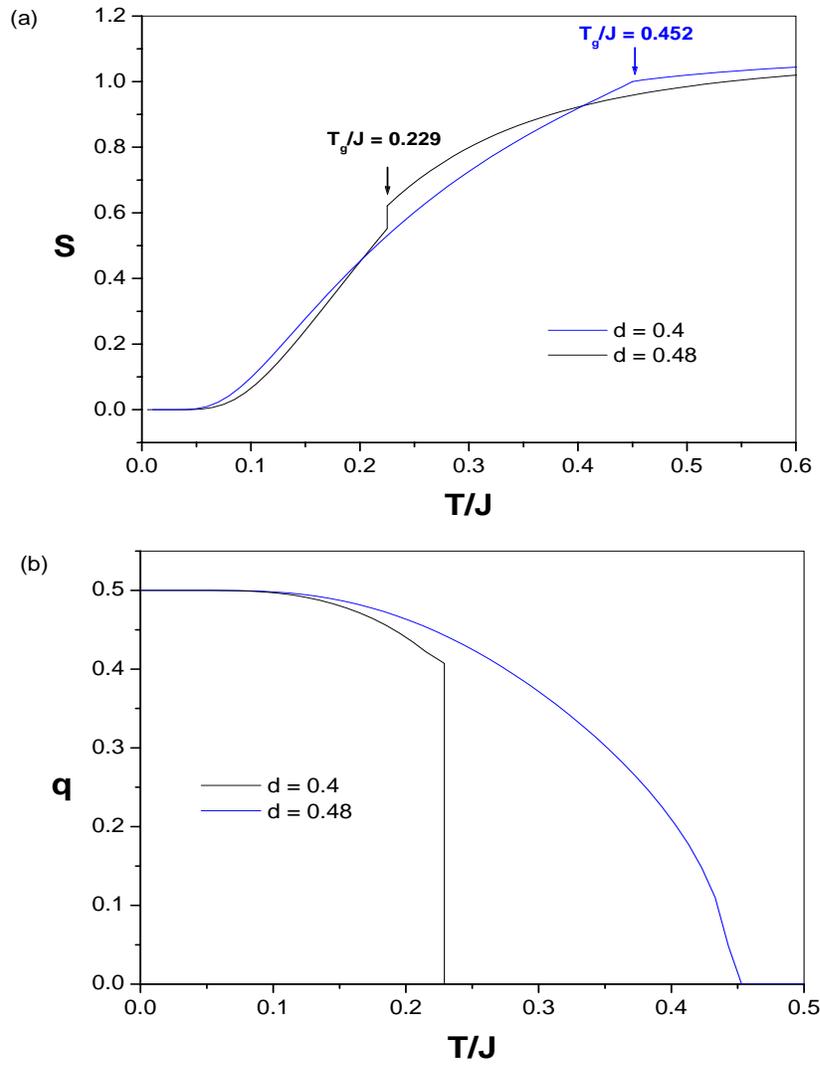


Figura 3.18: (a) Comportamento da entropia S em função da temperatura T/J para campo $\Omega/J = 0$ e anisotropias $D/J = 0.48$ e $D/J = 0.4$, a seta indica a temperatura de congelamento T_g/J .(b) Comportamento do parâmetro de ordem vidro de spin q em função da temperatura T/J para essas intensidades de anisotropias

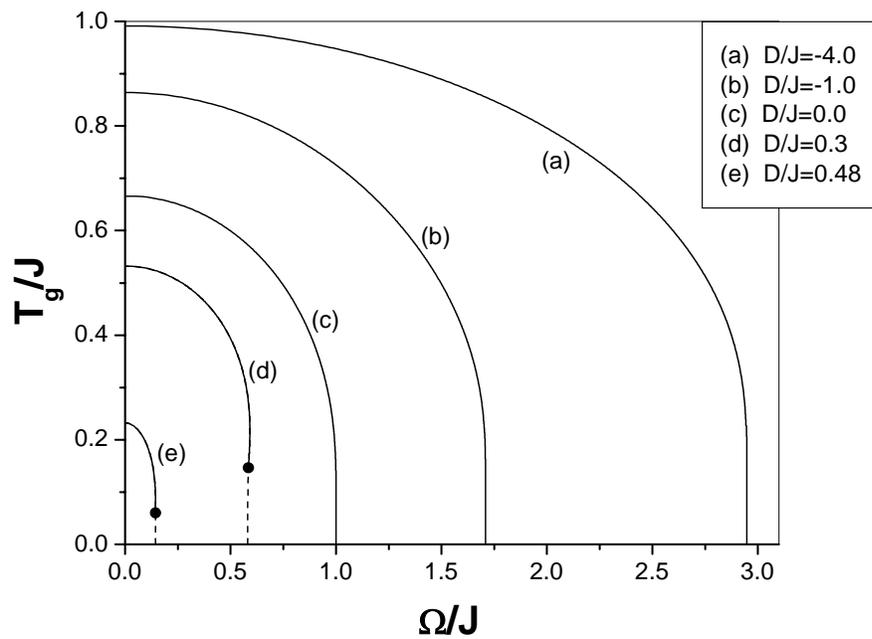


Figura 3.19: Comportamento da temperatura de congelamento em função do campo transversal para diferentes intensidades de anisotropia. As linhas contínuas e tracejadas indicam transições de segunda e primeira ordem, respectivamente

D) Caso da anisotropia biaxial assimétrica ($D_x/J \neq 0$ e $D_y/J = 0$)

Na Fig.(3.20) mostramos o comportamento da temperatura de congelamento em função da anisotropia D_x/J . As linhas de transições são determinadas a partir de várias intensidades do campo transversal Ω/J , com a condição de que a anisotropia $D_y = 0.0$ na aplicação da DPB. Este tratamento foi feito, a fim de investigar o que este modelo nos informa, a respeito da influência de uma anisotropia transversal uniaxial na criticalidade da ordem vidro de spin. Os resultados obtidos são completamente diferentes do caso simétrico em que $D_x/J = D_y/J$, pois como pode-se observar nesta figura, independentemente, se $D_x/J > 0$ ou $D_x/J < 0$, a medida que a intensidade da anisotropia D_x/J aumenta a temperatura de congelamento diminui. Isto acontece porque a anisotropia D_x reorienta os momentos magnéticos do sistema na direção x , porém essa reorientação pode ocorrer nos dois sentidos da direção x , de tal forma que o primeiro momento $\langle \sigma_i^x \rangle = 0$ com $D_x/J \neq 0$ e $\Omega/J = 0$, não havendo magnetização induzida na direção x , porém temos que o segundo momento $\langle (\sigma_i^x)^2 \rangle \neq 0$ para $D_x/J \neq 0$. Sendo que o segundo momento da magnetização é dado por

$$\langle (\sigma_i^x)^2 \rangle = \frac{1}{N} \frac{Tr \sum_i (\sigma_i^x)^2 \exp(-\beta \mathcal{H}_N)}{Tr \exp(-\beta \mathcal{H}_N)}, \quad (3.77)$$

que após algumas manipulações algébricas encontramos

$$\langle (\sigma_i^x)^2 \rangle = \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial k_5} (\ln Z_N) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\Gamma} \frac{\partial \Gamma}{\partial k_5} P(\xi, \eta) d\xi d\eta, \quad (3.78)$$

No estado fundamental ($T = 0$) podemos observar na Fig.(3.20) que as anisotropias críticas $(D_x/J)_c$ não são simétricas, nos regimes $D_x/J < 0$ e $D_x/J > 0$, qualquer que seja a intensidade do campo transversal aplicada no sistema magnético. Essa mudança nos valores das anisotropias críticas positivas e negativas, são influenciadas pelos mínimos de energia que o sistema se encontra no equilíbrio termodinâmico. É observado que dependendo se a anisotropia D_x/J for positiva ou negativa, a energia

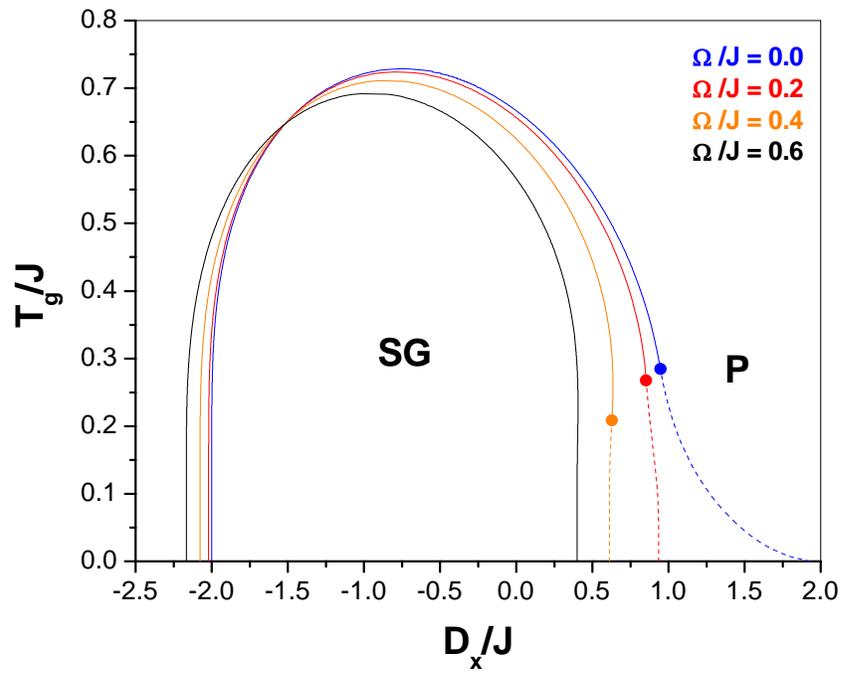


Figura 3.20: Comportamento da temperatura de congelamento em função da anisotropia transversa D_x/J no modelo VH quântico biaxial com $D_y = 0$ para diversos valores do campo transverso. Fixando em $D_x = 0$, a temperatura diminui com aumento do campo transverso.

livre do sistema assumirá comportamento diferentes, como podemos observar nas figuras (3.21) e (3.22). Estes resultados foram obtidas para a condição em que o campo transversal $\Omega/J = 0.0$, para que pudesse ser feita uma análise mais precisa do sistema anisotrópico sem influência de outros agentes físicos.

No caso quando $D_x/J > 0$ temos o comportamento apresentado na Fig.(3.21), onde podemos observar que a medida que a anisotropia aumenta de intensidade os mínimos de energia diminuem gradativamente, esses mínimos apresentam estados ordenados, porém essa ordem magnética diminui também com o aumento de $D_x/J > 0$. Contudo, para a anisotropia crítica $(D_x/J)_c \simeq 1.94$ temos que um estado com mínimo de energia triplamente degenerado, como pode ser melhor observado na Fig.(3.21b), esta degenerescência do estado com mínimo de energia indica que o sistema magnético sofre uma transição de fase de primeira ordem. Portanto, com o aumento de intensidade da anisotropia $D_x/J > 0$ o sistema tende a apresentar estados com mínimos de energia, gradativamente, mais estáveis.

Quando $D_x/J < 0$ temos o comportamento dado na Fig.(3.22), onde podemos observar que na medida que a intensidade da anisotropia aumenta, os mínimos de energia também aumentam de valor. Sendo que esses mínimos tendem para o nível de energia $f/J = 0$, quando a anisotropia for $(D_x/J)_c \simeq -2.0$ que corresponde a anisotropia crítica. A ordem magnética do sistema diminui à medida que a intensidade de $D_x/J < 0$ aumenta, como podemos observar nos mínimos de energia. Para a anisotropia crítica $(D_x/J)_C \simeq -2.0$ o estado com mínimo de energia é singleto com ordem magnética nula ($q = 0$), desta forma o sistema magnético sofre uma transição de fase de segunda ordem. Para anisotropias no regime $D_x/J < 0$ o sistema tende a apresentar estados com mínimos de energia menos estáveis à medida que aumenta a intensidade desta anisotropia. Perceba que para $D_x/J < (D_x/J)_c$ o estado com mínimo de energia é desordenado. Este comportamento para anisotropia negativa é observado para qualquer intensidade do campo.

Portanto, essas mudanças bruscas de comportamentos do sistema magnético no estado

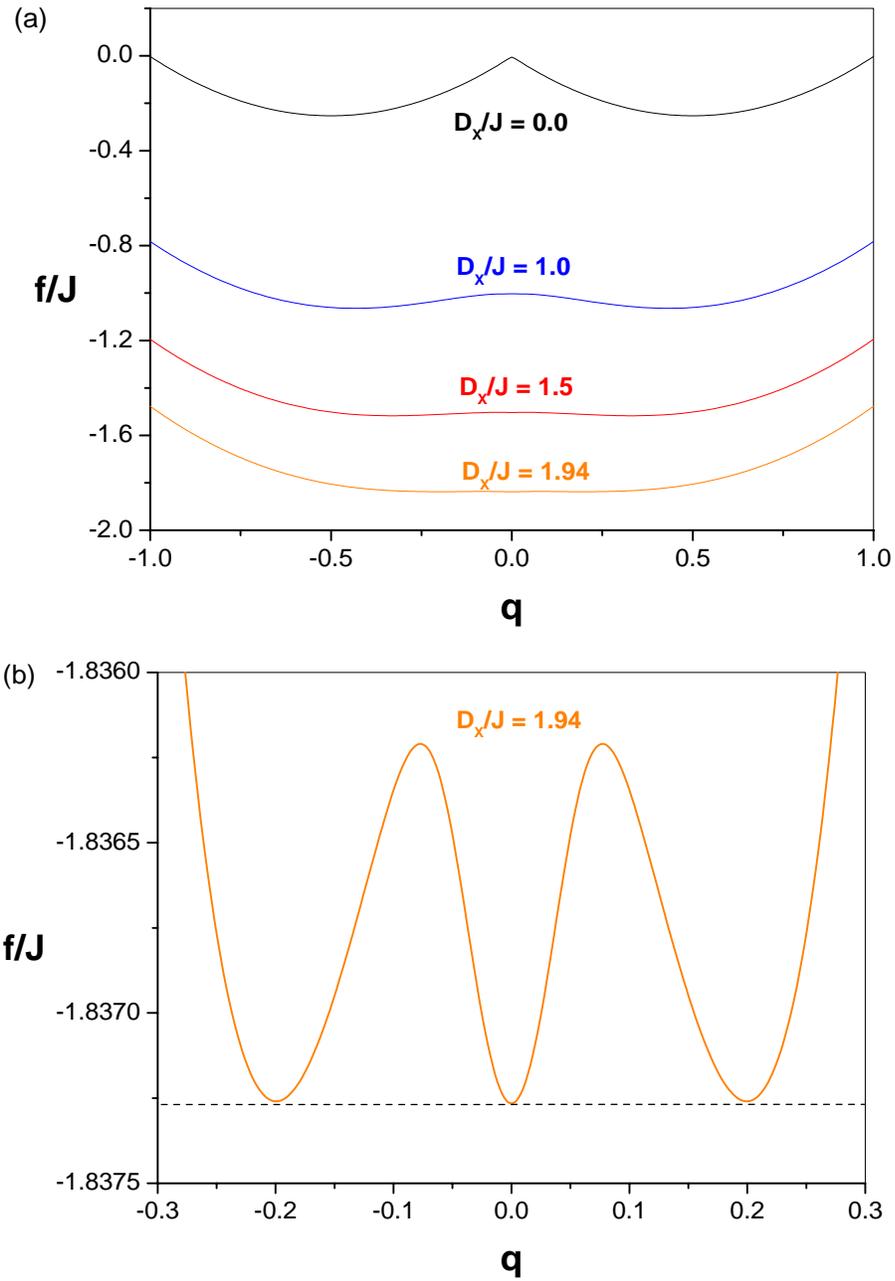


Figura 3.21: (a) Comportamento da energia livre f/J do sistema magnético em função do parâmetro de ordem q , para várias intensidades de anisotropias D_x/J positivas e com $\Omega = 0$ usando a DPB no estado fundamental. (b) Detalhe em menor escala para a anisotropia crítica $D_x/J = 1.94$, sendo observado um estado triplamente degenerado o que indica uma transição de primeira ordem.

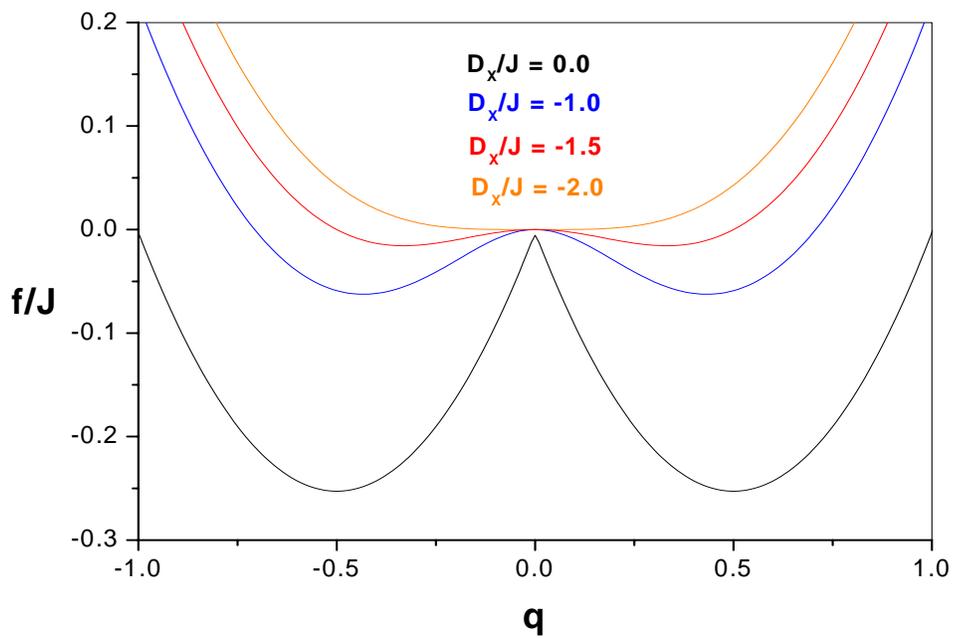


Figura 3.22: Comportamento da energia livre f/J do sistema magnético em função do parâmetro de ordem q , para várias intensidades de anisotropias D_x/J negativas, $\Omega = 0$ e $D_y/J = 0$ usando a DPB no estado fundamental.

fundamental, dependendo do regime de valores da anisotropia D_x/J , é que nos permite compreender o porquê das anisotropias críticas não serem simétricas mesmo com campo transversal nulo. Zhang e colaboradores [35] obtiveram resultados para um sistema ferromagnético de spin $S = 1$ com anisotropia biaxial numa rede honeycomb, em que as anisotropias também não são simétricas na ausência de campo transversal, onde foi usado o formalismo da técnica do operador diferencial na teoria de campo efetivo. Vários trabalhos têm sido propostos sobre modelos magnéticos com anisotropias biaxial, como os desenvolvidos por Jiang [57,58,59] para um sistema ferromagnético de spin $S = 1$ e $S = 3/2$, Kopec [38] que trata do sistema vidro de spin, Htoutou [54] que trata de um sistema magnético diluído, Baberschke [55], Usadel [56], que tratam das propriedades de um sistema vidro de spin anisotrópico.

Infelizmente, em nenhum desses trabalhos são feitas análises mais minuciosas para explicar a razão do comportamento da não simetria da anisotropia crítica D_x/J , no estado fundamental. Todavia, a partir dos trabalhos desenvolvidos por Blume e Capel [31,32] para um sistema ferromagnético anisotrópico uniaxial, serviu como motivação para explicar esses comportamentos das anisotropias, a partir da análise dos estados de mínimos de energia do sistema.

Outro fator importante, como podemos observar na Fig.(3.23) referente ao diagrama de fase em $T = 0$ no plano $\Omega/J - D_x/J$, de onde observamos que se a intensidade do campo transversal cresce, a intensidade da anisotropia crítica diminui no regime $D_x/J > 0$, o que é esperado, pois tanto o campo transversal, quanto a anisotropia D_x/J destroem a ordem magnética. Contudo, no regime $D_x/J < 0$ a medida que a intensidade do campo transversal aumenta, a intensidade (módulo) da anisotropia crítica também aumenta.

Este resultado obtido a partir do modelo estudado neste trabalho parece gerar um paradigma, haja visto que nos sugere que o campo transversal está criando ordem magnética vidro de spin. Podemos explicar este aparente paradigma, a partir da análise feita em torno dos comportamentos dos estados com mínimo de energia, referentes ao sistema magnético na presença de um campo transversal, como mostra a Fig.(3.8). Observamos

que a medida que o campo transversal aumenta, os estados com mínimo de energia ficam mais estáveis (diminuição do mínimo de energia). Enquanto, que a anisotropia $D_x/J < 0$ proporciona um aumento dos mínimos de energia, de tal forma que a transição de fase SG-P ocorre com mínimo de energia correspondente a $f/J = 0$ como podemos observar na Fig.(3.22). Desta forma, na presença do campo transversal, o sistema magnético precisa de maior anisotropia negativa, para deslocar o mínimo de energia até o nível $f/J = 0$ ³, onde o sistema sofre a transição de fase SG-P de segunda ordem no estado fundamental.

Para $(D_x/J)_c > 0$ temos uma linha mista tal que a linha contínua corresponde a transição de segunda ordem, enquanto que a linha descontínua é de transição de primeira ordem e o círculo preto é um tricrítico $PTC(0.498; 0.501)$. Em detalhe temos este comportamento para $(D_x/J)_c < 0$, onde podemos observar o aumento da intensidade da anisotropia crítica em função do aumento do campo transversal, cuja a razão desse comportamento já foi anteriormente discutido, a linha é toda de segunda ordem.

E) Caso biaxial em que $D_x \neq 0$ e $D_y \neq 0$

Na Fig.(3.24) temos o comportamento da temperatura de congelamento em função da anisotropia D_x/J , as linhas críticas foram obtidas a partir de vários valores da anisotropia D_y/J com campo transversal $\Omega/J = 0$ usando a DPB. Os resultados obtidos apresentam linha de primeira ordem (descontínua) e linha de segunda (contínuas), os círculos correspondem aos pontos tricríticos. Quanto a relação de proporcionalidade entre as grandezas, os resultados são os esperados, haja visto que fixando D_y/J , podemos verificar que a medida que aumenta a intensidade de D_x/J , a temperatura de congelamento diminui. Fixando a temperatura de congelamento T_g , podemos observar que a medida que aumenta a intensidade de D_y/J , a intensidade da anisotropia D_x/J deve ser menor para que o sistema atinja a criticalidade. Zhang [35] obtém resultados semelhante para um

³Para qualquer que seja a intensidade do campo transversal Ω/J o sistema sofre uma transição de fase SG-P para uma anisotropia crítica, que proporciona um estado com mínimo de energia singleto desordenado ($q = 0$) no nível $f/J = 0$.

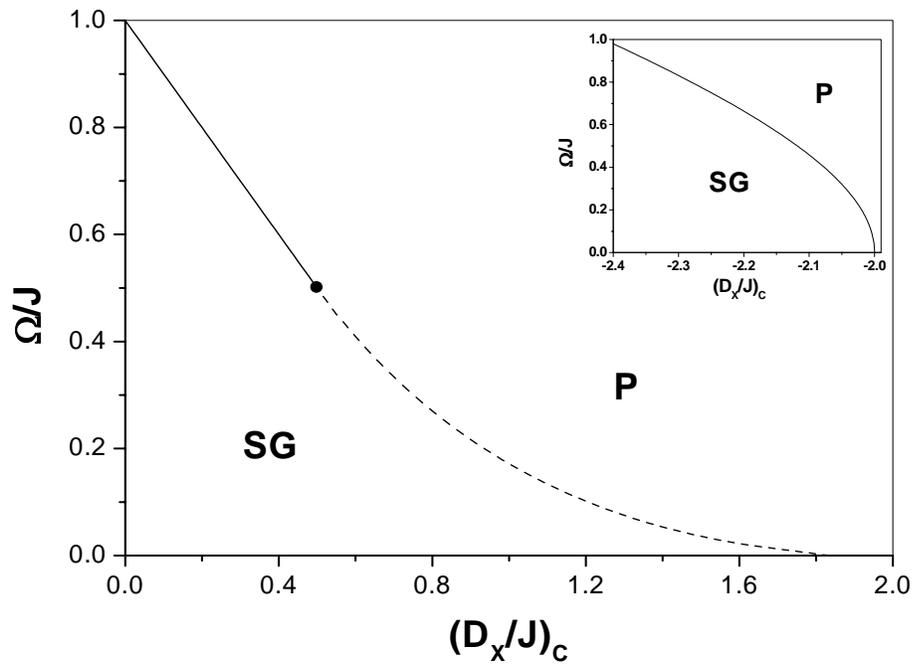


Figura 3.23: Diagrama de fase do estado fundamental no plano $\Omega/J - D_x/J$ para o modelo de VH quântico biaxial com $D_y = 0$ usando a DPB. As linhas contínuas e tracejadas correspondem a transições de segunda e primeira ordem, respectivamente. A figura menor corresponde ao caso em $D_x/J < 0$.

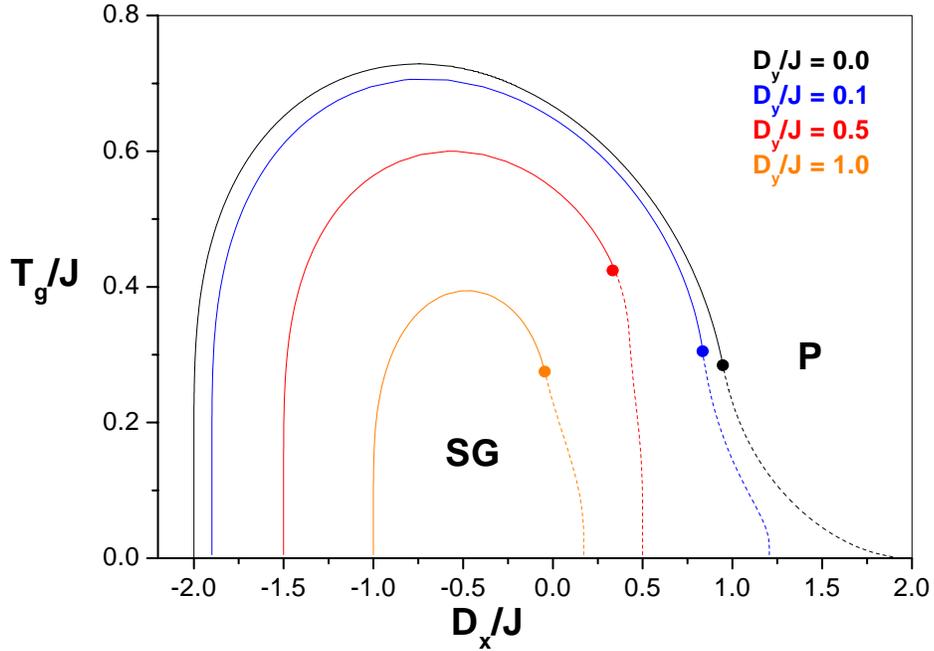


Figura 3.24: Comportamento da temperatura de congelamento em função do anisotropia transversal D_x/J para várias intensidades de anisotropias D_y/J e $\Omega/J = 0$ usando a DPB.

sistema ferromagnético de spin $S = 1$ com anisotropia biaxial numa rede honeycomb.

No estado fundamental temos o comportamento da anisotropia crítica $(D_x/J)_c$ em função da anisotropia D_y/J apresentado na Fig.(3.25). Esse comportamento é referente a Fig.(3.24). Observamos que para $(D_x/J)_c > 0$ a linha é toda de primeira ordem, enquanto que para $(D_x/J)_c < 0$ a linha é toda de segunda ordem. Não há nenhuma surpresa de comportamento na relação entre as anisotropias D_x/J e D_y/J , devido ambas apresentarem o mesmo comportamento, no que diz respeito aos estados com mínimos de energia em que o sistema magnético se encontra no equilíbrio termodinâmico.

Os resultados obtidos para o caso da aplicação da DPG no modelo tomando $D_x \neq D_y$ são semelhantes aos obtidos na aplicação da DPB. Desta forma os resultados obtidos

para DPG não adicionam nenhum novo comportamento nos diagramas de fase.

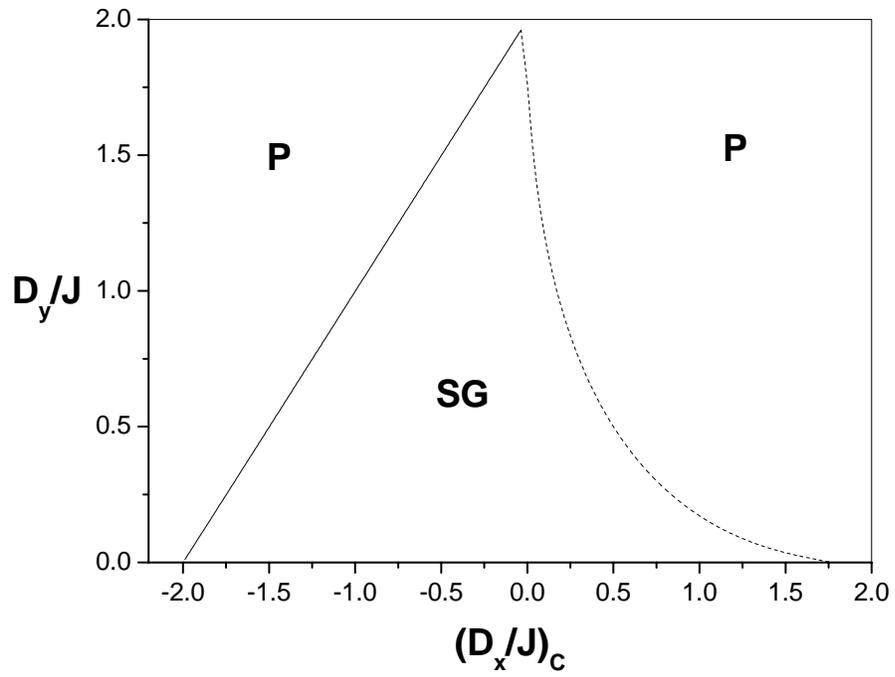


Figura 3.25: Diagrama de fase do estado fundamental no plano $D_x/J - D_y/J$ para o modelo VH quântico biaxial com $\Omega = 0$ usando a DPB. As linhas contínua e tracejada correspondem a transições de segunda e primeira ordem, respectivamente.

Referências

- [1] A.R. Rivera, *Tese de Doutorado: Estudo Experimental de Antiferromagnetos Desordenados*, **Universidade Federal de Pernambuco**, (1997).
- [2] P.Weiss, *J. Phys. Radium* **4**, 661 (1907).
- [3] J. A. Plascak, W. Figueredo e B.C.S. Grandi, *Braz. J. Phys.* **29**, 579 (1999).
- [4] F. Bitter e A. R. Kaufmann, *Phys. Rev.* **56**, 1044, (1939).
- [5] F. Bitter, A. R. Kaufmann, C. Starr e S. T. Pan, *Phys. Rev.* **60**, 134 (1941).
- [6] M. A. dos Santos, *Dissertação de Mestrado: Estudo Sistemático de um Modelo Clássico de Vidro de Spin com Anisotropia*, **Universidade Federal de Pernambuco**, (1986).
- [7] J.E. Zimmerman, e F. E. Hoare, *Phys. Soc.* **3**, 124, (1958).
- [8] V. Cannella, e J. A. Mydosh, *Phys. Rev. B* **6**, 4220 (1972).
- [9] J. Owen, M. Browne e A. F. Kip, *J. Phys. Chem Solids* **2**, 85 (1957).
- [10] C. J. Gorter, G. J. van der Berg, e Can de Nobel, *J. Phys.* **34**, 1281 (1956).
- [11] I. S.Jacobs e R. W. Shmitt, *Phys. Rev.* **113**, 459 (1959).
- [12] A. W. Overhauser, *Phys. Rev. Lett.* **3**, 414 (1959).
- [13] S. F. Edwards, e P. W. Anderson, *J. Phys. F* **5**, 965 (1975).

- [14] D. Sherrington, e S. Kirkpatrick, *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1792 (1975).
- [15] J. L. van Hemmen e R. G. Palmer, *J. Phys. A* **12**, 563 (1979).
- [16] J. R. L. de Almeida e D. F. Thouless, *J. Phys. A: Math. Gen* **11**, 983 (1978).
- [17] A. J. Bray e M. A. Moore, *J. Phys.* **C12**, 79 (1979).
- [18] A. J. Bray e M. A. Moore, *Phys Rev. Lett.* **41**, 1068 (1978).
- [19] A. Blandin, M. Gabay, e T. Garel, *J. Phys.* **C13**, 40 (1980).
- [20] A. J. Bray e M. A. Moore, *J. Phys.* **C13**, 419 (1980).
- [21] G. Parisi, *Phys. Lett. A* **73**, 203 (1979).
- [22] G. Parisi, *J. Phys. A* **13**, 1101 (1980).
- [23] G. Parisi, *J. Phys. A* **13**, 1115 (1980).
- [24] G. Parisi, *J. Phys. A* **13**, 1887 (1980).
- [25] H. Sompolinsky, *Phys. Rev. Lett.* **47**, 935, (1931).
- [26] D. C. Mattis, *Phys. Lett.* **56A**, 421, (1976).
- [27] G. Toulouse, *Commun. Phys.* **2**,115 (1977).
- [28] J. L. van Hemmen, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 409, (1982).
- [29] J. L. van Hemmen e Canisius, *J., Z. Phys. B - Condensed Matter* **50**, 311, (1983).
- [30] T. C. Choy e D. Sherrington, *J. Phys. Rev. C* **17**, 739, (1984).
- [31] M. Blume, *Phys. Rev.* **141**, 517 (1966).
- [32] W. Capel, *Physica* **32**, 966 (1966).
- [33] B. C. Frazer, G. Shirane, D. E. Cox e C. E. Olsen, *Phys. Rev* **140**, A1448 (1965).

- [34] W. Capel, V. J. Emery e Robert, R. Griffiths, *Phys. Rev. A* **4**,1071 (1971).
- [35] Q. Zhang, G. Z. Wei e Y. Q. Liang, *J. Mag. Mag. Mat.* **253**, 45 (2002).
- [36] H. Albrecht, E. F. Wassermann, F. T Heldgcock e P. Monod, *Phys. Rev. Lett.* **48**, 819 (1981).
- [37] S. Murayama, K. Yokosawa, W. Miyako, E. F. Wassermann, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1785 (1986).
- [38] T. K. Kopec e Z. Domànski, *J. Phys. Condens. Matter.* **12**, 5727 (2000).
- [39] S. Gatak e D. Sherrington, *J. Phys. C* **10**, 3149 (1977).
- [40] W. Jiang e S. Wang, *Phys. A* **341**, 333 (2004).
- [41] W. Wu, D. Bitko, T.F. Rosenbaum e G. Aeppli, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 2076 (1991).
- [42] M. A. Continentino, B. Boechet e R. R. dos Santos, *Phys. Rev. B* **50**, 13529 (1994).
- [43] Y. Y. Goldschmidt e P. Y. Lai, *Phys. Rev. Lett.* **21**, 2467 (1990).
- [44] J. A. Mydosh, *Disordered Systems and Localization - Ed. C. Castellán et. al., Springer Lecture Notes in Physics, N°149* (1981).
- [45] P.W. Anderson, *Amorphous Magnetism I* - Ed. H. Hooper e A. M. de Graff, Plenum (1973).
- [46] J. Roberto.Viana, J. Ricardo. de Sousa e Y. Nogueira, *Phys. Rev. B* **66**,113307 (2002).
- [47] J. Roberto Viana, J. Ricardo. de Sousa e Y. Nogueira, *Phys. Lett. A* **311**, 480 (2003).
- [48] J. RobertoViana, *Dissertação de Mestrado: Limite da Estabilidade da Fase Vidro de Spin no Modelo de van Hemmen Quântico, Universidade Federal do Amazonas* (2002).

- [49] A.W. Overhauser, *Phys. Rev. Lett.* **3**, 414 (1959).
- [50] M. Suzuki, *General Theory of Exponential Product Formulas*, (1995).
- [51] W. Jiang, *Physica A* **329**, 161 (2003).
- [52] W. Jiang, *Physica B* **362**, 236 (2005).
- [53] W. Jiang, *Physica A* **354**, 301 (2005).
- [54] K. Htoutou, *J. Magn. and Mag. Mat.* **288** 259 (2005).
- [55] K. Baberschke, *Phys. Rev. B* **29**, 499 (1984).
- [56] K. D. Usadel, *Phys. Rev. B* **27**, 6957 (1983).

Capítulo 4

Modelo de Heisenberg quântico anisotrópico

4.1 Introdução

O estudo de sistemas de spins quânticos frustrados em baixa dimensionalidade tem sido tema atual de grande interesse. O conceito de frustração, introduzida inicialmente por Thouless [1], está associada ao conflito de ordenamento (competição) de um dado íon magnético distribuído sobre uma matriz de um dado cristal magnético. Por exemplo, seja o caso do modelo de Ising numa rede triangular, se a interação de troca for positiva (ferromagnética), o estado fundamental ($T = 0$) corresponde a todos os sítios apontando numa única direção (para cima ou para baixo), o que representa, termodinamicamente, a ter uma entropia nula. Por outro lado, para o caso antiferromagnético (interação de troca negativa) um dado sítio em $T = 0$, apontado para cima, não poderá satisfazer simultaneamente com todos os seus vizinhos um ordenamento dos spins antiparalelo, pois esta configuração dos spins não corresponde ao estado fundamental. Desta forma, teremos uma infinidade de estados em $T = 0$ que satisfaz o mínimo de energia, e conseqüentemente teremos uma densidade de entropia ($s = S/N$, $N \rightarrow \infty$) não nula. Este resultado para a entropia e outras propriedades termodinâmicas no modelo de Ising na

rede triangular tem sido apresentado, de forma exata, por Wannier [2].

Do ponto de vista teórico, e da mecânica estatística clássica, o fenômeno da frustração por si só já representa um fator bastante atraente, levando ao sistema apresentar novos ordenamentos magnéticos, como, por exemplo, vidro de spin. Outro sistema frustrado, que será estudado neste capítulo, é o modelo de Ising com interações de primeiro (J_1) e segundo (J_2) vizinhos. Para este tipo de modelo teremos frustração apenas quando J_2 for do tipo antiferromagnética. Este resultado é independente do tipo de acoplamento J_1 (ferromagnético ou antiferromagnético), desde que não tenhamos campos magnético externo longitudinal (direção das componentes de spins) ¹.

Dependendo do valor do parâmetro $\alpha = J_1/J_2$ (parâmetro de frustração), em $T = 0$ (estado fundamental) teremos dois tipos de ordenamento. Abaixo de um determinado valor crítico α_c ($\alpha < \alpha_c$), o estado fundamental corresponde ao ordenamento ferromagnético-F (ou antiferromagnético-AF) cujo os spins estão orientados paralelamente (antiparalelamente) sob toda a rede cristalina. Para $\alpha > \alpha_c$ temos um ordenamento chamado de superantiferromagnético. Na rede quadrada, denotamos a ordem superantiferromagnética de fase colinear, que corresponde aos spins orientados ferromagneticamente numa dada cadeia na direção vertical (ou horizontal) e interagindo antiferromagneticamente, ou seja, o estado colinear é caracterizado pelo orientação ferromagnética alternada entre as direções de um plano. Na Fig.4.1 temos os esquemas das ordens antiferromagnético e colinear numa rede quadrada.

No caso da rede cúbica, o estado SAF é caracterizado pela orientação ferromagnética dos spins que compõem cada plano, alternando a orientação dos spins entre dois planos consecutivos. Neste caso, o estado SAF é denominado de fase laminar (L), a ilustração desta fase é observada na Fig.(4.2), onde podemos observar que nos planos xz uma alternância da orientação ferromagnética dos spins que compõem os planos consecutivos, enquanto que nos planos xy o comportamento colinear continua sendo observado.

¹No próximo capítulo introduzimos um campo transversal no modelo $J_1 - J_2$ de Ising e os resultados das propriedades termodinâmica e diagramas de fases são independentes do sinal de J_1 .

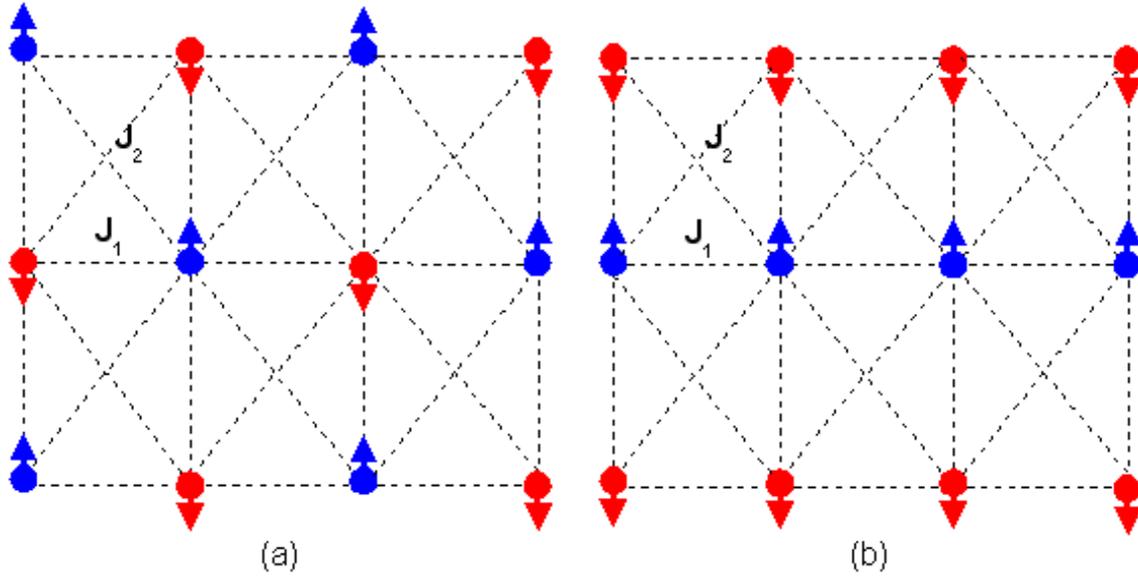


Figura 4.1: Ordenamento magnético de um modelo de Ising frustrado numa rede quadrada. (a) ordem de Néel ou antiferromagnética, (b) ordem colinear.

Comparando a energia do estado fundamental AF (ou F) com energia da fase SAF, mostramos que existe um valor crítico $\alpha_c = z_1/2z_2$, onde z_1 e z_2 são as quantidades de primeiros e segundos vizinhos, respectivamente. Rigorosamente falando, no ponto $\alpha = \alpha_c$ 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 ainda como um ponto de transição.

