



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
(Convênio UFSCar\UFAM)

MODELOS MAGNÉTICOS COM FRUSTRAÇÃO E DILUIÇÃO

Josefa Teixeira de Mendonça Pacobahyba

Manaus - AM
2006



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

MODELOS MAGNÉTICOS COM FRUSTRAÇÃO E DILUIÇÃO

Josefa Teixeira de Mendonça Pacobahyba

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

Orientador: Prof. Dr. José Ricardo de Sousa

Manaus - AM
2006

**Ficha catalográfica elaborada pelo DePT da
Biblioteca Comunitária/UFSCar**

P121mm

Pacobahyba, Josefa Teixeira de Mendonça.

Modelos magnéticos com frustração e diluição / Josefa
Teixeira de Mendonça Pacobahyba. -- São Carlos : UFSCar,
2007.

196 f.

Tese (Doutorado) -- Universidade Federal de São Carlos,
2006.

1. Propriedades magnéticas. 2. Modelo de Heisenberg. 3.
Modelo de Ising. 4 Frustração. 5. Diluição. I. Título.

CDD: 371.9 (20^a)

JOSEFA TEIXEIRA DE MENDONÇA PACOBAHYBA

Tese de Doutorado submetida à
Coordenação do Programa de Pós-
Graduação em Física, da Universidade
Federal de São Carlos, como requisito
parcial para a obtenção do título de
Doutora em Ciências.

Aprovada em: 08/12/2006.

BANCA EXAMINADORA



Prof. Dr. José Ricardo de Sousa (Orientador)
Universidade Federal do Amazonas – DF/UFAM



Prof. Dr. Paulo Henrique Lana Martins
Universidade Federal do Tocantins – IF/UFT



Prof. Dr. João Antônio Plascak
Universidade Federal de Minas Gerais – IF/UFMG



Prof. Dr. Paulo Daniel Emmel
Universidade Federal de São Carlos – DF/UFSCar



Profa. Dra. Angsula Ghosh
Universidade Federal do Amazonas – DF/UFAM

Este trabalho foi realizado com apoio da CAPES

A minha filha Amanda, e ao meu esposo Henrique.

AGRADECIMENTOS

Desculpem-me aqueles que porventura tenha esquecido de mencionar.

Ao Prof. Dr. José Ricardo de Sousa pelo trabalho de orientação, incentivo, paciência e amizade.

Ao meu esposo Luiz Henrique Pacobahyba pelo amor incondicional, dedicação, carinho, apoio e pelos momentos de discussões e de felicidades.

Aos meus familiares por tudo, em especial a minha irmã Marluce Teixeira de Mendonça, pelo apoio, incentivo e carinho.

À minha filha Amanda, um presente de Deus, que nasceu durante o desenvolvimento deste trabalho.

Aos meus colegas que me acompanharam durante o curso de doutorado, em especial aos colegas Minos, Wagner, José Roberto, Igor, Yamilhes e João Neto pelos momentos divididos nas horas de trabalho e de lazer.

Aos professores do programa de pós-graduação em física da UFAM que participaram direta ou indiretamente da minha formação profissional.

Aos meus amigos em geral, Ednalva, João Bosco, Zezinho, Cacao e Kika pelo incentivo.

À esposa do meu orientador, Kátia de Sousa pelo carinho e amizade.

Ao Departamento de Física da UFSCar.

Ao Departamento de Física da UFRR.

Ao órgão de fomento, Centro de Aperfeiçoamento de Pesquisa e Ensino - CAPES pelo apoio financeiro.

E por fim, a todos aqueles que contribuíram de uma maneira ou de outra para a realização deste trabalho.