Em temperatura finita este modelo de Ising frustrado não apresenta solução exata. Para a rede quadrada, o diagrama de fase no plano $T - \alpha$ na região $\alpha < \alpha_c = 1/2$ (F ou AF) é bem conhecido. A temperatura crítica $T_c(\alpha)$ decresce a medida que o parâmetro de frustração cresce, se anulando em $\alpha_c = 1/2$. Neste região os expoentes críticos relacionados ao parâmetro renormalizado $t = [T - T_c(\alpha)]/T_c$ (i.e. $\xi \approx |t|^{-\nu}$, $m \approx (-t)^\beta$, ...) são iguais ao do modelo de Ising 2d (mesma classe de universalidade). Por outro lado, para $\alpha > 1/2$ (fase SAF) os expoentes críticos variam continuamente

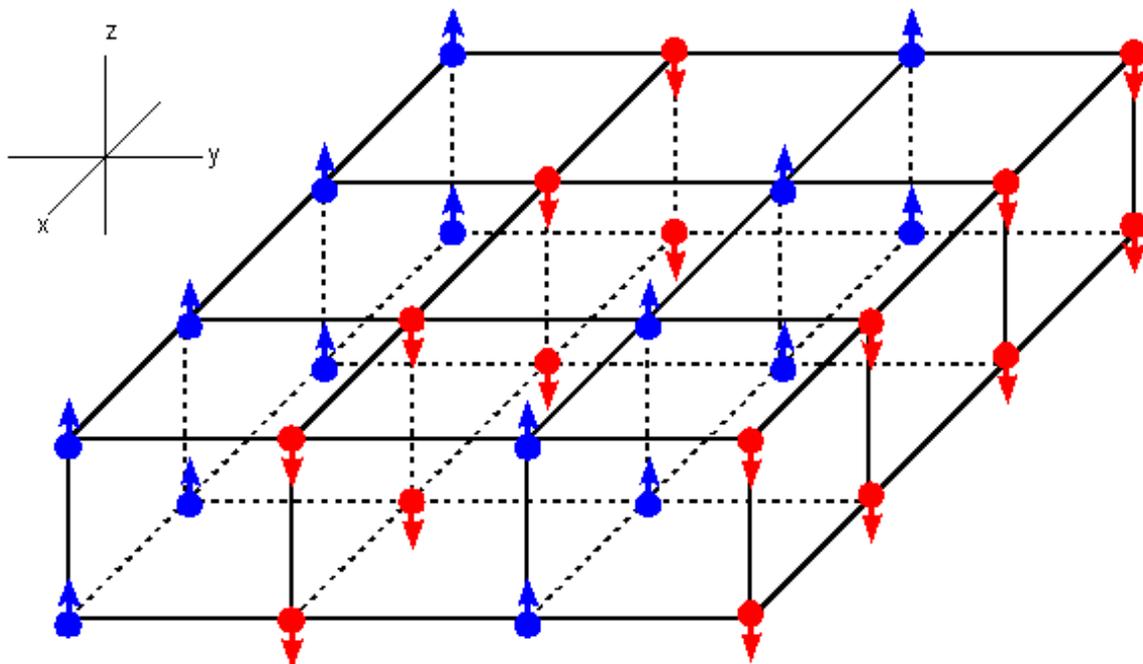


Figura 4.2: Ilustração do estado fundamental do modelo de Ising frustrado, numa rede cúbica simples, onde temos planos ordenados ferromagneticamente e alternados em direções opostas da magnetização ao longo do eixo y . Este estado é denominado de laminar

com o aumento do parâmetro de frustração, violando assim a hipótese de universalidade. Estes resultados têm sido analisados por diversos métodos, como, por exemplo, teoria da perturbação [3], expansão em série [4], simulação de Monte Carlo [5], método da anomalia coerente (CAM) [6], grupo de renormalização [7] e o método do cluster variacional (CVM) [8].

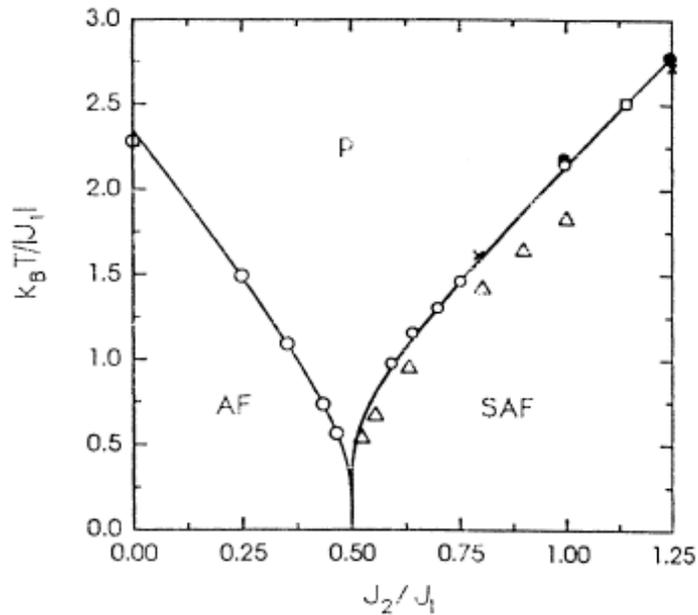


Figura 4.3: Comportamento da temperatura crítica em função do parâmetro de frustração J_2/J_1 para o modelo de Ising com interações entre primeiros (J_1) e segundos (J_2) vizinhos numa rede quadrada. A linha contínua é obtida pelo método CVM [8], os pontos triangulares pelo método de Monte Carlo [5] e os pontos circulares pela expansão em série [4].

Na Fig.(4.3) apresentamos o diagrama de fase no plano $T - \alpha$ para o modelo de Ising frustrado numa rede quadrada obtido pelos métodos CVM [8] e Monte Carlo [5]. O resultado de CVM indica que na região $0.5 < \alpha < 1.144$ temos uma transição de primeira ordem e para $\alpha > 1.144$ uma transição de segunda ordem, onde a conexão entre estas duas linhas de transição de fase é denominado de ponto tricrítico ($\alpha_t = 1.144$). Simulação de Monte Carlo de alta precisão [12] tem previsto um ponto tricrítico no diagrama

de fase com valor α_t inferior ao obtido por CVM. Recentes simulações de MC [13] têm mostrado uma transição de segunda ordem para $\alpha = 1$, diferente do que foi obtido com CVM que prevê uma transição de primeira ordem. Usando o método da anomalia coerente (CAM) [6], que é muito eficiente na determinação de expoentes críticos [14], 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, muito pouco se conhece para o caso de redes tridimensionais. Cálculos de campo médio [10] mostraram que este modelo exibe um rico diagrama de fase, porém a verdadeira dimensão do sistema fica suprimida pelo tipo de aproximação usada, que é exata quando usada para descrever a física deste modelo em dimensão infinita. Assim sendo, campo médio não é apropriado para descrever o verdadeiro comportamento qualitativo do diagrama de fase. Usando o método variacional em aglomerado finito Pelizzola [11], com a inclusão de uma interação de quatro spins (J_3), o diagrama de fase no $T - \alpha$ 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 e paramagnética. Foi mostrado, também, que entre as fases F (ou AF) e laminar a transição de fase é de primeira ordem. Quando $J_3 \neq 0$ 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 fase.

Os diagramas de fase no plano $T - \alpha$ do modelo de Ising $J_1 - J_2$ em duas e três dimensões não são conhecidos exatamente, onde apenas métodos aproximativos têm sido aplicados para elucidar a criticalidade em $T \neq 0$. O estado fundamental ($T = 0$) é exatamente conhecido, ou seja, para $\alpha < \alpha_c$ temos um ordenamento F(AF), enquanto que para $\alpha > \alpha_c$ temos um ordenamento SAF para as redes quadrada e cúbica simples. Temos que o valor crítico do parâmetro de frustração para estas redes é dado por $\alpha_c = z_1/2z_2$, que é obtido de modo exato. Assim sendo o estudo do diagrama de fase deste modelo

de spins frustrados clássico em $T \neq 0$ representa um tema, ainda, bastante motivante para ser analisado por outros métodos aproximativos, com o objetivo de desvendar o “verdadeiro” comportamento qualitativo para este diagrama de fase. Neste capítulo este será um dos temas a ser investigado.

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 desenvolvida por Hommura e Kaneyoshi [51], e que será aprimorado nesta tese para aglomerados finitos (análise de “*finite size scaling*”). Esta técnica aliada com algum desacoplamento nas funções de correlações, tem sido mostrado para vários outros sistemas 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 [15], tem estimulado a estudar, do ponto de vista teórico, as propriedades termodinâmicas e a criticalidade do modelo de Heisenberg quântico de spin $1/2$ em baixa dimensão [16]. Segundo o teorema de Mermin e Wagner [17], este modelo não apresenta ordem de longo-alcance em $T > 0$ para redes bidimensionais, o que significa uma temperatura crítica nula ($T_c = 0$)². 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

²Em 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 $m(T = 0) < S$.

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 previsto recentemente usando diversas métodos de grupo de renormalização [18]. A presença da ordem antiferromagnética no composto isolante La_2CuO_4 é atribuída a 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 foram descritas através deste modelo quase-2d [19].

Anderson [20] tem proposto que para pequeno valor do spin, as flutuações quânticas no modelo de Heisenberg 2d (rede triangular) pode gerar um novo estado fundamental, sem ordem de longo-alcance, que ele denominou de spin-líquido (ou *resonating valence bond* - RVB). Este estado RVB foi proposto, independentemente, por Kivelson, Rokhsar e Sethna [21], onde a principal diferença está nas formas das ligações (dímeros) que são neste último caso do tipo de curto alcance. Temos que a ausência da ordem em $T = 0$ numa rede triangular deve-se sobretudo a existência da frustração, que acrescida das flutuações quânticas pode levar o sistema a um novo estado desordenado (RVB), que é diferente do paramagnetismo previsto no caso do modelo de Ising (clássico). O estado RVB é importante na descrição das propriedades dos supercondutores em altas temperaturas, devido a existência de um *gap* de energia ocasionado por formação de estruturas de dímeros e plaquetas correlacionados.

Muitos estudos têm indicado uma ordem magnética (AF) em $T = 0$ para o modelo de Heisenberg $-1/2$ numa rede quadrada [16],[22], o que torna relevante estudar o ordenamento AF nos planos de CuO_2 nos compostos supercondutores de altas temperaturas. Foi mostrado que a diferença de energia entre os estados antiferromagnético (AF) e paramagnético (P) é muita pequena (aproximadamente 0, 2%), portanto, é de grande interesse testar a estabilidade da ordem AF neste tipo de modelo introduzindo novos parâmetros que destroem a ordem magnética, como, por exemplo, dopagem, campo magnético, frustração, etc. Medidas recentes [24] têm mostrado que o estado RVB é o responsável pelo

transporte de carga nos planos de CuO_2 no composto supercondutor $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, onde o ponto crítico quântico (PCQ), que separa a fase AF do estado RVB, está associado ao efeito de dopagem.

Chandra e Doucot [25] foram os primeiros pesquisadores a investigar o estado spin-líquido, onde os spins se comportam com uma onda de spin, no qual usaram como protótipo o modelo de Heisenberg antiferromagnético frustrado numa rede quadrada, baseado no seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + J_2 \sum_{\langle i,i' \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i'} + J_2 \sum_{\langle j,j' \rangle} \vec{S}_j \cdot \vec{S}_{j'}, \quad (4.1)$$

sendo que J_1 e J_2 são as interações de primeiro e segundo vizinho, respectivamente e os índices i e j denotam os sítios das sub-redes A e B, de acordo com as configurações de ordenação do sistema de spins mostradas pela Fig.(4.4).

Usando a teoria de ondas de spin convencional (linear), calcularam as flutuações quânticas em $T = 0$ dos parâmetros de ordem das fases antiferromagnética (AF) e colinear (C), como uma função do spin S e do parâmetro de frustração dado por $\alpha = J_2/J_1$. Observaram que para spin finito ($S < \infty$) existe um estado intermediário, denotado de RVB, entre as fases AF e C. No limite clássico ($S \rightarrow \infty$) o estado RVB é destruído por causa da ausência de flutuações quânticas, sendo apenas observado uma transição de fase entre as fases AF e C para o valor crítico $\alpha_c = 1/2$ do parâmetro de frustração.

Kohmoto e Friedel [26] obtiveram um diagrama de fase onde a fase spin-líquido aparece como uma fase intermediária entre as fases antiferromagnética e a fase supercondutora no estado fundamental, obtido a partir de um modelo de Heisenberg antiferromagnético para uma rede quadrada. Neste trabalho foram obtidas duas fases spin líquido (SL1 e SL2) em baixa e altas temperaturas, sendo que em baixa temperatura a fase spin-líquido é intermediária entre as fases antiferromagnética e supercondutora.

Recentemente, Bergman e colaboradores [27] estudaram o modelo de Heisenberg antiferromagnético frustrado numa rede pyrochlore, que é uma rede tridimensional com

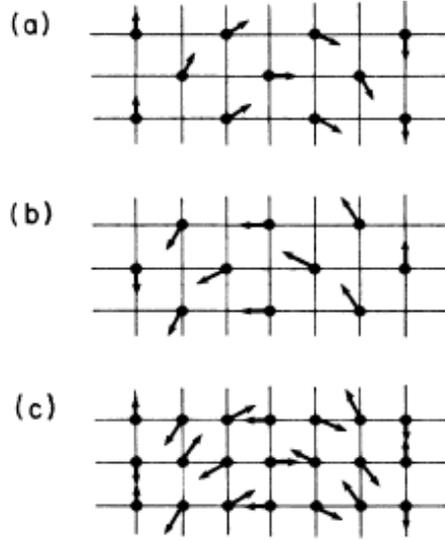


Figura 4.4: Exemplo de esquema da proposta de ordem spin-líquido dadas pela configuração das subredes A e B. Caso (a) subrede A; caso (b) subrede B e no caso (c) a configuração com as redes A e B.

uma estrutura básica tetraédrica, como ilustra a Fig.(4.5). Neste trabalho, foi proposto a existência de uma transição da fase antiferromagnética para o estado spin líquido.

Os compostos óxidos de vanádio $\text{Li}_2\text{VO}(\text{Si},\text{Ge})\text{O}_4$ são candidatos para serem descritos pelo modelo de Heisenberg de spin $1/2$ com interações entre primeiros e segundos vizinhos (modelo $J_1 - J_2$) numa rede quadrada [28]. Através de medidas experimentais de ressonância magnética nuclear (RMN), Melzi e colaboradores [29] encontraram evidência para o estado ordenado dos spins na fase colinear. Do comportamento da susceptibilidade $\chi(T)$, a temperatura crítica de Curie-Weiss dada por $T_c = J_1 + J_2$ foi estimada em $T_c \simeq (8.2 \pm 1)K$ [30]. Combinando esta informação com a posição do ponto máximo do calor específico do composto $\text{Li}_2\text{VOSiO}_4$, Melzi e colaboradores [29] estimaram o parâmetro de frustração em $\alpha \simeq 1.1$. Estes óxidos de vanádio são caracterizados por apresentar estruturas de camadas contendo íons V^{4+} ($3d^1$) com spin localizado de valor $S = 1/2$. Na Fig.(4.6) apresentamos a estrutura destes óxidos, que são formados por íons V^{4+} numa rede quadrada, com $\alpha \simeq 1.1$ e estado fundamental colinear [29]. Cálculos de

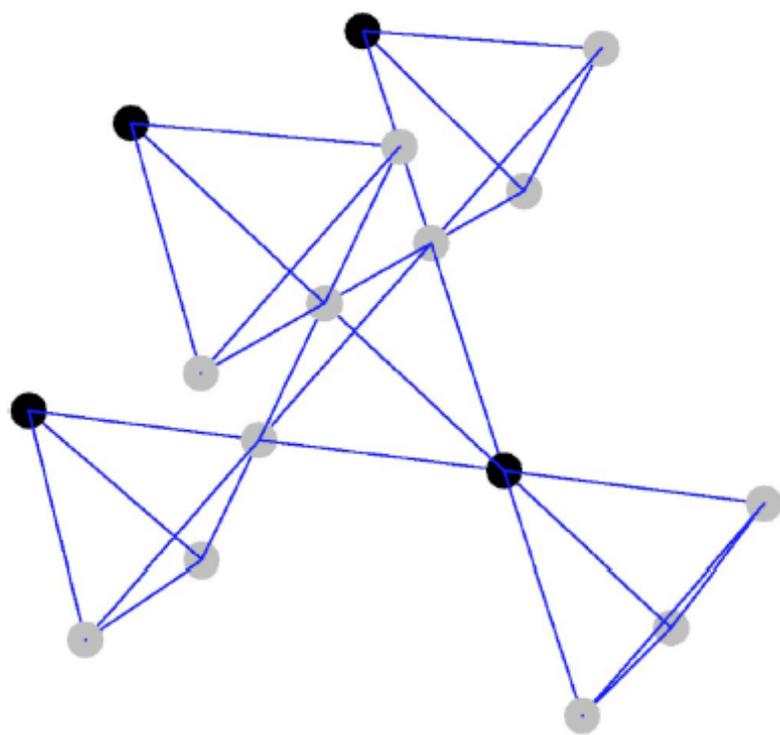


Figura 4.5: Esquema de uma rede pyrochlore. Os sítios são localizados nos vértices dos tetraedros.

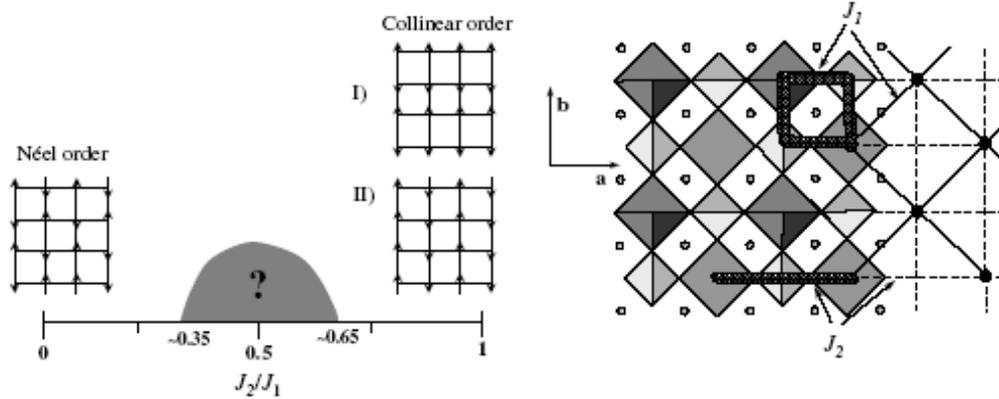


Figura 4.6: A esquerda temos o diagrama de fase esquemático do modelo $J_1 - J_2$ para uma rede quadrada. Na região $0.35 \leq \alpha \leq 0.65$ a natureza do estado fundamental (RVB?) não é bem estabelecido. A direita temos a estrutura dos compostos de óxidos de vanádio projetado ao longo da direção $[001]$.

estrutura de banda [31] tem estimado para o composto $\text{Li}_2\text{VO}\text{SiO}_4$ os seguintes valores $J_1 + J_2 \simeq 9.5 \pm 1.5$ e $\alpha = J_2/J_1 \simeq 12$.

Usando expansão em série em altas temperaturas [32] para o modelo $J_1 - J_2$ numa rede quadrada, a susceptibilidade $\chi(T)$ e o calor específico $C(T)$ foram calculados. Comparando os resultados teóricos com as medidas experimentais do composto $\text{Li}_2\text{VO}\text{SiO}_4$, obtido pela técnica RMN [30], foram estimadas $J_1 = (1.25 \pm 0.5)K$ e $J_2 = (5.95 \pm 0.2)K$, ou seja, $\alpha \simeq 5$ que difere significamente do valor $\alpha = 12$ previsto por cálculos de teoria de banda [31]. Apesar das discrepâncias dos valores obtidos para o parâmetro de frustração α referentes a estes compostos de óxido de vanádio, todos indicam que $\alpha > 1$, o que corresponde teoricamente no modelo $J_1 - J_2$ a fase colinear. Em $T = T_c$ temos uma transição de fase de segunda ordem entre as fases colinear (fase ordenada) e paramagnética (desordenada). A análise de RMN no espectro dos íons ^7Li e ^{29}Si abaixo de T_c mostra que a ordem é colinear [29] e, portanto, a aplicação do campo externo H destrói este estado ordenado, conforme mostramos na Fig.(4.7). A dependência da magnetização de sub-rede em função da temperatura e campo nulo é caracterizado por um expoente crítico $\beta \simeq 0.236$, muito semelhante ao valor obtido por Bramwell e Hodsworth [33] para

o modelo XY quase-2d, ou seja, podemos tratá-lo numa rede quadrada com uma pequena anisotropia no exchange XY.

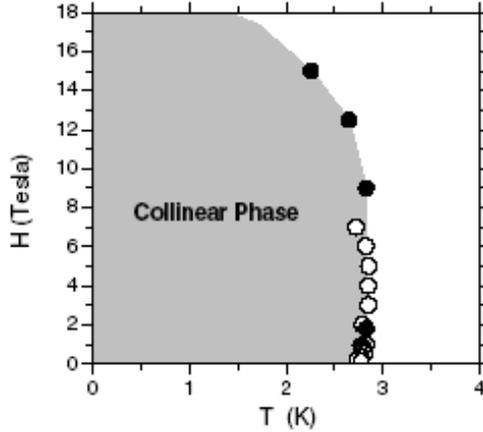


Figura 4.7: Diagrama de fase no plano $T-H$ para o composto $\text{Li}_2\text{VO SiO}_4$. A temperatura crítica T_c foi estimada da medida susceptibilidade (círculos brancos) ou da relaxação de RMN (círculos pretos) [29].

O comportamento da magnetização em baixas temperaturas pode ser comparado com os resultados teóricos do modelo $J_1 - J_2$, com uma pequena interação entre planos J_\perp . Analisando as medidas experimentais de $m(T)$ em baixas temperaturas estima-se que $10^{-4} \leq J_1/(J_1 + J_2) \leq 10^{-2}$. Na Fig.(4.8) apresentamos o comportamento da magnetização normalizada com o valor do ponto zero em função da temperatura reduzida para os compostos de óxido de vanádio [33]³.

Do ponto de vista teórico, dependendo do valor do parâmetro de frustração α do modelo $J_1 - J_2$ numa rede quadrada, o calor específico $C(T)$ em baixas temperaturas apresenta dois tipos de comportamentos: i) lei de potência do tipo $C(T) \approx T^2$ nas regiões ordenadas AF ($\alpha \lesssim 0.38$) e colinear ($\alpha \gtrsim 0.6$); ii) comportamento exponencial do tipo $\exp(-\Delta/T)$ na região $0.38 \lesssim \alpha \lesssim 0.6$ (estado supostamente identificado como spin-

³Para uma revisão geral sobre modelos frustrados, recomendamos os artigos do volume 16, Nº11 do periódico *Journal of Physics: Condensed Matter* (2004), onde em particular, o estado spin-líquido foi discutido. Este periódico representa os resultados da conferência *Highly frustrated magnetism*, realizado em 2003, Grenoble, França.

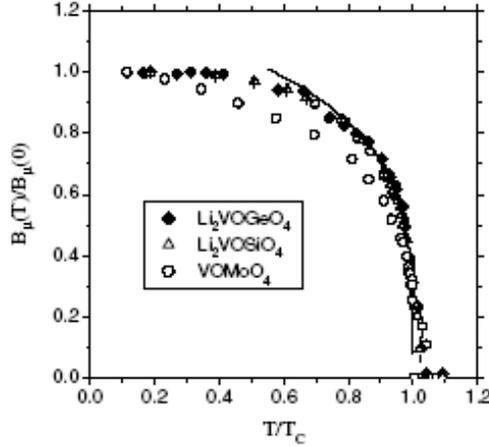


Figura 4.8: Dependência da magnetização normalizada de sub-rede com a temperatura reduzida T/T_c para os compostos VOMoO_4 , $\text{Li}_2\text{VOSiO}_4$ e $\text{Li}_2\text{VOGeO}_4$. A curva contínua mostra o comportamento da magnetização para um expoente crítico $\beta = 0.235$ do modelo $J_1 - J_2$ quase-2d.

líquido ou RVB) [34], onde Δ é proporcional ao *gap* de energia entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado. No limite $\alpha \rightarrow \alpha_{1c}^+$, o *gap* vai a zero com uma lei de potência $\Delta \simeq (\alpha - \alpha_{1c})^\theta$, onde θ é um expoente dependente do modelo.

No modelo de Heisenberg AF em 1d as propriedades, em baixas temperaturas, apresentam comportamentos distintos quanto ao valor do spin. No caso de spin inteiro temos um *gap* no seu espectro de excitação, enquanto o spin semi-inteiro não existe *gap*. Este resultado é conhecido como conjectura de Haldane [35]. Read e Sachdev [36] tem estudado o modelo de Heisenberg AF em 2d prevendo um estado desordenado dependente do valor do spin. Moukourni [37] tem estudado recentemente o modelo $J_1 - J_2$ de spin $S = 1$, onde o estado com *gap* RVB foi previsto. No limite clássico ($S \rightarrow \infty$) o estado RVB é destruído [25].

Para um sistema tridimensional, em particular para uma rede cúbica simples, Pinettes e Diep [38] estudaram o modelo de Heisenberg frustrado $J_1 - J_2$ clássico, usando simulação de Monte Carlo. Deste estudo é obtido diagrama de fase apresentado na Fig.(4.9). Neste diagrama são observados transições de segunda ordem, entre as fases AF e P ($J_2/J_1 <$

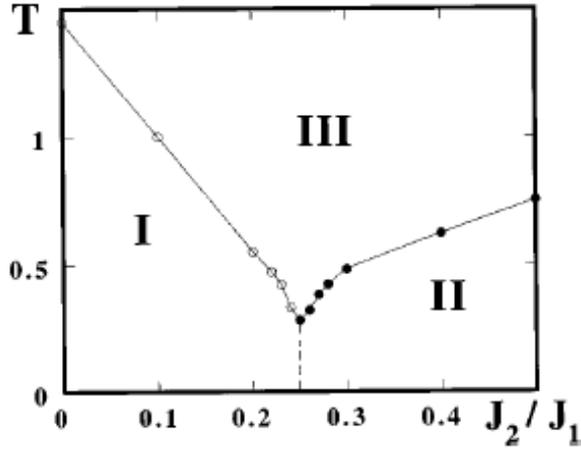


Figura 4.9: Diagrama de fase no plano $T - J_2/J_1$. As regiões I, II, e III correspondem as fase antiferromagnética (AF), laminar (L) e paramagnética (P). Os pontos vazados para $J_2/J_1 < 0.25$ indicam transição de segunda ordem, enquanto que os pontos pretos indicam transição de primeira ordem na região $J_2/J_1 > 0.25$. A linha pontilhada o valor crítico $J_2/J_1 = 0.25$ da transição entre as fases AF e L.

0.25), de primeira ordem na transição L-P ($J_2/J_1 > 0.25$). O ponto crítico na transição entre as fases AF e L é observado o ponto crítico $\alpha = 0.25$, que é exato dado por $\alpha = z_1/2z_2$, onde z_1 e z_2 são as quantidades de primeiros e segundos vizinhos, respectivamente.

Recentemente, Schmidt e colaboradores [39] estudaram a influência da frustração e flutuações quânticas, na ordem magnética do modelo de Heisenberg antiferromagnético frustrado, no estado fundamental, numa rede cúbica de corpo centrado, usando o método da diagonalização exata (ED). Deste trabalho é obtido o ponto crítico $\alpha_c = J_2/J_1 = 0.7$, sendo que para $\alpha > 0.7$ é observada uma região do estado laminar. Porém, em nenhuma literatura é feito o tratamento para uma rede cúbica do modelo de Heisenberg antiferromagnético frustrado. Diante disso é que se propõem o estudo deste modelo neste capítulo, para uma rede cúbica simples, a fim de investigar a termodinâmica desse sistema magnético a partir da determinação de diagramas de fases.

Vários trabalhos experimentais desenvolvidos por Coldea [40] e Kenzelmann [41] referentes a dinâmica de spins de baixa energia baseado no material Cs_2CuCl_4 , que é um

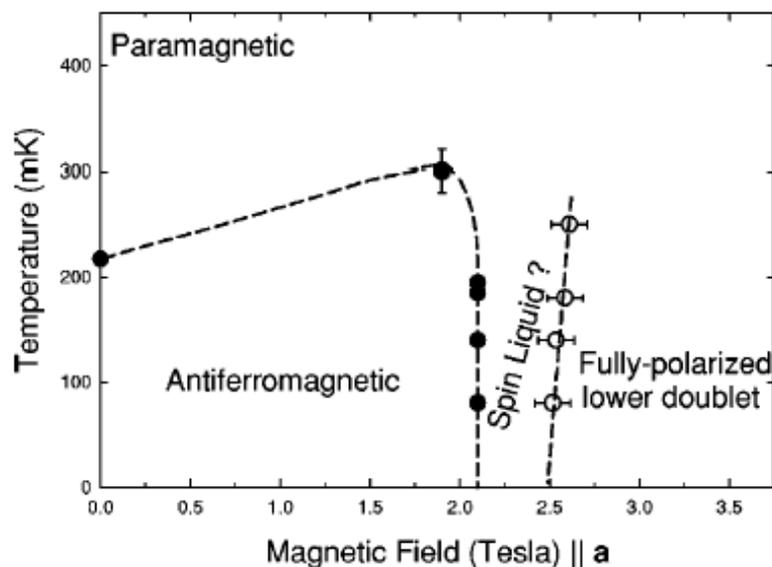


Figura 4.10: Diagrama da temperatura crítica em função da intensidade do campo externo. É proposto a existência do estado spin líquido, a partir dos resultados experimentais para o material Cs_2CuCl_4 [41].

sistema antiferromagnético, ver Fig.(4.10), têm mostrado a possibilidade da existência da fase spin líquido para este material em duas dimensões. Estes recentes resultados experimentais têm motivado vários novos trabalhos.

Como podemos observar existem vários trabalhos que estudam o modelo de Heisenberg antiferromagnético, que propõem a existência do estado spin líquido. Neste trabalho também vamos estudar a criticalidade do modelo de Heisenberg antiferromagnético em duas e três dimensões, contribuindo também para o questionamento da existência de um estado com as características do spin-líquido, haja visto que neste trabalho é observado nos diagramas de fase uma fase intermediária entre as fases antiferromagnética e superantiferromagnética para uma rede quadrada, a qual propomos que seja a fase spin-líquido. Porém para o sistema numa rede cúbica não é observado o estado spin-líquido.

4.1.1 Técnica do operador diferencial

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 [42] para o ferromagnetismo e posteriormente por Néel [43] para o antiferromagnetismo. 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 universais⁴ $\{\beta = 1/2, \gamma = 1, \delta = 3, \alpha = 0, \eta = 0, \nu = 1/2\}$ independentes da dimensão- d e simetria do Hamiltoniano.

Várias outras técnicas tem sido usada para estudar modelos magnéticos, entre essas podemos citar a Teoria de Campo Efetivo (*Effective-Field Theory* - **EFT**). Esta teoria é baseada em aglomerados finito com N sítios centrais, com uma quantidade de n vizinhos que indica a topologia da rede e também a dimensão d espacial. 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.

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

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{\text{Tr} \left[\hat{\mathcal{O}} \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}}) \right]}{Z}, \quad (4.2)$$

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 $\text{Tr}\{\dots\}$

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

é o funcional traço no espaço dos spins associado ao Hamiltoniano $\widehat{\mathcal{H}}$.

Dado o Hamiltoniano $\widehat{\mathcal{H}}$ 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 rescrever o Hamiltoniano $\widehat{\mathcal{H}}$ na forma fatorada

$$\widehat{\mathcal{H}} = \widehat{\mathcal{H}}_{\Omega} + \widehat{\mathcal{H}}_{\Omega'}, \quad (4.3)$$

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

Escolhendo uma grandeza que contenha apenas variáveis de spin do aglomerado Ω , ou seja, $\mathcal{O}(\Omega)$. Caso $\widehat{\mathcal{H}}_{\Omega}$ e $\widehat{\mathcal{H}}_{\Omega'}$ comutem, isto é, $[\widehat{\mathcal{H}}_{\Omega}, \widehat{\mathcal{H}}_{\Omega'}] = 0$, o traço da Eq.(4.2) 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 $Tr'_{\Omega'}$, acompanhado da fatoração

$$\exp \left[-\beta(\widehat{\mathcal{H}}_{\Omega} + \widehat{\mathcal{H}}_{\Omega'}) \right] = \exp \left[-\beta\widehat{\mathcal{H}}_{\Omega} \right] \exp \left[-\beta\widehat{\mathcal{H}}_{\Omega'} \right], \quad (4.4)$$

segundo podemos definir o traço $Tr_{\Omega} = Tr'_{\Omega'} Tr_{\Omega}$, e desta maneira, obtemos o valor médio a partir da Eq.(4.3) por

$$\langle \mathcal{O}(\Omega) \rangle = \frac{Tr'_{\Omega'} \exp \left(-\beta\widehat{\mathcal{H}}_{\Omega'} \right) Tr_{\Omega} \left[\widehat{\mathcal{O}}(\Omega) \exp \left(-\beta\widehat{\mathcal{H}}_{\Omega} \right) \right]}{Z}. \quad (4.5)$$

onde separamos os traços para termo. Multiplicando o numerador da Eq.(4.5) por um fator unidade do tipo

$$1 \equiv \frac{Tr \exp \left(-\beta\widehat{\mathcal{H}} \right)}{Tr \exp \left(-\beta\widehat{\mathcal{H}} \right)} = \frac{Tr \exp \left(-\beta\widehat{\mathcal{H}} \right)}{Tr'_{\Omega'} \exp \left(-\beta\widehat{\mathcal{H}}_{\Omega'} \right) Tr_{\Omega} \exp \left(-\beta\widehat{\mathcal{H}}_{\Omega} \right)}, \quad (4.6)$$

ficaremos com

$$\langle \mathcal{O}(\Omega) \rangle = \frac{1}{Z} \frac{Tr_{\Omega} \left[\widehat{\mathcal{O}}(\Omega) \exp(-\beta \widehat{\mathcal{H}}_{\Omega}) \right] Tr \exp(-\beta \widehat{\mathcal{H}})}{Tr_{\Omega} \exp(-\beta \widehat{\mathcal{H}}_{\Omega})}, \quad (4.7)$$

combinando adequadamente mediante as propriedades de separação do traço e do Hamiltoniano, obtemos

$$\langle \mathcal{O}(\Omega) \rangle = \frac{1}{Z} Tr \left\{ \frac{Tr_{\Omega} \left[\widehat{\mathcal{O}}(\Omega) \exp(-\beta \widehat{\mathcal{H}}_{\Omega}) \right]}{Tr_{\Omega} \exp(-\beta \widehat{\mathcal{H}}_{\Omega})} \right\} \exp(-\beta \widehat{\mathcal{H}}). \quad (4.8)$$

Comparando a Eq.(4.8) com a definição dada pela Eq.(4.2), teremos que o valor médio da grandeza $\widehat{\mathcal{O}}(\Omega)$ fica reduzido ao cálculo parcial no aglomerado finito, ou seja,

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \left\langle \frac{Tr_{\Omega} \left[\widehat{\mathcal{O}}(\Omega) \exp(-\beta \widehat{\mathcal{H}}_{\Omega}) \right]}{Tr_{\Omega} \exp(-\beta \widehat{\mathcal{H}}_{\Omega})} \right\rangle. \quad (4.9)$$

Podemo ainda generalizar a Eq.(4.9) 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 mesmos procedimentos anteriores obtemos

$$\langle A(\Omega')B(\Omega) \rangle = \left\langle A(\Omega') \frac{Tr \left[B(\Omega) \exp(-\beta \widehat{\mathcal{H}}_{\Omega}) \right]}{Tr_{\Omega} \exp(-\beta \widehat{\mathcal{H}}_{\Omega})} \right\rangle. \quad (4.10)$$

A Eq.(4.10) é exata para sistemas clássicos, pois neste limite as variáveis de spin presentes no Hamiltoniano comutam. Por outro lado, para modelos quânticos, a Eq.(4.10) não é mais exata uma vez que $[\widehat{\mathcal{H}}_{\Omega}, \widehat{\mathcal{H}}_{\Omega'}] \neq 0$. Sá Barreto e Fittipaldi [44] tem aplicado de forma aproximada a Eq.(4.10) para estudar as propriedades termodinâmicas e a criticalidade do modelo de Ising -1/2 com campo transversal.

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

Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_N = -J \sum_{\langle i \neq j \rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad (4.11)$$

onde J ($J > 0$ e $J < 0$ corresponde aos sistemas ferromagnético e antiferromagnético, respectivamente) é a interação de troca, $\sigma_i = \pm 1$ 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 fim de ilustração usaremos um aglomerado com um spin (ou aglomerado com um sítio central), onde da Eq.(4.11) reescrevemos o Hamiltoniano para este aglomerado na forma

$$\mathcal{H}_1 = -J \sigma_1 \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}}, \quad (4.12)$$

onde $\vec{\delta}$ 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.(4.9), usando $\mathcal{O} = \sigma_1$, ou seja,

$$m = \langle \sigma_1 \rangle = \left\langle \tanh \left(K \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}} \right) \right\rangle, \quad (4.13)$$

sendo que $K = \beta J$.

Esta identidade ficou sendo conhecida como identidade de Callen e Suzuki [45],[46], 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.(4.13) como uma média no argumento, obtendo assim uma expressão auto-consistente para a magnetização tipo Curie-Weiss. A identidade de Callen-Suzuki foi, primeiramente, usada para se obter funções de correlações e temperatura crítica do modelo de Ising 2D usando o método da expansão em série de altas temperaturas. Diversos autores, tais como: Matsudaira [47], Frank e Mitran [48], Tanaka e Uryû [49], Zhang [50], têm usado 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 [51],

tem como ponto de partida o uso a identidade

$$\exp(\alpha D_x)F(x) = F(x + \alpha), \quad (4.14)$$

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

Definindo $F(x) = \tanh(x)$, a Eq.(4.13) ficará reescrita na forma

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^z \exp(K\sigma_{1+\vec{\delta}} D_x) \right\rangle F(x)|_{x=0}. \quad (4.15)$$

Usando a identidade de van der Waerdan para a variável de spin $\sigma_i = \pm 1$, dado por

$$e^{\varphi\sigma_i} = \cosh(\varphi) + \sigma_i \sinh(\varphi), \quad (4.16)$$

a Eq.(4.15) ficará

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^z \left[\cosh(KD_x) + \sigma_{1+\vec{\delta}} \sinh(KD_x) \right] \right\rangle F(x)|_{x=0}. \quad (4.17)$$

Vamos desenvolver a Eq.(4.17) 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 expressão para a magnetização:

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^4 \left[\alpha_x + \sigma_{1+\vec{\delta}} \beta_x \right] \right\rangle F(x)|_{x=0}, \quad (4.18)$$

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.(4.18) ficará reduzida

a forma

$$m = A_1(K) \left\langle \frac{1}{4} (\sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4 + \sigma_5) \right\rangle + A_3(K) \left\langle \frac{1}{4} (\sigma_2\sigma_3\sigma_4 + \sigma_2\sigma_3\sigma_5 + \sigma_3\sigma_4\sigma_5 + \sigma_2\sigma_4\sigma_5) \right\rangle, \quad (4.19)$$

sendo

$$A_1 = 4\alpha_x^3 \beta_x F(x)|_{x=0} = \frac{1}{2}(t_4 + 2t_2) \quad (4.20)$$

e

$$A_3 = 4\alpha_x \beta_x^3 F(x)|_{x=0} = \frac{1}{2}(t_4 - 2t_2), \quad (4.21)$$

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.(4.14). Aplicando a propriedade da simetria translacional, a Eq.(4.19) ficará sendo dada por

$$m = A_1(K) + A_3(K)\Gamma, \quad (4.22)$$

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

$$\Gamma = \langle \sigma_i \sigma_j \sigma_l \rangle \quad (4.23)$$

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

A Eq.(4.22) 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 correlações. Este fato é semelhante ao que acontece no formalismo da função de Green de Zubarev. Assim sendo, algum tipo de aproximação (para o desacoplamento das funções de correlações) deve ser usada. A aproximação mais simples consiste em desprezar as correlações entre os spins (*RPA-random phase approximation*), ou seja,

$$\langle \sigma_i \sigma_j \cdots \sigma_l \rangle \simeq \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \cdots \langle \sigma_l \rangle, \quad (4.24)$$

sendo $i \neq j \neq l$.

Usando a aproximação dada na Eq.(4.24) na Eq.(4.22) ficaremos com seguinte resultado para a magnetização:

$$m = \sqrt{\frac{1 - A_1(K)}{A_3(K)}}. \quad (4.25)$$

A temperatura crítica é obtida da Eq.(4.25) fazendo $m \rightarrow 0$, resultando na expressão dada por

$$A_1(K_c) = 1, \quad (4.26)$$

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.(4.24) e obter a equação de estado dado por

$$m = [\alpha_x + m\beta_x]^z F(x)|_{x=0}. \quad (4.27)$$

No limite $m \rightarrow 0$, da Eq.(4.27) encontramos T_c resolvendo numericamente a expressão dada por

$$A_1 = z\alpha_x^{z-1}\beta_x F(x)|_{x=0} = 1. \quad (4.28)$$

Para a rede cúbica simples ($z = 6$) obtemos da Eq.(4.28) 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.(4.28) representa um grande avanço em relação MFA. A 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.(4.23). Por exemplo, Kaneyoshi e colaboradores [53] propuseram um desacoplamento, em que se leva em consideração as flutuações dos spins ao redor do spins σ_1 na forma dada por

$$\sigma_i = \langle \sigma_i \rangle + \lambda (\sigma_1 - \langle \sigma_i \rangle), \quad (4.29)$$

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,

$$T_c = \frac{2}{\ln\left(\frac{z}{z-2}\right)}. \quad (4.30)$$

Desejando obter melhores valores de T_c , mas mantendo a simplicidade de desacoplamento da aproximação RPA, vamos aumentar o tamanho do aglomerado para dois spins, desta maneira teremos o seguinte Hamiltoniano para o caso Ising

$$\mathcal{H}_N = -J\sigma_1\sigma_2 - J\sigma_1 \sum_{\vec{\delta}_1}^{z-1} \sigma_{1+\vec{\delta}_1} - J\sigma_2 \sum_{\vec{\delta}_2}^{z-1} \sigma_{2+\vec{\delta}_2}, \quad (4.31)$$

logo a magnetização definifa por $m = \frac{1}{2} \langle \sigma_1 + \sigma_2 \rangle$ será dada por

$$m = \left\langle \frac{\sinh(C_1 + C_2)}{\cosh(C_1 + C_2) + \exp(-2K) \cosh(C_1 + C_2)} \right\rangle, \quad (4.32)$$

sendo

$$C_p = K \sum_{\vec{\delta}_p}^{z-1} \sigma_{p+\vec{\delta}_p}, \quad (p = 1, 2). \quad (4.33)$$

Definindo a função

$$G(x_1, x_2) = \frac{\sinh(x_1 + x_2)}{\cosh(x_1 + x_2) + \exp(-2K) \cosh(x_1 + x_2)}, \quad (4.34)$$

generalizamos a propriedade do operador diferencial, ou seja,

$$\exp(a_1 D_{x_1} + a_2 D_{x_2}) G(x_1, x_2) = G(x_1 + a_1, x_2 + a_2), \quad (4.35)$$

onde $D_\nu = \frac{\partial}{\partial \nu}$ ($\nu = x_1, x_2$) é o operador diferencial. Aplicando a Eq.(4.35) na Eq.(4.32) ficaremos com a seguinte expressão para a magnetização:

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}_1}^{z-1} \exp(K D_{x_1} \sigma_{1+\vec{\delta}_1}) \prod_{\vec{\delta}_2}^{z-1} \exp(K D_{x_2} \sigma_{2+\vec{\delta}_2}) \right\rangle G(x_1, x_2)|_{x_1, x_2=0}. \quad (4.36)$$

Uma análise mais cuidadosa na Eq.(4.36) 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.(4.36) resultando

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}_1}^{z-z'-1} \exp(K D_{x_1} \sigma_{1+\vec{\delta}_1}) \prod_{\vec{\delta}_2}^{z-z'-1} \exp(K D_{x_2} \sigma_{2+\vec{\delta}_2}) \prod_{\vec{\delta}}^{z'} \exp [K (D_{x_1} + D_{x_2}) \sigma_{\vec{\delta}}] \right\rangle G(x_1, x_2)|_{x_1, x_2=0}. \quad (4.37)$$

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.(4.11) 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.(4.37) obtemos a expressão

$$m = (\alpha_{x_1} + m\beta_{x_1})^{z-z'-1} (\alpha_{x_2} + m\beta_{x_2})^{z-z'-1} (\alpha_{x_1 x_2} + m\beta_{x_1 x_2})^{z'} G(x_1, x_2)|_{x_1, x_2=0}, \quad (4.38)$$

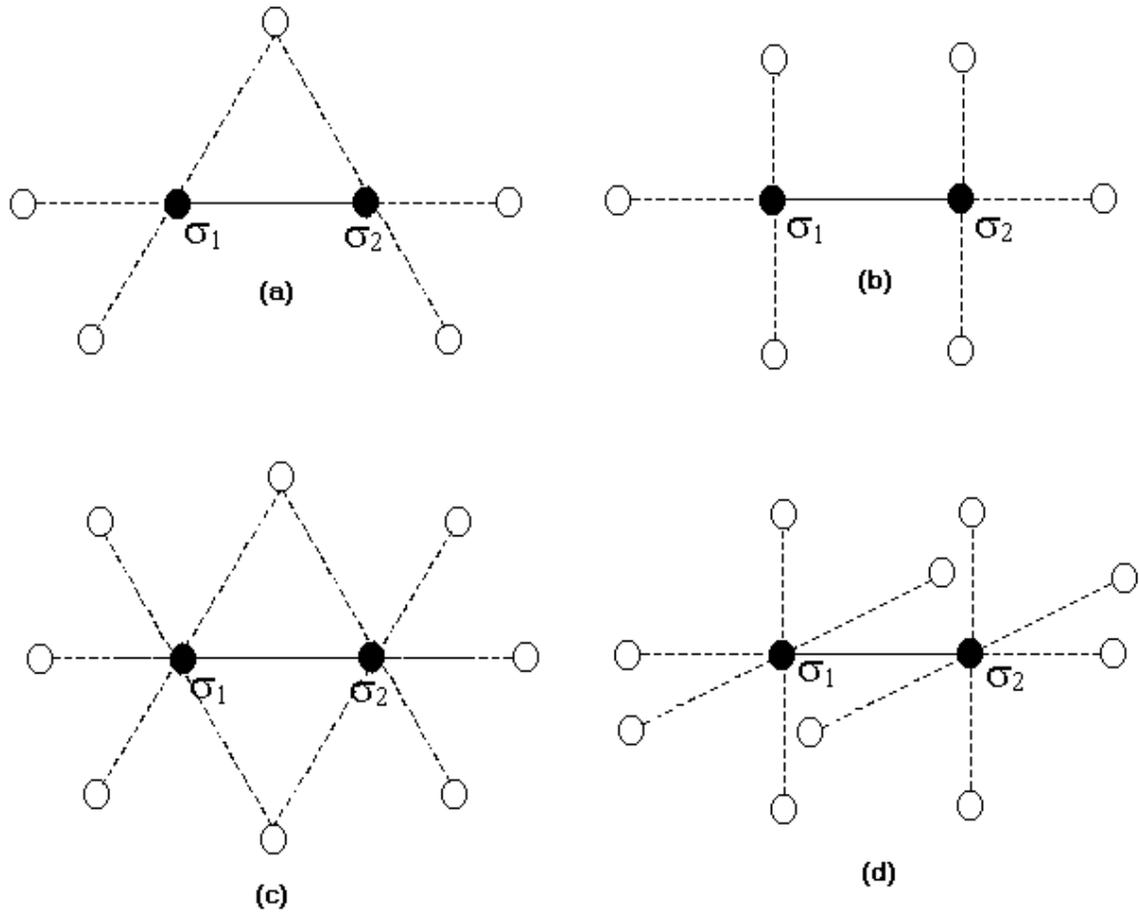


Figura 4.11: Estrutura topológica das redes: (a) kagomé, (b) quadrada, (c) triangular e (d) cúbica simples.