Resumo

Neste trabalho investigamos os efeitos de diluição e frustração nas propriedades termodinâmicas e os diagramas de fase nos modelos de Heisenberg e Ising quase-bidimensional. Usamos o formalismo das funções de Green de Zubarev e obtivemos as propriedades magnéticas do modelo de Heisenberg antiferromagnético quase-bidimensional de spin $\frac{1}{2}$. Determinamos o limite de estabilidade da fase antiferromagnética em função da concentração dos buracos no plano CuO_2 e da diluição do Cu pelo Zn. Simulamos o ponto de máximo do diagrama de fase no plano (T, z) previsto experimentalmente para o composto $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{Cu}_{1-z}\text{Zn}_z\text{O}_4$. No modelo de Heisenberg o efeito da frustração é simulado pelo parâmetro $\lambda = \lambda_0(1-x/x_c)$, medindo a interação entre os planos de CuO_2 . O efeito da diluição que está presente no plano xy é teoricamente descrito fenomenologicamente para pequeno valor de z através de uma interação efetiva $J(1-z)$ (aproximação tipo campo médio). Estendemos o presente formalismo para incluir interação de longo alcance no modelo de Heisenberg unidimensional antiferromagnético frustrado e verificamos ausência de ordem magnética para $p > 1$ (onde p é o parâmetro do decaimento da interação, i.e., $J_n = J/n^p$). Estudamos também as propriedades termodinâmicas do modelo de Ising diluído decorado de forma *quenched* com interações competitivas através da técnica do operador diferencial unida à teoria de campo efetivo. O modelo de Ising decorado com interações competitivas é utilizado para descrever qualitativamente as propriedades termodinâmicas dos compostos supercondutores baseados em planos de cobre-oxigênio na sua fase isolante (antiferromagnética). O modelo consiste de planos nos quais os spins nodais interagem antiferromagneticamente ($J_A < 0$) com seus primeiros vizinhos (simulando a interação Cu-Cu), e ferromagneticamente ($J_F > 0$) com os spins decoradores (simulando a interação Cu-O), os quais são distribuídos aleatoriamente de forma *quenched* sobre uma rede bidimensional. Os planos interagem antiferromagneticamente com uma fraca interação de troca (i.e., $J'_A = \lambda J_A$, $\lambda = 10^{-5}$). Além disso, em nosso modelo alguns sítios magnéticos (átomos de Cu) são substituídos por sítios não magnéticos. Discutimos além das propriedades termodinâmicas do sistema o limite de estabilidade antiferromagnética nos diagramas de fase (T, p) e (T, z) , para vários valores do parâmetro de frustração ($\alpha = J_A/J_F$) e campo magnético. Observamos que certos intervalos de valores de α , o sistema apresenta um comportamento reentrante em baixas temperaturas o que se reflete nas propriedades termodinâmicas.

Abstract

In this work, we investigate the effect of dilution and frustration in the thermodynamic properties and the phase diagrams using the quasi-two-dimensional Heisenberg and Ising models. We use the Zubarev Green's function formalism and obtain the magnetic properties of the quasi-two-dimensional antiferromagnetic spin $\frac{1}{2}$ Heisenberg model. We determine the limit of the stability of the antiferromagnetic phase as a function of the concentration of the holes in the CuO_2 plane and dilution of the Cu by Zn. We simulate the point of maximum of the phase diagram in the plane (T,z) following the experimental data for the $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{Cu}_{1-z}\text{Zn}_z\text{O}_4$ compounds. In the Heisenberg model the effect of the frustration is simulated by the parameter $\lambda=\lambda_0(1-x/x_c)$, which measures the interaction between the CuO_2 planes. The effect of dilution present in the xy -plane is described theoretically by a small value for z through an effective interaction $J(1-z)$ (mean field approach). We extend the present formalism to include long-range interaction in the antiferromagnetic one-dimensional Heisenberg frustrated model and verify the absence of magnetic order for $p>1$ (where p is the decay interaction parameter, i.e., $J_n=J/n^p$). We also study the thermodynamic properties of the quenched decorated diluted Ising model with competitive interactions, using the differential operator technique with the effective field. The decorated Ising model with competitive interactions used is herein to describe the magnetic properties of the copper-oxide plane containing superconductor compounds in the insulating phase (antiferromagnetic). The model consists of planes in which the nodal spins interact antiferromagnetically ($J_A<0$) with their nearest-neighbors, and ferromagnetically ($J_F>0$) with the quenched spins that decorate the bonds (simulating the Cu-O interaction), and distributed randomly over the two-dimensional lattice. The planes interact antiferromagnetically with weak-exchange interaction (i.e., $J'_A = \lambda J_A, \lambda = 10^{-5}$). Moreover, in our model some magnetic sites (atoms of Cu) are substituted by non-magnetic sites. We study the thermodynamic properties of the system and the limit of antiferromagnetic stability in the phase diagrams (T,p) and (T,z) , for some values of the frustration parameter ($\alpha= J_A/J_F$) and magnetic field. We observe for some values α , the system presents a reentrant behavior in low temperatures, which also is reflected in the thermodynamic properties.

Índice

1	Introdução	1
1.1	Aspectos gerais	1
1.2	Ordenamento Magnético	5
1.2.1	Modelo de Heisenberg	10
1.2.2	Outras Interações	12
1.3	Sistemas Desordenados	17
1.3.1	Sistemas Magnéticos Diluídos	18
1.4	Sistemas magnéticos com interações competitivas	21
1.5	Modelos Decorados	23
1.6	Objetivo e Apresentação da Tese	25
2	Modelo de Heisenberg fenomenológico com frustração e diluição: Simulação do diagrama de fase do composto diluído $La_{2-x}Sr_xCu_{1-z}Zn_zO_4$	31
2.1	Formalismo da Função de Green de Zubarev	31
2.1.1	Funções de Correlação Dependentes do Tempo	36
2.1.2	Representação Espectral	38
2.2	Modelo de Heisenberg Antiferromagnético Anisotrópico	42
2.2.1	Considerações Gerais	42
2.3	Cadeia de Heisenberg frustrada com Interação de Longo Alcance	58
3	Teoria de Campo Efetivo	74

3.1	Considerações Gerais	74
3.2	Teoria de Campo Efetivo Correlacionado	76
3.2.1	Identidade de Callen-Suzuki	79
3.2.2	Técnica do Operador Diferencial	80
3.2.3	Outras Aproximações	86
3.3	Outros Modelos	93
4	Modelo de Ising quase-2d aleatoriamente decorado com interações competitivas	101
4.1	Considerações Gerais	101
4.2	Modelo e Formalismo	105
4.3	Limite de estabilidade da fase Antiferromagnética	112
4.3.1	Na ausência de campo externo	116
4.4	Propriedades Termodinâmicas	120
4.4.1	Magnetização Total e Alternada (<i>Staggered</i>)	120
4.4.2	Susceptibilidade Magnética	124
4.4.3	Energia Interna e Calor específico	130
5	Propriedades Termodinâmicas do Modelo de Ising Desordenado com Frustração	148
5.1	Considerações Gerais	148
5.2	Modelo e Formalismo	152
5.3	Limite de estabilidade da fase Antiferromagnética	159
5.3.1	Na ausência de campo externo	165
5.4	Propriedades Termodinâmicas	167
5.4.1	Magnetização Total e Alternada (<i>Staggered</i>)	167
5.4.2	Susceptibilidade Magnética	170
5.4.3	Energia Interna e Calor específico	176

Lista de Figuras

1.1	Esquema do diagrama de fase, como função da concentração dos buracos x . AF = antiferromagnética; SG = vidro de spin; I = isolante; M = metal; SC = supercondutor; O = ortorrômbica; T = tetragonal [9].	4
1.2	Temperatura de Néel normalizada $[T_N/T_N(\text{max})]$ vs concentração de íons não magnéticos em vários magnetos quase-2d [22].	5
1.3	Comportamento da magnetização do níquel em função da temperatura, juntamente com a curva teórica para $S = \frac{1}{2}$ obtida por teoria de campo médio. Os valores experimentais foram obtidos por P. Weiss e R. Forrer, <i>Ann. Phys.</i> 5 , 153 (1926).	7
1.4	Desordem com remoção de uma ligação.	21
1.5	Desordem com remoção de um sítio.	22
1.6	A rede Kagomé - - - construída por uma transformação estrela - triângulo a partir da rede honeycomb. O traço parcial é feito sobre os sítios (O) [51].	23
1.7	Rede original.	24
1.8	Rede Decorada. Os spins pretos são os decoradores.	25
2.1	(a) T_N versus concentração de Zn com $x = 0.017$ (●) e $x = 0$ (○, ◇). (b) T_N versus concentração de Sr com $z = 0.15$ (●) e $z = 0$ (○, ◇). A linha tracejada em (a) representa uma extrapolação da parte linear da curva $T_N(x = 0.017, z)$ versus z	45