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.(4.38), na teoria de campo efetivo com aglomerado de dois spins (EFT-2), resolvendo numericamente a seguinte expressão:

$$A_1^{z,z'}(K_c) = 1, \quad (4.39)$$

sendo

$$A_1^{z,z'}(K_c) = \left[2(z - z' - 1)\alpha_{x_1}^{z-z'-2}\alpha_{x_2}^{z-z'-1}\beta_{x_1} + z'\alpha_{x_2}^{z-z'-1}\alpha_{x_1}^{z-z'-1}\alpha_{x_1x_2}^{z'-1}\beta_{x_1x_2} \right] G(x_1, x_2)|_{x_1, x_2=0}. \quad (4.40)$$

Da Eq.(4.39) obtemos T_c para diversas topologias de redes. Na tabela-4.1 apresentamos os resultados de T_c obtido por EFT-1 e EFT-2, que são comparadas com 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 em torno da 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 *finite-size-scaling* 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 $N > 2$.

Anos atrás um eficiente e simples esquema de grupo de renormalização no espaço real, para tratar sistema de spins, foi proposto por Indekeu, Maritan e Stella [54]. Em contraste com os métodos similares pré-existentes, este “novo” esquema utiliza conceitos típicos das teorias clássicas de transição de fase (aproximação de campo médio), contudo dentro de uma estratégia moderna baseada em procedimento de *scaling* à luz da teoria de grupo de renormalização. Este esquema assemelha-se, em espírito, ao método do grupo de renormalização Nightingale [55], o qual tem por base a comparação de sistema fini-

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 4.1: Valores da temperaturas 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).

tos de tamanhos diferentes. Diante de sua conexão com aproximação clássica de campo médio, o método proposto por Indekeu e colaboradores [54] recebeu a denominação de grupo de renormalização de campo médio (MFRG - *mean field renormalization group*). Em particular, além de sua simplicidade, o método MFRG oferece grande vantagem de fornecer bons resultados para os parâmetros críticos, sem grandes esforços computacionais. Temos ainda que o método MFRG remove restrições e limitações inerentes às teorias de campo médio, como, por exemplo: i) prevê o correto comportamento crítico de sistema unidimensionais ($T_c = 0$); ii) obtém valores (não clássicos) fisicamente aceitáveis para os expoentes críticos.

Por outro lado, como o método MFRG baseia-se na aproximação de campo médio usual, onde auto-correlação e flutuações de spins são desprezados, a estrita criticalidade do sistema é perdida e a dimensão real do modelo é apenas, parcialmente, incorporada, através do número de coordenação da rede. Assim sendo o método MFRG quando aplicadas em redes com mesmo número de coordenação, mas topologias diferentes, revela-se inadequado. Baseado no esquema de MFRG, mas fazendo uso da aproximação de campo efetivo, Fittipaldi [56] propôs um novo esquema de grupo de renormalização na aproximação de campo efetivo (EFRG - *effective-field renormalization group*). Como foi mostrado, anteriormente, o uso da teoria de campo efetivo em aglomerado com dois spins (EFT-2) já é capaz de fazer distinção da topologia da rede.

Na metodologia EFRG, para os spins externos ao aglomerado com N spins é assumido ser igual a um campo de quebra de simetria (magnetização de superfície) denotado por

b_N . Para exemplificar, vamos considerar aglomerados com $N' = 1$ e $N = 2$ spins, cujas equações de estados para o modelo de Ising-1/2 são dadas, respectivamente, por

$$m_{N'}(K', b') = [\alpha'_x + b'\beta'_x]^z F(x)|_{x=0} \quad (4.41)$$

e ainda

$$m_N(K, b) = (\alpha_{x_1} + b'\beta_{x_1})^{z-z'-1} (\alpha_{x_2} + b'\beta_{x_2})^{z-z'-1} (\alpha_{x_1x_2} + b'\beta_{x_1x_2})^{z'} G(x_1, x_2)|_{x_1, x_2=0}, \quad (4.42)$$

onde $K'(K)$ é o acoplamento com $N' = 1(N = 2)$ spins. Próximo da temperatura crítica os campos $b(b') \rightarrow 0$, sendo assim, as Eqs.(4.41),(4.42) ficarão reescrita até a primeira ordem em relação ao campos de simetria, nas formas

$$m_{N'}(K', b') = A_{1N'}(K')b' \quad (4.43)$$

e

$$m_N(K, b) = A_{1N'}(K)b. \quad (4.44)$$

Das Eqs.(4.43),(4.44) obtemos T_c usando EFT-1 e EFT-2 fazendo $b' = m_{N'}$, $b = m_N$ e $K' = K = K_c$. Das idéias de grupo de renormalização, as magnetizações se escalam na forma

$$m_{N'}(K', b') = l^{d-Y_h} m_{N'}(K, b), \quad (4.45)$$

onde $l = (N/N')^{1/d}$ é o fator de escala. Assumindo que os campos de simetria se escalam (hipótese) da mesma forma que a Eq.(4.45), obtemos a equação de fluxo (relação entre K' e K), substituindo as Eqs.(4.43),(4.44) na Eq.4.45, que será dada por

$$A_{1N'}(K') = A_{1N'}(K). \quad (4.46)$$

Observe que a Eq.(4.46) é independente do valor do expoente crítico magnético Y_h . Da Eq.(4.46) obtemos a temperatura crítica (ponto fixo) fazendo $K' = K = K_c$, desta

Rede	z	z'	MFRG	EFRG	Exato/Monte Carlo
Hexagonal	3	0	1.820	1.588	1.519
Kagomé	4	1	2.882	2.083	2.143
Quadrada	4	0	2.882	2.974	2.269
Triangular	6	2	4.926	4.101	3.641
Cúbica Simples	6	0	4.926	4.852	4.511

Tabela 4.2: Valores da temperatura crítica obtidas por MFRG [54] EFRG [56] para o modelo de Ising-1/2 em diversas topologias de redes, que são comparadas com soluções exatas e de Monte Carlo.

forma

$$A_{1N'}(K_c) = A_{1N}(K_c). \quad (4.47)$$

O expoente crítico térmico é dado por

$$y_t = \frac{\ln \left[\frac{dK'}{dK} \Big|_{K_c} \right]}{\ln(l)}, \quad (4.48)$$

sendo

$$\frac{dK'}{dK} \Big|_{K_c} = \frac{\left[\frac{\partial A_{1N}(K)}{\partial K} \right]_{K_c}}{\left[\frac{\partial A_{1N'}(K')}{\partial K'} \right]_{K_c}}. \quad (4.49)$$

Resolvendo numericamente a Eq.(4.47) para cada topologia de rede (z, z') , obtemos a temperatura crítica $T_c = K_c^{-1}$ através do método do EFRG em aglomerados com $N' = 1$ e $N = 2$ spins. Comparando com os resultados de MFRG, e confrontando com os valores exatos (ou Monte Carlo), é observado que os resultados de EFRG para T_c dados na Tabela-4.2 são qualitativamente e quantitativamente melhores do que os de MFRG, revelando a superioridade do método. Quando comparamos com os resultados rigorosos, a aproximação EFRG demonstra um excelente performance em comparação com outros métodos, principalmente quando se leva em consideração sua simplicidade.

A partir da Eq.(4.48) encontramos o expoente crítico do comprimento de correlação $\nu = 1/y_t$ para diversas redes que também são confrontadas com os valores fornecidos por

Rede	d	z	z'	MFRG	EFRG	Exato/Monte Carlo
Hexagonal	2	3	0	1.43	1.53	1.00
Kagomé	2	4	1	1.67	1.99	1.00
Quadrada	2	4	0	1.67	1.39	1.00
Triangular	2	6	2	2.31	2.66	1.00
Cúbica Simples	3	6	0	2.31	1.37	0.63

Tabela 4.3: Valores do expoente crítico obtidas por MFRG [54] EFRG [56] para o modelo de Ising-1/2 em diversas topologias de redes, que são comparadas com soluções exatas e de Monte Carlo.

MFRG e exatos (ou Monte Carlo). Os valores dados na Tabela-4.3 previstos por EFRG para ν , revelam que a exemplo de MFRG, o método viola a hipótese de universalidade. Contudo, os valores obtidos para as redes hipercúbicas (quadrada e cúbica simples; $d = z/2$) são superiores aos resultados de MFRG. Tais resultados são esperados uma vez que EFRG tem por base equações de estado de campo efetivo, que, para o cálculo dos expoentes críticos são inadequados, quando se deseja uma boa descrição da criticalidade do sistema. Para contornar essa inconsistência, somente um esquema de aglomerados maiores numa perspectiva de *finite size scaling* levará a resultados satisfatórios. Por outro lado, resultados superiores podem ser obtidos, mantendo os aglomerados pequenos, pela simples redefinição do fator de escala dado por $l = (N/N')^{1/d}$, como enfatizado por Slotte [57]. No novo fator de escala, o tamanho do aglomerado é medido através do número de interações com os spins da vizinhança do aglomerado. Tal procedimento leva, surpreendentemente, a excelentes resultados para o expoente crítico ν . Para aglomerados com $N' = 1$ e $N = 2$ spins, Slotte sugeriu o fator de escala $l = \sqrt{9d/(9d-5)}$ e com isto para $d = 3$ foram obtidos $\nu = 0.66$ e $\nu = 0.61$ nos formalismo MFRG [57] e EFRG [56], respectivamente, que estão em excelente concordância com os resultados rigorosos de Monte Carlo do qual é obtido $\nu = 0.63$.

A principal dificuldade inerente aos métodos de grupo de renormalização no espaço real, está associada aos critérios de escolha dos aglomerados, de forma a garantir a convergência do método. Como regra geral, procura-se escolher a geometria de aglomerados de modo a refletir a simetria da rede em estudo, o que de alguma forma, intro-

N/N'	MFRG	EFRG
2/1	$T_c = 2.885$ $\nu = 1.67$	$T_c = 2.794$ $\nu = 1.39$
4/1	$T_c = 2.771$ $\nu = 1.45$	$T_c = 2.697$ $\nu = 1.17$
4/2	$T_c = 2.704$ $\nu = 1.28$	$T_c = 2.640$ $\nu = 1.01$

Tabela 4.4: Valores da temperatura crítica e expoente crítico obtidas por MFRG [54] EFRG [56] para o modelo de Ising-1/2 numa rede quadrada usando tamanhos de aglomerados diferentes.

duz certo grau de arbitrariedade na escolha. A escolha da geometria dos aglomerados não garante a priori a convergência do método. Contudo, visando exemplificar a aplicação para aglomerados maiores, bem como exibir um teste de convergência, aplicamos o presente método numa rede quadrada, escolhendo um aglomerado de forma quadrada contendo quatro spins ($N = 4$). A generalização do formalismo para este aglomerado se faz obtendo-se, inicialmente, a expressão aproximada (EFT-4) para a magnetização $m = \langle \frac{1}{4}(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4) \rangle$ usando a condição de contorno adequada para o campo de quebra de simetria b na fase ferromagnética ($b_i = b \forall i$). Em primeira ordem no campo de quebra de simetria b , é obtido o coeficiente linear $A_N(K)$ e aplicando EFRG em aglomerados com N' e N (com $N > N'$) spins, a equação de fluxo é dada por

$$A_{N'}(K') = A_N(K). \quad (4.50)$$

Resolvendo numericamente a Eq.(4.50), a temperatura crítica e o expoente crítico ν são obtidos. Na tabela-4.4 apresentamos os resultados de T_c e ν obtidos por MFRG [54] para fins de comparação, sendo que os resultados são referentes a rede quadrada. No esquema EFRG (e também MFRG), os resultados indicam convergência na direção dos valores exatos. Como esperado para um esquema de grupo de renormalização, os melhores resultados são obtidos na comparação de aglomerados maiores, como revelam os resultados para $N/N' = 4/2$.

O desenvolvimento do formalismo EFRG deve-se ao fato de que para o estudo do modelo de Ising frustrado na rede quadrada, a linha de transição entre as fases ferromagnéticas (F) (ou antiferromagnética (AF)) e paramagnética (P) apresenta, espuriamente uma transição de fase de primeira ordem, para alto valor do parâmetro de frustração $\alpha < 0.5$, quando usamos EFT-1 e EFT-2, enquanto que EFRG (na relação $N/N' = 2/1$) encontra o resultado qualitativamente correto. Uma primeira tentativa de eliminar esta discrepância foi adotar o esquema de *finite size scaling* em aglomerado com $N = 4$ spins, o que de certa forma acarretará um considerável aumento de tempo computacional no cálculo das raízes de T_c e também no desenvolvimento da obtenção do coeficiente $A_1(K)_{N=4}$ obtido da expansão da magnetização.

O método EFRG tem sido generalizado por de Sousa e colaboradores [58] para tratar a criticalidade do modelo de Heisenberg quântico de spin 1/2 anisotrópico com interação F e AF. Os resultados obtidos na rede cúbica simples para T_c e ν usando EFRG são satisfatórios, quando comparados com os métodos mais rigorosos (série e Monte Carlo). Devemos salientar que, EFRG só descreve transição de fase de segunda ordem, isto porque no seu formalismo é usado o fato de que a magnetização vai a zero continuamente, quando atingimos a temperatura crítica. Assim sendo, devido a boa performance do método EFRG em relação a MFRG em sistema quânticos, serviu de grande motivação para usar o formalismo EFRG no modelo $J_1 - J_2$, que será estudado a seguir.

4.2 Modelos $J_1 - J_2$ numa rede quadrada

Nesta seção iremos estudar diagramas de fases obtidos de modelos que apresentam Hamiltoniano com o seguinte aspecto:

$$\mathcal{H} = -J_1 \sum_{\langle i, \neq j \rangle} [(1 - \Delta) (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z] + J_2 \sum_{\langle i, \neq j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (4.51)$$

onde J_1 e J_2 são os termos de interações entre os primeiros e segundos vizinhos, respectivamente, numa rede quadrada ($z_1 = z_2 = 4$), para sistemas com spin $1/2$. Usaremos a teoria de campo efetivo em aglomerados finitos ($N = 1, 2, \text{ e } 4$). Nossos principais objetivos serão: i) analisar o comportamento tricrítico do modelo de Ising ($\Delta = 1$); ii) investigar a influência da anisotropia (Δ) sobre a fase quântica paramagnética no modelo de Heisenberg frustrado (diagrama de fase do estado fundamental no plano $\Delta - \alpha$). Os resultados a serem discutidos a seguir serão publicados na *Physical Review B*, tanto o caso do limite Ising⁵ como o caso Heisenberg [67].

4.2.1 Aglomerado com $N = 1$ sítio central

Vamos representar o spin do sítio deste aglomerado por S_1 , e dependendo da fase que analisaremos teremos condições de contorno apropriadas. Inicialmente, vamos desenvolver os modelos para os estados ferromagnético, superantiferromagnético para este tamanho de aglomerado.

A) Estado ferromagnético (F)

Para o caso do aglomerado de spin com $N = 1$ sítio central só podemos fazer a análise do modelo de Ising, haja visto que a magnetização da vizinhança, em torno deste sítio central, será tomada em numa única direção (aproximação axial), sendo que neste trabalho vamos adotar a direção z sem perda de generalidade. Desta forma podemos usar a seguinte relação $\sum_i \vec{\sigma}_i \cdot \vec{S}_c \cong \sum_i \sigma_i^z S_c^z$ entre os spins da vizinhança e o spin do sítio central, tal que S_c^z é a componente operadora z do sítio central \vec{S}_c . Na Fig.(4.12) temos os esquema de uma rede quadrada para um sistema ferromagnético, onde adotamos por σ_i o spin ao redor (1° e 2° vizinhos) do spin central S_1 . O Hamiltoniano para este aglomerado é dado por

$$-\beta\mathcal{H}_1^F = (C_x - C_y) S_1 \quad (4.52)$$

⁵O diagrama de fase do modelo de Ising com interação de primeiro e segundos vizinhos fez parte da dissertação de mestrado da estudante Rosana dos Anjos [66].

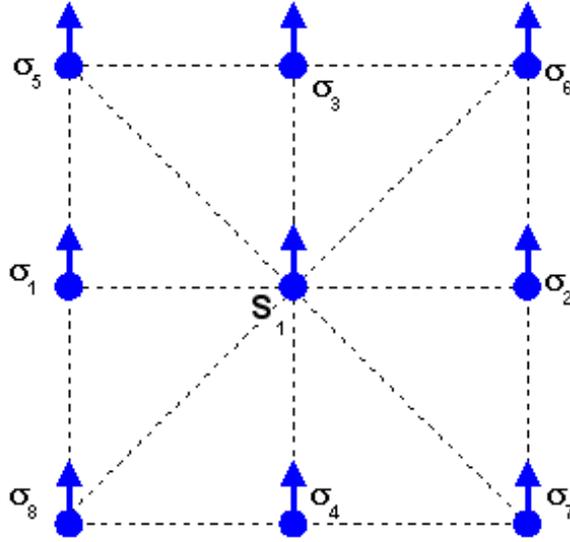


Figura 4.12: Configurações dos spins no estado fundamental do estado ferromagnético numa rede quadrada para aglomerado com $N = 1$ sítio central.

sendo

$$C_x = K \sum_{i=1}^4 \sigma_i \quad \text{e} \quad C_y = \alpha K \sum_{i=5}^8 \sigma_i \quad (4.53)$$

onde $K = \beta J_1$, $\beta = 1/K_B T$ e $\alpha = J_2/J_1$. O operador de spin de Pauli S_1^z é um operador diagonalizado dado por

$$S_1 \equiv S_1^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.54)$$

sendo que os autovalores são $\lambda_n = -1$ e 1 . Da mecânica estatística temos que a função de partição canônica é dada por

$$Z_1^F = 2 \cosh(C_x - C_y). \quad (4.55)$$

Usando a identidade de Callen dada pela seguinte expressão:

$$\langle \{g\} S_1 \rangle = \left\langle \frac{\text{Tr} \{g\} S_1 \exp(-\beta \mathcal{H}_1^F)}{\text{Tr} \exp(-\beta \mathcal{H}_1^F)} \right\rangle = \left\langle \{g\} \frac{\text{Tr} S_1 \exp(-\beta \mathcal{H}_1^F)}{\text{Tr} \exp(-\beta \mathcal{H}_1^F)} \right\rangle, \quad (4.56)$$

fazendo $\{g\} = 1$ e observando que a magnetização do sistema é dado por $m = \langle S_1 \rangle$, ficaremos então com a magnetização sendo dada por

$$m = \left\langle \frac{\text{Tr} S_1^z \exp(-\beta \mathcal{H}_1^F)}{\text{Tr} \exp(-\beta \mathcal{H}_1^F)} \right\rangle \quad (4.57)$$

ou em função da função de partição Z_1^F

$$m = \left\langle \frac{\partial}{\partial \phi} \ln(Z_1^F) \right\rangle, \quad (4.58)$$

e finalmente

$$m = \langle \tanh(C_x - C_y) \rangle \quad (4.59)$$

onde $\phi = C_x - C_y$.

Aplicando a técnica do operador diferencial proposto por Honmura e Kaneysohi [51], ficaremos com a seguinte expressão:

$$m = \langle \exp(C_x D_x + C_y D_y) \rangle f(x, y) |_{x,y=0} \quad (4.60)$$

sendo $f(x, y) = \tanh(x - y)$, $D_x = \frac{\partial}{\partial x}$ e $D_y = \frac{\partial}{\partial y}$. Tomando a identidade de van der Waerdan para spin 1/2, isto é:

$$e^{\varphi \sigma_i} = \cosh(\varphi) + \sigma_i \sinh(\varphi), \quad (4.61)$$

sendo que $\sigma_i = \pm 1$, ficaremos com

$$m = \left\langle \prod_{i=1}^4 [\cosh(K D_x) + \sigma_i \sinh(K D_x)] \prod_{i=5}^8 [\cosh(\alpha K D_y) + \sigma_i \sinh(\alpha K D_y)] \right\rangle f(x, y) |_{x,y=0}. \quad (4.62)$$

Ao desenvolver os produtórios da Eq.(4.62) surgem termos da forma $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$, $\langle \sigma_i \sigma_j \sigma_w \rangle$, $\langle \sigma_i \sigma_j \sigma_w \sigma_v \rangle$, ..., onde os spins σ_i estão acoplados, então é necessário aplicar alguma técnica

para desacoplar esse sistema. No contexto deste trabalho, vamos usar a aproximação linear para desacoplar o sistema, isto é:

$$\langle \sigma_i \sigma_j \sigma_w \sigma_v \rangle \simeq \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \langle \sigma_w \rangle \langle \sigma_v \rangle \quad (4.63)$$

que é um razoável desacoplamento (tipo RPA usado em teoria de muitos corpos, em particular no formalismo da função de Green). Uma outra aproximação diferente, como a de Zernike [52], usada por Kaneyoshi e Fittipaldi[53] no tratamento do modelo de Ising ferromagnético, melhora o resultado quantitativo para a temperatura crítica em comparação com a aproximação linear, porém, o processo de solução dos modelos do ponto de vista de equações torna o processo mais trabalhoso, ficando como proposta de aplicação em futuros trabalhos nos modelos aqui estudados. Tomando a condição de contorno $\langle \sigma_i \rangle = m$, $\forall i$, vamos obter uma expressão a partir da Eq.(4.62) do tipo $m = f(m, T, \alpha)$. No contexto deste trabalho, dependendo do tamanho do aglomerado de sítios, poderemos obter expressões, relativamente grandes do tipo $m = f(m, T, \alpha)$, para contornar essa dificuldade é que se propõem no apêndice-B um algoritmo para resolver, computacionalmente, esses modelos, onde é feita a proposta de trabalhar com produtórios em que as parcelas sejam constituídas de dois estados exponenciais (positiva e negativa). Portanto, a partir dessas propostas metodológicas teremos a seguinte expressão para Eq.(4.62):

$$m = [\exp(KD_x)a + \exp(-KD_x)b]^4 [\exp(\alpha KD_y)a + \exp(-\alpha KD_y)b]^4 f(x, y) |_{x,y=0}, \quad (4.64)$$

sendo

$$a = \frac{1+m}{2} \quad e \quad b = \frac{1-m}{2}. \quad (4.65)$$

No desenvolvimento da Eq.(4.64) será obtida uma expressão do tipo

$$m = A_0 + A_1m + A_2m^2 + A_3m^3 + \dots + A_n m^8 = \sum_{p=0}^8 A_p m^p. \quad (4.66)$$

Para o caso em que o campo longitudinal for nulo, teremos que os coeficientes dos termos da magnetização de expoente par são nulos, isto acontece devido a simetria da Eq.(4.66), ou seja, quando é feita a mudança $m \rightarrow -m$ os dois membros devem respeitar essa condição, o que só acontece se os coeficientes de índice par forem nulos. Desta forma ficaremos com a seguinte expressão compactada:

$$m = \sum_{p=0}^3 A_{2p+1} m^{2p+1} \quad (4.67)$$

Esses coeficientes $A_p = A_p(T, \alpha)$ são dados por expressões muito grande, o que proporciona um grande esforço computacional, como, por exemplo, programas com muitas linhas acarretando uma demora na compilação, e que também dificultam na análise de certos erros que venham a ser detectados na execução do programa. Como já foi mencionado acima, no apêndice-B são apresentadas propostas metodológicas avançadas para a implementação computacional e determinação desses coeficientes, o que diminui em muito o esforço computacional. Todos os modelos deste capítulo terão as suas conclusões analíticas com expressões da forma dada pela Eq.(4.67).

A equação de estado Eq.(4.66) é obtida a partir do processo de minimização de uma energia livre $\Psi(m)$ (i.e. $\frac{d\Psi}{dm} = 0$). A importância de se obter a equação da energia livre $\Psi(m)$ é para podermos fazer uma análise mais precisa do tipo de transição de fase existente entre os estados F (ou AF) e paramagnético (P). Através da construção de Maxwell da termodinâmica (igualdade entre as energias livres das fases envolvidas na transição de fase), podemos resolver, simultaneamente, a Eq.(4.66) com a expressão dada por

$$\Psi_F(m \neq 0) = \Psi_P(m = 0). \quad (4.68)$$

Desta maneira será obtida a temperatura de transição como função do parâmetro

de frustração, ou seja, $T_c(\alpha)$. Se a transição de fase for de segunda ordem (contínua), o parâmetro de ordem magnética (m) se torna nula quando for atingida a temperatura crítica $T_c(\alpha)$. Por outro lado, caso $m \neq 0$ teremos uma transição de fase de primeira ordem e o valor obtido m_c da solução numérica das Eqs. (4.66) e (4.68), corresponderá a descontinuidade da magnetização em $T = T_c(\alpha)$. Segundo os resultados de simulação de Monte Carlo, a transição de fase F-P é de segunda ordem, então a priori, não seria necessário obter uma expressão para a energia livre $\Psi(m)$, haja visto que da Eq.(4.66) no limite $m \rightarrow 0$ obtemos $T_c(\alpha)$ resolvendo, numericamente, a expressão

$$A_1(T_c, \alpha) = 1. \quad (4.69)$$

Do ponto de vista computacional, resolver apenas uma equação não linear, como no caso da Eq.(4.69), é muito mais simples. Porém, esta metodologia, Eq.(4.69), seria apropriada se realmente o formalismo EFT-1 obtivesse a transição de fase F-P de segunda ordem. Esta suposição não pode ser dada de imediata, isto porque estamos tratando de um modelo complexo, através de método aproximativo (EFT-1), que poderá a princípio induzir erroneamente uma transição de fase de primeira ordem. Desta forma, para investigar a natureza da transição de fase necessitamos de uma expressão para a energia livre.

Na técnica do operador diferencial não tem sido proposto 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 [59] e Heisenberg com campo aleatório [60]. Neste trabalho vamos propor um funcional para a energia livre $\Psi(m)$ de tal forma que a partir da condição $\frac{d\Psi}{dm} = 0$ seja obtida a equação de estado Eq.(4.66). Assim sendo, integrando a Eq.(4.66) encontramos

$$\Psi(m, T, \alpha) = \lambda_1(T, \alpha) + \lambda_2(T, \alpha) \left[\frac{1}{2}m^2 - \sum_{p=0}^3 \frac{A_{2p+1}}{2p+2} m^{2p+2} \right], \quad (4.70)$$

onde $\lambda_{r=1,2}(T, \alpha)$ é uma função arbitrária irrelevante na análise da transição de fase, $A_p(T, \alpha)$ são os coeficientes não nulos. Igualando as energias livres das fases F e P (construção de Maxwell), ficaremos com a seguinte expressão:

$$\sum_{p=0}^3 \frac{A_{2p+1}}{p+1} m^{2p} = 1. \quad (4.71)$$

Resolvendo, simultaneamente, as Eqs. (4.66) e (4.71) encontraremos T_c e m para um dado valor de α . Na criticalidade se $m = 0$ teremos uma transição de fase de 2ª ordem, mas se $m \neq 0$ ($m = m_c$) teremos uma transição de 1ª ordem.

B) Sistema superantiferromagnético (SAF)

Na Fig.(4.13) temos o estado fundamental da fase SAF numa rede quadrada, onde o aglomerado de um sítio central, representado por \mathbf{S}_1 apresenta os spins orientados na mesma direção ao longo do eixo x e antiparelelo entre cadeias vizinhas ao longo do eixo y . Por conveniência (sem perda de generalidade) adotamos o spin central \mathbf{S}_1 apontando para cima (subrede A). Denota-se, também, a fase SAF como sendo um estado colinear para uma rede quadrada.

O Hamiltoniano nesta fase deve ser decomposto em duas subredes, dado pela seguinte expressão:

$$\mathcal{H}_1^{SAF} = -J_1 \left(\sum_{i=1}^2 \sigma_i^A + \sum_{i=3}^4 \sigma_i^B \right) S_1 + J_2 \sum_{i=5}^8 \sigma_i^B S_1, \quad (4.72)$$

onde σ_i^A e σ_i^B são os spins das subredes A e B no sítio i . Desta forma ficaremos com a seguinte expressão:

$$-\beta \mathcal{H}_1^{SAF} = (C_x - C_y) S_1, \quad (4.73)$$

onde

$$C_x = K \left(\sum_{i=1}^2 \sigma_i^A + \sum_{i=3}^4 \sigma_i^B \right) \text{ e } C_y = \alpha K \sum_{i=5}^8 \sigma_i^B. \quad (4.74)$$

Este Hamiltoniano possui a mesma forma para o caso ferromagnético, só mudando os

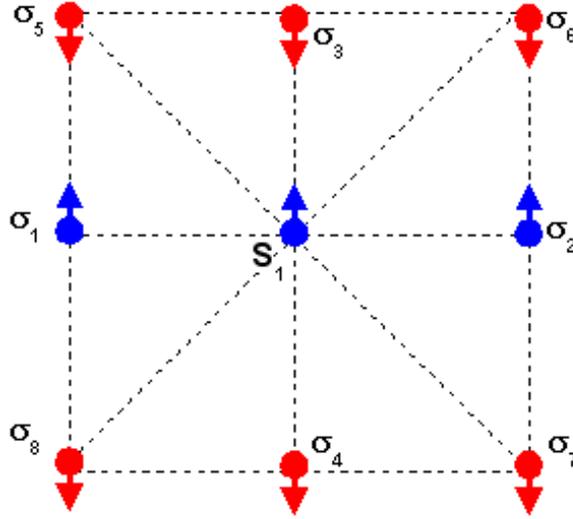


Figura 4.13: Configurações dos spins no estado fundamental da fase SAF numa rede quadrada para aglomerado com $N = 1$.

termos C_x e C_y . A magnetização da subrede A será dada por

$$m_A = \langle S_1^z \rangle = \left\langle \frac{\text{Tr} S_1^z \exp(-\beta \mathcal{H}_1^{SAF})}{\text{Tr} \exp(-\beta \mathcal{H}_1^{SAF})} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial}{\partial \phi} \ln(Z_1^{SAF}) \right\rangle = \langle \tanh(C_x - C_y) \rangle. \quad (4.75)$$

Usando as identidades do operador diferencial e de van der Werden, a Eq.(4.75) ficará reescrita na forma

$$m_A = \left\langle \prod_{i=1}^2 (\cosh(KD_x) + \sigma_i^A \sinh(KD_x)) \prod_{i=3}^4 (\cosh(KD_x) + \sigma_i^B \sinh(KD_x)) \prod_{i=5}^8 (\cosh(\alpha KD_y) + \sigma_i^B \sinh(\alpha KD_y)) \right\rangle f(x, y) |_{x,y=0}. \quad (4.76)$$

Aplicando a aproximação linear e a condição de contorno $m_A = -m_B = m$ para a fase SAF (na ausência de campo magnético axial), teremos a seguinte expressão para a equação de estado

$$m = [\exp(KD_x)a + \exp(-KD_x)b]^2 [\exp(KD_x)b + \exp(-KD_x)a]^2 [\exp(\alpha KD_y)b + \exp(-\alpha KD_y)a]^4 f(x, y)|_{x,y=0} \quad (4.77)$$

sendo que a e b são dados pela Eq.(4.65). Expandindo em série de potência de m , a equação de estado pode ser compactada ficando semelhante a Eq.(4.67). Os coeficientes A_p são obtidos via algoritmo desenvolvido no apêndice B.

Assim como foi feito para o estado ferromagnético, propomos o seguinte funcional $\Psi_{SAF}(m)$ para a energia livre na fase SAF

$$\Psi_{SAF}(m, T, \alpha) = \lambda_1^{SAF}(T, \alpha) + \lambda_2^{SAF}(T, \alpha) \left[\frac{1}{2}m^2 - \sum_{p=0}^3 \frac{A_{2p+1}}{2p+2} m^{2p+2} \right], \quad (4.78)$$

onde mais uma vez as funções $\lambda_{1,2}^{SAF}(T, \alpha)$ são arbitrárias e irrelevantes na determinação da linha de transição de fase entre as fase superantiferromagnética ($m \neq 0$) e paramagnética ($m = 0$). De tal forma que usando a construção de Maxwell (igualdade das energias livres das fases SAF e P) obtemos uma expressão semelhante a Eq.(4.71). Devemos salientar que os coeficientes A_p na fase SAF são distintos na equação de estado na fase F (ou AF), apesar de usarmos as mesmas notações. Lembrando, ainda, que estes coeficientes são demasiadamente grandes para expressá-los nesta tese.

Outra observação importante, e que não ocorrerá quando usarmos aglomerados com dois ou mais sítios, é que para aglomerado com um único spin (qualquer dimensão), o Hamiltoniano escrito na aproximação axial apresenta uma simetria tipo Ising, portanto, na ausência de campo externo longitudinal os sistemas F e AF apresentam as mesmas propriedades termodinâmicas e conseqüentemente mesmo diagrama de fase (i.e. $T_c(\alpha) = T_N(\alpha)$).

4.2.2 Aglomerado com $N = 2$ spins

Para um sistema finito com aglomerado de $N \geq 2$ sítios centrais devemos tomar o cuidado com a presença de vizinhos comuns as interações de primeiro e segunda vizinhança, quando aplicarmos o formalismo da EFT. Por exemplo, no caso para aglomerado com $N = 2$ sítios centrais, como mostra a Fig.(4.14), temos alguns sítios que são primeiros vizinhos ao sítio \mathbf{S}_1 , porém são segundos vizinhos para sítio \mathbf{S}_2 (e vice-versa). Desta maneira, quando aplicamos a técnica do operador diferencial aparecem termos do tipo σ_i^2 no desenvolvimento dos produtórios nas expressões das magnetizações dos modelos a serem estudados, que segundo propriedades da matriz de Pauli corresponde a uma matriz identidade, i.e., $\sigma_i^2 = 1$.

Um outro fator importante é que para esta quantidade de sítios centrais pode-se trabalhar com o modelo de Heisenberg, devido a interação entre estes sítios ser levado em consideração no Hamiltoniano, desta forma teremos então que desenvolver o formalismo para os casos dos estados ferromagnético (F), antiferromagnético (AF) e superantiferromagnético (SAF), pois os resultados para os sistemas ferromagnético e antiferromagnético são diferentes para o modelo de Heisenberg. A fim de ilustração na Fig.(4.14) apresentamos o aglomerado com dois spins para o estado fundamental SAF numa rede quadrada. Outros estados F e AF são obtidos apenas com a inversão apropriada dos spins nas suas respectivas condições de contorno, e omitiremos as suas ilustrações por achar desnecessário.

A) Estado ferromagnético

Tomando como referência a Fig.(4.14) e orientando todos os spins para cima, teremos o seguinte Hamiltoniano para um sistema ferromagnético:

$$-\beta\mathcal{H}_2^F = K [(1 - \Delta) (S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y) + S_1^z S_2^z] + C_1 S_1^z + C_2 S_2^z, \quad (4.79)$$

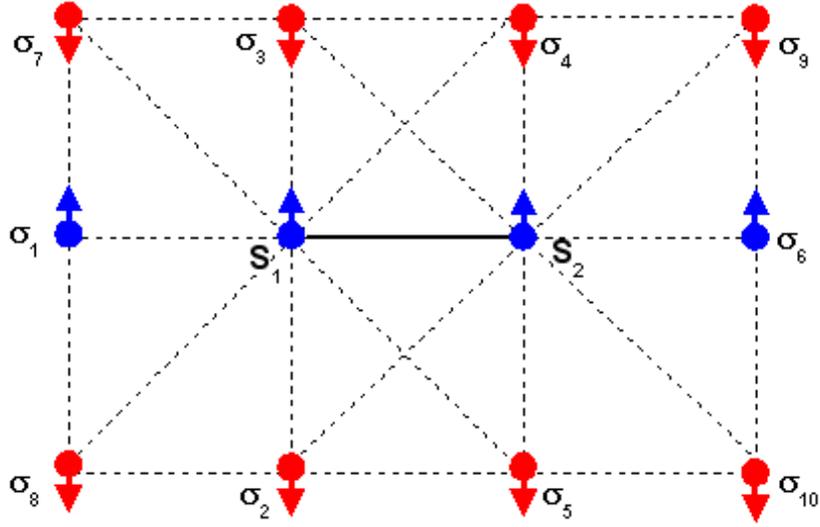


Figura 4.14: Configuração dos spins da fase SAF no estado fundamental para um aglomerado com $N = 2$ sítios centrais numa rede quadrada.

sendo

$$C_n = C_{nx} - C_{ny}, \quad n = 1, 2 \quad (4.80)$$

$$C_{1x} = K \sum_{i=1}^3 \sigma_i, \quad C_{1y} = \alpha K \sum_{i=4,5,7,8} \sigma_i, \quad (4.81)$$

$$C_{2x} = K \sum_{i=4}^6 \sigma_i, \quad C_{2y} = \alpha K \sum_{i=2,3,9,10} \sigma_i. \quad (4.82)$$

Escrevendo o operador $\beta\mathcal{H}_2^F$ na base onde S_1^z e S_2^z são diagonais, i.e.,

$$base = \{|m_1, m_2\rangle; |++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\},$$

e diagonalizando a matriz (4 x 4) encontraremos a função de partição, que é dada por.

$$Z_2^F = 2 [\exp(K) \cosh(C_1 + C_2) + \exp(-K) \cosh(\Gamma)] \quad (4.83)$$

sendo

$$\Gamma = \sqrt{(C_1 - C_2)^2 + 4K^2(1 - \Delta)^2}. \quad (4.84)$$

Usando a identidade de Callen dada pela Eq.(4.56), definindo $m = \langle S_1^z \rangle$ e usando a identidade para o traço parcial neste aglomerado finito com dois spins, ficaremos com o seguinte resultado:

$$m = \langle S_1^z \rangle = \left\langle \frac{\text{Tr} S_1^z \exp(-\beta \mathcal{H}_2^F)}{\text{Tr} \exp(-\beta \mathcal{H}_2^F)} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial}{\partial C_1} \ln(Z_1^F) \right\rangle, \quad (4.85)$$

ou seja,

$$m = \left\langle \frac{\sinh(C_1 + C_2) + \exp(-2K) \sinh(\Gamma) \frac{(C_1 - C_2)}{\Gamma}}{\cosh(C_1 + C_2) + \exp(-2K) \cosh(\Gamma)} \right\rangle. \quad (4.86)$$

Generalizando a técnica do operador diferencial para quatro dimensões, ou seja,

$$\exp(\vec{a} \cdot \vec{D}) F(\vec{r}) = F(\vec{r} + \vec{a}), \quad (4.87)$$

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 $D_{x_1} = \partial/\partial x_1$)⁶. Desta forma reescrevemos a Eq.(4.86) na forma

$$m = \left\langle \exp \left[\sum_{n=1}^2 C_{xn} D_{xn} + C_{yn} D_{yn} \right] \right\rangle f(\vec{r}) \Big|_{\vec{r}=0}. \quad (4.88)$$

⁶Devido a necessidade de organização dos termos são usadas as notações x e y que são relacionados a primeira e segunda interação dos spins, respectivamente. Enquanto, que os índices 1 e 2 são referentes ao primeiro e segundo sítio central, respectivamente.