2.2	Comportamento da magnetização em função da temperatura reduzida. Considerando a concentração dos buracos $x = 0$ e para diferentes valores da diluição.	56
2.3	Comportamento da magnetização em função da temperatura reduzida. Considerando a diluição $z = 0$ e para diferentes valores da concentração dos buracos de oxigênio.	57
2.4	Comportamento da magnetização em função da temperatura reduzida. Considerando o valor da diluição $z = 0.15$ e para diferentes valores da concentração dos buracos de oxigênio.	58
2.5	Comportamento da magnetização em função da temperatura reduzida. Considerando o valor da concentração dos buracos de oxigênio $x = 0.018$ e variando o valor da diluição.	59
2.6	Temperatura de Néel reduzida em função da concentração dos buracos de oxigênio. Para os valores da diluição $z = 0$ e 0.15	60
2.7	Temperatura de Néel reduzida em função da diluição z para valores diferentes da concentração dos buracos de oxigênio, $x = 0; 0.016; 0.017$ e 0.018	61
3.1	Representação esquemática de um sistema com N partículas (sistema $= \Omega \cup \Omega'$).	78
3.2	Topologias das redes (a) rede kagomé, (b) quadrada, (c) triangular e (d) cúbica simples com aglomerado com dois spins.	91
4.1	Comportamento experimental da susceptibilidade magnética em função da temperatura para o composto La_2CuO_4 na presença de um campo magnético externo $H = 3.0T$ [9].	103
4.2	Diagrama de fase no plano $T - H$ para o composto La_2CuO_4 . Lado direito temos o comportamento da magnetização em função da temperatura obtida ao longo da linha crítica $T_N(H)$ [10].	104

4.3	Representação esquemática de uma rede cúbica simples decorada. Os círculos pretos indicam os íons de Cu^{2+} de spin- $\frac{1}{2}$ (representado por S_i^ν , onde ν representa a subrede relacionada A ou B) e os círculos brancos indicam os íons de O^- de spin- $\frac{1}{2}$ no plano (representado por σ_i).	106
4.4	Uma ligação decorada com íons de oxigênio na parte (a). Transformação decoração-iteração na parte (b) excluindo o átomo de oxigênio.	107
4.5	Análise por sítio: Primeiros vizinhos do ponto de vista dos átomos de Cobre.109	
4.6	Diagrama de fase no plano (T, H) para o metamagneto de Ising quase- $2d$ aleatoriamente decorado com diferentes valores do parâmetro da frustração α e a concentração $p = 0.1$	114
4.7	Diagrama de fase no plano (T, H) para o metamagneto de Ising quase- $2d$ aleatoriamente decorado com diferentes valores da concentração de buracos p e parâmetro de frustração $\alpha = 0.6$	115
4.8	Dependência da temperatura crítica como função da concentração p para o metamagneto Ising quase- $2d$ aleatoriamente decorado com $\alpha = 0.6$ e vários valores de H	116
4.9	Dependência da temperatura crítica do metamagneto Ising quase- $2d$ aleatoriamente decorado com o parâmetro p com $H = 1.0$ e diferentes valores do parâmetro de frustração α indicado nas curvas crítica em ordem crescente $\alpha = 0.3, 0.35, 0.4, 0.45, 0.5, 0.55, 0.6, 0.65, 0.7, 0.75, 0.8$ e 0.85	117
4.10	Diagrama de fase no espaço (T, p) para o modelo de Ising quase- $2d$ aleatoriamente decorado e diferentes valores do parâmetro de frustração α indicado nas curvas crítica em ordem crescente $\alpha = 0.1, 0.2, 0.25, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.75, 0.8, 0.9$ e 0.98	118
4.11	Diagrama de fase no espaço (T, α) para o modelo de Ising quase- $2d$ aleatoriamente decorado e diferentes valores da concentração p indicado nas curvas crítica em ordem crescente $p = 0.03, 0.06, 0.09, 0.1, 0.12, 0.15, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.7$ e 0.9	120

4.12	$T_N(x)/T_N(0)$ versus a concentração de buracos normalizada x/x_c . As linhas cheias representam os resultados numéricos para $\alpha = 0.2, 0.3; 0.5$. Os símbolos são dos resultados experimentais; LaCuO: (■)[38, 39] e YBaCu: (○)[39, 40].	121
4.13	Magnetização alternada do modelo de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do parâmetro de frustração α com $H = 1.0$ e $p = 0.1$	122
4.14	Magnetização alternada do modelo de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do campo externo com $\alpha = 0.6$ e $p = 0.0$	123
4.15	Magnetização alternada do modelo de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do campo externo com $\alpha = 0.6$ e $p = 0.1$	124
4.16	Magnetização alternada do modelo de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores da concentração com $\alpha = 0.3$ e $H = 0.6$	125
4.17	Magnetização alternada do modelo de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores da concentração com $\alpha = 0.6$ e $H = 1.0$	126
4.18	Magnetização total do modelo de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do parâmetro de frustração α com $H = 1.0$ e $p = 0.1$	127
4.19	Magnetização total do modelo de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do campo externo com $\alpha = 0.6$ e $p = 0.0$	128
4.20	Magnetização total do modelo de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do campo externo com $\alpha = 0.6$ e $p = 0.1$	129
4.21	Magnetização total do modelo de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores da concentração p com $\alpha = 0.3$ e $H = 0.6$	130
4.22	Magnetização total do modelo de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores da concentração p com $\alpha = 0.6$ e $H = 1.0$	131

4.23	Dependência da susceptibilidade total em função da temperatura reduzida para o modelo de Ising quase- $2d$ para vários valores do parâmetro da frustração α com $H = 1.0$ e $p = 0.1$	132
4.24	Dependência da susceptibilidade total em função da temperatura reduzida para o modelo de Ising quase- $2d$ para vários valores do campo externo com $\alpha = 0.6$ e $p = 0.0$	133
4.25	Dependência da susceptibilidade total em função da temperatura reduzida para o modelo de Ising quase- $2d$ para vários valores do campo externo com $\alpha = 0.6$ e $p = 0.1$	134
4.26	Dependência da susceptibilidade total em função da temperatura reduzida para o modelo de Ising quase- $2d$ para vários valores da concentração p com $\alpha = 0.6$ e $H = 1.0$	135
4.27	Dependência da susceptibilidade total em função da temperatura reduzida para o modelo de Ising quase- $2d$ para vários valores da concentração p com $\alpha = 0.6$ e $H = 1.0$. No detalhe, temos uma ampliação das curvas em ordem crescente das concentrações $p = 0.2, 0.3$ e 0.4 na região de baixas temperaturas.	136
4.28	Dependência da susceptibilidade <i>staggered</i> em função da temperatura reduzida para o modelo de Ising quase- $2d$ para vários valores do parâmetro de frustração α com $H = 1.0$ e $p = 0.1$	136
4.29	Dependência da susceptibilidade <i>staggered</i> em função da temperatura reduzida para o modelo de Ising quase- $2d$ para vários valores do campo externo com $\alpha = 0.6$ e $p = 0.0$	137
4.30	Dependência da susceptibilidade <i>staggered</i> em função da temperatura reduzida para o modelo de Ising quase- $2d$ para vários valores do campo externo com $\alpha = 0.6$ e $p = 0.1$	137