Desenvolvendo o somatório acima aplicando a identidade de var de Waerden ficaremos

$$\begin{aligned}
m = & \left\langle \prod_{i=1}^3 \left[\exp(KD_{x_1})\hat{a}_i + \exp(-KD_{x_1})\hat{b}_i \right] \prod_{i=4,5,7,8} \left[\exp(\alpha KD_{y_1})\hat{a}_i + \right. \right. \\
& \left. \left. \exp(-\alpha KD_{y_1})\hat{b}_i \right] \prod_{i=4}^6 \left[\exp(KD_{x_2})\hat{a}_i + \exp(-KD_{x_2})\hat{b}_i \right] \right. \\
& \left. \prod_{i=2,3,9,10} \left[\exp(\alpha KD_{y_2})\hat{a}_i + \exp(-\alpha KD_{y_2})\hat{b}_i \right] \right\rangle f(\vec{r}) \Big|_{\vec{r}=0}, \quad (4.89)
\end{aligned}$$

sendo

$$f(\vec{r}) = \frac{\sinh(r_1 + r_2) + \exp(-2K) \sinh(\Gamma) (r_1 - r_2)/\Gamma}{\cosh(r_1 + r_2) + \exp(-2K) \cosh(\Gamma)} \quad (4.90)$$

onde

$$r_1 = x_1 - y_1 \quad \text{e} \quad r_2 = x_2 - y_2, \quad (4.91)$$

e

$$\hat{a}_i = \frac{1 + \sigma_i}{2} \quad \text{e} \quad \hat{b}_i = \frac{1 - \sigma_i}{2}, \quad (4.92)$$

sendo que agora Γ é dado por

$$\Gamma = \sqrt{(r_1 - r_2)^2 + 4K^2 (1 - \Delta)^2}. \quad (4.93)$$

Observe que os sítios $i = 2, 3, 4, 5$ se repetem nos produtórios, desta forma devemos, primeiramente, aplicar a propriedade $\sigma_i^2 = 1$ dos spins na Eq.(4.89) nas parcelas dos produtórios que contenham os sítios citados. É oportuno mencionarmos que ao desenvolvermos os produtos entre as diversas parcelas que contenham os mesmos sítios, a idéia dos dois estados exponenciais continuam sendo respeitada, aliás de um modo geral é fácil

verificar que:

$$\begin{aligned}
\Lambda &= \prod_{j=1}^n \left(\exp(\varphi_j) \hat{a}_i + \exp(-\varphi_j) \hat{b}_i \right) \\
&= \exp \left(\sum_{j=1}^n \varphi_j \right) \hat{a}_i + \exp \left(-\sum_{j=1}^n \varphi_j \right) \hat{b}_i \\
&= \prod_{j=1}^n \exp(\varphi_j) \hat{a}_i + \prod_{j=1}^n \exp(-\varphi_j) \hat{b}_i,
\end{aligned} \tag{4.94}$$

Aplicando o processo dado pela Eq.(4.94), a Eq.(4.89) ficará reescrita da seguinte forma

$$\begin{aligned}
m &= \left\langle \left[\exp(KD_{x_1}) \hat{a}_1 + \exp(-KD_{x_1}) \hat{b}_1 \right] \prod_{i=7}^8 \left[\exp(\alpha KD_{y_1}) \hat{a}_i + \exp(-\alpha KD_{y_1}) \hat{b}_i \right] \right. \\
&\quad \left[\exp(KD_{x_2}) \hat{a}_6 + \exp(-KD_{x_2}) \hat{b}_6 \right] \prod_{i=9}^{10} \left[\exp(\alpha KD_{y_2}) \hat{a}_i + \exp(-\alpha KD_{y_2}) \hat{b}_i \right] \\
&\quad \prod_{i=2}^3 \left[\exp(KD_{x_1}) \exp(\alpha KD_{y_2}) \hat{a}_i + \exp(-KD_{x_1}) \exp(-\alpha KD_{y_2}) \hat{b}_i \right] \\
&\quad \left. \prod_{i=4}^5 \left[\exp(KD_{x_2}) \exp(\alpha KD_{y_1}) \hat{a}_i + \exp(-KD_{x_2}) \exp(-\alpha KD_{y_1}) \hat{b}_i \right] \right\rangle \\
&f(\vec{r}) |_{\vec{r}=0},
\end{aligned} \tag{4.95}$$

Aplicando a aproximação linear (RPA) e a condição de contorno na fase ferromagnética $\langle \sigma_i \rangle = m$, ficaremos

$$\begin{aligned}
m &= [\exp(KD_{x_1})a + \exp(-KD_{x_1})b] [\exp(\alpha KD_{y_1})a + \exp(-\alpha KD_{y_1})b]^2 \\
&\quad [\exp(KD_{x_2})a + \exp(-KD_{x_2})b] [\exp(\alpha KD_{y_2})a_i + \exp(-\alpha KD_{y_2})b_i]^2 \\
&\quad [\exp(KD_{x_1}) \exp(\alpha KD_{y_2})a + \exp(-KD_{x_1}) \exp(-\alpha KD_{y_2})b]^2 \\
&\quad [\exp(KD_{x_2}) \exp(\alpha KD_{y_1})a + \exp(-KD_{x_2}) \exp(-\alpha KD_{y_1})b]^2 \\
&f(\vec{r}) |_{\vec{r}=0}
\end{aligned} \tag{4.96}$$

onde a e b são dados pela Eq.(4.65). Mais uma vez na ausência de campo magnético longitudinal, a expansão da equação de estado só terá termos de potências ímpares do parâmetro de ordem (m), ou seja,

$$m = \sum_{p=0}^4 A_{2p+1} m^{2p+1}, \quad (4.97)$$

onde adotamos a mesma nomenclatura para os coeficientes da expansão das usadas anteriormente, mas para caso analisado esses coeficientes são diferentes. Um funcional, para a energia livre $\Psi_F(m)$ semelhante aos casos anteriores é também obtida

B) Estado antiferromagnético

Tomando como referência a Fig.(4.14) invertendo as orientações dos spins: $\sigma_1, \sigma_4, \sigma_5, \sigma_7, \sigma_8$, e \mathbf{S}_1 , teremos o aglomerado com dois spins na fase antiferromagnética numa rede quadrada. Nesta fase iremos substituir K por $-K$ no Hamiltoniano de Heisenberg, que para este aglomerado finito com dois spins e duas subredes A e B será dado por

$$-\beta\mathcal{H}_2^{AF} = -K [(1 - \Delta) (S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y) + S_1^z S_2^z] + C_1 S_1^z + C_2 S_2^z, \quad (4.98)$$

sendo

$$C_n = -C_{nx} - C_{ny}, \quad n = 1, 2 \quad (4.99)$$

$$C_{1x} = K \sum_{i=1}^3 \sigma_i^B, \quad C_{1y} = \alpha K \sum_{i=4,5,7,8} \sigma_i^A, \quad (4.100)$$

$$C_{2x} = K \sum_{i=4}^6 \sigma_i^A, \quad C_{2y} = \alpha K \sum_{i=2,3,9,10} \sigma_i^B. \quad (4.101)$$

Semelhante ao processo de diagonalização feito para o sistema ferromagnético, apenas

fazendo a troca $K \rightarrow -K$, a magnetização da subrede A $m_A = \langle S_1^z \rangle$ será dada por

$$m_A = \left\langle \frac{\sinh(C_1 + C_2) + \exp(2K) \sinh(\Gamma) \frac{(C_1 - C_2)}{\Gamma}}{\cosh(C_1 + C_2) + \exp(2K) \cosh(\Gamma)} \right\rangle. \quad (4.102)$$

Aplicando a técnica do operador diferencial e a identidade de Waerden para spin com dois estados, a Eq.(4.102) ficará

$$\begin{aligned} m_A = & \left\langle \prod_{i=1}^3 \left(\exp(KD_{x_1}) \hat{a}_i^B + \exp(-KD_{x_1}) \hat{b}_i^B \right) \prod_{i=4,5,7,8} \left(\exp(\alpha KD_{y_1}) \hat{a}_i^A + \right. \right. \\ & \left. \left. \exp(-\alpha KD_{y_1}) \hat{b}_i^A \right) \prod_{i=4}^6 \left(\exp(KD_{x_2}) \hat{a}_i^A + \exp(-KD_{x_2}) \hat{b}_i^A \right) \right. \\ & \left. \prod_{i=2,3,9,10} \left(\exp(\alpha KD_{y_2}) \hat{a}_i^B + \exp(-\alpha KD_{y_2}) \hat{b}_i^B \right) \right\rangle g(\vec{r}) \Big|_{\vec{r}=0} \end{aligned} \quad (4.103)$$

sendo

$$g(\vec{r}) = \frac{\sinh(r_1 + r_2) + \exp(2K) \sinh(\Gamma) \frac{(r_1 - r_2)}{\Gamma}}{\cosh(r_1 + r_2) + \exp(2K) \cosh(\Gamma)}, \quad (4.104)$$

temos que agora r_1 e r_2 são dados por

$$r_1 = -x_1 - y_1 \quad \text{e} \quad r_2 = -x_2 - y_2, \quad (4.105)$$

e

$$\hat{a}_i^{A,B} = \frac{1 + \sigma_i^{A,B}}{2} \quad \text{e} \quad \hat{b}_i^{A,B} = \frac{1 - \sigma_i^{A,B}}{2}. \quad (4.106)$$

Aplicando a propriedade $\sigma_i^2 = 1$ para os sítios $\sigma_i = 2, 3, 4$ e 5 no desenvolvimento dos produtórios, e posteriormente usando a aproximação linear e a condição de contorno AF (na ausência de campo longitudinal) $m_A = -m_B = m$ teremos a seguinte equação de

estado para a fase AF:

$$\begin{aligned}
m_A &= [\exp(KD_{x_1})b + \exp(-KD_{x_1})a] [\exp(\alpha KD_{y_1})a + \exp(-\alpha KD_{y_1})b]^2 \\
&\quad [\exp(KD_{x_2})a + \exp(-KD_{x_2})b] [\exp(\alpha KD_{y_2})b + \exp(-\alpha KD_{y_2})a]^2 \\
&\quad [\exp(KD_{x_1}) \exp(\alpha KD_{y_2})b + \exp(-KD_{x_1}) \exp(-\alpha KD_{y_2})a]^2 \\
&\quad [\exp(KD_{x_2}) \exp(\alpha KD_{y_1})a + \exp(-KD_{x_2}) \exp(-\alpha KD_{y_1})b]^2 \\
&\quad g(\vec{r}) \Big|_{\vec{r}=0}
\end{aligned} \tag{4.107}$$

sendo que a e b são dados pela Eq.(4.65). Expandindo em série de potência em relação a m a Eq.(4.107) obtemos uma expressão semelhante dada pela Eq.(4.97) do caso F, com a diferença apenas nas expressões dos coeficientes A_p . A energia livre para a fase AF $\Psi_{AF}(m)$ é semelhante a forma da energia livre determinadas para outros caso já visto, sendo que essa expressão da energia livre será importante para analisar o tipo de transição nos diagramas de fases.

C) Estado superantiferromagnético

Apesar da fase SAF bidimensional apresentar o mesmo aspecto colinear, como mostra a Fig.(4.14), independentemente, se a fase SAF é originado de um sistema ferromagnético ou antiferromagnético, todavia os resultados para o modelo de Heisenberg são diferentes e portanto dependem do sistema originário. Desta forma vamos utilizar dois Hamiltonianos para a fase SAF de acordo com a Fig.(4.14) e dado pela seguinte expressão:

$$\begin{aligned}
-\beta\mathcal{H}_2^{SAF} &= \pm K [(1 - \Delta) (S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y) + S_1^z S_2^z] + \\
&\quad \left(\pm K \left(\sigma_1^A + \sum_{i=2}^3 \sigma_i^B \right) - \alpha K \sum_{i=4,5,7,8} \sigma_i^B \right) S_1^z + \\
&\quad \left(\pm K \left(\sigma_6^A + \sum_{i=4}^5 \sigma_i^B \right) - \alpha K \sum_{i=2,3,9,10} \sigma_i^B \right) S_2^z,
\end{aligned} \tag{4.108}$$

ou de forma compacta

$$-\beta\mathcal{H}_2^{SAF} = \pm K [(1 - \Delta) (S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y) + S_1^z S_2^z] + C_1 S_1^z + C_2 S_2^z, \quad (4.109)$$

sendo

$$C_n = \pm C_{nx} - C_{ny}, \quad n = 1, 2 \quad (4.110)$$

$$C_{1x} = K \left(\sigma_1^A + \sum_{i=2}^3 \sigma_i^B \right), \quad C_{1y} = \alpha K \sum_{i=4,5,7,8} \sigma_i^B, \quad (4.111)$$

$$C_{2x} = K \left(\sigma_6^A + \sum_{i=4}^5 \sigma_i^B \right), \quad C_{2y} = \alpha K \sum_{i=2,3,9,10} \sigma_i^B. \quad (4.112)$$

onde os sinais (+) e (-) correspondem as interações do tipo ferromagnético e anti-ferromagnético, respectivamente, entre os primeiros vizinhos. Aplicando a técnica do operador diferencial obtemos que

$$\begin{aligned} m_A = & \left\langle \left[\exp(KD_{x_1}) \hat{a}_1^A + \exp(-KD_{x_1}) \hat{b}_1^A \right] \prod_{i=2}^3 \left[\exp(KD_{x_1}) \hat{a}_i^B + \right. \right. \\ & \left. \left. \exp(-KD_{x_1}) \hat{b}_i^B \right] \prod_{i=4,5,7,8} \left[\exp(\alpha KD_{y_1}) \hat{a}_i^B + \exp(-\alpha KD_{y_1}) \hat{b}_i^B \right] \right. \\ & \prod_{i=4}^5 \left[\exp(KD_{x_2}) \hat{a}_i^B + \exp(-KD_{x_2}) \hat{b}_i^B \right] \left[\exp(KD_{x_2}) \hat{a}_6^A + \right. \\ & \left. \left. \exp(-KD_{x_2}) \hat{b}_6^A \right] \prod_{i=2,3,9,10} \left[\exp(\alpha KD_{y_2}) \hat{a}_i^B + \exp(-\alpha KD_{y_2}) \hat{b}_i^B \right] \right\rangle \\ & f_{\pm}(\vec{r}) \Big|_{\vec{r}=0}, \quad (4.113) \end{aligned}$$

sendo que nesta expressão os termos $a_i^{A,B}$ e $b_i^{A,B}$ são dados pela Eq.(4.106) e ainda temos função $f_+(\vec{r}) = f(\vec{r})$ e $f_-(\vec{r}) = g(\vec{r})$. Portanto, r_1 e r_2 , dependendo do caso, são dados por

$$r_1 = \pm x_1 - y_1 \quad \text{e} \quad r_2 = \pm x_2 - y_2. \quad (4.114)$$

Aplicando a propriedade $\sigma_i^2 = 1$, a aproximação linear e a condição de contorno

$m_A = -m_B = m$, ficaremos

$$\begin{aligned}
m &= [\exp(KD_{x_1})a + \exp(-KD_{x_1})b] [\exp(\alpha KD_{y_1})b + \exp(-\alpha KD_{y_1})a]^2 \\
&\quad [\exp(KD_{x_2})a + \exp(-KD_{x_2})b] [\exp(\alpha KD_{y_2})b + \exp(-\alpha KD_{y_2})a]^2 \\
&\quad [\exp(KD_{x_1}) \exp(\alpha KD_{y_2})b + \exp(-KD_{x_1}) \exp(-\alpha KD_{y_2})a]^2 \\
&\quad [\exp(KD_{x_2}) \exp(\alpha KD_{y_1})b + \exp(-KD_{x_2}) \exp(-\alpha KD_{y_1})a]^2 \\
&\quad f_{\pm}(\vec{r}) |_{\vec{r}=0}
\end{aligned} \tag{4.115}$$

onde a e b são dados pela Eq.(4.65). Expandindo em série de potência a Eq.(4.115) obtemos uma equação auto-consistente para a magnetização, semelhante a Eq.(4.97) em função dos coeficientes A_p obtidos para este caso. Temos ainda que a energia livre para a fase SAF $\Psi_{SAF}(m)$ é semelhante a forma da energia livre determinadas para outros caso.

4.2.3 Aglomerado com $N = 4$ sítios centrais

Apesar de não ter sido discutido os resultados numéricos, adiantamos que o uso de EFT-1 e EFT-2 encontram espuriamente transição de primeira ordem entre as fases F(AF) e P. Na tentativa de eliminar essa discrepância iremos fazer a seguir uma análise alternativa para o caso do modelo de Ising em aglomerado com $N = 4$ spins (EFT-4).

A) Estado ferromagnético

Tomando como referência a Fig.(4.15) e tomando o arranjo, em que todos os spins estão orientados no mesmo sentido, teremos a configuração do estado fundamental do ferromagnético. Desta forma, o Hamiltoniano para este estado no caso do modelo de

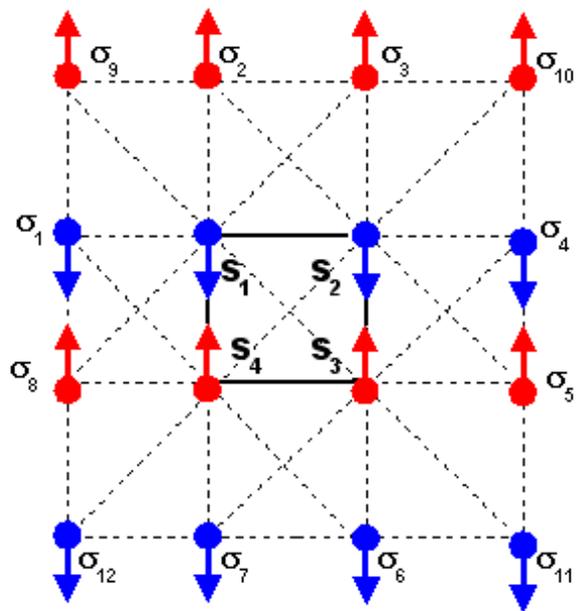


Figura 4.15: Configuração para os spins da fase colinear (SAF) numa rede quadrada para um aglomerado com $N = 4$ sítios centrais.

Ising é dado pela seguinte expressão:

$$\begin{aligned}
-\beta\mathcal{H}_4^F &= K (S_1^z S_2^z + S_2^z S_3^z + S_3^z S_4^z + S_4^z S_1^z) - K\alpha (S_1^z S_3^z + S_2^z S_4^z) + \\
&C_1 S_1^z + C_2 S_2^z + C_3 S_3^z + C_4 S_4^z
\end{aligned} \tag{4.116}$$

sendo

$$C_n = C_{nx} - C_{ny}, \quad n = 1, 2, 3, 4 \tag{4.117}$$

$$C_{1x} = K \sum_{i=1}^2 \sigma_i, \quad C_{1y} = \alpha K \sum_{i=3,8,9} \sigma_i, \tag{4.118}$$

$$C_{2x} = K \sum_{i=3}^4 \sigma_i, \quad C_{2y} = \alpha K \sum_{i=2,5,10} \sigma_i \tag{4.119}$$

$$C_{3x} = K \sum_{i=5}^6 \sigma_i, \quad C_{3y} = \alpha K \sum_{i=4,7,11} \sigma_i \tag{4.120}$$

$$C_{4x} = K \sum_{i=7}^8 \sigma_i, \quad C_{4y} = \alpha K \sum_{i=1,6,12}^9 \sigma_i. \tag{4.121}$$

Temos oito sítios σ_i ($i = 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9$), que são primeiros e segundos vizinhos em relação aos sítios centrais S_1, S_2, S_3 e S_4 , sendo necessário aplicar a propriedade da cinemática de spins ($\sigma_i^2 = 1$) nesses sítios. Tomando da magnetização dada por $m = \langle S_1^z \rangle$ e ainda aplicando a técnica do operador diferencial e a propriedade, conforme discutimos anteriormente para aglomerados com $N=1, 2$ spins, obtemos a seguinte expressão para a

magnetização:

$$\begin{aligned}
m = & \left\langle \left[\exp(KD_{x_1}) \exp(\alpha KD_{y_4}) \widehat{a}_1 + \exp(-KD_{x_1}) \exp(-\alpha KD_{y_4}) \widehat{b}_1 \right] \right. \\
& \left[\exp(KD_{x_1}) \exp(\alpha D_{y_2}) \widehat{a}_2 + \exp(-KD_{x_1}) \exp(-\alpha KD_{y_2}) \widehat{b}_2 \right] \\
& \left[\exp(KD_{x_2}) \exp(\alpha KD_{y_1}) \widehat{a}_3 + \exp(-KD_{x_2}) \exp(-\alpha KD_{y_1}) \widehat{b}_3 \right] \\
& \left[\exp(KD_{x_2}) \exp(\alpha KD_{y_3}) \widehat{a}_4 + \exp(-KD_{x_2}) \exp(-\alpha KD_{y_3}) \widehat{b}_4 \right] \\
& \left[\exp(KD_{x_3}) \exp(\alpha KD_{y_2}) \widehat{a}_5 + \exp(-KD_{x_3}) \exp(-\alpha KD_{y_2}) \widehat{b}_5 \right] \\
& \left[\exp(KD_{x_3}) \exp(\alpha KD_{y_4}) \widehat{a}_6 + \exp(-KD_{x_3}) \exp(-\alpha KD_{y_4}) \widehat{b}_6 \right] \\
& \left[\exp(KD_{x_4}) \exp(\alpha KD_{y_3}) \widehat{a}_7 + \exp(-KD_{x_4}) \exp(-\alpha KD_{y_3}) \widehat{b}_7 \right] \\
& \left[\exp(KD_{x_4}) \exp(\alpha KD_{y_1}) \widehat{a}_8 + \exp(-KD_{x_4}) \exp(-\alpha KD_{y_1}) \widehat{b}_8 \right] \\
& \left[\exp(\alpha KD_{y_1}) \widehat{a}_9 + \exp(-\alpha KD_{y_1}) \widehat{b}_9 \right] \left[\exp(\alpha KD_{y_2}) \widehat{a}_{10} + \exp(-\alpha KD_{y_2}) \widehat{b}_{10} \right] \\
& \left. \left[\exp(\alpha KD_{y_3}) \widehat{a}_{11} + \exp(-\alpha KD_{y_3}) \widehat{b}_{11} \right] \left[\exp(\alpha KD_{y_4}) \widehat{a}_{12} + \exp(-\alpha KD_{y_4}) \widehat{b}_{12} \right] \right\rangle \\
& h(\vec{r}) \Big|_{\vec{r}=0}, \tag{4.122}
\end{aligned}$$

onde $\vec{r} = (x_1, y_1, x_2, y_2, x_3, y_3, x_4, y_4)$, \widehat{a}_i e \widehat{b}_i dados pela Eq.(4.92). A função $h(\vec{r})$ é determinada facilmente para o caso Ising, pois o Hamiltoniano para este caso já é diagonalizado, ou seja,

$$h(\vec{r}) = \frac{F_N}{F_D}, \tag{4.123}$$

sendo

$$\begin{aligned}
F_N = & \exp(4K - 2K\alpha) \sinh(r_1 + r_2 + r_3 + r_4) + \exp(2K\alpha) \\
& [\sinh(r_1 + r_2 - r_3 - r_4) + \sinh(r_1 - r_2 - r_3 + r_4)] + \\
& \sinh(r_1 + r_2 + r_3 - r_4) + \sinh(r_1 + r_2 - r_3 + r_4) + \\
& \sinh(r_1 - r_2 + r_3 + r_4) - \sinh(-r_1 + r_2 + r_3 + r_4) + \\
& \exp(-4K - 2K\alpha) \sinh(r_1 - r_2 + r_3 - r_4), \tag{4.124}
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
F_D = & \exp(4K - 2K\alpha) \cosh(r_1 + r_2 + r_3 + r_4) + \exp(2K\alpha) \\
& [\cosh(r_1 + r_2 - r_3 - r_4) + \cosh(r_1 - r_2 - r_3 + r_4)] + \\
& \cosh(r_1 + r_2 + r_3 - r_4) + \cosh(r_1 + r_2 - r_3 + r_4) + \\
& \cosh(r_1 - r_2 + r_3 + r_4) + \cosh(-r_1 + r_2 + r_3 + r_4) + \\
& \exp(-4K - 2K\alpha) \cosh(r_1 - r_2 + r_3 - r_4), \tag{4.125}
\end{aligned}$$

onde $r_i = x_i - y_i$, $i = 1, 2, 3$ e 4 .

Usando a aproximação de Zernike, a magnetização ficará reescrita na forma

$$\begin{aligned}
m = & [\exp(KD_{x_1}) \exp(\alpha KD_{y_4})a + \exp(-KD_{x_1}) \exp(-\alpha KD_{y_4})b] \\
& [\exp(KD_{x_1}) \exp(\alpha D_{y_2})a + \exp(-KD_{x_1}) \exp(-\alpha KD_{y_2})b] \\
& [\exp(KD_{x_2}) \exp(\alpha KD_{y_1})a + \exp(-KD_{x_2}) \exp(-\alpha KD_{y_1})b] \\
& [\exp(KD_{x_2}) \exp(\alpha KD_{y_3})a + \exp(-KD_{x_2}) \exp(-\alpha KD_{y_3})b] \\
& [\exp(KD_{x_3}) \exp(\alpha KD_{y_2})a + \exp(-KD_{x_3}) \exp(-\alpha KD_{y_2})b] \\
& [\exp(KD_{x_3}) \exp(\alpha KD_{y_4})a + \exp(-KD_{x_3}) \exp(-\alpha KD_{y_4})b] \\
& [\exp(KD_{x_4}) \exp(\alpha KD_{y_3})a + \exp(-KD_{x_4}) \exp(-\alpha KD_{y_3})b] \\
& [\exp(KD_{x_4}) \exp(\alpha KD_{y_1})a + \exp(-KD_{x_4}) \exp(-\alpha KD_{y_1})b] \\
& [\exp(\alpha KD_{y_1})a + \exp(-\alpha KD_{y_1})b] [\exp(\alpha KD_{y_2})a + \exp(-\alpha KD_{y_2})b] \\
& [\exp(\alpha KD_{y_3})a + \exp(-\alpha KD_{y_3})b] [\exp(\alpha KD_{y_4})a + \exp(-\alpha KD_{y_4})b] \\
& h(\vec{r})|_{\vec{r}=0}, \tag{4.126}
\end{aligned}$$

onde os termos a e b são iguais os da Eq.(4.65). Expandindo em série de potência de m ,

a equação de estado Eq.(4.126) assume a seguinte forma:

$$m = \sum_{p=0}^5 A_{2p+1} m^{2p+1}, \quad (4.127)$$

onde os coeficientes são dados por expressões bastantes grandes, determinados a partir da metodologia proposta no apêndice B desta tese.

B) Estado superantiferromagnético

Na Fig.(4.15) temos estado fundamental superantiferromagnético, o Hamiltoniano para este estado SAF é dado pela seguinte expressão:

$$\begin{aligned} -\beta\mathcal{H}_4^{SAF} = & K (S_1^z S_2^z + S_2^z S_3^z + S_3^z S_4^z + S_4^z S_1^z) - K\alpha (S_1^z S_3^z + S_2^z S_4^z) \\ & C_1 S_1^z + C_2 S_2^z + C_3 S_3^z + C_4 S_4^z \end{aligned} \quad (4.128)$$

sendo

$$C_n = C_{nx} - C_{ny}, \quad n = 1, 2, 3, 4 \quad (4.129)$$

$$C_{1x} = K (\sigma_1^A + \sigma_2^B), \quad C_{1y} = \alpha K \sum_{i=3,8,9} \sigma_i^B, \quad (4.130)$$

$$C_{2x} = K (\sigma_4^A + \sigma_3^B), \quad C_{2y} = \alpha K \sum_{i=2,5,10} \sigma_i^B \quad (4.131)$$

$$C_{3x} = K (\sigma_6^A + \sigma_5^B), \quad C_{3y} = \alpha K \sum_{i=4,7,11} \sigma_i^A \quad (4.132)$$

$$C_{4x} = K (\sigma_7^A + \sigma_8^B), \quad C_{4y} = \alpha K \sum_{i=1,6,12}^9 \sigma_i^A. \quad (4.133)$$

Aplicando a técnica do operador diferencial e a cinemática dos spins para os sítios $i = 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9$ ficaremos com a seguinte expressão para a magnetização da subrede A ($m_A = \langle S_1 \rangle$):

$$\begin{aligned}
m_A = & \left\langle \left[\exp(KD_{x_1}) \exp(\alpha KD_{y_4}) \widehat{a}_1^A + \exp(-KD_{x_1}) \exp(-\alpha KD_{y_4}) \widehat{b}_1^A \right] \right. \\
& \left[\exp(KD_{x_1}) \exp(\alpha KD_{y_2}) \widehat{a}_2^B + \exp(-KD_{x_1}) \exp(-\alpha KD_{y_2}) \widehat{b}_2^B \right] \\
& \left[\exp(KD_{x_2}) \exp(\alpha KD_{y_1}) \widehat{a}_3^B + \exp(-KD_{x_2}) \exp(-\alpha KD_{y_1}) \widehat{b}_3^B \right] \\
& \left[\exp(KD_{x_2}) \exp(\alpha KD_{y_3}) \widehat{a}_4^A + \exp(-KD_{x_2}) \exp(-\alpha KD_{y_3}) \widehat{b}_4^A \right] \\
& \left[\exp(KD_{x_3}) \exp(\alpha KD_{y_2}) \widehat{a}_5^B + \exp(-KD_{x_3}) \exp(-\alpha KD_{y_2}) \widehat{b}_5^B \right] \\
& \left[\exp(KD_{x_3}) \exp(\alpha KD_{y_4}) \widehat{a}_6^A + \exp(-KD_{x_3}) \exp(-\alpha KD_{y_4}) \widehat{b}_6^A \right] \\
& \left[\exp(KD_{x_4}) \exp(\alpha KD_{y_3}) \widehat{a}_7^A + \exp(-KD_{x_4}) \exp(-\alpha KD_{y_3}) \widehat{b}_7^A \right] \\
& \left[\exp(KD_{x_4}) \exp(\alpha KD_{y_1}) \widehat{a}_8^B + \exp(-KD_{x_4}) \exp(-\alpha KD_{y_1}) \widehat{b}_8^B \right] \\
& \left[\exp(\alpha KD_{y_1}) \widehat{a}_9^B + \exp(-\alpha KD_{y_1}) \widehat{b}_9^B \right] \left[\exp(\alpha KD_{y_2}) \widehat{a}_{10}^B + \exp(-\alpha KD_{y_2}) \widehat{b}_{10}^B \right] \\
& \left[\exp(\alpha KD_{y_3}) \widehat{a}_{11}^A + \exp(-\alpha KD_{y_3}) \widehat{b}_{11}^A \right] \left[\exp(\alpha KD_{y_4}) \widehat{a}_{12}^A + \exp(-\alpha KD_{y_4}) \widehat{b}_{12}^A \right] \Big\rangle \\
& h(\vec{r}) \Big|_{\vec{r}=0} , \tag{4.134}
\end{aligned}$$

onde $\widehat{a}_i^{A,B}$ e $\widehat{b}_i^{A,B}$ são dados pela Eq.(4.106). Aplicando a aproximação de Zernike e também a condição de contorno $m_A = -m_B = m$ (válida para campo longitudinal nulo) ficaremos com o seguinte resultado

$$\begin{aligned}
m = & [\exp(KD_{x_1}) \exp(\alpha KD_{y_4})a + \exp(-KD_{x_1}) \exp(-\alpha KD_{y_4})b] \\
& [\exp(KD_{x_1}) \exp(\alpha D_{y_2})b + \exp(-KD_{x_1}) \exp(-\alpha KD_{y_2})a] \\
& [\exp(KD_{x_2}) \exp(\alpha KD_{y_1})b + \exp(-KD_{x_2}) \exp(-\alpha KD_{y_1})a] \\
& [\exp(KD_{x_2}) \exp(\alpha KD_{y_3})a + \exp(-KD_{x_2}) \exp(-\alpha KD_{y_3})b] \\
& [\exp(KD_{x_3}) \exp(\alpha KD_{y_2})b + \exp(-KD_{x_3}) \exp(-\alpha KD_{y_2})a] \\
& [\exp(KD_{x_3}) \exp(\alpha KD_{y_4})a + \exp(-KD_{x_3}) \exp(-\alpha KD_{y_4})b] \\
& [\exp(KD_{x_4}) \exp(\alpha KD_{y_3})a + \exp(-KD_{x_4}) \exp(-\alpha KD_{y_3})b] \\
& [\exp(KD_{x_4}) \exp(\alpha KD_{y_1})b + \exp(-KD_{x_4}) \exp(-\alpha KD_{y_1})a] \\
& [\exp(\alpha KD_{y_1})b + \exp(-\alpha KD_{y_1})a] [\exp(\alpha KD_{y_2})b + \exp(-\alpha KD_{y_2})a] \\
& [(\exp(\alpha KD_{y_3})a + \exp(-\alpha KD_{y_3})b)] [\exp(\alpha KD_{y_4})a + \exp(-\alpha KD_{y_4})b] \\
& h(\vec{r}) \Big|_{\vec{r}=0} , \tag{4.135}
\end{aligned}$$

onde os termos a e b são dados pela Eq.(4.65). Ao expandir a Eq.(4.135) em potência de m obtemos uma expressão auto-consistente para a magnetização desta fase, semelhante a expressão dada na Eq.(4.127). Para este tamanho de aglomerado podemos usar a expressão da energia dada pela Eq.(4.70), tanto para a fase F, quanto para a fase SAF, onde os coeficientes A_p são característicos para cada fase.

4.3 Modelos $J_1 - J_2$ anisotrópico numa rede cúbica simples

Como discutimos na introdução, a topologia da rede é uma propriedade marcante nas grandezas termodinâmicas de modelos de spins frustrados, o que de certa forma induz transição de primeira ordem entre as fases laminar e paramagnética para todos os valores de $\alpha > \alpha_{1c}$. Por exemplo, no caso do modelo de Heisenberg ($J_1 - J_2$) muito pouco se

conhece a respeito do diagrama de fase deste sistema, portanto, é um tema que motiva aplicar o formalismo desenvolvido, anteriormente, para a rede quadrada.

4.3.1 Aglomerado com N=1 sítio central

Nesta seção é usada somente uma figura como referência para os modelos das fases ferromagnética e superantiferromagnética. Essa figura ilustra o comportamento da fase SAF no estado fundamental, porém com a reorientação de alguns spins podemos obter a configuração de spins que caracteriza a ordem ferromagnética.

A) Estado superantiferromagnético

No caso tridimensional, o sistema SAF apresenta uma característica bem interessante, como mostra a Fig.(4.16), onde nos planos xy e xz temos o comportamento de um sistema SAF em duas dimensões (ordem colinear), enquanto que nos planos yz temos uma ordem do tipo ferromagnética. Estes fatores caracterizam um sistema SAF em três dimensões, por isso que este sistema é também denominado de fase laminar, pois a ordem do sistema se apresentam nos planos. Esta ordenação dos spins do estado SAF acontece por uma questão de energia de interação, ou seja, a quantidade de energia de interação entre o sítio central e os primeiros e segundos vizinhos proporciona esta configuração mais estável para o sistema de spins.

O Hamiltoniano para o estado SAF tridimensional é dado pela seguinte expressão:

$$-\beta\mathcal{H}_1^{SAF} = (C_x - C_y) S_1, \quad (4.136)$$

sendo

$$C_x = K \left(\sum_{i=1}^2 \sigma_i^B + \sum_{i=3}^6 \sigma_i^A \right) \quad e \quad (4.137)$$

$$C_y = \alpha K \left(\sum_{i=7}^{10} \sigma_i^A + \sum_{i=11}^{18} \sigma_i^B \right). \quad (4.138)$$

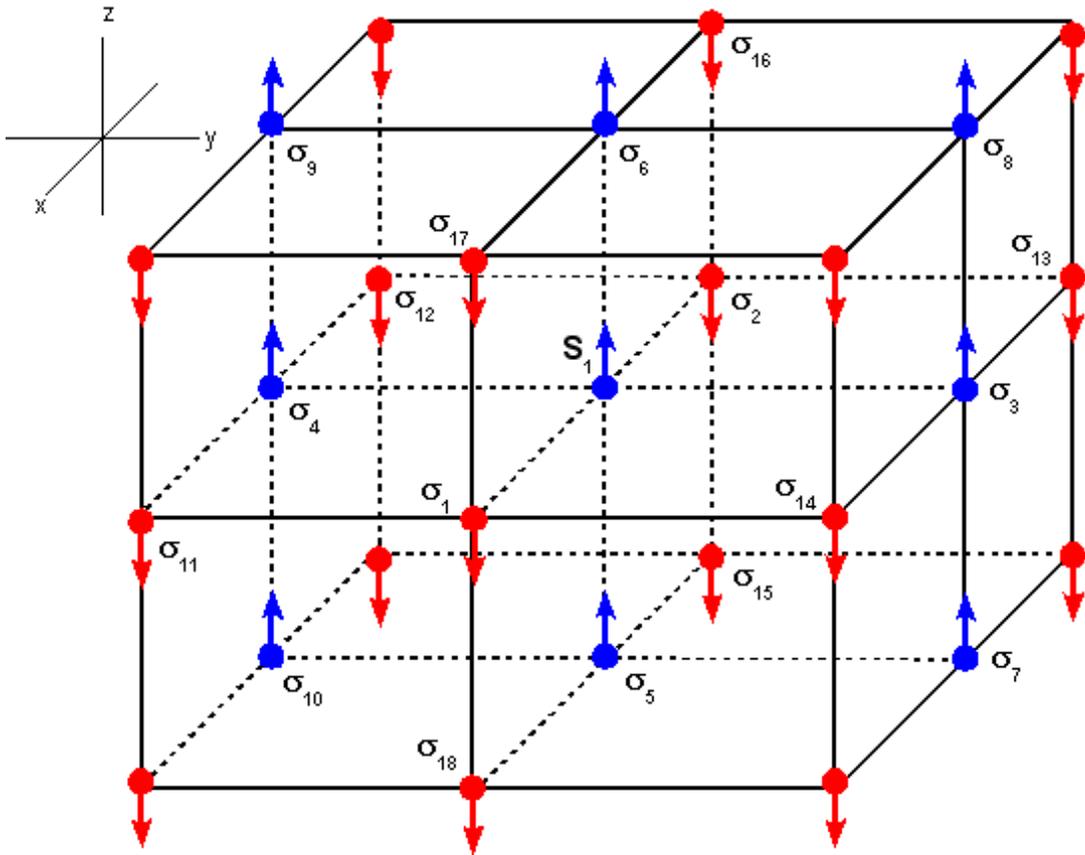


Figura 4.16: Configurações dos spins no estado fundamental da fase superantiferromagnético numa rede cúbica simples para aglomerado com $N = 1$ sítio central.

Realizando os mesmos procedimentos realizados para o caso SAF numa rede quadrada, vamos obter o seguinte resultado para a magnetização da subrede A usando a condição de contorno $m_A = -m_B = m$:

$$\begin{aligned}
m &= [\exp(KD_x)b + \exp(-KD_x)a]^2 [\exp(KD_x)a + \exp(-KD_x)b]^4 \\
&\quad [\exp(\alpha KD_y)a + \exp(-\alpha KD_y)b]^4 [\exp(\alpha KD_y)b + \exp(-\alpha KD_y)a]^8 \\
&\quad f(x, y) |_{x,y=0}
\end{aligned} \tag{4.139}$$

onde a e b são dados pela Eq.(4.65) e $f(x, y) = \tanh(x - y)$. Expandindo a Eq.(4.139) em potências de m , obtemos uma expressão da forma

$$m = \sum_{p=0}^8 A_{2p+1} m^{2p+1}, \tag{4.140}$$

e conseqüentemente encontraremos um funcional para a energia livre integrando a Eq.(4.140).

B) Estado ferromagnético

Tomando como referência a Fig.(4.16), porém orientando todos os spins do sistema num mesmo sentido, teremos a configuração do estado fundamental ferromagnético para um aglomerado com $N = 1$ sítio central numa rede cúbica simples. Como é observado nesta figura, o sítio central possui seis primeiros vizinhos e doze segundos vizinhos, desta forma temos o Hamiltoniano para este sistema dado pela seguinte expressão:

$$-\beta\mathcal{H}_1^F = (C_x - C_y) S_1, \tag{4.141}$$

sendo

$$C_x = K \sum_{i=1}^6 \sigma_i \quad \text{e} \quad C_y = \alpha K \sum_{i=7}^{18} \sigma_i. \tag{4.142}$$

Os resultados para a função de partição e para a magnetização são os análogos aos obtidos para o caso ferromagnético no EFT-1 bidimensional, diferenciando nas expressões

dos termos C_x e C_y , desta forma teremos que

$$m = [(\exp(KDx)a + \exp(-KDx)b)]^6 [\exp(\alpha KDy)a + \exp(-\alpha KDy)b]^{12} f(x, y) |_{x,y=0}, \quad (4.143)$$

onde a e b são dados pela Eq.(4.65). Ao expandir a Eq.(4.143) encontramos uma equação auto-consistente para m semelhante a Eq.(4.140), com os coeficientes A_p diferentes do caso SAF.

4.3.2 Aglomerado com $N = 2$ sítios centrais

Para todos os modelos vamos tomar como referência a Fig.(4.17) que é original para o estado fundamental SAF (laminar), sendo usada também para os estados ferromagnético e antiferromagnético, contudo alterando as orientações de alguns spins do aglomerado de modo a configurar as ordens destes estados.

A) Estado ferromagnético

Da Fig.(4.17) tomando os spins orientados no mesmo sentido, teremos a configuração para o estado fundamental ferromagnético. O Hamiltoniano para esta fase é dado, de acordo com a Fig.(4.17), pela seguinte expressão:

$$-\beta\mathcal{H}_2^F = K [(1 - \Delta) (S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y) + S_1^z S_2^z] + C_1 S_1^z + C_2 S_2^z, \quad (4.144)$$

sendo

$$C_n = C_{nx} - C_{ny}, \quad n = 1, 2 \quad (4.145)$$

$$C_{1x} = K \sum_{i=1}^5 \sigma_i, \quad C_{1y} = \alpha K \left(\sum_{i=10}^{17} \sigma_i + \sum_{i=19}^{22} \sigma_i \right), \quad (4.146)$$

$$C_{2x} = K \sum_{i=14}^{18} \sigma_i, \quad C_{2y} = \alpha K \left(\sum_{i=2}^9 \sigma_i + \sum_{i=23}^{26} \sigma_i \right). \quad (4.147)$$

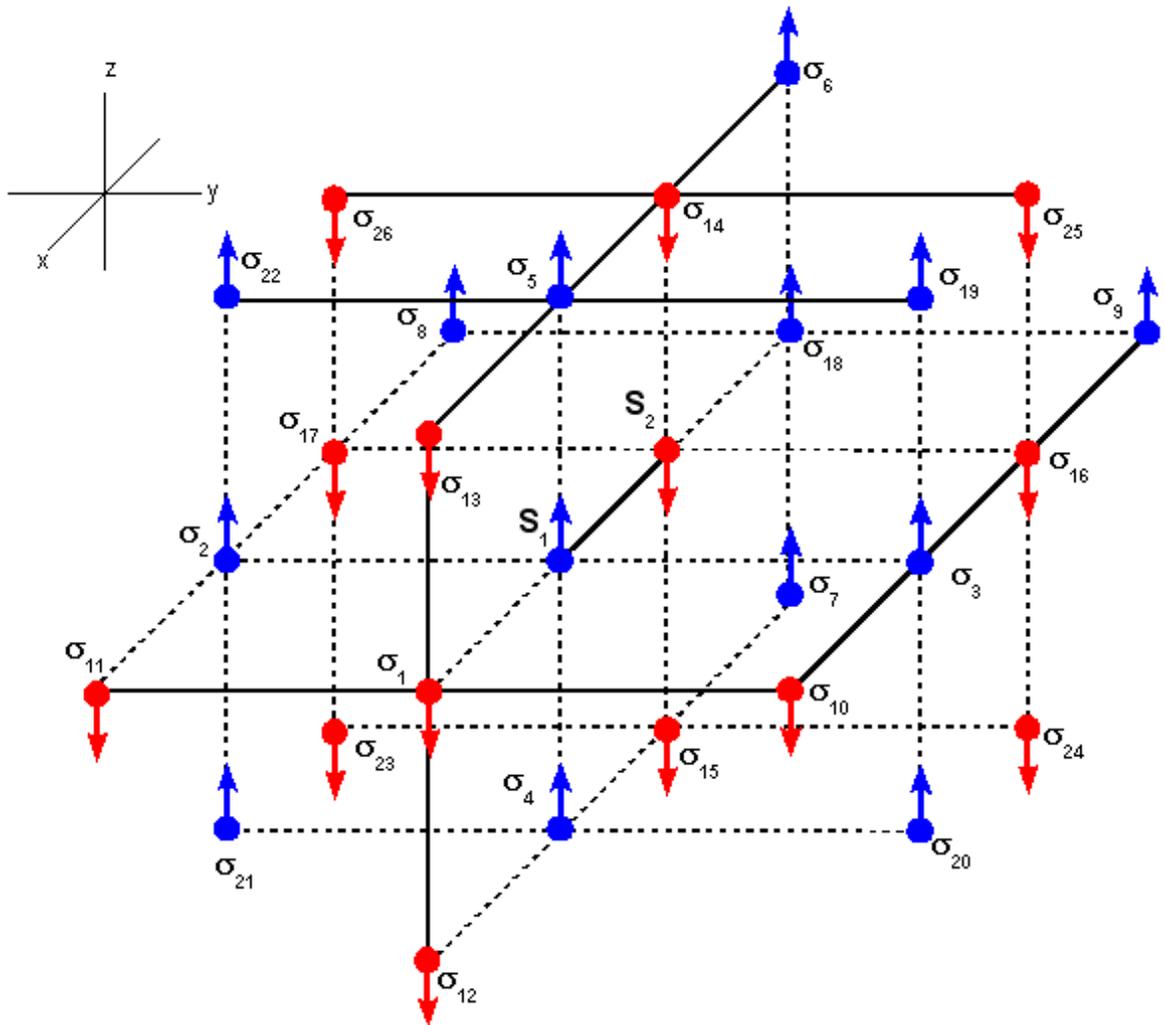


Figura 4.17: Configuração da fase SAF no estado fundamental para um aglomerado de $N = 2$ sítios centrais numa rede cúbica simples.