4.31	Dependência da susceptibilidade <i>staggered</i> em função da temperatura reduzida para o modelo de Ising quase- $2d$ para vários valores da concentração p com $\alpha = 0.3$ e $H = 0.6$	138
4.32	Dependência da susceptibilidade <i>staggered</i> em função da temperatura reduzida para o modelo de Ising quase- $2d$ para vários valores da concentração p com $\alpha = 0.6$ e $H = 1.0$	138
4.33	Comportamento da energia interna do metamagneto de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do parâmetro da frustração α com $H = 1.0$ e $p = 0.1$	139
4.34	Comportamento da energia interna do metamagneto de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do campo externo com $\alpha = 0.6$ e $p = 0.0$	139
4.35	Comportamento da energia interna do metamagneto de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do campo externo com $\alpha = 0.6$ e $p = 0.1$	140
4.36	Comportamento da energia interna do metamagneto de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores da concentração p com $\alpha = 0.3$ e $H = 0.6$	140
4.37	Comportamento da energia interna do metamagneto de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores da concentração p com $\alpha = 0.6$ e $H = 1.0$	141
4.38	Comportamento do calor específico em função da temperatura reduzida no modelo de Ising quase- $2d$ para diferentes valores do parâmetro de frustração α com $H = 1.0$ e $p = 0.1$	141
4.39	Comportamento do calor específico em função da temperatura reduzida no modelo de Ising quase- $2d$ para diferentes valores do campo externo com $\alpha = 0.6$ e $p = 0.0$	142

4.40	Comportamento do calor específico em função da temperatura reduzida no modelo de Ising quase- $2d$ para diferentes valores do campo externo com $\alpha = 0.6$ e $p = 0.1$	142
4.41	Comportamento do calor específico em função da temperatura reduzida no modelo de Ising quase- $2d$ para diferentes valores da concentração p com $\alpha = 0.3$ e $H = 0.6$	143
4.42	Comportamento do calor específico em função da temperatura reduzida no modelo de Ising quase- $2d$ para diferentes valores da concentração p com $\alpha = 0.6$ e $H = 1.0$	143
5.1	Susceptibilidade Magnética χ <i>versus</i> temperatura para $La_2Cu_{1-y}Zn_yO_4$ com concentrações $y = 0, 0.013$ e 0.02 na ordem crescente no gráfico. Detalhe: Dependência da temperatura de Néel T_N para amostras de vacâncias móveis (Sr) (linha sólida) e amostras de vacâncias estáticas (Zn) (linha pontilhada) [9].	151
5.2	Susceptibilidade magnética <i>versus</i> temperatura para $La_2Cu_{1-x}Zn_xO_{4-y}$. Os dados para cada curva são deslocados por 0.5×10^{-4} emu/mol. O detalhe mostra T_N^{\max} (máximo em χ) e T_x (T no qual χ diverge para baixos e altos campos) [7].	152
5.3	Susceptibilidade magnética estática ($H = 1$ Tesla) <i>versus</i> temperatura para o composto $La_{1.983}Sr_{0.017}Cu_{1-z}Zn_zO_4$ para diferentes dopagens de Zn [5].	153
5.4	Configuração de uma rede quadrada com sítios magnéticos (as setas, representando spins) e não magnéticos (círculos vazios) representando o plano de CuO_2 com diluição (Zn).	154
5.5	Diagrama de fase no plano (H, T) para o metamagneto de Ising quase- $2d$ aleatoriamente decorado e diluído com diferentes valores do parâmetro da frustração α e a concentração $p = 0.1$ e o valor da diluição $z = 0.8$	161