A partir do mesmo procedimento de desenvolvimento usado no modelo ferromagnético para rede quadrada com $N = 2$ sítios, para determinação da função de partição e da magnetização, vamos obter a seguinte expressão para a magnetização:

$$\begin{aligned}
m = & \left\langle \prod_{i=1}^5 \left[\exp(KD_{x_1})\hat{a}_i + \exp(-KD_{x_1})\hat{b}_i \right] \prod_{i=10}^{17} \left[\exp(\alpha KD_{y_1})\hat{a}_i + \exp(-\alpha KD_{y_1})\hat{b}_i \right] \right. \\
& \prod_{i=19}^{22} \left[\exp(\alpha KD_{y_1})\hat{a}_i + \exp(-\alpha KD_{y_1})\hat{b}_i \right] \prod_{i=14}^{18} \left[\exp(KD_{x_2})\hat{a}_i + \exp(-KD_{x_2})\hat{b}_i \right] \\
& \left. \prod_{i=2}^9 \left[\exp(\alpha KD_{y_2})\hat{a}_i + \exp(-\alpha KD_{y_2})\hat{b}_i \right] \prod_{i=23}^{26} \left[\exp(\alpha KD_{y_2})\hat{a}_i + \exp(-\alpha KD_{y_2})\hat{b}_i \right] \right\rangle \\
& f(\vec{r}) \Big|_{\vec{r}=0} , \tag{4.148}
\end{aligned}$$

onde \hat{a}_i e \hat{b}_i são dados pela Eq.(4.92) e $f(\vec{r})$ é dado pela Eq.(4.90). Aplicando a propriedade da cinemática dos spins ($\sigma_i^2 = 1$) para os sítios $i = 2, 3, 4, 5, 14, 15, 16, 17$, comuns a condição de primeiros e segundos vizinhos em relação aos sítios centrais S_1 e S_2 , obtemos a seguinte expressão para a magnetização do sistema:

$$\begin{aligned}
m = & \left\langle \left[\exp(KD_{x_1})\hat{a}_1 + \exp(-KD_{x_1})\hat{b}_1 \right] \prod_{i=10}^{13} \left[\exp(\alpha KD_{y_1})\hat{a}_i + \exp(-\alpha KD_{y_1})\hat{b}_i \right] \right. \\
& \prod_{i=19}^{22} \left[\exp(\alpha KD_{y_1})\hat{a}_i + \exp(-\alpha KD_{y_1})\hat{b}_i \right] \left[\exp(KD_{x_2})\hat{a}_{18} + \exp(-KD_{x_2})\hat{b}_{18} \right] \\
& \prod_{i=6}^9 \left[\exp(\alpha KD_{y_2})\hat{a}_i + \exp(-\alpha KD_{y_2})\hat{b}_i \right] \prod_{i=23}^{26} \left[\exp(\alpha KD_{y_2})\hat{a}_i + \exp(-\alpha KD_{y_2})\hat{b}_i \right] \\
& \prod_{i=2}^5 \left[\exp(KD_{x_1}) \exp(\alpha KD_{y_2})\hat{a}_i + \exp(-KD_{x_1}) \exp(-\alpha KD_{y_2})\hat{b}_i \right] \\
& \left. \prod_{i=14}^{17} \left[\exp(KD_{x_2}) \exp(\alpha KD_{y_1})\hat{a}_i + \exp(-KD_{x_2}) \exp(-\alpha KD_{y_1})\hat{b}_i \right] \right\rangle \\
& f(\vec{r}) \Big|_{\vec{r}=0} . \tag{4.149}
\end{aligned}$$

A partir do desenvolvimento dos produtórios e aplicando a aproximação de Zernike ficaremos com a seguinte expressão:

$$\begin{aligned}
m &= [\exp(KD_{x_1})a + \exp(-KD_{x_1})b] [\exp(\alpha KD_{y_1})a + \exp(-\alpha KD_{y_1})b]^4 \\
&\quad [\exp(\alpha KD_{y_1})a + \exp(-\alpha KD_{y_1})b]^4 (\exp(KD_{x_2})a + \exp(-KD_{x_2})b) \\
&\quad [\exp(\alpha KD_{y_2})a + \exp(-\alpha KD_{y_2})b]^4 [\exp(\alpha KD_{y_2})a + \exp(-\alpha KD_{y_2})b]^4 \\
&\quad [\exp(KD_{x_1}) \exp(\alpha KD_{y_2})a + \exp(-KD_{x_1}) \exp(-\alpha KD_{y_2})b]^4 \\
&\quad [\exp(KD_{x_2}) \exp(\alpha KD_{y_1})a + \exp(-KD_{x_2}) \exp(-\alpha KD_{y_1})b]^4 \\
&\quad f(\vec{r}) |_{\vec{r}=0}
\end{aligned} \tag{4.150}$$

onde os termos a e b são iguais aos dados na Eq.(4.65). Ao expandir a Eq.(4.150) ficaremos com um expressão auto-consistente para a magnetização m dada por

$$m = \sum_{p=0}^{12} A_{2p+1} m^{2p+1}, \tag{4.151}$$

e também podemos obter a energia livre de imediato.

B) Estado antiferromagnético

Tomando como referência a Fig.(4.17) e reorientando no sentido opostos os spins $\sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \sigma_5, \sigma_6, \sigma_7, \sigma_8, \sigma_9, \sigma_{10}, \sigma_{11}, \sigma_{12}, \sigma_{13}, \sigma_{14}, \sigma_{15}, \sigma_{16}$ e σ_{17} , teremos a configuração de spins que caracteriza o estado antiferromagnético tridimensional, tendo duas subredes A e B. Portanto, o Hamiltoniano desse sistema é dado pela seguinte expressão:

$$-\beta\mathcal{H}_2^{AF} = -K [(1 - \Delta) (S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y) + S_1^z S_2^z] + C_1 S_1^z + C_2 S_2^z, \tag{4.152}$$

sendo

$$C_n = -C_{nx} - C_{ny}, \quad n = 1, 2 \quad (4.153)$$

$$C_{1x} = K \sum_{i=1}^5 \sigma_i^B, \quad C_{1y} = \alpha K \left(\sum_{i=10}^{17} \sigma_i^A + \sum_{i=19}^{22} \sigma_i^A \right), \quad (4.154)$$

$$C_{2x} = K \sum_{i=14}^{18} \sigma_i^A, \quad C_{2y} = \alpha K \left(\sum_{i=2}^9 \sigma_i^B + \sum_{i=23}^{26} \sigma_i^B \right). \quad (4.155)$$

A Eq.(4.152) é semelhante a obtida na Eq.(4.98) para o caso AF bidimensional, desta forma os resultados para as expressões da função de partição e da magnetização da subrede A são os mesmos para o caso AF bidimensional para o aglomerado com $N = 2$ sítios centrais. Portanto, a expressão da magnetização, após aplicar a técnica do operador diferencial, é dada pela seguinte expressão:

$$\begin{aligned} m_A = & \left\langle \prod_{i=1}^5 \left[\exp(KD_{x_1}) \hat{a}_i^B + \exp(-KD_{x_1}) \hat{b}_i^B \right] \prod_{i=10}^{17} \left[\exp(\alpha KD_{y_1}) \hat{a}_i^A + \right. \right. \\ & \left. \left. \exp(-\alpha KD_{y_1}) \hat{b}_i^A \right] \prod_{i=19}^{22} \left[\exp(\alpha KD_{y_1}) \hat{a}_i^A + \exp(-\alpha KD_{y_1}) \hat{b}_i^A \right] \right. \\ & \prod_{i=14}^{18} \left[\exp(KD_{x_2}) \hat{a}_i^A + \exp(-KD_{x_2}) \hat{b}_i^A \right] \prod_{i=2}^9 \left[\exp(\alpha KD_{y_2}) \hat{a}_i^B + \right. \\ & \left. \left. \exp(-\alpha KD_{y_2}) \hat{b}_i^B \right] \prod_{i=23}^{26} \left[\exp(\alpha KD_{y_2}) \hat{a}_i^B + \exp(-\alpha KD_{y_2}) \hat{b}_i^B \right] \right\rangle \\ & g(\vec{r}) \Big|_{\vec{r}=0}, \quad (4.156) \end{aligned}$$

sendo $\hat{a}_i^{A,B}$ e $\hat{b}_i^{A,B}$ dados pela Eq.(4.106) e a função $g(\vec{r})$ é dada pela Eq.(4.104). Desenvolvendo os produtórios e aplicando a cinemática dos spins nos sítios $i = 2, 3, 4, 5, 14, 15, 16, 17$

ficaremos com a seguinte expressão:

$$\begin{aligned}
m_A = & \left\langle \left[\exp(KD_{x_1})\widehat{a}_1^B + \exp(-KD_{x_1})\widehat{b}_1^B \right] \prod_{i=10}^{13} \left[\exp(\alpha KD_{y_1})\widehat{a}_i^A + \right. \right. \\
& \left. \left. \exp(-\alpha KD_{y_1})\widehat{b}_i^A \right] \prod_{i=19}^{22} \left[\exp(\alpha KD_{y_1})\widehat{a}_i^A + \exp(-\alpha KD_{y_1})\widehat{b}_i^A \right] \right. \\
& \left. \left[\exp(KD_{x_2})\widehat{a}_{18}^A + \exp(-KD_{x_2})\widehat{b}_{18}^A \right] \prod_{i=6}^9 \left[\exp(\alpha KD_{y_2})\widehat{a}_i^B + \exp(-\alpha KD_{y_2})\widehat{b}_i^B \right] \right. \\
& \prod_{i=23}^{26} \left[\exp(\alpha KD_{y_2})\widehat{a}_i^B + \exp(-\alpha KD_{y_2})\widehat{b}_i^B \right] \prod_{i=2}^5 \left[\exp(KD_{x_1}) \exp(\alpha KD_{y_2})\widehat{a}_i^B + \right. \\
& \left. \exp(-KD_{x_1}) \exp(-\alpha KD_{y_2})\widehat{b}_i^B \right] \prod_{i=14}^{17} \left[\exp(KD_{x_2}) \exp(\alpha KD_{y_1})\widehat{a}_i^A + \right. \\
& \left. \left. \exp(-KD_{x_2}) \exp(-\alpha KD_{y_1})\widehat{b}_i^A \right] \right\rangle g(\vec{r}) \Big|_{\vec{r}=0}, \tag{4.157}
\end{aligned}$$

aplicando a aproximação de Zernike e a condição de contorno $m_A = -m_B = m$ ficaremos com expressão dada por

$$\begin{aligned}
m = & \left[\exp(KD_{x_1})b + \exp(-KD_{x_1})a \right] \left[\exp(\alpha KD_{y_1})a + \exp(-\alpha KD_{y_1})b \right]^4 \\
& \left[\left(\exp(\alpha KD_{y_1})a + \exp(-\alpha KD_{y_1})b \right) \right]^4 \left[\exp(KD_{x_2})a + \exp(-KD_{x_2})b \right] \\
& \left[\exp(\alpha KD_{y_2})b + \exp(-\alpha KD_{y_2})a \right]^4 \left[\exp(\alpha KD_{y_2})b + \exp(-\alpha KD_{y_2})a \right]^4 \\
& \left[\exp(KD_{x_1}) \exp(\alpha KD_{y_2})b + \exp(-KD_{x_1}) \exp(-\alpha KD_{y_2})a \right]^4 \\
& \left[\exp(KD_{x_2}) \exp(\alpha KD_{y_1})a + \exp(-KD_{x_2}) \exp(-\alpha KD_{y_1})b \right]^4 \\
& g(\vec{r}) \Big|_{\vec{r}=0} \tag{4.158}
\end{aligned}$$

onde os termos a e b são iguais aos da Eq.(4.65). Ao expandir a Eq.(4.158) em termos de m obtemos uma equação auto-consistente para a magnetização semelhante a Eq.(4.151), porém os coeficientes A_p são relacionados a cada caso.

C) Estado superantiferromagnético

Da Fig.(4.17) temos o esquema do estado fundamental para a fase laminar (SAF) tridimensional. A fase laminar depende da interação entre os primeiros vizinhos, ou seja, se é do tipo ferromagnética (-) ou antiferromagnética (+), então é necessário dois Hamiltonianos para a fase laminar que é dado pela expressão a seguir:

$$-\beta\mathcal{H}_2^{SAF} = \pm K [(1 - \Delta) (S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y) + S_1^z S_2^z] + C_1 S_1^z + C_2 S_2^z, \quad (4.159)$$

sendo

$$C_n = \pm C_{nx} - C_{ny}, \quad n = 1, 2 \quad (4.160)$$

$$C_{1x} = K \left(\sigma_1^B + \sum_{i=2}^5 \sigma_i^A \right), \quad C_{1y} = \alpha K \left(\sum_{i=10}^{17} \sigma_i^B + \sum_{i=19}^{22} \sigma_i^A \right), \quad (4.161)$$

$$C_{2x} = K \left(\sigma_{18}^A + \sum_{i=14}^{17} \sigma_i^B \right), \quad C_{2y} = \alpha K \left(\sum_{i=2}^9 \sigma_i^A + \sum_{i=23}^{26} \sigma_i^B \right). \quad (4.162)$$

A forma da Eq.(4.159) é semelhante a Eq.(4.109), desta forma os resultados obtidos para a função de partição é a mesma. A partir da magnetização da subrede A definida por $m_A = \langle S_1^z \rangle$ e aplicando a técnica do operador diferencial ficaremos com a seguinte

expressão:

$$\begin{aligned}
m_A = & \left\langle \left[\exp(KD_{x_1})\widehat{a}_1^B + \exp(-KD_{x_1})\widehat{b}_1^B \right] \prod_{i=2}^5 \left[\exp(KD_{x_1})\widehat{a}_i^A + \right. \right. \\
& \left. \exp(-KD_{x_1})\widehat{b}_i^A \right] \prod_{i=10}^{17} \left[\exp(\alpha KD_{y_1})\widehat{a}_i^B + \exp(-\alpha KD_{y_1})\widehat{b}_i^B \right] \\
& \prod_{i=19}^{22} \left[\exp(\alpha KD_{y_1})\widehat{a}_i^A + \exp(-\alpha KD_{y_1})\widehat{b}_i^A \right] \left[\exp(KD_{x_2})\widehat{a}_{18}^A + \right. \\
& \left. \exp(-KD_{x_2})\widehat{b}_{18}^A \right] \prod_{i=14}^{17} \left[\exp(KD_{x_2})\widehat{a}_i^B + \exp(-KD_{x_2})\widehat{b}_i^B \right] \\
& \prod_{i=2}^9 \left[\exp(\alpha KD_{y_2})\widehat{a}_i^A + \exp(-\alpha KD_{y_2})\widehat{b}_i^A \right] \prod_{i=23}^{26} \left[\exp(\alpha KD_{y_2})\widehat{a}_i^B + \right. \\
& \left. \exp(-\alpha KD_{y_2})\widehat{b}_i^B \right] \left. \right\rangle f_{\pm}(\vec{r}) \Big|_{\vec{r}=0}, \tag{4.163}
\end{aligned}$$

onde $\widehat{a}_i^{A,B}$ e $\widehat{b}_i^{A,B}$ são dados pela Eq.(4.106) e ainda temos que $f_+(\vec{r}) = f(\vec{r})$ e $f_-(\vec{r}) = g(\vec{r})$, como foi proposto no caso da rede quadrada. Aplicando a cinemática dos spins para os spins $i = 2, 3, 4, 5, 14, 15, 16, 17$ na Eq.(4.163) ficaremos com

$$\begin{aligned}
m_A = & \left\langle \left[\exp(KD_{x_1})\widehat{a}_1^B + \exp(-KD_{x_1})\widehat{b}_1^B \right] \prod_{i=10}^{13} \left[\exp(\alpha KD_{y_1})\widehat{a}_i^B + \exp(-\alpha KD_{y_1})\widehat{b}_i^B \right] \right. \\
& \prod_{i=19}^{22} \left[\exp(\alpha KD_{y_1})\widehat{a}_i^A + \exp(-\alpha KD_{y_1})\widehat{b}_i^A \right] \left[\exp(KD_{x_2})\widehat{a}_{18}^A + \exp(-KD_{x_2})\widehat{b}_{18}^A \right] \\
& \prod_{i=6}^9 \left[\exp(\alpha KD_{y_2})\widehat{a}_i^A + \exp(-\alpha KD_{y_2})\widehat{b}_i^A \right] \prod_{i=23}^{26} \left[\exp(\alpha KD_{y_2})\widehat{a}_i^B + \exp(-\alpha KD_{y_2}) \right. \\
& \left. \widehat{b}_i^B \right] \prod_{i=2}^5 \left[\left(\exp(KD_{x_1}) \exp(\alpha KD_{y_2})\widehat{a}_i^A + \exp(-KD_{x_1}) \exp(-\alpha KD_{y_2})\widehat{b}_i^A \right) \right. \\
& \left. \prod_{i=14}^{17} \left[\exp(KD_{x_2}) \exp(\alpha KD_{y_1})\widehat{a}_i^B + \exp(-KD_{x_2}) \exp(-\alpha KD_{y_1})\widehat{b}_i^B \right] \right] \left. \right\rangle \\
& f_{\pm}(\vec{r}) \Big|_{\vec{r}=0}, \tag{4.164}
\end{aligned}$$

aplicando a aproximação de Zernike e a condição de contorno $m_A = -m_B = m$ obtemos

$$\begin{aligned}
m = & [(\exp(KD_{x_1})b + \exp(-KD_{x_1})a)] [(\exp(\alpha KD_{y_1})b + \exp(-\alpha KD_{y_1})a)]^4 \\
& [(\exp(\alpha KD_{y_1})a + \exp(-\alpha KD_{y_1})b)]^4 [\exp(KD_{x_2})a + \exp(-KD_{x_2})b] \\
& [\exp(\alpha KD_{y_2})a + \exp(-\alpha KD_{y_2})b]^4 [(\exp(\alpha KD_{y_2})b + \exp(-\alpha KD_{y_2})a)]^4 \\
& [\exp(KD_{x_1}) \exp(\alpha KD_{y_2})a + \exp(-KD_{x_1}) \exp(-\alpha KD_{y_2})b]^4 \\
& [\exp(KD_{x_2}) \exp(\alpha KD_{y_1})b + \exp(-KD_{x_2}) \exp(-\alpha KD_{y_1})a]^4 \\
& f_{\pm}(\vec{r}) |_{\vec{r}=0}
\end{aligned} \tag{4.165}$$

onde os termos a e b são dados pela Eq.(4.65). Expandindo a Eq.(4.165) em relação a m obtemos uma expressão semelhante a Eq.(4.151) para a magnetização da fase SAF, diferenciando somente os coeficientes A_p .

Para o caso da rede cúbica simples são observados transições de primeira ordem nos diagramas de fases para os casos F-P, AF-P e SAF-P. Desta forma é necessário utilizar a expressão da energia livre para as fases F, AF, SAF e P. A forma da energia livre para cada uma dessas fases é semelhante a expressão dada pela Eq.(4.70), sendo que para cada fase os coeficientes A_p são diferentes.

4.4 Discussão dos resultados

Iremos a seguir apresentar os resultados numéricos para o diagrama de fase no plano $T - \alpha$, como uma função da anisotropia Δ e da dimensão espacial d . A dificuldade para se obter a temperatura de transição de fase de primeira ordem, torna o estudo do modelo $J_1 - J_2$ muito difícil, mas neste trabalho desenvolveremos um formalismo geral capaz de localizar esta temperatura de transição.

4.4.1 Caso Ising ($\Delta = 1$)

Na Fig.(4.18) temos o diagrama de fases no plano $k_B T_c / J - \alpha$ para o modelo de Ising numa rede quadrada na teoria de campo efetivo (EFT) em aglomerados com $N = 1, 2$ e 4 sítios centrais. As linhas contínuas correspondem a transição de segunda ordem, enquanto as linhas descontínuas são referentes a transição de primeira ordem. No tratamento da criticalidade entre as fases SAF-P, as linhas de transições são obtidas a partir da igualdade das energias livres nestas duas fases e resolvendo a equação de estado da fase SAF. Na transição entre as fase F(AF) e P usamos o mesmo procedimento.

Usando EFT-1 e EFT-2, entre as fases F(AF) e P temos encontrado espuriamente uma linha de primeira ordem, e também um ponto tricrítico foi observado no diagrama de fase. A temperatura de transição de primeira ordem é caracterizada pela existência de uma descontinuidade do parâmetro de ordem ($m \neq 0$ para $T = T_c$). É observado que a medida que aumenta o parâmetro de frustração α , T_c diminui se anulando no ponto crítico $\alpha_c = 0.5$. Para $\alpha > \alpha_c$ esperamos um ordenamento do tipo SAF, onde T_c cresce a medida que o parâmetro de frustração α aumenta, passando por uma linha de transição de primeira ordem (linha descontínua) para pequeno valor de α , e uma linha de segunda ordem (linha contínua) para grandes valores de α , estas duas linhas se encontram num ponto tricrítico (PTC). Para pequenos aglomerados ($N = 1, 2$), o presente formalismo (EFT-1 e EFT-2) encontra o estado fundamental SAF apenas para $\alpha > \alpha_c^* > 0.5$, onde atribuímos este resultado espúrio ao efeito do tamanho finito. Na tentativa de eliminar estes resultados inconsistentes, estenderemos o formalismo para aglomerado com $N = 4$ spins (EFT-4). Na Fig.(4.18) observamos que EFT-4 apresenta resultados qualitativamente corretos quando comparados com outros formalismo [9].

Como a temperatura de transição SAF-P tende para $\alpha_c = 0.5$ somente com $N = 4$ sítios centrais para o caso Ising, isto acarreta um grande problema no tratamento do modelo de Heisenberg com $N = 4$ sítios centrais, pois teremos que fazer uma diagonalização numérica para o Hamiltoniano que representa esse modelo, sendo que esse processo de diagonalização é feito para uma matriz de ordem $n = 16$. Este processo de diago-

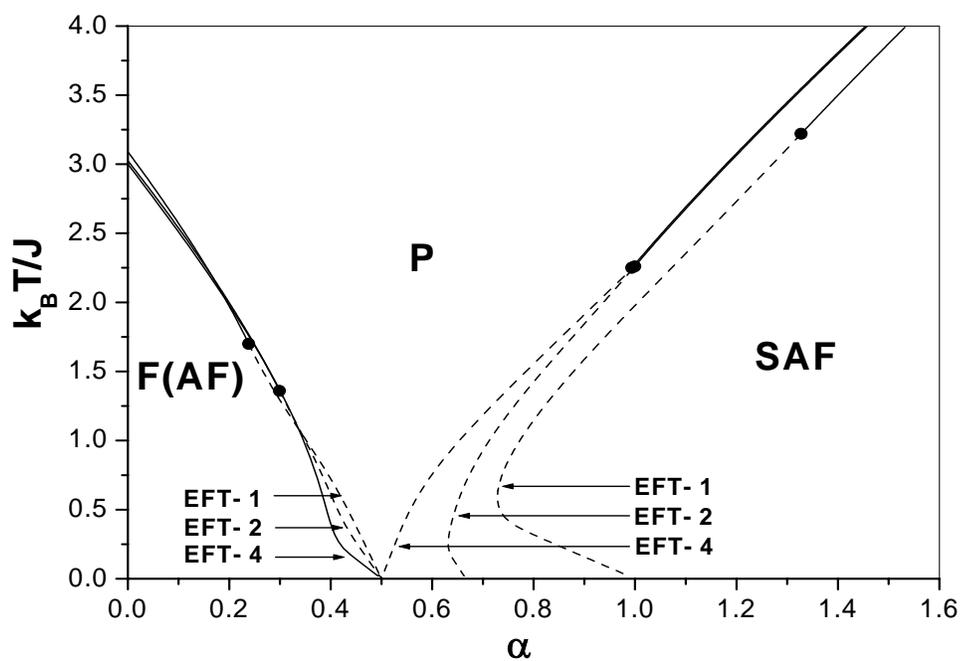


Figura 4.18: Diagrama de fase no plano $T-\alpha$ para o modelo de Ising frustrado numa rede quadrada. As linhas tracejadas representa transições de primeira ordem, as contínuas transição de segunda ordem e os pontos correspondem a pontos tricríticos. As linhas foram obtidas a partir da EFT-1, EFT-2 e EFT-4.

nalização numérica e a implementação computacional para calcular os coeficientes das equações de estado, torna a execução computacional muito demorada e bastante instável devido o fato de ocorrer divergência na determinação das raízes. Para contornar essa dificuldade propomos neste trabalho, no tratamento dos modelos referente a rede quadrada, que seja usada a aproximação dada a partir da derivada da função magnetização da fase SAF. Desta forma fazendo

$$m = \sum_{p=0}^n A_{2p+1} m^{2p+1} = F(m, T, \alpha) \quad (4.166)$$

Derivando parcialmente a Eq.(4.166) em relação a m ficaremos com a seguinte expressões fixando α e T :

$$\left(\frac{\partial F}{\partial m} \right)_{\alpha, T} = 1, \quad (4.167)$$

e, portanto,

$$\sum_{p=0}^n (2p+1) A_{2p+1} m^{2p} = 1 \quad (4.168)$$

O resultado dado na Eq.(4.167) é exato quando a criticalidade do sistema é referente a uma temperatura crítica, ou seja, a transição de fase é de segunda ordem, onde temos que

$$\left(\frac{dm}{dT} \right)_c = \infty, \quad \text{se } \alpha = \text{fixo} \quad (4.169)$$

$$\left(\frac{dm}{d\alpha} \right)_c = \infty, \quad \text{se } T = \text{fixo} \quad (4.170)$$

Para transições de fase de primeira ordem, as divergências dadas pelas Eqs.(4.169),(4.170) normalmente ocorrem no ponto de transição $P(T_D, \alpha_D)$, onde esses valores diferem dos valores do ponto $P(T_c, \alpha_c)$ obtidos pela igualdade de energias livres. Fixando, por exemplo, um valor de α obtemos $T_D > T_c$. A Fig.(4.19) ilustra bem estes comportamentos da magnetização em função da temperatura para este dois tipos de transição de fase.

Da Fig.(4.19) temos que a temperatura (T_D), onde ocorre a divergência da derivada

$\frac{dm}{dT} = \infty$, é maior que a temperatura de transição T_{1C} , onde as energias livres são iguais referentes a fases envolvidas na transição de fase. Desta forma é de se esperar que a linha de transição de primeira ordem, obtida usando a igualdade das energias livres, seja diferente da linha de transição obtida pela expressão dada pela derivada da magnetização. Contudo, nos modelos estudados neste capítulo os resultados obtidos a partir desta aproximação dada pela Eq.(4.168) são muito bons quando comparados com o resultado obtido a partir da igualdade das energias livres, como podemos observar na Fig.(4.20).

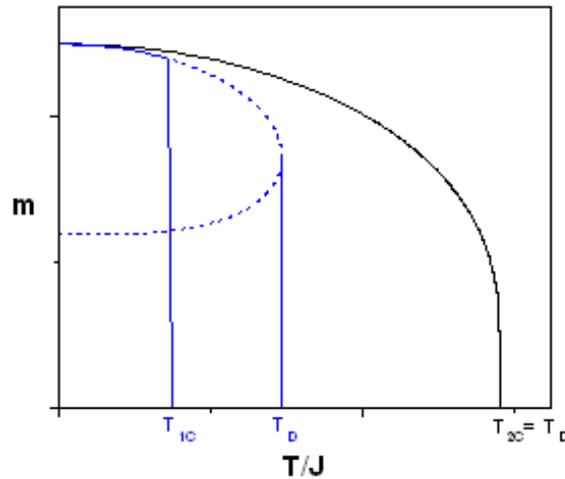


Figura 4.19: Comportamento da magnetização em função da temperatura para transições de primeira e segunda ordem. T_{1c} e T_{2c} representam as temperaturas de transição de primeira e segunda ordem. T_D é temperatura de transição de primeira ordem via divergência da derivada da magnetização em relação a temperatura.

Da Fig.(4.20) podemos observar que são obtidas as mesmas temperaturas críticas na região de transição de segunda ordem para os dois métodos utilizados em EFT-4. Na região de transição de primeira ordem, a temperatura $T_D > T_C$, mas relativamente próximas e ainda no estado fundamental os dois métodos encontram o valor crítico $\alpha_c = 0.5$. A partir destes resultados obtidos temos a motivação para utilizar a aproximação dada pela Eq.(4.168) para determinar as linhas de primeira ordem dos diagramas de fase

para uma rede quadrada para aglomerado com $N < 4$ sítios. Desta forma, podemos fazer o tratamento do modelo de Heisenberg para uma rede quadrada tomando o tamanho do aglomerado com $N = 2$ sítios centrais, o que acarreta uma diagonalização exata do Hamiltoniano que representa o modelo estudado.

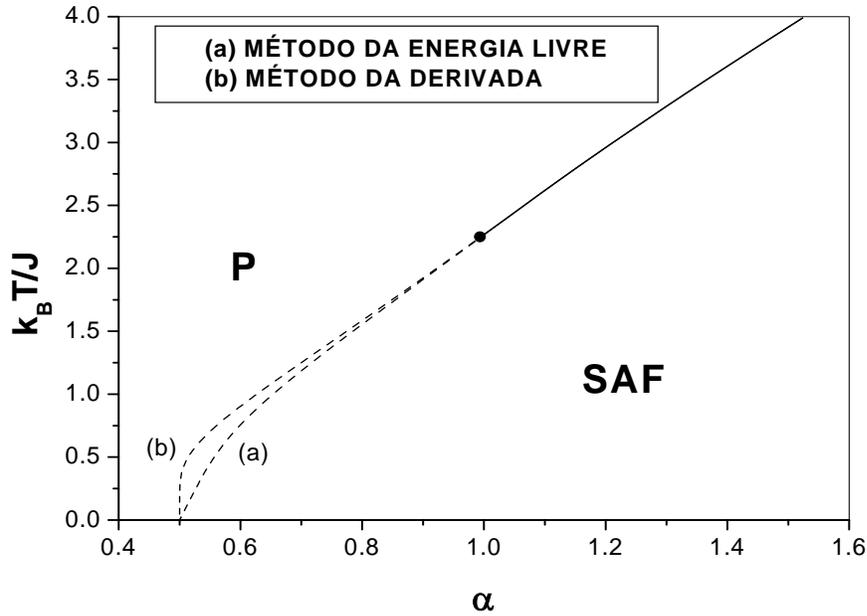


Figura 4.20: Diagrama de fase no plano $T - \alpha$ do modelo de Ising frustrado na rede quadrada obtido via EFT-4. A linha de transição de fase de primeira ordem SAF-P encontrada pela energia livre é menor que a obtida da divergência da derivada da magnetização.

Do ponto de vista computacional, a análise do estado fundamental ($T = 0$) é um problema bastante complexo, por causa das divergências existentes do tipo exponencial ($\exp(a/T)$). Em baixa dimensionalidade ($d = 2$), percebemos que o problema torna-se mais marcante, uma vez que tivemos que obter diagrama de fase qualitativamente correto apenas quando utilizamos aglomerado com $N = 4$ spins (EFT-4). As linhas de primeira ordem foram obtidas para $N = 4$ spins usando o método da energia livre

(construção de Maxwell dado pela Eq.(4.68)), apresentando resultados sub-estimados em comparação com o método da derivada (ver Fig.(4.20)). Ambos os métodos descrevem adequadamente o diagrama de fase. Devemos mencionar, ainda, que EFT-1 e EFT-2 mostram resultados inconsistentes para a linha de transição entre as fases F(AF)-P, cuja a previsão é de uma transição de segunda ordem [9]. Usando EFRG com aglomerados com $N' = 1$ e $N = 2$ spins é encontrado apenas transição de fase contínua entre essas fases, que é qualitativamente correta. Com o aumento da dimensionalidade, por exemplo, $d = 3$ a convergência numérica torna-se mais atenuada, o que certamente nos levará a usar pequeno aglomerados para obter o comportamento qualitativamente correto para o diagrama de fase.

Na Fig.(4.21) apresentamos os resultados do diagrama de fase no plano $T - \alpha$ para o modelo de Ising frustrado numa rede cúbica simples. Usamos EFT-1 Fig.(a) e EFT-2 Fig.(b), onde as linhas de primeira ordem são obtidas via igualdades das energias livres. No caso EFT-1 (a), a transição de primeira ordem entre as fases a laminar (SAF) e paramagnética (P) está de acordo com o resultado obtido por Emílio e colaboradores [10] usando o método variacional (CVM), ou seja, a linha é toda de primeira ordem. Por outro lado, no caso da fase F(AF) ($\alpha < 0.25$) temos previsto um resultado diferente para o diagrama em comparação ao obtido por Emílio, onde são observados transições de primeira e segunda ordem com a presença de um ponto tricrítico $P_1(\alpha_t = 0.19; T_t/J = 2.1)$. Na análise de *finite size scaling*, temos aplicado EFT-2 (b) e os resultados qualitativamente corretos foram obtidos para o diagrama de fase em todo o intervalo do parâmetro de frustração α , não sendo mais apresentado um ponto tricrítico na linha de transição de fase F(AF)-P. A linha de transição F(AF)-SAF é determinada a partir da igualdade de energia livres das fases F(AF) e SAF, resultando na seguinte expressão:

$$\frac{1}{2}m_F^2 - \sum_{p=0}^n \frac{A_{2p+1}}{2p+2} m_F^{2p+2} = \frac{1}{2}m_{SAF}^2 - \sum_{p=0}^n \frac{A_{2p+1}}{2p+2} m_{SAF}^{2p+2}. \quad (4.171)$$

Resolvemos simultaneamente três equações não lineares $m_F = F_1(m_F, T, \alpha)$, $m_{SAF} = F_2(m_{SAF}, T, \alpha)$ e a expressão 4.171. Dos resultados numéricos tivemos uma previsão de

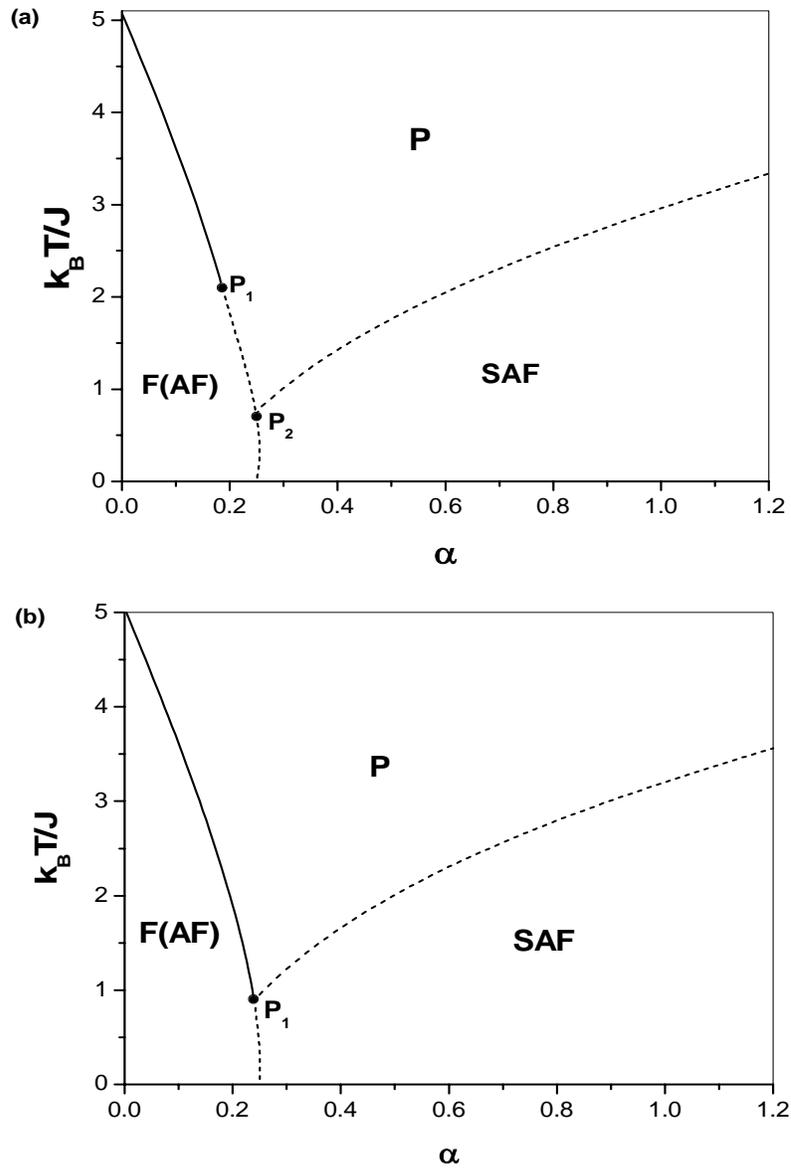


Figura 4.21: Diagrama de fase no plano $T - \alpha$ para o modelo de Ising frustrado numa rede cúbica simples obtido por EFT-1 (a) e EFT-2 (b). As linhas contínuas representam transições de segunda ordem e as linhas tracejadas transições de primeira ordem.

transição de fase de primeira ordem entre as fases F(AF) e SAF.

4.4.2 Caso Heisenberg

A partir do aglomerado com $N = 2$ sítios centrais podemos fazer o tratamento do modelo do Heisenberg, do qual podemos tomar os casos especiais para os modelos de Ising ($\Delta = 1$) e Heisenberg Isotrópico ($\Delta = 0$), além dos diagramas para o caso Heisenberg Anisotrópico. Para $\Delta \neq 1$, os comportamentos dos estados ferromagnéticos e antiferromagnéticos são diferentes.

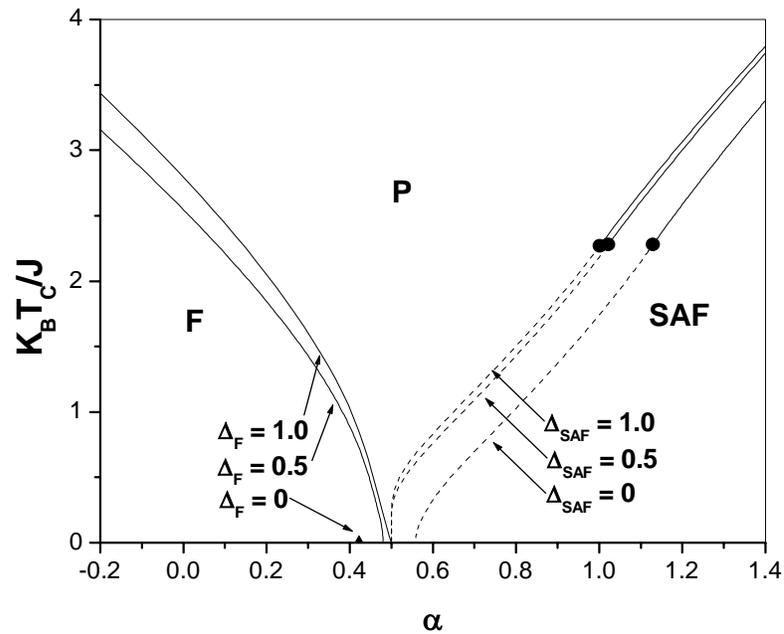


Figura 4.22: Comportamento da temperatura crítica em função do parâmetro de frustração para o modelo $J_1 - J_2$ anisotrópico ferromagnético num rede quadrada, para diferentes valores do parâmetro Δ .

Na Fig.(4.22) apresentamos a dependência da temperatura crítica em relação ao parâmetro de frustração α para o modelo $J_1 - J_2$ anisotrópico ferromagnético numa

rede quadrada. Como foi visto anteriormente, na análise usando EFT-2 no limite Ising ($\Delta = 1$) a transição de fase F(AF)-P apresenta um ponto tricrítico, que não é um resultado qualitativamente correto, pois a linha deve ser toda de segunda ordem. Resolvemos este problema aplicando a aproximação do grupo de renormalização na teoria de campo efetivo em aglomerados com $N = 1$ e $N = 2$ sítios centrais (EFRG).

Para obter a linha de primeira ordem entre as fases SAF e P, usamos a metodologia desenvolvida anteriormente, que é baseada na divergência da derivada da magnetização em relação a temperatura (i.e. $(\frac{dm}{dT})_{T_c} \rightarrow \infty$ para um dado valor de α). Quando comparamos esta linha de transição com a obtida usando a igualdade de energias livres para o caso EFT-4, observamos uma boa concordância qualitativa. Por outro lado, EFT-2 não encontra linha de primeira ordem adequada, usando o método da igualdade da energia livres das fases SAF e P na região de baixas temperaturas, onde o estado fundamental ($T = 0$) fica completamente desconfigurado na transição de fase. Apesar de não ter sido discutido anteriormente, a obtenção da linha de primeira ordem usando EFT-2 na transição SAF-P com o método da derivada para o caso Ising, devemos mencionar que a região SAF do diagrama de fase apresenta resultados qualitativamente corretos. Devido as instabilidades computacionais em sistema de baixa dimensionalidade próximo do estado fundamental ($T = 0$), o efeito de tamanho finito na aproximação usada é mais atenuante na rede quadrada. Na rede cúbica simples o aglomerado com $N = 2$ spins (EFT-2) já é suficiente, por causa de menor instabilidade, e observamos pouca diferenciação dos resultados da linha de primeira ordem usando os dois métodos (derivada e energia livre).

Para o sistema ferromagnético podemos observar da Fig.(4.22) que a linha de transição F-P no caso Ising ($\Delta = 1$) é superior a linha de transição ($\Delta = 0.5$), ou seja, para um mesmo valor de α é necessário mais energia térmica no sistema Ising do que no sistema Heisenberg para que seja destruída a ordem ferromagnética. A explicação para isto, se deve ao fato de que um sistema Ising apresenta menor grau de liberdade do que um sistema Heisenberg, pois no sistema Ising os spins só possuem um direção de orientação,

enquanto que num sistema Heisenberg o spins possuem três direções de orientações. Então o sistema sistema Ising é mais fortemente ordenado do que um sistema Heisenberg, de tal forma que a ordem de um sistema Heisenberg é mais rapidamente destruída com energia térmica. No estado fundamental podemos observar que os valores críticos α_c diminuem a medida que o parâmetro de anisotropia Δ diminui, ou seja, $\alpha_c^F(\Delta = 1) = 0.5$, $\alpha_c^F(\Delta = 0.5) \simeq 0.48$ e $\alpha_c^F(\Delta = 0) \simeq 0.42$, indicando que é necessário uma menor intensidade do parâmetro α para desordenar a fase ferromagnética que apresenta ordem, gradativamente, mais fraca com a diminuição da anisotropia Δ .