5.6	Diagrama de fase no plano (H, T) para o metamagneto de Ising quase- $2d$ aleatoriamente decorado e diluído com diferentes valores da concentração p e da diluição z e com o valor da frustração $\alpha = 0.4$	162
5.7	Dependência da temperatura crítica do metamagneto Ising quase- $2d$ aleatoriamente decorado e diluído com o parâmetro p para $\alpha = 0.4$ e variando o campo externo e número de vacâncias.	163
5.8	Diagrama de fase no plano (T, p) para o modelo de Ising quase- $2d$ aleatoriamente decorado e diluído com $H = 1.0$ e $z = 0.8$ e diferentes valores do parâmetro de frustração α indicado nas curvas crítica em ordem crescente $\alpha = 0.4, 0.45, 0.5, 0.55, 0.6, 0.65, 0.7, 0.75, 0.8, 0.85, 0.9$ e 0.95	164
5.9	Diagrama de fase no plano (T, z) para o modelo de Ising quase- $2d$ aleatoriamente decorado e diluído com o parâmetro de frustração $\alpha = 0.1$ e diferentes valores do campo externo e o valor da concentração dos buracos de oxigênio.	165
5.10	Diagrama de fase no plano (T, z) para o modelo de Ising quase- $2d$ aleatoriamente decorado e diluído com o parâmetro de frustração $\alpha = 0.4$ e diferentes valores do campo externo e o valor da concentração dos buracos de oxigênio.	166
5.11	Diagrama de fase no plano (T, p) para o modelo de Ising quase- $2d$ aleatoriamente decorado e diluído com $H = 0.0$ e $p = 0.1$ e diferentes valores do parâmetro de frustração α indicado nas curvas crítica em ordem decrescente $\alpha = 0.98, 0.9, 0.8, 0.7, 0.6, 0.5, 0.4$	167
5.12	Diagrama de fase no plano (T, z) para o modelo de Ising quase- $2d$ aleatoriamente decorado e diluído com $H = 1.0$ e $p = 0.1$ e diferentes valores do parâmetro de frustração α	168

5.13	Diagrama de fase no plano (T, p) para o modelo de Ising quase- $2d$ aleatoriamente decorado e diluído com $H = 1.0$ e $z = 0.8$ e diferentes valores do parâmetro de frustração α indicado nas curvas crítica em ordem crescente $\alpha = 0.4, 0.45, 0.5, 0.55, 0.6, 0.65, 0.7, 0.75, 0.8, 0.85, 0.9, 0.95$	169
5.14	Diagrama de fase no plano (T, α) para o modelo de Ising quase- $2d$ aleatoriamente decorado e diluído com $H = 0.0$ e $z = 0.8$ e diferentes valores da concentração dos íons de oxigênio p indicado nas curvas crítica em ordem crescente $p = 0.03, 0.05, 0.08, 0.1, 0.15, 0.2, 0.25, 0.3, 0.4, 0.5$	170
5.15	Magnetização alternada do modelo de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do parâmetro de frustração α com $H = 1.0, p = 0.1$ e $z = 0.8$	171
5.16	Magnetização alternada do modelo de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do campo externo e da diluição com $\alpha = 0.4$ e $p = 0.0$	172
5.17	Magnetização alternada do modelo de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do campo externo e da diluição com $\alpha = 0.4$ e $p = 0.05$	173
5.18	Magnetização alternada do modelo de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores da concentração dos buracos de oxigênio e da diluição com $\alpha = 0.7$ e $H = 2.0$	174
5.19	Magnetização total do modelo de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do parâmetro de frustração α com $H = 1.0, z = 0.8$ e $p = 0.1$	175
5.20	Magnetização total do modelo de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do campo externo e da diluição com $\alpha = 0.4$ e $p = 0.0$	176

5.21	Magnetização total do modelo de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do campo externo e da diluição com $\alpha = 0.4$ e $p = 0.05$	177
5.22	Magnetização total do modelo de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores da concentração dos buracos de oxigênio e da diluição com $\alpha = 0.7$ e $H = 2.0$	178
5.23	Dependência da susceptibilidade total com a temperatura para o modelo de Ising quase- $2d$ para vários valores do parâmetro da frustração α com $H = 1.0$, $z = 0.8$ e $p = 0.1$	179
5.24	Dependência da susceptibilidade total com a temperatura para o modelo de Ising quase- $2d$ para vários valores do parâmetro da diluição z e campo H com $\alpha = 0.4$ e $p = 0.0$	180
5.25	Dependência da susceptibilidade total com a temperatura para o modelo de Ising quase- $2d$ para vários valores do parâmetro da diluição z e campo H com $\alpha = 0.4$ e $p = 0.05$	181
5.26	Dependência da susceptibilidade total com a temperatura para o modelo de Ising quase- $2d$ para vários valores do parâmetro da diluição z com $\alpha = 0.5$, $H = 1.0$ e $p = 0.05$	181
5.27	Dependência da susceptibilidade total com a temperatura para o modelo de Ising quase- $2d$ para vários valores do parâmetro da diluição z e concentração p com $\alpha = 0.7$ e $H = 2.0$	182
5.28	Dependência da susceptibilidade alternada com a temperatura para o modelo de Ising quase- $2d$ e diferentes valores do parâmetro de frustração α indicado nas curvas em ordem crescente $\alpha = 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9$ com $H = 1.0$, $z = 0.8$ e $p = 0.1$	182
5.29	Dependência da susceptibilidade alternada com a temperatura para o modelo de Ising quase- $2d$ para vários valores do parâmetro da diluição z e campo H com $\alpha = 0.4$ e $p = 0.0$	183