Por outro lado, na transição SAF-P temos linhas de transição de primeira (linha descontínua) e segunda (linha contínua) ordem, separadas através de um ponto tricrítico que varia continuamente com o parâmetro de anisotropia Δ do modelo, onde esses pontos correspondem a $P_{TC}(\alpha_t \simeq 1.0; T_t/J \simeq 2.27)_{\Delta=1}$, $P_{TC}(\alpha_t \simeq 1.02; T_t/J \simeq 2.28)_{\Delta=0.5}$ e $P_{TC}(\alpha_t \simeq 1.13; T_t/J \simeq 2.28)_{\Delta=0}$. Observe que no limite isotrópico ($\Delta = 0$) na rede quadrada, o parâmetro de frustração α quebra a simetria rotacional e induz um ordenamento SAF em $T \neq 0$, apresentando assim uma transição de fase em $T = T_c \neq 0$. Este resultado aparentemente em contradição com o teorema de Mermin e Wagner, é fisicamente correto e tem sido previsto em anos atrás por Weber e colaboradores [64].

No estado fundamental são observados os seguintes pontos multicríticos $\alpha_c^{SAF}(\Delta = 1) = 0.5$, $\alpha_c^{SAF}(\Delta = 0.5) = 0.5$ e $\alpha_c^{SAF}(\Delta = 0) \simeq 0.56$. Este valores críticos de α nos dizem que, a medida que diminui a anisotropia do sistema é necessário mais intensidade de α para destruir a ordem da fase superantiferromagnética (SAF).

Na literatura o caso ferromagnético não tem sido discutido, apenas o $J_1 - J_2$ anti-ferromagnético foi bastante analisado. No estado fundamental ($T = 0$) existe uma fase paramagnética quântica na região $\alpha_c^F(\Delta) < \alpha < \alpha_c^{SAF}(\Delta)$, que desaparece no limite clássico ($\Delta = 1$). Não sabemos a natureza deste estado desordenado, pois apenas os limites da instabilidade das fase F e SAF foram analisados via parâmetro de ordem que caracteriza cada fase. Este novo estado pode vim a ser um spin-líquido (SL), mas esta é apenas uma suposição nossa que não podemos provar por falta de parâmetros que possa

caracterizar este estado quântico paramagnético.

Na Fig.(4.23) temos o diagrama de fase no plano $T - \alpha$ para o caso do modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg antiferromagnético numa rede quadrada. A medida que α aumenta, a temperatura crítica da fase AF decresce se anulando no ponto $\alpha_c^F(\Delta)$. Este ponto cresce gradativamente com o aumento do parâmetro de anisotropia Δ , de tal forma que $\alpha_c^{AF}(\Delta = 0) \simeq 0.28$, $\alpha_c^{AF}(\Delta = 0.5) \simeq 0.35$ e $\alpha_c^{AF}(\Delta = 1) = 0.5$. Para $\Delta \neq 1$ temos observado um comportamento reentrante na região de baixas temperaturas, que é caracterizada por apresentar duas temperaturas críticas para um dado valor de α . As linhas crítica entre as fases AF e P foram obtidas pela aproximação EFRG.

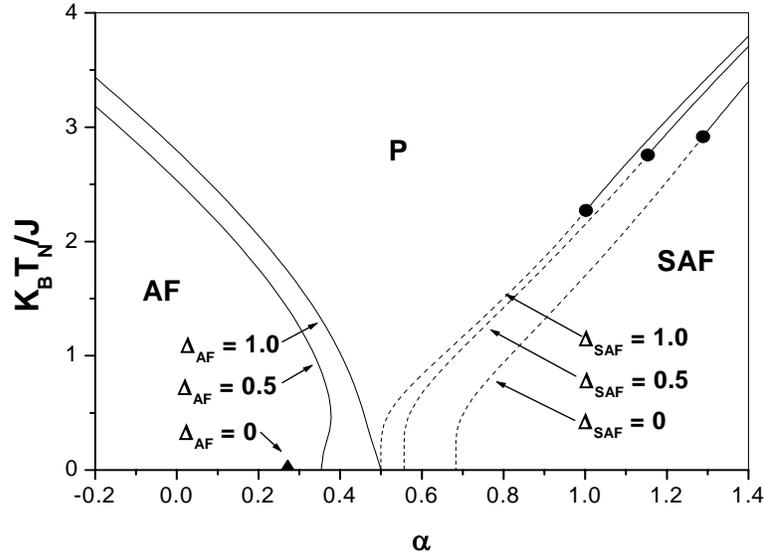


Figura 4.23: Comportamento da temperatura crítica em função do parâmetro de frustração para o modelo $J_1 - J_2$ anisotrópico antiferromagnético numa rede quadrada para diferentes valores do parâmetro de anisotropia Δ .

Na região da fase SAF, assim como no caso ferromagnético, temos a presença de transição de primeira e segunda ordem, conectadas por pontos tricríticos, o qual depende dos valores da anisotropia Δ . Da análise numérica, encontramos $P_{TC}(\alpha_t \simeq 1,00, T_t/J \simeq$

$2.27)_{\Delta=1}$, $P_{TC}(\alpha_t \simeq 1,15, T_t/J \simeq 2.76)_{\Delta=0.5}$ e $P_{TC}(\alpha_t \simeq 1,29, T_t/J \simeq 2.92)_{\Delta=0}$. A previsão do comportamento reentrante na fase AF pode ser a priori, um artefato da aproximação usada, onde o efeito de tamanho finito se manifesta na região de baixas temperaturas. No estado fundamental ($T = 0$) temos observado outras vez uma região ($\alpha_c^{AF}(\Delta) < \alpha < \alpha_c^{SAF}(\Delta)$) desordenada, que desaparece no limite Ising ($\Delta = 1$). As linhas de transição SAF-P foram obtidas usando EFT-2.

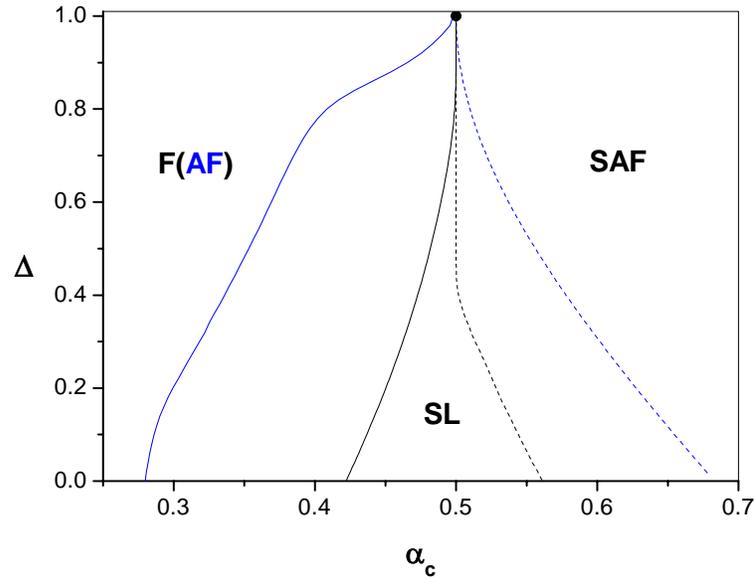


Figura 4.24: Diagrama de fase no estado fundamental no plano $\Delta - \alpha_c$ para o modelo $J_1 - J_2$ anisotrópico na rede quadrada. As linhas contínuas e tracejadas correspondem as transições de primeira e segunda ordem, respectivamente.

Na Fig.(4.24) apresentamos os resultados numéricos do diagrama de fase no estado fundamental no plano $\Delta - \alpha$, para os modelos $J_1 - J_2$ ferromagnético e antiferromagnético numa rede quadrada. Assumiremos sem argumento físico que o estado desordenado é do tipo spin-líquido, como foi proposto por Anderson no modelo de Heisenberg numa rede triangular. Este modelo anisotrópico não tem sido tratado na literatura, apenas o limite isotrópico ($\Delta = 0$) foi discutido, onde os pontos $\alpha_c^{AF}(\Delta = 0)$ e $\alpha_c^{SAF}(\Delta = 0)$ foram

obtidos por diversos métodos, porém, não apresentam resultados definitivos (rigorosos) que possamos adotar como referência. O resultado da reentrância na fase AF obtida neste trabalho, pode ser comparada com o caso da reentrância na fase SAF, no qual a anisotropia foi colocada na interação de segundo vizinhos e foi usado simulação de Monte Carlo quântico [65], o que de alguma forma pode garantir a veracidade dos nossos resultados.

Temos investigados em $T = 0$ a influência do efeito quântico simulado pelo parâmetro de anisotropia Δ , sobre o estado paramagnético quântico (spin-líquido) onde verificamos que o limite Ising ($\Delta = 1$) esta fase intermediária (SL) é destruída. Esta ausência do estado SL deve-se sobretudo pela falta de flutuações quânticas no sistema. A segunda maneira de se eliminar as flutuações quânticas é aumentar o valor do spin S , sendo que para valor finito ($S < \infty$) o estado SL está presente. Chandra e Douçout [25] foram os primeiros a mostrar que o estado SL desaparece quando $S \rightarrow \infty$, e atualmente tem sido confirmado através de simulação de Monte Carlo [64].

Sistemas quânticos de baixa dimensionalidade manifestam-se efeitos quânticos com maior intensidade, a medida que a dimensão espacial (d) diminui. Schmit e colaboradores [39] estudaram o modelo $J_1 - J_2$ quântico antiferromagnético numa rede cúbica de corpo centrado (bcc), concluíram que em $T = 0$ o estado SL está ausente e uma transição de fase ocorre em $\alpha = \alpha_c$ passando do estado AF ($\alpha < \alpha_c$) para o estado SAF ou laminar ($\alpha > \alpha_c$). Estes autores não foram capazes de identificar o tipo de transição da fase que ocorre em $\alpha = \alpha_c$, que a princípio eles assumiram ser de primeira ordem. Portanto, um estudo mais aprimorado da transição de fase do modelo $J_1 - J_2$ quântico 3d não tem sido realizado e a seguir apresentaremos os primeiros resultados para este modelo quântico frustrado em 3d.

As linhas de primeira e segunda ordem que calcularemos a seguir foram obtidas por EFT-2, usando o método da energia livre. Inicialmente, o diagrama de fase (T versus α) do modelo anisotrópico ferromagnético numa rede cúbica simples é discutido na Fig.(4.25). O resultado qualitativo do limite quântico ($\Delta = 0$) é semelhante ao modelo

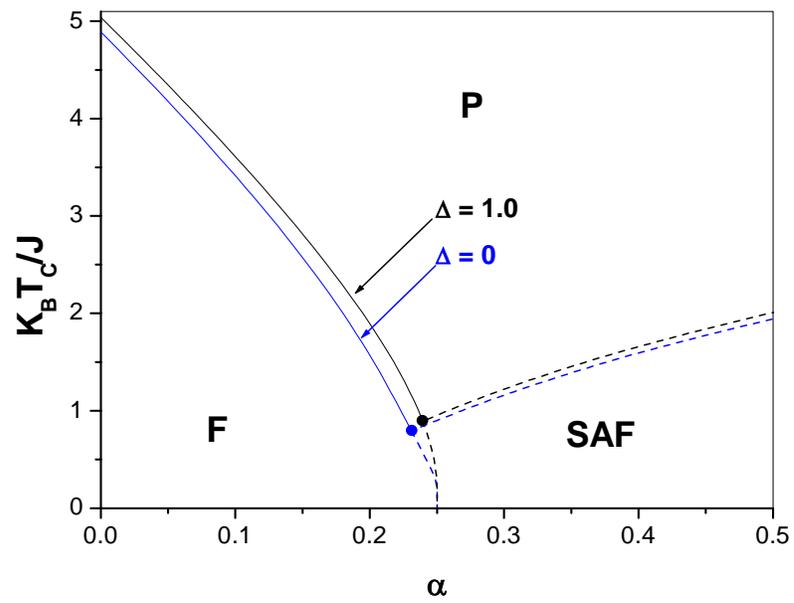


Figura 4.25: Comportamento da temperatura crítica em função do par âmetro de frustração para o modelo $J_1 - J_2$ anisotrópico antiferromagnético numa rede cúbica simples.

Ising ($\Delta = 1$), isto é, teremos uma transição de segunda ordem entre as fase F e P, e de primeira ordem entre as fases SAF e P.

Na fase F quando o parâmetro de frustração α cresce a temperatura de transição decresce se anulando no ponto crítico $\alpha = \alpha_c(\Delta)$. Surpreendentemente, temos encontrado que $\alpha_c(\Delta) = 0.25$ é independente do parâmetro de anisotropia Δ . O estado spin-líquido é ausente, mostrando que o aumento da dimensionalidade enfraquece os efeitos quânticos que é um ingrediente fundamental para o surgimento do estado SL.

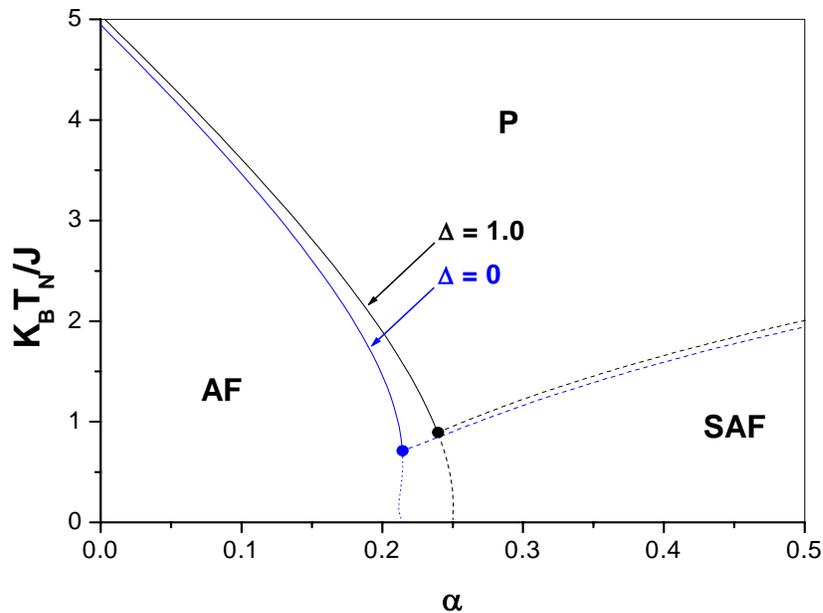


Figura 4.26: Comportamento da temperatura crítica em função do parâmetro de frustração para o modelo $J_1 - J_2$ anisotrópico antiferromagnético numa rede cúbica simples.

O estado ferromagnético (F) é bem conhecido em $T = 0$, que corresponde aos spins orientados na direção do eixo- z (escolha arbitrária), o valor médio da energia é independente do parâmetro Δ e conseqüentemente uma possível transição de fase encontra um ponto de transição α_c também independente de α .

Por outro lado, na Fig.(4.26) apresentamos os resultados do diagrama de fase para

o caso do antiferromagnético. Devido aos efeitos quânticos, em $T = 0$ o estado AF não correspondem ao estado de Néll com spins antiparalelos na rede. Este fato reflete drasticamente na dependência do ponto $\alpha_c(\Delta)$ com a anisotropia, apresentando um comportamento reentrante em baixas temperaturas para $\Delta \neq 1$, com linhas de transições semelhantes ao sistema F. A extensão para spin clássico ($S \rightarrow \infty$) deve apresentar um valor para $\alpha_c(\Delta) = 0.25$, como podemos observar nos resultado de Monte Carlo [38] para o limite isotrópico ($\Delta = 0$).

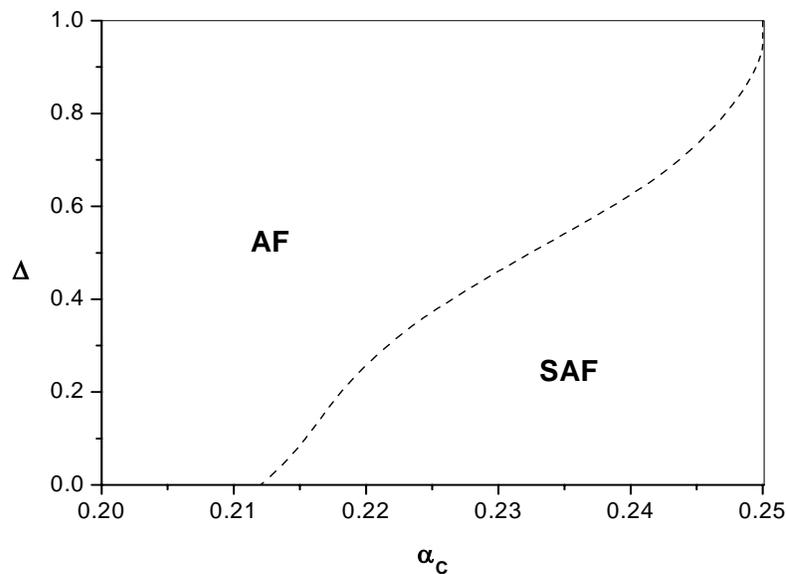


Figura 4.27: Diagrama de fase no estado fundamental no plano $\Delta - \alpha_c$ para o modelo $J_1 - J_2$ anisotrópico antiferromagnético numa rede cúbica simples. A linha tracejada corresponde a transição de primeira ordem.

Finalmente, na Fig.(4.27) apresentamos o comportamento de $\alpha_c(\Delta)$ em função do parâmetro de anisotropia Δ para o modelo $J_1 - J_2$ antiferromagnético na rede cúbica simples. Do ponto de vista numérico, temos usado $T/J = 0.02$ para descrever o estado fundamental por causa de $T = 0$ apresenta divergência nas grandezas termodinâmicas. Os resultados obtidos nesta tese foram aceitos para serem publicados na *Physical Review*

B [66,67].

Referências

- [1] Thoulouse, G., *Commun. Phys.* **2**, 115 (1977).
- [2] G. H. Wannier, *Phys. Rev.* **79**, 357 (1950).
- [3] M. N. Barber, *J. Phys. A: Math. Gen.* **12**, 679 (1979).
- [4] F.Y. Wu, *Phys. Rev. B* **4**, 2312 (1971); J. Oitmará, *J. Phys. A: Math Gen.* **14**, 1159 (1981).
- [5] R. H. Swendsen e S. Krinsky, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 177 (1979); D. P. Landau e K. Binder, *Phys. Rev. B* **31**, 5946 (1985).
- [6] K. Tanaka, T. Horiguchi e T. Morita, *Phys. Lett. A* **165**, 266 (1992).
- [7] J. A. Plascak, *Physica A* **183**, 563 (1992); P. M. Oliveira, C. Tsallis e G. Scwachheinn, *Phys. Rev. B* **29**, 2755 (1984); M. P. Nightingale, *Phys. Lett. A* **59**, 486 (1977); H. W. Blote e M. P. Nightingale, *Physica A* **143**, 274 (1985).
- [8] F. Aguilera-Granja e J. L. Morán-Lopez, *J. Phys. Cond. Matter* **5**, A195 (1993).
- [9] J. L. Morán, F.G. Aguilera e J. M. Sanchez, *Phys. Rev. B* **48**, 3519 (1993).
- [10] N. M. Emilio e A. Pelizzola, *Phys. Rev. E* **55**, R17 (1997).
- [11] A. Pelizzola, *Phys. Rev. E* **49**, R2503 (1994).
- [12] D. P. Landau e R. H. Swendsen, *Phys. Rev. B* **33**, 7700 (1986).

- [13] A. Malakis, P. Kalozoumis e N. Tyraskis, *Eur. Phys. J. B* **50**, 63 (2006).
- [14] M. Suzuki, *Coherent Anomaly Method: Mean Field, Fluctuations and Systematics*, World Scientific, (1995).
- [15] J.G. Bednorz e K.A. Muller, *Z. Phys. B* **64**, 189 (1986).
- [16] E. Manousakis, *Rev. Mod. Phys.* **63**,1 (1991).
- [17] N. D. Mermin e H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966).
- [18] N. S. Branco e J. Ricardo de Sousa, *Phys. Rev. B* **62**, 5745 (2002); Ijanílio G. Araújo e J. Ricardo de Sousa, *Solid. State Comm.* **115**, 265 (2000); Ijanílio G. Araújo e J. Ricardo de Sousa, N. S. Branco, *Physica A* **305**, 585 (2002); J. Ricardo de Sousa, N.S. Branco, B. Boechat e Claudete Cordeiro, *Physica A* **328**, 167 (2003); A. M. C. de Sousa, *Phys. Rev. B* **48**, 3744 (1993); V. E. Sinitsyn, A. S. Boyarchenkov, A. S. Ovchinnikov e I. G. Bostrem, *J. Exp. Theor. Phys.* **101**, 472 (2005).
- [19] L. Siurakshina, D. Ihle e R. Hayn, *Phys. Rev. B* **61**, 14601 (2000).
- [20] P. W. Anderson, *Science*, **235** 1196 (1987).
- [21] S. Kivelson, D. Rokhsan e J. P. Sethna, *Phys. Rev. B* **35**, 8865 (1987). Ver também S. Yunoki e S. Sorella, *Phys. Rev. B* **74**, 014408 (2006).
- [22] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **86**, 694 (1952); T. Oguchi, *ibid* **117**, 117 (1960); R. Kubo, *ibid* **87**, 568 (1952); J. D. Reger e A. P. Yuong, *Phys. Rev. B*, **37**, 5493 (1988).
- [23] S. Liang, B. Doucot, e P. W. Anderson, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 365 (1988).
- [24] O. E. Parfenov e A. A. Nikonov, *JETP letters* **80**, 253 (2006).
- [25] P. Chandra e B. Doucot, *Phys. Rev. B*. **48**, 9535 (1988). (repetido)
- [26] M. Kohmoto e J. Friedel, *Phys. Rev. B*. **38**, 7054 (1988).

- [27] D. L. Bergman, G. A. Fiete e L. Balents, *Phys. Rev. B* **73**,134402 (2006).
- [28] P. Millet e C. Satto, *Mater. Res. Bull.* **33**, 1339 (1998).
- [29] R. Melzi, P. Carreta, A. Lascialfar, M. Mambrini, M. Troyer, P. Millet e F. Mila, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 1318 (2000).
- [30] R. Melzi, S. Androvandi, F. Tedoldi, P. Carreta, P. Millet e F. Mila, *Phys. Rev. B* **64**, 024409 (2001).
- [31] H. Rosner, R. R. P. Singh, W. H. Zheng, J-Oitamaa, S.- L. Dreechsler e W. E. Pickett, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 186405 (2002).
- [32] G. Misguich, B. Bernu e L. Pierre, *Phys. Rev. B* **68**, 1134409 (2003).
- [33] S. T. Bramwell e P. C. W. Holdsworth, *J. Phys. Cond. Matter.* **5**, 153 (1993); *ibid Phys. Rev. B.* **49**, 8811 (1994).
- [34] M. P. Gelfand, R. R. Singh e D. A. Huse, *Phys. Rev. B* **40**, 10801 (1989); M. P. Gelfand, *ibid* **42**, 8206 (1990); J. Oitmara e Z. Wéihong, *ibid* **54**, 3022 (1996).
- [35] F. D. M. Haldane, *Phys. Lett. A*, **93**, 464 (1983); *Phys. Lett.* **50**, 1153 (1983).
- [36] N. Read e S. Sachdev, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 1694 (1989).
- [37] S. Moukouri, *Phys. Lett. A* **352**, 256 (2006).
- [38] C. Pinettes e H. T. Diep, *J. Appli. Phys.* **83**, 6317 (1998).
- [39] R. Schimidt, J. Schulenbrug e J. Richter, *Phys. Rev. B* **66**, 224406 (2002).
- [40] R. Coldea, D. A. Tennant, A. M. Tsvelik, e Z. Tylczynski, *Phys.Rev. Lett.* **86**, 1335 (2001); R. Coldea, D. A. Tennant, K. Habicht, P. Smeibidl, C. Wolters, e Z. Tylczynski, *ibid.* **88**,137203 (2002); R. Coldea, D. A. Tennant, e Z. Tylczynski, *Phys. Rev. B* **68**, 134424 (2003) .

- [41] M. Kenzelmann, R. Coldea, D. A. Tennant, D. Visser, M. Hofmann, P. Smeibidl, e Z. Tylczynski, *Phys. Rev. B* **65**, 144432 (2002).
- [42] P. Weiss, *J. Phys. Radium* **4**, 661 (1907).
- [43] L. Néel, *Ann. Physique* **18**, 5 (1932).
- [44] F. C. Sá Barreto e I. P. Fittipaldi, *Physica A* **129**, 360 (1985).
- [45] H.B. Callen, *Phys. Lett.* **4**.161 (1963).
- [46] N. Suzuki, *Phys. Lett.* **19**, 267 (1965).
- [47] N. Matsudaira, *J. Phys. Soc. Jpn.* **35**, 1493 (1973).
- [48] B. Frank e O. Mitran, *J. Phys. C* **10**, 2641 (1977); **11**, 2087 (1978).
- [49] Y. Tanaka e N. Uryû, *Phys. Rev.* **21**, 1994 (1980).
- [50] H. I. Zhang e A. K. Rajagopal, *J. Phys. C* **12**, L 277 (1979).
- [51] R. Honmura e T. Kaneyoshi, *J. Phys. C* **12**, 3970 (1979).
- [52] F. Zernike, *Physica* **1**, 565 (1940).
- [53] T. Kaneyoshi, I. P. Fittipaldi, R. Honmura e T. Manbe, *Phys. Rev. B* **24**, 481 (1981).
- [54] J. O. Indekeu, A. Maritan e A. L. Stella, *J. Phys. A* **15**, L291 (1982).
- [55] M. P. Nightingale, Phase transitions and critical phenomena, editado por C. Domb e M.S. Green, Academic Press, N.Y., 1976.
- [56] I. F. Fittipaldi, *J. Mag. Mag. Mater.* **131**, 43 (1994).
- [57] P. A. Slotte, *J. Phys. A* **20**, L177 (1987)
- [58] J. Ricardo de Sousa e I. P. Fittipaldi, *J. Appl. Phys.* **75**, 5835 (1994); J. Ricardo de Sousa e Ijanílio G. Araújo, *J. Mag. Mag. Mat.* **202**, 231 (1999).

- [59] J.W. Tucker, *J. Mag. Mag. Mater.* **183**, 299 (1998).
- [60] Douglas F. de Albuquerque, S. R. L. Alves e Alberto S. Arruda, *Phys. Lett. A* **346**, 128 (2005).
- [61] H. W. J. BLöte, A. Compagner, e H. Hoogland, *Physica A* **141**, 375 (1987).
- [62] P.W. Anderson, *Mater. Res. Bull.* **8**,153 (1973).
- [63] R.B. Laughlin e Z. Zou, *Phys. Rev. B.* **41**, 664 (1989).
- [64] C. Weber, L. Capriotti, G. Misguich, F. Becca, M. Elhajal e F. Mila, *Phys. Rev. Lett.* **24**, 1772021 (2003).
- [65] T. Roscilde, A. Feiguin, A. L. Chernyshev, S. Liu e S. Haas, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 0172031 (2004).
- [66] Rosana A. dos Anjos, J. Roberto Viana e J. Ricardo de Sousa, *Phys. Rev. B* (2007) in press.
- [67] J. Roberto Viana e J. Ricardo de Sousa, *Phys. Rev. B* (2007) in press.

Capítulo 5

Modelo de Ising frustrado com campo transversal

5.1 Introdução

Vários trabalhos têm sido desenvolvidos para estudar o comportamento da estabilidade da ordem de sistemas magnéticos tipo Ising na presença de um campo transversal (MICT). O MICT é um sistema quântico proposto inicialmente por de Gennes [1], que corresponde a uma formulação de pseudo-spin, usada para estudar transições de fase de segunda ordem com efeito de tunelamento, referente a um sistema ferroelétrico.

Posteriormente, Elliott e Pfeuty [2] desenvolveram um estudo sobre sistema ferromagnético em uma dimensão na presença de um campo transversal, onde foi usada a transformação de Jordan-Wigner para operadores de férmions. No estado fundamental ($T \simeq 0$) quando o sistema magnético é submetido a um valor crítico do campo transversal, o sistema sofre uma transição de fase de segunda ordem. Outros trabalhos foram desenvolvidos para sistemas magnéticos submetidos a um campo transversal, como por exemplo, Goldschmidt [3] que tratou de um sistema magnético de vidro de spin. O sistema vidro de spin quântico também foi tratado por Viana e colaboradores [4,5], onde o modelo de van Hemmen foi generalizado e uma transição de fase quântica de primeira ordem

foi observada.

O MICT tem sido objeto de muitos estudos, não só pelo fato de ser um dos problemas de muitos corpos quântico, que pode ser resolvido exatamente em $d = 1$, mas também devido a sua utilidade em descrever outros sistemas.

Temos observado, que dependendo do modelo estudado, as transições de fase no estado fundamental podem ser de primeira ou de segunda ordem, quando o sistema magnético é submetido a um campo transverso. Por exemplo, nos trabalhos desenvolvidos por Elliot-Pfeuty [2], Viana [4], Bitko-Rosenbaum [6], a ordem do sistema magnético é destruída por dois agentes a temperatura e o campo transverso, e no estado fundamental são obtidas transições de fase de segunda ordem em todos esses trabalhos citados. Por outro lado nos trabalhos desenvolvidos por Viana [5], Htoutou [7], Moessner [8], entre outros, são observados transições de fase de primeira ordem no estado fundamental. Sendo que nos modelos que são obtidas transições de primeira ordem, além do campo transverso e da temperatura existem outros agentes que destroem a ordem do sistema magnético, como por exemplo, campo internos cristalizados (anisotropias uniaxial, biaxiais transversais), frustração magnética, etc.

Um outro tipo de Hamiltoniano Ising que se tem estudado, onde atenção especial é dada na região de baixas temperaturas, são os modelos com interações de primeiro e segundo vizinhos, ocasionando no sistema o fenômeno da frustração. A presença do campo transverso torna o diagrama em $T = 0$ mais rico, pois são observadas transições de fases quânticas com diversos pontos multicríticos dependentes da dimensão espacial (d) e do parâmetro de frustração $\alpha = J_2/J_1$ (onde J_1 e J_2 são as interações de primeiros e segundos vizinhos, respectivamente). Quando $J_2 < 0$ (interação antiferromagnética) teremos a presença de frustração e novas ordens magnéticas são criadas. O principal objetivo deste capítulo é estudar a criticalidade do seguinte Hamiltoniano de Ising quântico frustrado.

$$\mathcal{H}_N = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i^z \sigma_j^z + J_2 \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i^z \sigma_j^z - \Omega \sum_i \sigma_i^x, \quad (5.1)$$

onde J_1 (J_2) é a interação entre primeiros (segundos) vizinhos, que assumiremos serem positivas¹, a primeira soma é feita sobre os pares z_1 de primeiros vizinhos, a segunda soma é feita sobre os pares z_2 de segunda vizinhança, Ω é o campo transversal responsável pelos efeitos quânticos em $T = 0$ e σ_i^μ ($\mu = x, z$) é a componente μ da matriz de Pauli no sítio i da rede cristalina.

O Hamiltoniano referente a um rede unidimensional ($d = 1$) não apresenta ordem de longo alcance em temperatura finita ($T > 0$), mas $T = 0$ temos uma transição de fase quântica e que no plano ($\Omega - \alpha$) o diagrama de fase apresenta duas fases ordenadas. Para $T = 0$ e $\alpha < 0.5$ temos uma linha crítica do tipo $\Omega(\alpha_c)$ que separa a fase ferromagnética (ou antiferromagnética) da paramagnética. Este modelo quântico frustrado em $d = 1$ tem sido estudado por vários autores [9], [10], [11], [12] e [13]. Para $\alpha > 0.5$ o estado fundamental do sistema corresponde ao estado modulado $\langle \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow \dots \rangle$ e, à medida que o campo transversal aumenta, outras modulações aparecem até que finalmente, ocorre uma transição de fase de primeira ordem para a fase paramagnética induzida pelo campo Ω . Este modelo apresenta solução para os limites de campo nulo ($\Omega = 0$) [14] e na ausência de frustração ($J_2 = 0$) [7], e, portanto, qualquer método aproximativo que se proponha a estudar a criticalidade e a termodinâmica do MICT frustrado em $d = 1$ tem estes dois limites como guia.

Neste capítulo, vamos fazer estudos referentes aos limites de instabilidades das fases F(AF) e SAF, referente ao Hamiltoniano dado pela Eq.(5.1) usando os métodos EFT-2 e EFRG para obtermos as linhas de transição de fase. Motivado pelos estudos realizados, como, por exemplo, Colares [17], Arizmendi [18], Sen [19] e Tanatar [20], entre outros. Esses autores estudaram o modelo de Ising quântico frustrado Eq.(5.1) numa rede unidimensional. Na Fig.(5.1) são apresentados os resultados obtidos por Colares [17] (linhas contínuas, pontilhada e tracejadas), usando grupo de renormalização e escala de tamanho finito, Arizmendi [18] (círculos) usando simulação de Monte Carlo e Sen [19] (triângulos)

¹Com esta escolha para J_1 e J_2 positivos teremos acoplamentos ferromagnético e antiferromagnético para as interações entre primeiro e segundo vizinhos, respectivamente.

usando a aproximação de interfaces encontrou resultados semelhantes. A linha contínua corresponde a uma transição de segunda ordem entre as fases **F** e **P**, assim como os triângulos e os círculos. O comportamento da transição de fase de primeira ordem entre as fases **SAF** e **P** também é observado por Arizmendi [18] e San [19].

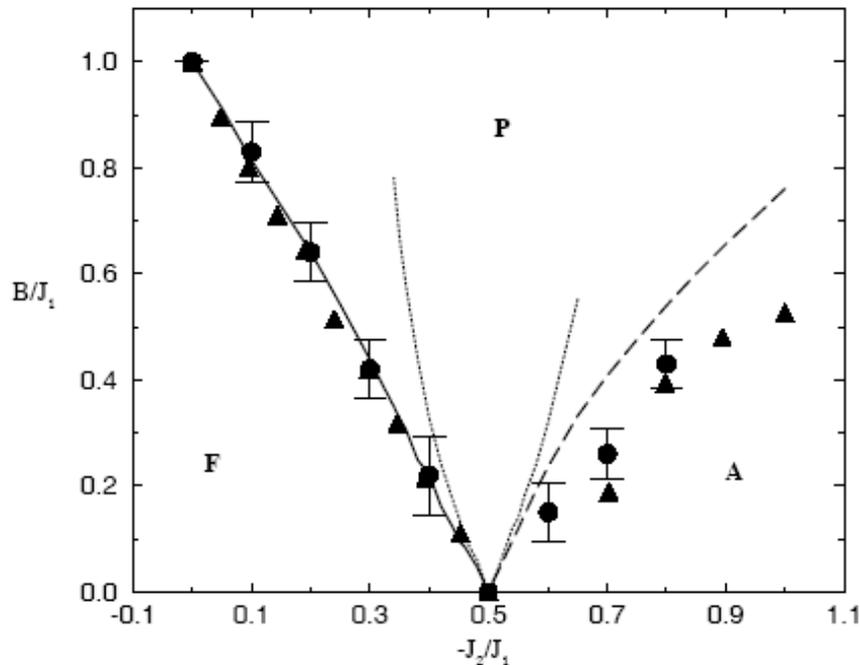


Figura 5.1: Diagrama de fase no plano do campo transversal em função do parâmetro de frustração, para o MICT com interações competitivas numa rede unidimensional em $T = 0$. Sendo que **F** correspondente a fase ferromagnética e **A** (ou SAF) e a anti-fase, que corresponde dois spins para cima dois para baixo, etc.

Temos estudado no capítulo-4 o diagrama de fase do modelo de Ising com interações entre primeiros e segundos vizinhos nas rede quadrada (2d) e cúbica simples (3d), onde foi analisado a influência da dimensionalidade no diagrama de fase. Neste capítulo é incluído um campo transversal nos modelos $J_1 - J_2$ para investigar os efeitos quânticos e de frustração, tomando como referência o modelo dado pela Eq.(5.1).

5.2 Modelos numa rede quadrada

5.2.1 Aglomerado com $N = 1$ sítio central

A) Estado ferromagnético

Baseado na Fig.(4.12) referente a um sistema ferromagnético numa rede quadrada. O Hamiltoniano para aglomerado com $N = 1$ spin na presença campo transverso é dado por:

$$-\beta\mathcal{H}_1^F = (C_x - C_y) S_1^z + K\omega S_1^x, \quad (5.2)$$

sendo

$$C_x = K \sum_{i=1}^4 \sigma_i \quad \text{e} \quad C_y = \alpha K \sum_{i=5}^8 \sigma_i, \quad (5.3)$$

onde $K = \beta J_1$ e $\omega = \Omega/J_1$. O Hamiltoniano 5.2 tem a seguinte forma matricial:

$$-\beta\mathcal{H}_1^F = \begin{bmatrix} C_x - C_y & K\omega \\ K\omega & -(C_x - C_y) \end{bmatrix}, \quad (5.4)$$

diagonalizando essa matriz obtemos a função de partição dada por

$$Z_1^F = \sum_{n=1}^2 \exp(\lambda_n), \quad (5.5)$$

onde λ_n são os autovalores, desta forma a função de partição fica sendo dada por

$$Z_1^F = 2 \cosh(\sqrt{(C_x - C_y)^2 + K^2\omega^2}). \quad (5.6)$$

Usando a relação (aproximada) Eq.(4.56) encontraremos a magnetização por spin dada por $m = \langle S_1^z \rangle$ que pode ser expressa por

$$m = \left\langle \frac{\partial}{\partial \phi} \ln(Z_1^F) \right\rangle, \quad (5.7)$$

derivando ficaremos com

$$m = \left\langle \frac{C_x - C_y}{\sqrt{(C_x - C_y)^2 + K^2\omega^2}} \tanh(\sqrt{(C_x - C_y)^2 + K^2\omega^2}) \right\rangle \quad (5.8)$$

onde $\phi = C_x - C_y$.

Aplicando a técnica do operador diferencial a Eq.(5.8) ficará reescrita na forma

$$m = \langle \exp(C_x D_x + C_y D_y) \rangle f(x, y) |_{x,y=0} , \quad (5.9)$$

sendo a função $f(x, y)$ é dada por

$$f(x, y) = \frac{x - y}{\sqrt{(x - y)^2 + K^2\omega^2}} \tanh(\sqrt{(x - y)^2 + K^2\omega^2}), \quad (5.10)$$

e ainda desenvolvendo a Eq.(5.9)

$$m = \left\langle \prod_{i=1}^4 [\cosh(K D_x) + \sigma_i \sinh(K D_x)] \prod_{i=5}^8 [\cosh(\alpha K D_y) + \sigma_i \sinh(\alpha K D_y)] \right\rangle f(x, y) |_{x,y=0} , \quad (5.11)$$

A expressão Eq.(5.11) é a mesma expressão dada pela Eq.(4.62), mudando apenas a forma da função $f(x, y)$, assim sendo o processo metodológico será o mesmo desenvolvido para o caso do sistema ferromagnético com transversal nulo, ou seja, aplicando a aproximação linear no desenvolvimento dos produtos obtemos uma equação com a mesma forma da Eq.(4.64), e conseqüentemente a partir da expansão em relação a m é obtida a equação com a mesma forma da Eq.(4.67).

B) Estado superantiferromagnético

Seguindo os mesmos procedimentos realizados no capítulo-4, para o modelo de Ising sem campo transversal na teoria de campo efetivo em aglomerados com $N = 1$ sítio na

fase SAF, cuja a equação de estado corresponderá a mesma expressão dada Eq.(4.77) com a simples modificação da função $f(x, y)$, passando neste caso a ser dada pela Eq.(5.10).

5.2.2 Aglomerado com $N = 2$ sítios centrais

A) Estado ferromagnético

Da Fig.(4.14) referente ao estado superantiferromagnético e adequando-a para um sistema ferromagnético vamos obter o seguinte Hamiltoniano para aglomerado com $N = 2$ sítios na presença campo transverso:

$$-\beta\mathcal{H}_2^F = KS_1^z S_2^z + C_1 S_1^z + C_2 S_2^z + K\omega (S_1^x + S_2^x), \quad (5.12)$$

sendo

$$C_n = C_{nx} - C_{ny}, \quad n = 1, 2 \quad (5.13)$$

$$C_{1x} = K \sum_{i=1}^3 \sigma_i, \quad C_{1y} = \alpha K \sum_{i=4,5,7,8} \sigma_i, \quad (5.14)$$

$$C_{2x} = K \sum_{i=4}^6 \sigma_i, \quad C_{2y} = \alpha K \sum_{i=2,3,9,10} \sigma_i. \quad (5.15)$$

Escrevendo o Hamiltoniano dado pela Eq.(5.12) na base onde S_1^z e S_2^z são diagonais usadas no capítulo-3, ficaremos com uma matriz 4 x 4. Diagonalizando numericamente essa matriz encontraremos os autovalores λ_n e conseqüentemente a função de partição será dada por.

$$Z_2^F = Tr \exp(-\beta\mathcal{H}_2^F) = \sum_{n=1}^4 \exp(\lambda_n), \quad (5.16)$$

onde os autovalores λ_n são determinados numericamente, e o procedimento numérico é estudado no apêndice-A. Desta forma não vamos aqui apresentar uma expressão analítica para a função de partição Z_2^F e para a magnetização do sistema. Contudo, no caso da magnetização podemos também utilizar recursos numérico para determiná-la, pois

a partir da definição da magnetização dada por $m = \langle S_1^z \rangle$ podemos usar a seguinte expressão:

$$m = \left\langle \frac{\partial}{\partial C_1} \ln(Z_2^F) \right\rangle = \left\langle \frac{1}{Z_2^F} \frac{\partial Z_2^F}{\partial C_1} \right\rangle. \quad (5.17)$$

Aplicando a técnica do operador diferencial e a propriedade da cinemática dos spins ($\sigma_i^2 = 1$) ficaremos com a seguinte expressão:

$$m = \left\langle \left[\exp(KD_{x_1})\hat{a}_1 + \exp(-KD_{x_1})\hat{b}_1 \right] \prod_{i=7}^8 \left[\exp(\alpha KD_{y_1})\hat{a}_i + \exp(-\alpha KD_{y_1})\hat{b}_i \right] \right. \\ \left. \left[\exp(KD_{x_2})\hat{a}_6 + \exp(-KD_{x_2})\hat{b}_6 \right] \prod_{i=9}^{10} \left[\exp(\alpha KD_{2y})\hat{a}_i + \exp(-\alpha KD_{2y})\hat{b}_i \right] \right. \\ \left. \prod_{i=2}^3 \left[\exp(KD_{x_1}) \exp(\alpha KD_{y_2})\hat{a}_i + \exp(-KD_{x_1}) \exp(-\alpha KD_{y_2})\hat{b}_i \right] \right. \\ \left. \prod_{i=4}^5 \left[\exp(KD_{x_2}) \exp(\alpha KD_{y_1})\hat{a}_i + \exp(-KD_{x_2}) \exp(-\alpha KD_{y_1})\hat{b}_i \right] \right\rangle \\ f(\vec{r}) |_{\vec{r}=0}, \quad (5.18)$$

onde a equação de estado (5.18) apresenta a mesma forma da Eq.(4.95). Contudo, a função $f(\vec{r}) = f(x_1, y_1, x_2, y_2)$ é diferente da Eq.(4.90), pois a mesma é obtida por procedimento da derivação numérica a partir da Eq.(5.17). Aplicando a aproximação linear na Eq.(5.18), ficaremos com uma expressão semelhante a Eq.(4.97), diferindo apenas na expressão da função $f(\vec{r})$.

B) Estado superantiferromagnético

Seguindo os mesmos procedimentos realizados no capítulo-4 para o modelo $J_1 - J_2$ anisotrópico na teoria de efetivo em aglomerado com $N = 2$ sítios (EFT-2) nas condições de contorno do estado SAF, obteremos uma equação de estado semelhante a Eq.(4.115) com a simples modificação da função $f(\vec{r})$ pela equação obtida numericamente, pelos procedimentos descritos no apêndice-A.

5.3 Modelos J_1 - J_2 numa rede cúbica simples

5.3.1 Aglomerados com $N = 2$ sítio centrais

A) Estado ferromagnético

A partir da Fig.(4.17) referente ao estado superantiferromagnético, e adequando-a para um sistema ferromagnético teremos o seguinte Hamiltoniano para este aglomerado na presença de um campo transverso:

$$-\beta\mathcal{H}_2^F = KS_1^z S_2^z + C_1 S_1^z + C_2 S_2^z + K\omega (S_1^x + S_2^x), \quad (5.19)$$

sendo

$$C_n = C_{nx} - C_{ny}, \quad n = 1, 2 \quad (5.20)$$

$$C_{1x} = K \sum_{i=1}^5 \sigma_i, \quad C_{1y} = \alpha K \left(\sum_{i=10}^{17} \sigma_i + \sum_{i=19}^{22} \sigma_i \right), \quad (5.21)$$

$$C_{2x} = K \sum_{i=14}^{18} \sigma_i, \quad C_{2y} = \alpha K \left(\sum_{i=2}^9 \sigma_i + \sum_{i=23}^{26} \sigma_i \right). \quad (5.22)$$

Seguindo os mesmos procedimentos numéricos feitos anteriormente usando EFT-2 numa rede quadrada com campo transverso nulo, encontraremos a seguinte expressão para equação da magnetização:

$$\begin{aligned} m &= [\exp(KD_{x_1})a + \exp(-KD_{x_1})b] [\exp(\alpha KD_{y_1})a + \exp(-\alpha KD_{y_1})b]^8 \\ & [\exp(\alpha KD_{y_1})a + \exp(-\alpha KD_{y_1})b]^4 (\exp(KD_{x_2})a + \exp(-KD_{x_2})b) \\ & [\exp(\alpha KD_{y_2})a + \exp(-\alpha KD_{y_2})b]^4 [\exp(\alpha KD_{y_2})a + \exp(-\alpha KD_{y_2})b]^4 \\ & [\exp(KD_{x_1}) \exp(\alpha KD_{y_2})a + \exp(-KD_{x_1}) \exp(-\alpha KD_{y_2})b]^4 \\ & [\exp(KD_{x_2}) \exp(\alpha KD_{y_1})a + \exp(-KD_{x_2}) \exp(-\alpha KD_{y_1})b]^4 \\ & f(\vec{r}) \Big|_{\vec{r}=0}. \end{aligned} \quad (5.23)$$

Esta equação apresenta o mesmo formato da Eq.(4.151). Expandindo a Eq.(5.23) em potência de m obteremos uma expressão compactada como forma final da equação de estado.

B) Estado superantiferromagnético

Repetindo o mesmo procedimento metodológico realizado no capítulo-4 referente ao modelo $J_1 - J_2$ na teoria de campo efetivo EFT-2 na fase SAF, cuja a equação de estado corresponderá a mesma expressão dada pela Eq.(4.165), sendo realizado a simples modificação da função $f(\vec{r})$, onde neste caso é obtida a partir de um procedimento numérico estudado no apêndice A.

5.4 Resultado e discussões

Discutiremos a seguir os diagramas de fase para o modelo de Ising quântico frustrado. Na Fig(5.2) temos o comportamento da temperatura crítica em função do parâmetro de frustração α , para o sistema quântico numa rede quadrada, submetido a várias intensidade de campo transverso. As linhas de transições de fase F-P são todas de segunda ordem, sendo que as mesmas foram obtidas a partir da aproximação EFRG. Esta aproximação é dada pela seguinte equação $A_1(T, \alpha, \Omega)_{N=1} = A_1(T, \alpha, \Omega)_{N=2}$, onde o coeficiente $A_1(T, \alpha, \Omega)_{N=2}$ são determinado por métodos numéricos (ver apêndice-A).

As linhas de transições entre as fases F e P são determinadas para as seguintes intensidades de campo transverso: (a) $\Omega/J = 0$, $\Omega/J = 1.0$, $\Omega/J = 2.0$ e $\Omega/J = 3.0$. Observamos que a medida que a intensidade do campo transverso aumenta as linhas de transição F-P diminuem, ou seja, é necessário menos energia térmica para maior intensidade do parâmetro de frustração α . Este resultado é esperado, haja visto que o campo transverso é um agente de destruição da ordem ferromagnética, assim como a temperatura e o parâmetro de frustração. Desta forma, a medida que a intensidade deste campo aumenta o sistema fica menos ordenado, sendo assim é necessário menos

intensidades de outros agentes de destruição da ordem do sistema magnético. São observados os seguintes valores críticos no estado fundamental: $\alpha_c(\Omega/J = 0.0) = 0.5$, $\alpha_c(\Omega/J = 1.0) \simeq 0.41$, $\alpha_c(\Omega/J = 2.0) \simeq 0.23$ e $\alpha_c(\Omega/J = 3.0) \simeq -0.01$, esses pontos críticos α_c são inversamente proporcionais com o campo transversal Ω/J .

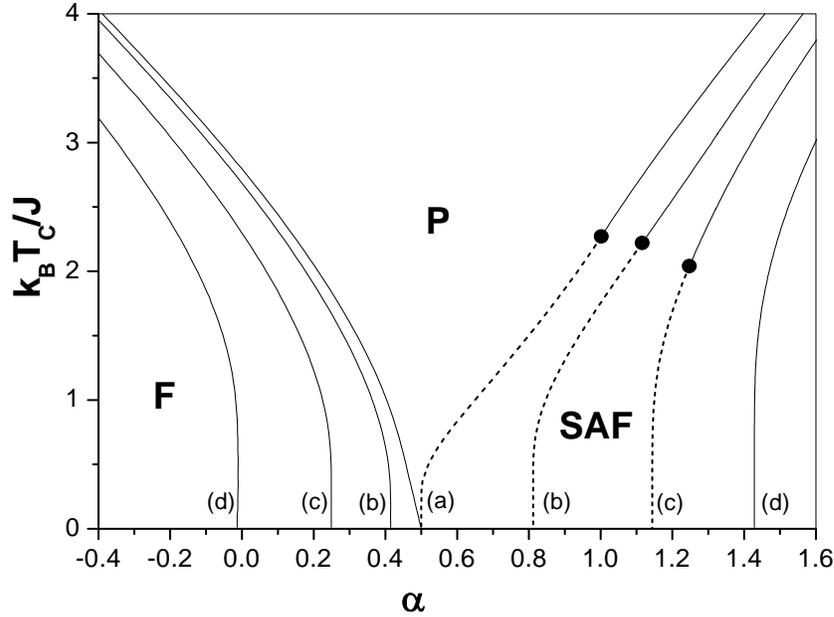


Figura 5.2: Comportamento da temperatura crítica em função do parâmetro de frustração para o modelo de Ising quântico frustrado numa rede quadrada na.(a) $\Omega/J = 0$, (b) $\Omega/J = 1.0$, (c) $\Omega/J = 2.0$ e (d) $\Omega/J = 3.0$. As linhas contínuas e tracejadas correspondem as linhas de segunda e primeira ordem, respectivamente. O círculo corresponde ao ponto tricrítico.

O último resultado do parâmetro de frustração negativo é compreendido fisicamente. A destruição da ordem F é causada pelos aumentos dos parâmetros α e Ω . Assim sendo, quanto maior valor do campo Ω menor frustração α é necessário para destruir a ordem em $T = 0$. Para $\Omega/J > 2.8$ o ponto crítico torna-se negativo ($\alpha_c < 0$) não existindo mais frustração para destruir a ordem ferromagnética, pois nesta região aumentando a

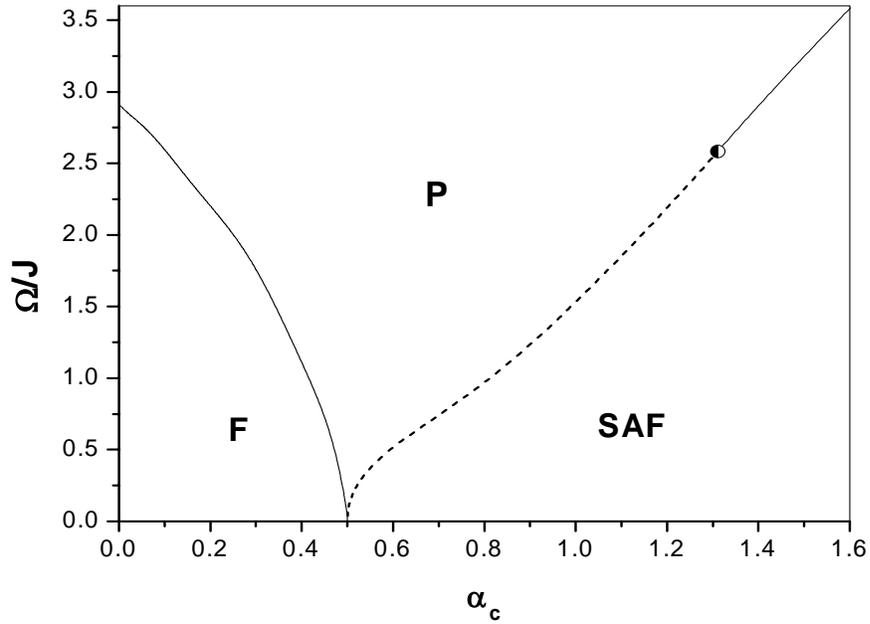


Figura 5.3: Diagrama de fase do estado fundamental no plano $\Omega-\alpha$ para o modelo de Ising quântico frustrado numa rede quadrada. As linhas contínua e tracejada correspondem as transições de segunda e primeira ordem, respectivamente. O círculo representa o ponto tricrítico (PTC).

intensidade de α a ordem ferromagnética é reforçada. O ponto $\Omega/J \simeq 2.8$ corresponde ao ponto crítico do modelo sem interação competitiva ($J_2 = 0$), o que acarretará na nossa análise no ponto crítico $\alpha_c = 0$.

Nas transições SAF-P são observados linhas de primeira (linha descontínua) e segunda ordem (linha contínua) até um certo limite de intensidade do campo transversal. Para campos maiores que $\Omega/J \simeq 2.58$, os pontos tricríticos desaparecem, e as linhas que representam a transição SAF-P passam a ser somente de segunda ordem. Observamos a medida que a intensidade do campo aumenta as linhas de transição apresentam pontos com menor intensidade de temperatura, no entanto a intensidade do parâmetro de frustração aumenta. Este resultado é explicado pelo fato de que o parâmetro α é um

agente que gera ordem SAF, e portanto, a medida que o campo transversal aumenta vários spins do sistema são reordenados na direção deste campo, sendo então necessário maior intensidade de α para reordenar esses spins de modo a configurar a ordem SAF. São observados os seguintes pontos multicríticos no estado fundamental: $\alpha_c(\Omega/J = 0.0) = 0.5$, $\alpha_c(\Omega/J = 1.0) \simeq 0.81$, $\alpha_c(\Omega/J = 2.0) \simeq 1.14$ e $\alpha_c(\Omega/J = 3.0) \simeq 1.43$. A determinação das linhas obtidas na transição entre as fases SAF e P são obtidas por EFT-2 via o método da derivada da magnetização. Para $\Omega = 0$, em $T = 0$ temos um estado paramagnético quântico com um *gap* de energia induzido pelo campo transversal que difere do estado RVB previsto no modelo $J_1 - J_2$.

Na Fig.(5.3) temos o diagrama de fase do estado fundamental no plano $\Omega - \alpha$ relativo aos resultados obtidos a partir da Fig(5.2). Entre as fases F e P temos sempre transição de segunda ordem, que é caracterizada pela magnetização se anulando continuamente ao longo da linha de crítica. No caso entre as fases SAF e P teremos transições de primeira e segunda ordem separadas por um ponto tricrítico $PTC(\alpha_t \simeq 1.31; \Omega_t/J \simeq 2.58)$. Para $\Omega \neq 0$ o estado quântico paramagnético é também observado com a presença de *gap* de energia induzido pelo campo Ω . As linhas críticas F-P são obtidas pela aproximação EFRG. Enquanto que, para a transição SAF-P as linhas de transição são obtidas usando EFT-2 via aproximação da derivada da magnetização.

Na Fig.(5.4) temos o comportamento da temperatura de transição de fase em função do parâmetro de frustração α para o sistema Ising quântico numa rede cúbica simples. As linhas de transições SAF-P e F-P são determinadas para as seguintes intensidades de campos transversal: (a) $\Omega/J = 0.0$, (b) $\Omega/J = 1.0$, (c) $\Omega/J = 2.0$, (d) $\Omega/J = 3.0$. Os comportamentos da fase F na presença do campo transversal são semelhantes aos obtidos para o caso da rede quadrada, mudando apenas os resultados quantitativos. Já a estabilidade da fase SAF (laminar) apresenta alguns resultados qualitativos bem diferentes do caso bidimensional, pois todas as linhas da transição SAF-P são de primeira ordem, independente da intensidade do campo transversal aplicado neste sistema magnético. As linhas de transição entre as fase F-P e F-SAF e SAF-P foram obtidas usando EFT-2 via

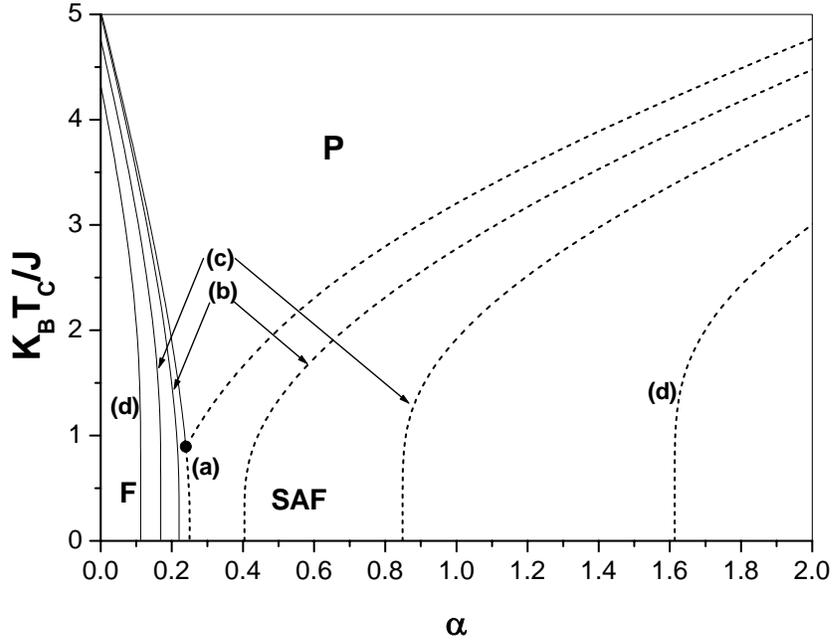


Figura 5.4: Comportamento da temperatura crítica em função do parâmetro de frustração para o modelo de Ising quântico frustrado numa rede cúbica simples. (a) $\Omega/J = 0$, (b) $\Omega/J = 1.0$, (c) $\Omega/J = 2.0$, e (d) $\Omega/J = 3.0$. As linhas contínuas e tracejadas correspondem as transições de segunda e primeira ordem, respectivamente. O círculo preto representa o ponto crítico terminal.

igualdade de energias livres das fases envolvidas na transição de fase.

Para pequenos valores de campo transversal ($\Omega/J \lesssim 0.5$) temos uma transição de primeira ordem entre as fases F e SAF, porém para $\Omega/J > 0.5$ esta transição é destruída, sendo observadas transições de fase de segunda ordem entre as fases F-P e SAF-P em qualquer temperatura, inclusive no estado fundamental ($T = 0$), onde temos um estado paramagnético quântico, com *gap* de energia induzido pelo campo. O presente resultado do diagrama de fase para o modelo de Ising quântico frustrado 3d, difere do caso do modelo $J_1 - J_2$ quântico frustrado 3d analisado no capítulo-4, onde o *gap* de energia não foi observado ocorrendo apenas transição de primeira ordem entre as fases SAF e F para

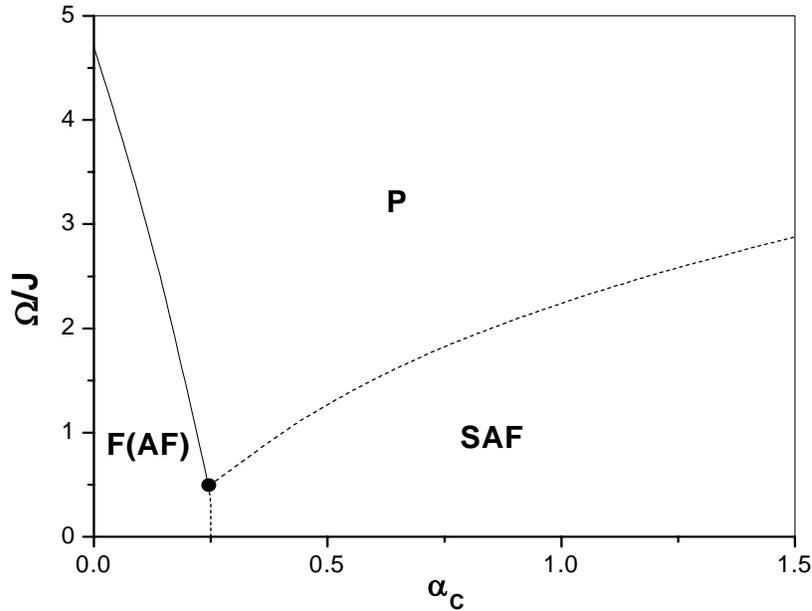


Figura 5.5: Diagrama de fase do estado fundamental no plano $\Omega - \alpha$ para o modelo de Ising quântico frustrado numa rede cúbica simples. As linhas contínua e tracejada correspondem as transições de segunda e primeira ordem, respectivamente. O círculo representa o ponto crítico terminal.

qualquer valor do parâmetro de anisotropia Δ .

O resultado do diagrama de fase em $T = 0$ é apresentado na Fig.(5.5). Observamos que aumentando a dimensionalidade do sistema, a presença do campo transversal não consegue destruir o estado paramagnético quântico (*gap* de energia), conforme é mostrado na Fig.(5.5). Um outro fator importante observado na Fig.(5.5) é que o campo transversal não consegue destruir completamente a ordem SAF, haja visto que a linha de transição SAF-P é sempre de primeira ordem e desta forma a magnetização não é absolutamente nula nos pontos de transição de fase. Este resultado comprova o que já tínhamos argumentado no capítulo-4, ou seja, o fato de que aumentando a dimensionalidade da rede o estado SAF se torna fortemente ordenado. Na transição F(AF)-SAF temos ponto crítico

terminal $PT(\alpha \simeq 0.246; \Omega/J \simeq 0.497)$ que indica o limite da transição F(AF)-SAF.

Referências

- [1] P. G. de Gennes, *Solid State Commum.* **1**, 132 (1963).
- [2] R. J. Elliott, P. Pfeuty e C. Wood, *Phys. Rev.Lett.* **25**, 7 (1970).
- [3] Y. Y. Goldschmidt, *Phys. Rev. B*, **41** 4858 (1998).
- [4] J. R. Viana, Y. Nogueira e J.R. de Sousa, *Phys. Rew. B.* **66**, 113307 (2002).
- [5] J. R. Viana, Y. Nogueira e J.R. de Sousa, *Phys. Lett. A.* **311**, 480 (2003).
- [6] D. Bitko e T.F. Rosenbaum, *Phys. Rev. Lett* **77**, 940 (1996).
- [7] K. Htoutou, *J. Magn. and Mag. Mat.* **288** 259 (2005).
- [8] R. Moessner, S. L. Sondhi e P. Chandra, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4457 (2000).
- [9] H. Rieger e G. Uimin, *Z. Phys. B* **101**, 597 (1997).
- [10] Y. Murdaka, K. Oda, J. W. Tucker e T. Idogaki, *J. Phys. A* **29**, 949 (1996).
- [11] P. D. Beale, *Phys. Rev. B* **31**, 7166 (1985).
- [12] P. R. Colares Guimarães, J. A. Plascak, F. C. Sá Barreto e J. Florêncio, *Phys. Rev. B* **66**, 064413 (2002).
- [13] M. Beccaria, M. Camprostrini e A. Feo, *Phys. Rev. B* **73**, 052402 (2006).
- [14] J. Stephenson, *Can. J. Phys.* **48**, 1724 (1970).

- [15] T. Kaneyoshi, *Phys. Rev. B* **33**, 526 (1986).
- [16] H. B. Callen, *Phys. Lett.* **4**.161 (1963).
- [17] P.R. Colares, Tese de Doutorado: *Dinâmica e Termodinâmica do Modelo de Ising a Campo Transverso com Interações de Segundos Vizinhos*, **Universidade Federal de Minas-Gerais** (2002).
- [18] C. M. Arizmendi, A. H. Rizzo e L. N. Epele, *Z. Phys. B* **83**, 273 (1991).
- [19] P. Sen, *Phys. Rev. B* **55**, 11367 (1997).
- [20] M. D. Grynberg e D. Tanatar, *Phys. Rev. B*, **45** 2876 (1991).
- [21] G. Y. Chitov e C. Gros, *L. Temp. Phys.* **31** 722 (2005).

Capítulo 6

Considerações finais e perspectivas

Apresentamos neste trabalho um estudo sistemático de transição de fase quântica em modelos de spins com interações competitivas. Novos ordenamentos (spin-líquido, colinear e vidro de spin) e comportamentos multicríticos foram observados nos diagramas de fases. Efeitos de anisotropia e dimensionalidade foram investigados.

No capítulo-3 estudamos o modelo de van Hemmen na presença de um campo transversal e anisotropias de íon único com spin $S = 1$. Usando aproximação de ordem zero para desacoplar exponencial de soma de operadores quânticos (i.e. $\exp(A.B) = \exp(A) \exp(B)$). Calculamos a energia livre e o parâmetro de ordem vidro de spin em função da temperatura T , do campo transversal Ω , e das anisotropias $D_{x,y,z}$ de íon único.

As anisotropias transversais D_x e D_y e o campo transversal Ω no modelo de van Hemmen permitiu observar novos comportamentos nos diagramas de fase SG-P, como, por exemplo, estudar transições de fase quânticas de primeira e segunda ordem. O campo transversal é um agente destruidor da ordem magnética em qualquer temperatura, inclusive no estado fundamental. Se o campo transversal for nulo, existe um *gap* de energia entre o mínimo de energia do estado ordenado ($q \neq 0$) e o mínimo de energia do primeiro estado excitado desordenado ($q = 0$). Contudo, para $\Omega \neq 0$ o *gap* de energia entre esses dois estados diminui, gradativamente, proporcionando que os spins tunelem do estado ordenado para o estado desordenado, de tal forma que no estado desordenado

($q = 0$) esses spins são reorientados na direção do campo transversal gerando uma ordem induzida nesta direção.

As anisotropias transversais podem ser agentes de destruição ou de aumento da ordem magnética. No caso em que $D_x = D_y = D$ temos que o modelo com anisotropia biaxial corresponde ao modelo com anisotropia uniaxial D_z , que é uma anisotropia que atua na mesma direção da magnetização do sistema. Nesta condição temos que se $D > 0$ as anisotropias transversais se comportam como agentes de destruição da ordem magnética do sistema, porém para $D < 0$ essas anisotropias funcionam como agentes de fortalecimento da ordem magnética, sem contudo aumentar a intensidade da ordem magnética, só mantendo congelada a ordem magnética com mínimos de energia mais estáveis. Para $D \rightarrow \infty$ o fica favorecido o estado $\sigma_i^z = 0$ desordenado (paramagnético) com mínimo de energia nulo ($f/J = 0$), e $D \rightarrow -\infty$ temos os estados $\sigma_i^z = \pm 1$ com mínimos de valores mais estáveis comportando-se como um sistema de spin $S = 1/2$. Quando aplicamos a DPB no modelo, o sistema sofre uma transição de fase SG-P para a anisotropia crítica $D_c/J = 0.5$, enquanto que para a DPG temos o valor $D_c/J \simeq 0.41325$, no estado fundamental. Para ambas distribuições de probabilidade, o sistema sofre uma transição de primeira ordem, ou seja, o parâmetro de ordem vidro de spin se torna nulo de modo descontínuo nos valores das anisotropias críticas.

Observamos que diferente da forma como o campo transversal destrói a ordem magnética, a anisotropia $D < 0$ eleva o estado com mínimo de energia até o nível $f/J = 0$ para que o sistema sofra a transição de fase, onde esse mínimo é menos estável em relação ao mínimo de energia quando $D = 0$. Na aplicação da DPB os resultados indicaram que a ordem magnética ficou congelada com o aumento da intensidade da anisotropia $D/J < 0$ até que o valor crítico da mesma seja atingido, com um mínimo de energia apresentando um estado triplamente degenerado ($q = \pm 0.5$ e $q = 0$), indicando assim uma transição de fase de primeira ordem. Este resultado indica que nenhum spin tunela entre os níveis de mínimo de energia dos estados ordenado ($q \neq 0$) e desordenado ($q = 0$) mesmo diminuindo o *gap* de energia entre esses estados com o aumento da intensidade da anisotropia

$D < 0$. Já no caso da aplicação da DPG a medida que aumenta a intensidade da $D < 0$, a ordem vidro de spin sofre uma diminuição, porém não sendo o suficiente para se anular no valor crítico da anisotropia. Este resultado nos permite concluir que para esta distribuição de probabilidade alguns spins, que compõem a ordem magnética do sistema, tunelam do estado ordenado para o estado desordenado a medida que aumenta a intensidade de $D < 0$. Contudo no aspecto qualitativo, referente ao transição de fase de primeira ordem que o sistema sofre no estado fundamental, as duas distribuições de probabilidade proporcionam o mesmo resultado para o modelo estudado.

Por outro lado, para o caso assimétrico $D_x \neq D_y$ ambas anisotropias se comportam como agentes de destruição da ordem magnética. Foram obtidos resultados diferenciados do caso simétrico $D_x = D_y$, se $D_{x,y} > 0$ o sistema atinge o equilíbrio termodinâmico com mínimos de energia que diminuem, gradativamente, a medida que cresce a intensidade dessa anisotropia, enquanto que se $D_{x,y} < 0$ os estados com mínimos de energia do sistema aumentam a medida que a intensidade das anisotropias aumentam (em módulo). Esses comportamentos das anisotropias transversais independem se o sistema magnético é submetido a um campo transversal ou não. O sistema não apresenta anisotropias críticas D_x/J simétricas nos regimes $D_x/J > 0$ e $D_x/J < 0$ no estado fundamental. Esse resultado é justificado pela diferença de comportamento dos mínimos de energia do sistema obtidos nos regimes de valores para $D_x/J > 0$ e $D_x/J < 0$. Este comportamento também modifica o tipo de transição de fase no estado fundamental, pois quando o campo transversal é nulo na anisotropia crítica $D_x/J \simeq 1.94$ temos uma transição de primeira ordem, enquanto que para o valor crítico $D_x/J \simeq -2.0$ temos uma transição de segunda ordem. Se $D_{x,y} \rightarrow -\infty$ o sistema continua apresentando um mínimo de energia nulo para um estado desordenado (paramagnético), enquanto que para $D_{x,y} \rightarrow \infty$ o sistema se encontra em equilíbrio termodinâmico com mínimo de energia mais estável que variam, independentemente, da intensidade do campo transversal.

As anisotropias transversais $D_{x,y}$ proporcionam resultados bem interessantes na criticidade do sistema, pois no confronto entre as mesmas e o campo transversal foram

obtidos resultados que num primeiro momento parecem ser contraditórios, como, por exemplo, a situação em que aumentando a intensidade do campo transversal é necessário uma intensidade de anisotropia crítica no regime de valores para $D_{x,y} < 0$ no estado fundamental. Lembramos que tanto o campo transversal Ω quanto as anisotropias $D_{x,y} < 0$ são agentes de destruição da ordem magnética, desta forma se aumentarmos a intensidade do campo transversal seria necessária menor intensidade das anisotropias $D_{x,y} < 0$. A explicação para isto se deve aos comportamentos dos mínimos de energia que o sistema se encontra quando é submetido ao campo transversal, que proporciona um deslocamento para níveis menores ou níveis mais estáveis dos mínimos de energia do sistema. No caso das anisotropias negativas esses mínimos de energia são deslocados para níveis maiores (níveis menos estáveis), desta forma na aplicação de um campo transversal no sistema magnético é necessário maior intensidade de anisotropias $D_{x,y} < 0$ para que os mínimos de energia sejam deslocados até o nível de energia igual a zero, onde o sistema sofre transição de segunda ordem.

O modelo de van Hemmen não simula um verdadeiro vidro de spin, pois não reproduz o fenômeno da histerese, contudo é um modelo que reproduz determinados comportamentos observado experimentalmente em materiais vidro de spin, como a cúspide da susceptibilidade. Contudo, é um modelo que nos permite fazer o tratamento de sistema que apresentam interações aleatórias entre os sítios que compõem esse sistema magnético. Podemos através de generalizações, incluindo efeitos quânticos, analisar aspectos gerais de transição de fase quântica. A partir do qual podemos obter resultados qualitativos bastante ricos em informações a respeito da criticalidade do sistema.

No capítulo 4 estudamos modelos de spins magnéticos com interações competitivas entre primeiros e segundos vizinhos. Usamos teoria de campo efetivo (EFT) aliada a técnica do operador diferencial em aglomerados com $N = 1, 2$ e 4 spins. Propomos um funcional para a energia livre (expansão de Landau) para analisar transição de fase de primeira ordem (e também de segunda ordem). Devido ao efeito de tamanho finito e dimensionalidade da rede, o método da energia livre para obter a linha de primeira ordem,

não foi satisfatório para alguns sistemas em baixas temperaturas, portanto formulamos um método aproximativo para encontrar esta linha de transição, baseada na divergência da derivada da magnetização em relação a temperatura, o que fez estimar um valor correto para $T_c(\alpha)$.

Inicialmente, estudamos o limite Ising ($\Delta = 1$) nas redes quadrada (2d) e cúbica (3d). Na ausência de campo magnético longitudinal o sistema ferromagnético é equivalente ao sistema antiferromagnético. A medida que o parâmetro de frustração α aumenta, a temperatura crítica $T_c = T_N$ diminui gradativamente, se anulando no ponto $\alpha_c = 0.5$ para a rede quadrada. Usando EFT-1 e EFT-2 temos encontrado resultados espúrios (quando comparamos com simulações de Monte Carlo) na transição de fase F(AF)-P, onde é observado transição de primeira ordem em baixas temperaturas. Para contorna essa inconsistência, usamos duas metodologias: a primeira consiste em aumentar o aglomerado para $N = 4$ spins na teoria de campo efetivo e segundo aplicamos o método do grupo de renormalização (EFRG) em aglomerados com $N' = 1$ e $N = 2$ spins. Para $\alpha > \alpha_c$ observamos um estado fundamental denominado de superantiferromagnético (SAF), são obtidas transições de fase SAF-P de primeira e segunda ordem dependendo do valor do parâmetro α . Nos formalismos EFT-1 e EFT-2 usamos o método da derivada da magnetização para determinar a linha de primeira ordem correta para a transição SAF-P. Enquanto que, para EFT-4 tanto o método da energia livre quanto o método da derivada da magnetização apresentam resultados qualitativos corretos e quantitativos ligeiramente diferentes. Estes resultados foram recentemente aceitos para publicação na *Physical Review B*. No caso da rede cúbica simples, usamos apenas o formalismo EFT-2 e o método da energia livre para encontrar a linha de transições de fase F(AF)-P, SAF-P e F(AF)-SAF. Na transição de fase F(AF)-P é observado uma linha de transição de fase de segunda ordem, enquanto que na transição SAF-P é obtida uma linha de primeira ordem. Contrário a alguns métodos utilizados para estudar este modelo, no presente trabalho fomos capazes de calcular a linha de primeira ordem entre as fases F(AF), onde T_c é nula no ponto $\alpha_c = 0.5$. Nossos resultados são qualitativamente corretos e observamos

que a dimensionalidade é um fator importante na criticalidade do sistema, induzido, por exemplo, transição de primeira ordem.

Introduzindo efeitos quânticos através do parâmetro de anisotropia $\Delta \neq 1$, as propriedades críticas do sistema em baixas temperaturas apresentam resultados completamente diferentes do limite clássico ($\Delta = 1$). Desta maneira estudamos os efeitos da anisotropia (Δ) e a dimensionalidade na transição de fase quântica. No caso do modelo $J_1 - J_2$ anisotrópico 2d, em $T = 0$ temos uma fase ordenada para $\alpha < \alpha_{1c}(\Delta)$ e $\alpha > \alpha_{2c}(\Delta)$. Na região $\alpha_{1c}(\Delta) < \alpha < \alpha_{2c}(\Delta)$ temos um estado desordenado paramagnético quântico que é aceito ser denominado de estado spin-líquido, que é caracterizado por apresentar *gap* de energia. Dependendo do sinal da interação de troca dos primeiros vizinhos (J_1) os sistemas F($J_1 > 0$) e AF($J_1 < 0$) não são equivalentes devido aos aspectos quânticos da álgebra dos spins. Portanto o valor do ponto crítico quântico $\alpha_{1c}(\Delta)$ depende fortemente do sinal da interação J_1 , que na nossa análise, usando EFRG, encontramos $\alpha_{1c}^F(\Delta) > \alpha_{1c}^{AF}(\Delta)$. O ponto $\alpha_{1c}^\mu(\Delta)$ corresponde a transição entre as fases F(ou AF) e spin-líquido. Para $\alpha > \alpha_{2c}(\Delta)$ temos um ordenamento colinear (semelhante a fase SAF no modelo de Ising frustrado 2d), sendo que agora $\alpha_{2c}^{AF}(\Delta) > \alpha_{2c}^F(\Delta)$. O ponto $\alpha_{2c}^\mu(\Delta)$ corresponde a uma transição de fase de primeira ordem entre as fases spin líquido e colinear. Em temperatura finita observamos uma transição de fase de segunda ordem entre as fase F(ou AF) e P, onde a temperatura crítica (T_c e T_N) diminui a medida que aumentamos o parâmetro α se anulando no ponto crítico quântico $\alpha_{1c}^\mu(\Delta)$. Na fase colinear teremos a presença de transições de primeira e segunda ordem. Os resultados qualitativos do diagrama de fase no plano $T - \alpha$, do ponto de vista dos tipos de transição de fase, para o modelo $J_1 - J_2$ 2d são independentes do parâmetro de anisotropia Δ , onde no limite clássico ($\Delta = 1$) a fase spin-líquido ($T = 0$) é destruída. No caso AF observamos um comportamento reentrante em baixas temperaturas, resultado este que pode ter sido ocasionado pelo efeito tamanho finito na aproximação usada (EFT) e também devido as competições entre do efeito da frustração, da temperatura e flutuações quânticas. Por outro lado, resultado de reentrância também foi observado recentemente na fase colinear

usando simulação de Monte Carlo quântico, sendo que a anisotropia se fez presente na interação de segundo vizinhos, portanto os nossos resultados na fase AF pode vim a está correto por esta analogia. Na rede 3d, a fase spin-líquido não está presente e o digrama de fase no plano $T - \alpha$ é qualitativamente o mesmo para qualquer valor $\Delta \in [0, 1]$.

Finalmente, no capítulo 5 o limite da estabilidade da ordem magnética do modelo de Ising frustrado na presença de um campo transversal foi estudado, usando os métodos EFT-2 e EFRG.

Foi verificado que para rede quadrada a ordem magnética do estado colinear (SAF) é destruída de modo contínuo ou descontínuo, para determinados valores do campo transversal. No estado fundamental no plano $\Omega - \alpha$ é observado um ponto tricrítico $PTC(\alpha_t = 1.31; (\Omega/J)_t = 2.58)$, e nos informa que a linha de transição entre as SAF e P apresenta regiões de transição de primeira ($\alpha < \alpha_t$) e segunda ($\alpha > \alpha_t$) ordem. O estado paramagnético quântico existente entre as fase F e SAF obtido no modelo de Ising quântico, não é o mesmo estado observado a partir do modelo quântico anisotrópico para a rede quadrada.

No caso da rede cúbica simples não observamos um ponto tricrítico, e ainda mais a transição de fase entre as fases SAF-P e SAF-F é toda de primeira ordem no estado fundamental. Entre as fases F e P a transição de fase é de segunda ordem e o diagrama de fase apresenta uma região intermediária com *gap* de energia, tanto para a rede 2d como para 3d, que é dependente do campo transversal.

O desenvolvimento dos capítulos 4 e 5 foi bastante trabalhoso, principalmente, porque a aplicação da técnica do operador diferencial acarreta um grande problema, ou seja, as equações de estados são bastantes grandes (devido o tamanho dos coeficientes) a medida que o tamanho do aglomerado aumenta. Desta maneira os programas gerados para fazer a solução computacional dos modelos, são complexos o que dificultou a compilação e execução dos programas. Contudo, este problema se transformou num grande desafio para realização desta tese, de tal forma que fizemos uma proposta metodologia para implementação desses modelos, tornando mais eficiente o processo computacional. Outro desafio foi

diagonalizar numericamente os Hamiltonianos em aglomerados com $N = 2$ spins, onde se fez necessário o desenvolvimento de uma proposta para diagonalizar, numericamente, os Hamiltonianos que não possuem uma solução analítica, como no caso do capítulo-5 em que os modelos com $N = 2$ sítios centrais apresentam Hamiltonianos que não podem ser diagonalizados analiticamente.

Como perspectivas futuras desta tese teremos:

- 1) Estudar as propriedades termodinâmicas dos modelos quânticos frustrados descritos nesta tese;
- 2) Desenvolver o formalismo do operador diferencial para o modelo $J_1 - J_2$ de spin clássico;
- 3) Investigar a fase spin-líquido para spin $S > 1/2$;
- 4) Calcular o *gap* de energia no modelo $J_1 - J_2$ quântico e conseqüentemente obter o expoente dinâmico z ;
- 5) Introduzir impurezas magnéticas e analisar esta influência sobre a fase spin-líquido;
- 6) Estudar o efeito do campo longitudinal nas fases colinear e laminar nos modelos frustrados.

Apêndice A

Procedimentos Numéricos

Os resultados dos gráficos apresentadas neste trabalho foram obtidos a partir da utilização de alguns procedimentos numéricos, como, por exemplo, o método de Newton-Raphson para soluções de sistema de equações não lineares e o método da Integração por Quadratura Gaussiana, sendo que para implementação computacional foi utilizada a linguagem fortran. Vamos, então, fazer uma pequena abordagem da forma como foram utilizados estes métodos numéricos neste trabalho, sem nos determos ao programa propriamente dito.

1.1 Métodos Numéricos de Newton-Raphson

A fim de ilustração de um problema físico real, consideremos o caso do modelo de Ising-1/2 na presença de um campo transversal discutido no capítulo 2 desta tese. Na aproximação de campo médio encontramos uma expressão auto-consistente para a magnetização em função da temperatura (T) e do campo transversal (Ω) dada Eq.(2.15) e que na forma de cálculo de raízes pode ser reescrita por

$$F(m, \Omega/J, \beta) = \sqrt{m^2 + (\Omega/J)^2} - \tanh\left(\beta J \sqrt{m^2 + (\Omega/J)^2}\right) = 0. \quad (1.1)$$

O processo a ser realizado consiste em determinar as raízes m da função $F(m, \Omega/J, \beta) = 0$ para cada valor da temperatura T/J e o campo Ω/J , normalizados. Para isto usamos o método iterativo de Newton Raphson (MNR), que neste caso é expresso por

$$m_{n+1} = m_n - \frac{F(m_n, \Omega/J, \beta)}{F'(m_n, \Omega/J, \beta)} \quad (1.2)$$

sendo

$$F'(m_n, \Omega/J, \beta) = \frac{\partial F}{\partial m_n} \quad (1.3)$$

onde m_n é um valor inicial (“chute”) para a magnetização. O processo iterativo termina quando o “zero” da função $F(m, \Omega/J, \beta)$ for satisfeita. As vezes a maior dificuldade é especificar o valor inicial m_n , por outro lado, se for conhecido a solução física, como, por exemplo, para baixa temperatura, a magnetização de um sistema ferromagnético é $m = 1$ que é uma condição inicial que satisfaz a função F , e desta forma a medida que T/J varia outras raízes m são obtidas mais rapidamente.

Não vamos nos aprofundar a respeito do método, caso o leitor queira se informar mais ver as refs. [2] e [1], que apresentam uma excelente explanação sobre esse assunto. Este método em relação aos outros (bisseção, cordas,...), que resolvem equações não lineares é o mais eficiente, pois converge rapidamente para a solução, ou seja, precisa de um menor número de iterações para determinar as raízes da equação.

No capítulo 3, a fig.(3.8) para ser obtida foi utilizado o método de Newton-Raphson Modificado para resolver sistema de equações não lineares. A determinação do diagrama de fase fig.(3.8), foi determinado para baixa temperatura fixada em $T/J = 0.001$ para o caso vidro de spin puro ($J_o = 0$). Contudo, sobram três variáveis Ω/J , $D/J = D_x/J = D_y/J$ e o parâmetro de ordem q . Tomamos como variável independente o campo Ω/J na implementação do programa que trata deste modelo, desta forma sobram D/J e q para serem determinados. Portanto, a linha de transição de fase da fig.(3.8) para ser obtida precisa determinar as raízes das variáveis D/J e q , desta forma é necessário um sistema de duas equações não lineares acopladas. No caso foram utilizadas as equações

do parâmetro de ordem q e também a igualdade das energias livres das fase vidro de spin (SG) e paramagnética (P), dadas a seguir em forma de funções nulas:

$$F_1(q, T, D_x, D_y, \Omega) = q - \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(\xi + \eta)}{\Gamma} \frac{\partial \Gamma}{\partial K} P(\xi, \eta) d\xi d\eta = 0, \quad (1.4)$$

$$F_2(q, T, D_x, D_y, \Omega) = f_{SG}(q, T, D_x, D_y, \Omega) - f_P(q = 0, T, D_x, D_y, \Omega) = 0, \quad (1.5)$$

sendo que

$$f = \frac{1}{\beta} \left[k_2 q^2 - \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \ln(\Gamma) P(\xi, \eta) d\xi d\eta \right]. \quad (1.6)$$

A partir dessas equações, as iterações para cada incógnita são dadas pelas seguintes expressões:

$$q_{n+1} = q_n + \frac{\det(M_q)}{\det(J)} \quad (1.7)$$

$$D_{n+1} = D_n + \frac{\det(M_D)}{\det(J)} \quad (1.8)$$

sendo que

$$\det(M_q) = \begin{vmatrix} -F_1 & \frac{\partial F_1}{\partial D} \\ -F_2 & \frac{\partial F_2}{\partial D} \end{vmatrix} \quad (1.9)$$

$$\det(M_D) = \begin{vmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial q} & -F_1 \\ \frac{\partial F_2}{\partial q} & -F_2 \end{vmatrix} \quad (1.10)$$

$$\det(J) = \begin{vmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial q} & \frac{\partial F_1}{\partial D} \\ \frac{\partial F_2}{\partial q} & \frac{\partial F_2}{\partial D} \end{vmatrix}. \quad (1.11)$$

O último determinante é conhecido como *Jacobiano* (J). Este método apresenta um grande problema de divergência, a medida que o valores iniciais tomados se distanciam das soluções. Então é necessário encontrar uma forma de obter esses valores iniciais para

essas grandezas. Existem softwares que podem resolver esse problema, como o *Maple* que apresenta o comando *fsolve* que tem por função determinar a solução para um sistema de equações lineares e não lineares. Usamos este software para estimar as raízes (“chutes”) e implementar na linguagem fortran. Das Eqs.(1.3) e (1.5) vemos que necessitamos calcular uma integral ao mesmo tempo obter raízes, dizemos que neste caso temos um sistema de equações-integrais a serem resolvidas. Assim sendo, vamos a seguir descrever o método da quadratura gaussiana para resolver integrais.

1.2 Método da Quadratura Gaussiana

Neste trabalho foi usado a distribuição de probabilidade gaussiana, o que acarreta a necessidade de resolver integrais definidas. Para a resolução numérica vamos usar o Método da Quadratura (MQ) de Gauss. Este método proposto por Gauss, consiste em fazer a seguinte transformação:

$$I = \int_a^b f(x)dx = \int_{-1}^1 F(w)dw, \quad (1.12)$$

onde foi feito a mudança de variável

$$x = \frac{1}{2}(b-a)w + \frac{1}{2}(b+a), \quad (1.13)$$

e a função $F(w)$ é dada por

$$F(w) = \frac{1}{2}(b-a) f \left[x = \frac{1}{2}(b-a)w + \frac{1}{2}(b+a) \right]. \quad (1.14)$$

A integral dada na Eq.(1.12) é dada pela fórmula geral para a quadratura gaussiana, ou seja,

$$I = \int_{-1}^1 F(w)dw = \sum_{i=0}^{m-1} A_i F(w_i), \quad (1.15)$$

que consiste numa soma de m termos (pontos), sendo baseada nas propriedades dos

polinômios de Legendre, tal que, A_i corresponde a um peso da função $F(w_i)$ e w_i são as raízes do polinômio de Legendre. Os termos A_i e w_i são as incógnitas a serem determinadas e independem da função $f(x)$ escolhida. O polinômio de Legendre é representado pela seguinte somatória:

$$P_n(w) = \sum_{k=0}^r \frac{(2n-2k)!}{2^k k! (n-2k)! (n-k)!} w^{n-2k} \quad (1.16)$$

sendo que $r = n/2$ se n for par ou $r = (n-1)/2$ se n for ímpar. Caso o leitor deseje mais informações sobre este polinômio ver [3]. Podemos obter todas as raízes deste polinômio usando o método de Newton-Raphson junto com o método da divisão sintética, que será abordado na próxima seção.

Após determinarmos as raízes do polinômio de Legendre, podemos determinar os coeficientes da série de Legendre na Eq.(1.15), a partir da seguinte expressão:

$$A_i = \frac{2}{(1-w_i^2) P_n'(w_i)^2} \quad (1.17)$$

Infelizmente, nas várias literaturas que pesquisamos não encontramos o desenvolvimento deste método de Quadratura para integrais múltiplas, deste forma fizemos um tratamento da generalização do método de Quadratura. Para ilustrar, vamos começar este tratamento verificando, por exemplo, para o caso da integral dupla, obtendo

$$I = \int_a^b \int_c^d f(x, y) dx dy = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 F(w, v) dw dv, \quad (1.18)$$

sendo

$$x = \frac{1}{2}(b-a)w + \frac{1}{2}(b+a) \quad (1.19)$$

$$y = \frac{1}{2}(d-c)v + \frac{1}{2}(d+c) \quad (1.20)$$

$$F(w, v) = \frac{1}{4}(b-a)(d-c) f(x, y). \quad (1.21)$$

Como sempre são as mesmas raízes do polinômio de Legendre de grau n e por consequência os mesmos coeficientes obtidos para a série de Legendre, então as raízes $w_i = v_i$ para as soluções das integrais da Eq.(1.18). Desta forma, para resolver a integral dupla, primeiramente, para a variável w a partir da aplicação do MQ obtemos

$$I = \int_{-1}^1 [A_0 F(w_0, v) + A_1 F(w_1, v) + A_2 F(w_2, v) + \dots + A_m F(w_n, v)] dv, \quad (1.22)$$

e, finalmente, aplicando o MQ para a variável v é obtido o seguinte resultado:

$$\begin{aligned} I = & A_0 [A_0 F(w_0, v_0) + A_1 F(w_0, v_1) + A_2 F(w_0, v_2) + \dots + A_m F(w_0, v_n)] + \\ & A_1 [A_0 F(w_1, v_0) + A_1 F(w_1, v_1) + A_2 F(w_1, v_2) + \dots + A_m F(w_1, v_n)] + \\ & A_2 [A_0 F(w_2, v_0) + A_1 F(w_2, v_1) + A_2 F(w_2, v_2) + \dots + A_m F(w_2, v_n)] + \dots + \\ & A_m [A_0 F(w_m, v_0) + A_1 F(w_m, v_1) + A_2 F(w_m, v_2) + \dots + A_m F(w_m, v_m)], \end{aligned} \quad (1.23)$$

resumindo o processo acima obtemos

$$I = \sum_{i=0}^{m-1} \sum_{j=0}^{m-1} A_i A_j F(w_i, v_j). \quad (1.24)$$

A partir desta mesma linha de raciocínio podemos obter uma expressão geral para integral múltiplas com q variáveis, dada por

$$I = \int_{a_1}^{b_1} \int_{a_2}^{b_2} \dots \int_{a_q}^{b_q} f(x_1, x_2, \dots, x_q) dx_1 dx_2 \dots dx_q \quad (1.25)$$

$$I = \sum_{i_1=0}^{m-1} \sum_{i_2=0}^{m-1} \sum_{i_3=0}^{m-1} \dots \sum_{i_q=0}^{m-1} A_{i_1} A_{i_2} \dots A_{i_q} F(w_{i_1}, w_{i_2}, \dots, w_{i_q}), \quad (1.26)$$

onde

$$x_k = \frac{1}{2}(b_k - a_k)w_k + \frac{1}{2}(b_k + a_k), \quad k = 1, 2, 3, \dots, q. \quad (1.27)$$

E, ainda, a função $F(w_{i_1}, w_{i_2}, \dots, w_{i_q})$ fica sendo dada por

$$F(w_{i1}, w_{i2}, \dots, w_{iq}) = \frac{1}{2^q} \prod_{k=1}^q (b_k - a_k) f(x_1, x_2, \dots, x_q). \quad (1.28)$$

Saber qual a quantidade necessária de pontos m para a implementação numérica da integral, é um fator que deve ser levado em consideração, quanto maior for a quantidade de ponto melhor será a convergência do procedimento numérico para o valor exato da integral. O problema é que para obter uma quantidade de pontos, devemos resolver polinômios com grau n cada vez maior, sendo que valor de n determina, diretamente, a quantidade de ponto $m = n$ a ser usado no método. No caso dos modelos estudados no capítulo 3 os diagramas de fase apresentaram flutuações numéricas, quando foi adotado $n = 20$, porém para valores $n \geq 34$ as flutuações numéricas desaparecem das linhas de transições de fase obtidas para os modelos estudados.

1.3 Solução Analítica para Polinômio de grau 3

No capítulo-3 é necessário diagonalizar o Hamiltoniano representado pela seguinte matriz:

$$M_{\mathcal{H}} = K\sigma^z + k_4\sigma^x + k_5(\sigma^x)^2 + k_6(\sigma^y)^2, \quad (1.29)$$

processo esse que consiste na determinação dos autovalores dessa matriz. Como o modelo estudado neste capítulo é referente a um sistema magnético de spins igual $S = 1$, devemos

usar os seguintes operadores matriciais:

$$\sigma^z = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (1.30)$$

$$\sigma^x = \begin{bmatrix} 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \end{bmatrix} \quad (1.31)$$

$$\sigma^y = \begin{bmatrix} 0 & -\frac{i\sqrt{2}}{2} & 0 \\ \frac{i\sqrt{2}}{2} & 0 & -\frac{i\sqrt{2}}{2} \\ 0 & \frac{i\sqrt{2}}{2} & 0 \end{bmatrix}, \quad (1.32)$$

O polinômio característico associado a matriz 1.29 é dado por:

$$P(\lambda) = \lambda^3 - \left(\frac{2k_5 + 2k_6}{t} \right) \lambda^2 - \left(\frac{k^2 - k_5^2 - k_6^2 + k_4^2 - 3k_5k_6}{t^2} \right) \lambda - \left(\frac{-k_5k^2 - k_6k^2 + k_5^2k_6 + k_5k_6^2 - k_5k_4^2}{t^3} \right), \quad (1.33)$$

onde utilizamos o fato de que $K \equiv 1/t$. Definindo, apropriadamente, os coeficientes a_1 , a_2 e a_3 na Eq.(1.33), podemos reescrever o polinômio característico na forma de uma equação do 3º grau, ou seja,

$$P(\lambda) = \lambda^3 + a_1\lambda^2 + a_2\lambda + a_3 \quad (1.34)$$

definindo as novas variáveis

$$Q = (3a_2 - a_1^2) / 9 \quad (1.35)$$

$$R = (9a_1a_2 - 27a_3 - 2a_1^3) / 54 \quad (1.36)$$

$$S = \left(R + \sqrt{Q^3 + R^2} \right)^{1/3} \quad (1.37)$$

$$T = \left(R - \sqrt{Q^3 + R^2} \right)^{1/3} \quad (1.38)$$

Vamos utilizar as soluções para o caso do discriminante $\Delta = Q^3 + R^2 < 0$, a partir do qual são obtidas soluções reais o que é adequado para $M_{\mathcal{H}}$ que é uma matriz Hermitiana, essas soluções são dadas pelas seguintes expressões:

$$\lambda_1 = -a_1/3 - 2\sqrt{-Q} \cos(\theta/3) \quad (1.39)$$

$$\lambda_2 = -a_1/3 - 2\sqrt{-Q} \cos(\theta/3 + 2\pi/3) \quad (1.40)$$

$$\lambda_3 = -a_1/3 - 2\sqrt{-Q} \cos(\theta/3 + 4\pi/3) \quad (1.41)$$

sendo que

$$\theta = \arccos \left(-R\sqrt{-Q^3} \right). \quad (1.42)$$

1.4 Métodos de Newton-Raphson e de Briot-Ruffini

O método de Newton-Raphson é o método numérico mais eficiente para determinação de raiz de uma equação linear e não linear, pois o mesmo converge, rapidamente, para uma das raízes da equação dada, mesmo que a condição inicial usada não seja tão próxima da raiz. Estes fatores são superiores a outros métodos conhecidos. Contudo, o método apresenta o problema de determinar uma única raiz, deste forma para uma equação polinomial, por exemplo, de grau $g > 2$, o método sozinho não determina, facilmente, todas as g raízes da equação polinomial. No caso desta tese, no capítulo-4 foram obtidas matrizes que representam os Hamiltonianos para um sistema magnético para um

aglomerado com $N = 2$ sítos centrais na presença de um campo transverso.

Este modelo resulta em matrizes não diagonalizáveis exatamente. Desta maneira é necessário utilizar algum processo numérico para diagonalização dessa matriz. Esta questão nos motivou a propor uma processo para determinação de todas as raízes de um polinômio $P(x)$ de grau g , sendo que este processo é baseado nos métodos de Briot-Ruffini, usado para calcular o valor do polinômio para $P(x = x_n)$, e o método de Newton-Raphson, que é usado para realizar o processo de convergência para raiz desejada. O método de Newton-Raphson já conhecemos, então vamos verificar do que trata o método de Briot-Ruffini.

O método da divisão sintética ou o Método de Briot-Ruffini [1] é um método iterativo que consiste na determinação do valor do polinômio $P(x_n)$, por exemplo, seja o polinômio dado a seguir

$$P(x) = a_3x^3 + a_2x^2 + a_1x + a_0. \quad (1.43)$$

vamos calcular $P(x_n)$. Para isto é usada o seguinte procedimento iterativo:

$$b_3 = a_3 \quad (1.44)$$

$$b_2 = a_2 + a_3x_n = a_2 + b_3x_n \quad (1.45)$$

$$b_1 = a_1 + a_2x_n + a_3x_n^2 = a_1 + b_2x_n \quad (1.46)$$

$$b_0 = a_0 + a_1x_n + a_2x_n^2 + a_3x_n^3 = a_0 + b_1x_n. \quad (1.47)$$

tal que b_0 é o valor do polinômio para $x = x_n$. Se o polinômio for de grau g este método pode ser generalizado, sendo que cada termo é obtido a partir da seguinte expressão interativa:

$$b_i = a_i + b_{i+1}x_n, \quad i = (m-1)(m-2), \dots, 3, 2, 1, 0. \quad (1.48)$$

Outro fator bastante importante deste método é que os coeficientes b_i com $i \neq 0$ correspondem aos coeficientes de um polinômio que determina o mesmo valor derivada

de $P(x)$ para $x = x_n$, ou seja, o polinômio derivada de $P(x)$ aplicado em x_n dado por

$$P'(x = x_n) = 3a_3x_n^2 + 2a_2x_n + a_1, \quad (1.49)$$

é fácil ver que este polinômio corresponde ao seguinte polinômio:

$$P'(x = x_n) = b_3x_n^2 + b_2x_n + b_1. \quad (1.50)$$

Desta forma podemos aplicar, novamente, este método para determinar $P'(x = x_n)$. Portanto, conhecendo $P(x_n)$ e $P'(x_n)$ podemos utilizar o método de Newton-Raphson, ou seja,

$$x_{n+1} = x_n - \frac{P(x_n)}{P'(x_n)}, \quad (1.51)$$

para determinar cada raiz x_o de $P(x)$. A determinação de uma das raízes para o polinômio $P(x)$, a partir do método iterativo de Briot-Ruffini dado por eq.(1.48), deve parar somente quando $P(x_n = x_o) \leq abs(\varepsilon)$, onde ε é o zero adotado para a função. Outro fator, extremamente, importante obtido deste método é que sendo determinado uma das raízes de $P(x)$, imediatamente, são obtidos os coeficientes para o polinômio de grau reduzido de grau $g - 1$, dado por

$$P(x)_{g-1} = b_3x^2 + b_2x + b_1. \quad (1.52)$$

A partir deste polinômio reduzido podemos aplicar, novamente, o método de Briot-Ruffini para determinar uma das raízes para este novo polinômio. Repetindo os mesmos procedimento até que todas as raízes sejam obtidas.

A verificação desta proposta foi, inicialmente, comparada com os resultados exatos para o caso do modelo estudado no capítulo-3, que como já vimos na seção anterior a diagonalização é exata. O resultado obtido a partir do processo numérico é surpreendente, quando comparado com o resultado exato como pode ser observado nas figuras fig.(1.1) e fig.(1.2). Desta maneira, este teste serve de garantia de convergência para matrizes que não apresentam solução exata para os autovalores.

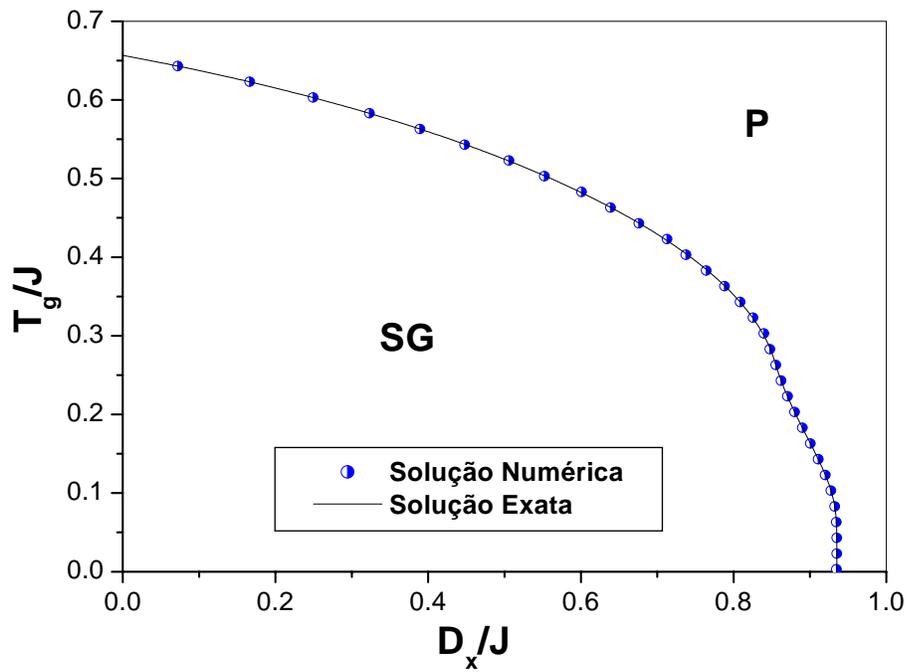


Figura 1.1: Comportamento da temperatura de congelamento em função da anisotropia D_x/J para intensidade de campo transversal $\Omega/J = 0.2$ e $D_y/J = 0$ aplicando a DPB no modelo. Resultados obtidos a partir de soluções numérica (pontos) e exata (linha).

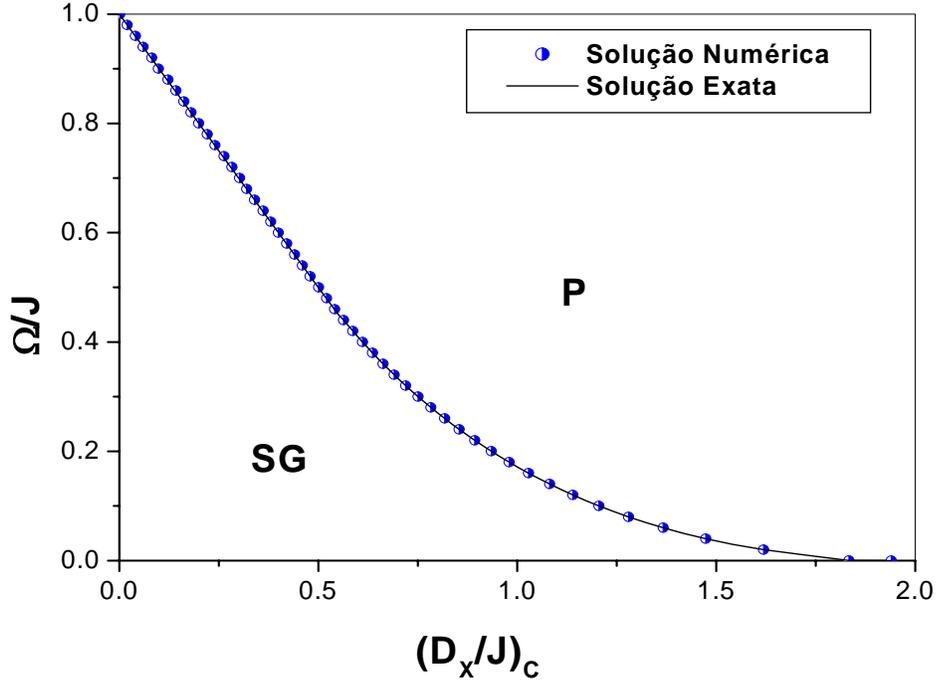


Figura 1.2: Comportamento do campo transverso em função da anisotropia D_x/J no estado fundamental com $D_y/J = 0$ aplicando a DPB no modelo. Resultados obtidos a partir de soluções numérica (pontos) e exata (linha),

Nas figuras (1.1) e (1.2) temos que os pontos representam a solução numérica, enquanto que a linha preta a solução exata, ambos os diagramas de fase são relativos a aplicação da distribuição de probabilidade bimodal (DPB), como os descritos no capítulo-3.

No capítulo-5 foram obtidos diagramas de fase com linhas de segunda ordem da transição F(AF)-P usando a aproximação do grupo de renormalização na teoria de campo efetivo (EFRG). Sendo que esta aproximação é feita partindo da expressão

$$A_1(T, \alpha, \Omega)_{N=1} = A_1(T, \alpha, \Omega)_{N=2}, \quad (1.53)$$

tal que $A_1(T, \alpha, \Omega)_{N=1}$ e $A_1(T, \alpha, \Omega)_{N=2}$ são os coeficientes de primeira ordem da expansão

da magnetização para aglomerados com $N = 1$ e $N = 2$ sítios centrais, respectivamente. O Hamiltoniano do qual é obtido $A_1(T, \alpha, \Omega)_{N=1}$ é diagonalizado exatamente como é observado no capítulo-5, já o coeficiente $A_1(T, \alpha, \Omega)_{N=2}$ é obtido a partir de um Hamiltoniano dado por

$$-\beta\mathcal{H}_2^F = K S_1^z S_2^z + C_1 S_1^z + C_2 S_2^z + K\omega (S_1^x + S_2^x), \quad (1.54)$$

cuja a sua diagonalização não é exata, sendo utilizado o processo numérico proposto neste apêndice.

Algumas questões devem ser observadas nesta proposta da implementação numérica de diagonalização dos Hamiltonianos a que se propõem diagonalizar:

1^a) Em todos os modelos aplicados é usada a função de partição canônica dada por

$$Z_N = \sum_{k=1}^n \exp(\lambda_k), \quad (1.55)$$

sendo λ_k os autovalores do Hamiltoniano em estudo, e que são determinados a partir do procedimento numérico proposto neste apêndice. A magnetização m do sistema magnético é dado por um processo de derivação do tipo

$$m_i = \langle S_i^z \rangle = \frac{\partial}{\partial \phi_i} \ln(Z_N), \quad (1.56)$$

onde ϕ_i é um parâmetro que esta associado a componente do spin S_i^z na função de partição. No processo de determinação dos autovalores λ_k a partir do método numérico aqui proposto, a magnetização é obtida a partir da derivada numérica que consiste em utilizar a seguinte expressão:

$$\frac{\partial}{\partial \phi_i} Z_N(\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_i) = \frac{1}{2\Delta} [Z_N(\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_i + \Delta) - Z_N(\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_i - \Delta)], \quad (1.57)$$

que é determinada a partir de *um ponto centralizado*. Para esta derivada numérica

temos verificado um problema com o valor de Δ , que não pode ser grande e nem muito pequeno, pois em ambos os casos a derivada diverge, normalmente em todos os modelos e para várias funções verificadas o melhor valor a ser usado é $\Delta \simeq 10^{-3}$. Mesmo assim, em alguns modelos estudado nesta tese esta proposta de derivada não foi adequada, quando comparada com a solução exata. Desta forma foi necessário usar outra aproximação numérica dada no caso por *ponto não centralizado*, cuja a expressão é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial \phi} Z_N(\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_i) = \frac{1}{\Delta} \left(h - \frac{1}{2}h^2 + \frac{1}{3}h^3 - \dots \right), \quad (1.58)$$

sendo

$$h = Z_N(\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_i + \Delta) - Z_N(\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_i - \Delta). \quad (1.59)$$

A grande vantagem de usar a derivada proposta pela Eq.(1.58) é que podemos utilizar maiores valores de Δ , proporcionando uma convergência para o valor correto da derivada.

2ª) Um outro fator é referente ao zero das funções (ε) no procedimento de determinação das raízes do Hamiltoniano estudado, onde foi usado o zero da função $\varepsilon = 10^{-8}$ obtendo raízes muito próxima ou igual as exatas, quando verificamos o método numérico com a solução exata no caso do modelo estudado no capítulo-3.

3ª) Quanto as raízes complexas, que é algo indesejável para os modelos estudados, haja visto que o Hamiltoniano que representam os modelos estudados só admitem raízes reais, temos observado que a partir do método numérico proposto as raízes obtidas do polinômio reduzido de grau $g = 2$, normalmente, são reais ou então quando são complexas o termo imaginário é muito pequeno quando comparado o termo real, prevalecendo a parte real desta raiz imaginária.

Apêndice B

Determinação dos Operadores Componentes de Spin

Quando utilizamos a Teoria do Campo Efetivo para um aglomerado com N sítios centrais devemos determinar os operadores componentes de spin correspondentes a S_i^x , S_i^y e S_i^z sendo que $i = 1, 2, \dots$ refere-se ao sítio central. Para um sistema magnético de spin $S = 1/2$ com $N = 2$ sítios centrais, por exemplo, temos a seguinte base formada pelos seguintes estados: $|1, 1\rangle = |+, +\rangle$, $|1, -1\rangle = |+, -\rangle$, $|-1, 1\rangle = |-, +\rangle$ e $|-1, -1\rangle = |-, -\rangle$, ou seja, temos uma base formada por dois estados do tipo $|n_1, n_2\rangle$, sendo que $n_i = \pm 1$. Para um aglomerado com $N = 4$ sítios centrais temos a base formada por estados do tipo $|n_1, n_2, n_3, n_4\rangle$ com $n_i = \pm 1$. A determinação dos operadores S_i^ν é realizado a partir do seguinte processo para o caso, por exemplo, de $N = 2$:

$$S_i^\nu = \langle n_1 | S_i^\nu | n_2 \rangle = \begin{bmatrix} \langle 1 | S_i^\nu | 1 \rangle & \langle 1 | S_i^\nu | 2 \rangle & \langle 1 | S_i^\nu | 3 \rangle & \langle 1 | S_i^\nu | 4 \rangle \\ \langle 2 | S_i^\nu | 1 \rangle & \langle 2 | S_i^\nu | 2 \rangle & \langle 2 | S_i^\nu | 3 \rangle & \langle 2 | S_i^\nu | 4 \rangle \\ \langle 3 | S_i^\nu | 1 \rangle & \langle 3 | S_i^\nu | 2 \rangle & \langle 3 | S_i^\nu | 3 \rangle & \langle 3 | S_i^\nu | 4 \rangle \\ \langle 4 | S_i^\nu | 1 \rangle & \langle 4 | S_i^\nu | 2 \rangle & \langle 4 | S_i^\nu | 3 \rangle & \langle 4 | S_i^\nu | 4 \rangle \end{bmatrix}, \quad (2.1)$$

sendo que $|1\rangle = |+, +\rangle$, $|2\rangle = |+, -\rangle$, $|3\rangle = |-, +\rangle$ e $|4\rangle = |-, -\rangle$. Cada operador S_i^ν atua somente no estado referente ao sítio i , a partir das seguintes relações para um sistema de

spin $S = 1/2$:

$$S_1^x |\pm, n_2\rangle = |\mp, n_2\rangle \quad (2.2)$$

$$S_2^x |n_1, \pm\rangle = |n_1, \mp\rangle \quad (2.3)$$

$$S_1^y |\pm, n_2\rangle = \pm i |\mp, n_2\rangle \quad (2.4)$$

$$S_2^y |n_1, \pm\rangle = \pm i |n_1, \mp\rangle \quad (2.5)$$

$$S_1^z |n_1, n_2\rangle = n_1 |n_1, n_2\rangle \quad (2.6)$$

$$S_2^z |n_1, n_2\rangle = n_2 |n_1, n_2\rangle. \quad (2.7)$$

O mesmo processo é realizado para outra quantidade N de sítios centrais. A seguir temos as matrizes que representam modelos estudados nos capítulos 4 e 5 na Teoria de Campo Efetivo em aglomerado com $N = 2$ sítios centrais.

1º) Hamiltonianos para $N = 2$ sítios centrais para o sistema Heisenberg ferromagnético de spin $1/2$, estudado no capítulo 4.

$$-\beta\mathcal{H}_2^F = K [(1 - \Delta) (S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y) + S_1^z S_2^z] + C_1 S_1^z + C_2 S_2^z, \quad (2.8)$$

a matriz que representa este Hamiltoniano é dada por

$$M_{\mathcal{H}_2^F} = \begin{bmatrix} K + C_1 + C_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -K + C_1 - C_2 & 2(\Delta - 1) & 0 \\ 0 & 2(\Delta - 1) & -K - C_1 + C_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & K - C_1 + C_2 \end{bmatrix}, \quad (2.9)$$

sendo que a mesma é diagonalizada exatamente.

2º) Hamiltonianos para $N = 2$ sítios centrais para um sistema Ising ferromagnético com campo transversal de spin $1/2$, estudado no capítulo 5.

$$-\beta\mathcal{H}_2^F = K S_1^z S_2^z + C_1 S_1^z + C_2 S_2^z + K\omega (S_1^x + S_2^x), \quad (2.10)$$

onde a matriz que representa este Hamiltoniano é dada por

$$M_{\mathcal{H}_2^F} = \begin{bmatrix} K + C_1 + C_2 & Kw & Kw & 0 \\ Kw & -K + C_1 - C_2 & 0 & Kw \\ Kw & 0 & -K - C_1 + C_2 & Kw \\ 0 & Kw & Kw & K - C_1 + C_2 \end{bmatrix}, \quad (2.11)$$

esta matriz não apresenta diretamente solução analítica para os seus autovalores.

Apêndice C

Proposta de Implementação da Técnica do Operador Diferencial

A técnica do operador diferencial desenvolvida por Honmura e Kaneyoshi [4] consiste na determinação da seguinte expansão de uma exponencial:

$$\exp(\alpha D_x) = \sum_{n=1} \frac{1}{n!} \alpha^n D_x^{(n)}, \quad (3.1)$$

onde $D_x = \frac{\partial}{\partial x}$ é o operador diferencial em relação a variável x , portanto, na Eq.(3.1) temos uma expansão em torno de operadores derivadas de ordem n . Seja $F(x)$ uma função contínua definida para qualquer valor de x , quando aplicamos a expansão da eq.(3.1) neste função $f(x)$ ficaremos com o seguinte resultado:

$$\exp(\alpha D_x)F(x) = \sum_{n=1} \frac{1}{n!} \alpha^n D_x^{(n)}F(x) = \sum_{n=1} \frac{1}{n!} \alpha^n F^{(n)}(x), \quad (3.2)$$

onde $F^{(n)}(x)$ corresponde a derivada de orden n da função $F(x)$ em relação a x . Usando a definição de série de Taylor para $F(x + \alpha)$ em torno de α , mostramos a equivalência

com a expressão na Eq.(3.2), portanto ficaremos com:

$$\exp(\alpha D_x)F(x) = F(x + \alpha), \quad (3.3)$$

no limite de $x = 0$ obtemos

$$\exp(\alpha D_x)F(x) \Big|_{x=0} = F(\alpha). \quad (3.4)$$

Se a função depender de outras variáveis, ou seja, $F = F(x_1, x_2, \dots, x_p)$, podemos generalizar a técnica do operador diferencial a partir da seguinte relação:

$$\exp(\vec{\alpha} \cdot \vec{D})F(x_1, x_2, \dots, x_p) \Big|_{\vec{x}=0} = F(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_p), \quad (3.5)$$

onde $\vec{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_p)$, $\vec{D} = (D_1, D_2, \dots, D_p)$, $D_p = \partial/\partial x_p$ com $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_p)$.

Kaneyoshi e Fittipaldi [6] desenvolveram um trabalho sobre sistema ferromagnético de spin 1/2 na Teoria de Campo Efetivo para um aglomerado com $N = 1$ sítio central no modelo de Ising, representado pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = \left(-J \sum_{\vec{\delta}}^z \sigma_{1+\vec{\delta}}^z \right) \sigma_1^z, \quad (3.6)$$

onde $\vec{\delta}$ representa o vetor primeiro vizinho, que apresenta z vizinhos em relação ao sítio central σ_1^z . Neste trabalho foi utilizada a Identidade de Callen-Suzuki [5], ou seja,

$$m = \langle \sigma_1^z \rangle = \left\langle \tanh \left(K \sum_{\vec{\delta}}^z \sigma_{1+\vec{\delta}}^z \right) \right\rangle. \quad (3.7)$$

Um dos problemas desta equação é como trabalhar com a variável $\sigma_{1+\vec{\delta}}^z$ que aparecem no argumento da função hiperbólica. Definindo $F(x) = \tanh(x)$ e usando a identidade dada pela Eq.(3.4), reescrevemos a Eq.(3.7) na forma

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^z \exp \left(K \sigma_{1+\vec{\delta}}^z D_x \right) \right\rangle F(x) \Big|_{x=0} . \quad (3.8)$$

Como estamos tratando um modelo spin $S = 1/2$ podemos aplicar a seguinte identidade de van der Waerden:

$$\exp(\varphi \sigma_i) = \cosh(\varphi) + \sigma_i \sinh(\varphi), \quad (3.9)$$

portanto aplicando a identidade da eq.(3.9) na eq.(3.8) ficaremos com a seguinte expressão:

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^z \cosh(K D_x) + \sigma_{1+\vec{\delta}}^z \sinh(K D_x) \right\rangle F(x) \Big|_{x=0} . \quad (3.10)$$

Ao desenvolver o produtório da eq.(3.10) são obtidos termos do tipo $\langle \sigma_k^z \sigma_j^z \rangle$, $\langle \sigma_k^z \sigma_j^z \sigma_p^z \rangle$, $\langle \sigma_k^z \sigma_j^z \sigma_p^z \sigma_q^z \rangle$, etc.... São usadas várias aproximações de desacoplamento do sistema de spins σ_i^z , no contexto desta tese e de outros trabalhos é usada a aproximação linear, que consiste na seguinte expressão $\langle \sigma_k^z \sigma_j^z \dots \sigma_q^z \rangle \simeq \langle \sigma_k^z \rangle \langle \sigma_j^z \rangle \dots \langle \sigma_q^z \rangle$, onde é usada a definição $m = \langle \sigma_i^z \rangle$. Portanto ao aplicar a definição das funções hiperbólicas, isto é: $\cosh(K D_x)_+, \sinh(K D_x)_- = \frac{1}{2} (\exp(K D_x) \pm \exp(-K D_x))$, aparecem termos do tipo $\exp(\nu K D_x)$, com $\nu = -n, -n+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, n-1, n$. Finalmente, aplicando novamente a técnica do operador diferencial ficaremos com termos do tipo

$$\exp(\nu K D_x) F(x) \Big|_{x=0} = F(\nu K) \quad (3.11)$$

na eq.(3.10). Da aplicação da expressão dada na eq.(3.11) no desenvolvimento da eq.(3.10) é obtida uma expressão que apresenta a seguinte forma:

$$m = A_0 + A_1 m + A_2 m^2 + \dots + A_n m^n = \sum_{p=0}^n A_p m^p, \quad (3.12)$$

sendo que os termos $A_p = \tanh((\nu K))$. Para este tamanho aglomerado ($N = 1$ sí-

tio central) em que a rede cristalina do sistema seja quadrada, ou cúbica simples, etc, não é difícil obter os coeficientes A_p , porém quando crescemos o sistema aumentando o tamanho do aglomerado ou ainda tomando um sistema com interações competitivas, como estudado nesta tese, o processo para determinação dos coeficientes A_p fica bastante complicado para ser feito manualmente, talvez seja por isso que a maioria dos trabalhos que utilizam esta técnica são referentes a sistemas pequenos. Para se ter uma idéia da dificuldade da resolução do simples modelo de Ising para um sistema competitivo com aglomerado contendo 1 sítio central, ou seja:

$$\mathcal{H}_1^F = -J_1 \sum_{i=1}^{Z_1} \sigma_i S_1 + J_2 \sum_{i=5}^{Z_2} \sigma_i S_1, \quad (3.13)$$

seriam necessárias $2^8 = 256$ multiplicações entre termos do tipo $\exp(f(Dx))$ para obter cada coeficiente A_p para uma rede quadrada ($Z_1 = 4$ e $Z_2 = 4$), enquanto que para uma rede cúbica simples ($Z_1 = 6$ e $Z_2 = 12$) $2^{18} = 262144$ multiplicações. Para este sistema com tamanho de aglomerado para $N = 2$ sítios centrais é necessário para uma rede quadrada ($Z_{i1} = 3$ e $Z_{i2} = 4$ com $i = 1, 2$), após aplicar a dinâmica dos spins, são necessárias $2^{10} = 1024$ multiplicações, enquanto que para uma rede cúbica simples ($Z_{i1} = 5$ e $Z_{i2} = 12$) são necessárias $2^{26} = 67108864$ multiplicações!

A dificuldade para determinação dos coeficientes A_p quando o aumenta tamanho do sistema, é um desafio e ao mesmo tempo uma motivação para o desenvolvimento de metodologias para resolução da técnica do operador diferencial. Para o desenvolvimento dos capítulos 4 e 5 desta tese, foi desenvolvida uma proposta metodológica para a implementação da técnica do operador diferencial, quando aplicada em cada modelo estudado. Esta proposta foi, gradativamente, evoluindo a medida em que o modelo ficava mais complexo, até obter uma versão mais geral.

Vamos utilizar o modelo de Ising para um sistema antiferromagnético para o aglomerado com $N = 1$ sítio central para uma rede cúbica simples, com objetivo de apresentar a metodologia proposta de modo mais geral possível. De acordo com o capítulo-4 para

este modelo teremos é obtida a seguinte expressão:

$$m = \left\langle \prod_{i=1}^4 (\cosh(KDx) + \sigma_i^A \sinh(KDx)) \prod_{i=5}^8 (\cosh(\alpha KDy) + \sigma_i^B \sinh(\alpha KDy)) \right\rangle_{f(x,y)|_{x,y=0}}, \quad (3.14)$$

aplicando a aproximação linear $\langle \sigma_k^z \sigma_j^z \dots \sigma_q^z \rangle \simeq \langle \sigma_k^z \rangle \langle \sigma_j^z \rangle \dots \langle \sigma_q^z \rangle$, tomando que $m = \langle \sigma_i^z \rangle$ e as definições das funções hiperbólicas ficaremos com o seguinte resultado:

$$m = \prod_{i=1}^6 (\exp(KDx)a + \exp(-KDx)b) \prod_{i=7}^{18} (\exp(\alpha KDy)b + \exp(-\alpha KDy)a)_{f(x,y)|_{x,y=0}}, \quad (3.15)$$

onde

$$a = \frac{1+m}{2} \quad (3.16)$$

$$b = \frac{1-m}{2}. \quad (3.17)$$

Esta forma da eq.(3.15) já nos permite implementar direto numa linguagem de programação para obter os coeficientes A_p , desta forma evitando carregar expressões enormes para os programas determinam os diagramas de fase obtidos nesta tese. Para isto basta utilizar *estados exponenciais*, ou seja, podemos convencionar que

$$\left\{ \begin{array}{l} \exp(KDx) \equiv 1 \\ \exp(-KDx) \equiv -1 \\ \exp(\alpha KDy) \equiv 1 \\ \exp(-\alpha KDy) \equiv -1, \end{array} \right. \quad (3.18)$$

Desta forma seria fácil desenvolver uma subrotina onde variáveis do tipo P_n assumem os estados 1 ou -1 e, posteriormente, o valores assumidos por P_n seriam usados nesta subrotina para substituir $(x = P_n K; y = P_n \alpha K)$ nas função função $f(x, y)$, em todas as

combinações possíveis de termos obtidos dos produtórios dados na eq.(eq.(3.15)). Contudo este procedimento só foi eficiente para aglomerado em redes bidimensionais, já para redes tridimensionais além da execução do programa ser demorado no caso com $N = 1$ sítio central, no caso para o aglomerado com 2 sítios centrais nos teríamos um outro problema ao tamanho do programa que ficaria com mais de 10^5 linhas, que contraria a proposta metodológica. Para solucionar esses problemas em redes tridimensionais a metodologia foi aperfeiçoada, sendo esta versão o objetivo deste apêndice. Esta metodologia são baseadas nos seguintes passos:

1 - Expandir todos os produtórios que apresentem os mesmos estados exponenciais, desta forma ficaremos com seguinte expressão na forma binomial:

$$\begin{aligned}
m &= \sum_{w=0}^6 \frac{6!}{w!(6-w)!} \exp[(6-w)K Dx] \exp[-wK Dx] a_A^{(4-w)} b_A^w \\
&\quad \sum_{r=0}^{12} \frac{12!}{w!(12-r)!} \exp[(12-r)\alpha K Dx] \exp[-r\alpha K Dx] a_B^{(4-r)} b_B^r \\
m &= \sum_{w=0}^6 \frac{6!}{w!(6-w)!} \exp[(6-2w)K Dx] a_A^{(4-w)} b_A^w \\
&\quad \sum_{r=0}^{12} \frac{12!}{w!(12-r)!} \exp[(12-2r)\alpha K Dx] a_B^{(4-r)} b_B^r
\end{aligned} \tag{3.19}$$

2 - Na eq.(3.19) temos a presença de vários estados exponenciais que apresentam a seguinte forma: $\exp[(6-w)K Dx]$, $\exp[-wK Dx]$, $\exp[(12-r)\alpha K Dx]$ e $\exp[-r\alpha K Dx]$. Os termos a e b são dados pela equações eq.(3.16) e eq.(3.17). O processo da metodologia começa guardando os coeficientes de cada potência da magnetização m a partir dos polinômios gerados pelos termos $a_A^{(4-w)} b_A^w$ e $a_B^{(4-r)} b_B^r$. Esses coeficientes seriam denotado por $C(e_1, e_2, e_3, e_4, e_m)$ que são caracterizados pelos expontes $(e_1, e_2, e_3, e_4, e_m)$ referente aos termos a_A, b_A, a_B, b_B e também o expoente da magnetização m gerado pelo polinômio $P = a_A^{e_1} b_A^{e_2} a_B^{e_3} b_B^{e_4}$, respectivamente. Observando que $e_1, e_2 = 0, 1, 2, \dots, 6$ e $e_3, e_4 = 0, 1, 2, \dots, 12$.

3 - Desenvolvendo uma subrotina para efetuar todas as combinações possíveis dos

produtos dos termos da eq.(3.19). Sendo que nessa subrotina devem usadas duas variáveis $p_1 = 0, 1, 2, \dots, 6$ e $p_2 = 0, 1, 2, \dots, 12$ que assumem os valores de w e r , respectivamente, nas parcelas de cada somatório dados na eq.(3.19). Nesta subrotina são recuperados os expoentes $(e_1, e_2, e_3, e_4, e_m)$ e desta forma podendo ser chamdo os coeficientes $C(e_1, e_2, e_3, e_4, e_m)$. Contudo os estados exponenciais, de acordo com a eq.(3.19), são do tipo $\exp[\phi_1 K D x]$ e $\exp[\phi_2 \alpha K D x]$, sendo que $\phi_1 = -6, -4, -2, 0, 2, 4, 6$ e $\phi_2 = -12, -10, \dots, -2, 0, 2, \dots, 10, 12$. Para recuperar os valores de ϕ_1 e ϕ_2 devemos usar a seguinte relação com as variáveis p_1 e p_2 :

$$\phi_{1,2} = n_{1,2} - 2p_{1,2}. \quad (3.20)$$

Posteriormente, são aplicadas as relações $x = \phi_1 K$ e $y = \phi_2 \alpha K$ na função $f(x, y)$. Finalmente, é guardado os valores para cada coeficiente da magnetização a partir do produto $C(e_1, e_2, e_3, e_4, e_m) f(x = \phi_1 K, y = \phi_2 \alpha K)$, para cada interação da subrotina.

Esta metodologia diminui em muito a quantidade de interações da subrotina que gera os coeficientes, quando comparado com o caso de ser utilizado somente dois estados exponenciais proposto na eq.(3.18), haja visto que enquanto na proposta de dois estados são necessárias 2^{18} interações, já na proposta de vários estados são necessárias 819 interações, para o sistema antiferromagnético no modelo de Ising com $N = 1$ sítio central numa rede cúbica simples.

Para o sistema antiferromagnético Heisenberg em aglomerado com 2 sítios centrais numa rede cúbica simples, seriam necessário 2^{26} interações na subrotina principal, e ainda uma quantidade aproximadamente de 10^5 de coeficientes do tipo $C(e_1, e_2, \dots, e_m)$ relacionadas as potências ímpares e_m da magnetização (gerados no programa Maple), quando usamos a proposta de dois estados exponenciais. Sendo que posteriormente esses coeficientes $C(e_1, e_2, \dots, e_m)$ devem ser "colados" no programa referentes ao modelo implementado na linguagem FORTRAN . Enquanto que na proposta para vários estados são necessárias 8100 interações na subrotina e 2548 coeficientes do tipo $C(e_1, e_2, e_3, e_4, e_m)$ com potência e_m ímpar. Portanto, a proposta da utilização de vários estados exponenciais

é muito mais eficiente para implementar computacionalmente os modelos mais complexos desta tese e de futuros trabalhos, que venham a ser estudados usando a técnica do operador diferencial.

Referências

- [1] P.A. Stark, “Introdução aos Métodos Numéricos”, Tradução: Carvalho J. P., Ed. Interciência, (1984).
- [2] L.C. Barroso, Barroso, M.M., Campos, F.F., Carvalho, M.L., Maia, M.L., “Cálculo Numérico”, Ed. Harba, (1987).
- [3] E. Butkov, “Física Matemática”, Tradução Bosco, J., Ed. Guanabara, (1988).
- [4] R. Honmura e T. Kaneyoshi, *J. Phys. C* **12** 3970 (1979).
- [5] H.B. Callen, *Phys. Lett.* **4**.161 (1963).
- [6] F. C. Sá Barreto e I. P. Fittipaldi, *Physica A* **129**, 360 (1985).