5.30	Dependência da susceptibilidade alternada com a temperatura para o modelo de Ising quase- $2d$ para vários valores do parâmetro da diluição z e campo H com $\alpha = 0.4$ e $p = 0.05$	183
5.31	Dependência da susceptibilidade alternada com a temperatura para o modelo de Ising quase- $2d$ para vários valores do parâmetro da diluição z e concentração p com $\alpha = 0.7$ e $H = 2.0$	184
5.32	Comportamento da energia interna do metamagneto de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do parâmetro da frustração α com $H = 1.0$, $p = 0.1$ e $z = 0.8$	184
5.33	Comportamento da energia interna do metamagneto de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do campo externo e da diluição com $\alpha = 0.4$ e $p = 0.0$	185
5.34	Comportamento da energia interna do metamagneto de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do campo externo e da diluição com $\alpha = 0.4$ e $p = 0.05$	185
5.35	Comportamento da energia interna do metamagneto de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores da diluição e da concentração dos íons de oxigênio com $\alpha = 0.7$ e $H = 2.0$	186
5.36	Comportamento do calor específico do metamagneto de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do parâmetro da frustração α com $H = 1.0$, $p = 0.1$ e $z = 0.8$	186
5.37	Comportamento do calor específico do metamagneto de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do campo externo e da diluição com $\alpha = 0.4$ e $p = 0.0$	187
5.38	Comportamento do calor específico do metamagneto de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do campo externo e da diluição com $\alpha = 0.4$ e $p = 0.05$	187

5.39 Comportamento do calor específico do metamagneto de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores da diluição e da concentração dos íons de oxigênio com $\alpha = 0.7$ e $H = 2.0$ 188

Lista de Tabelas

III.1 Valores da Temperatura crítica T_c para o modelo de Ising-1/2 em diversas topologias de rede.	93
III.2 Valores da temperatura crítica para modelos clássicos e quânticos com interações F e AF numa rede cúbica simples.	96
IV.1 Valores da concentração crítica p_c para o modelo de Ising quase- $2d$ aleatoriamente decorada utilizando o método da mecânica estatística usual (I) [37] e utilizando a transformação decoração (II) para vários valores do parâmetro de frustração α	119

Capítulo 1

Introdução

1.1 Aspectos gerais

As propriedades críticas em sistemas quânticos de baixa dimensionalidade têm despertado o interesse da comunidade científica na área da Física da Matéria Condensada, tanto do ponto de vista teórico como experimental. Em particular, o modelo de Heisenberg de spin $\frac{1}{2}$ antiferromagnético em duas dimensões ($2d$) é um dos mais discutidos na literatura por causa das grandes flutuações quânticas em $T = 0$, manifestando-se novos fenômenos físicos.

Do ponto de vista experimental, podemos citar a descoberta da transição spin-Peierls no composto $CuGeO_3$ [1], a transição de fase antiferromagnética (Néel) no isolante La_2CuO_4 [2], os férmions pesados [3], etc. como excelentes exemplos que tratam do modelo de Heisenberg quântico de spin $\frac{1}{2}$.

Desde a descoberta dos supercondutores formados por óxidos de cobre [4], que se tem dedicado um grande esforço ao estudo destes compostos. Para os físicos teóricos este tema é de grande motivação, pois até o momento não se conhece uma teoria microscópica completa capaz de explicar todas as propriedades destes novos supercondutores haja visto, que os supercondutores tradicionais (baixas temperaturas $T_{cmax} = 25K$), por exemplo, Hg , Al , etc., apresentam uma teoria microscópica rigorosa capaz de explicar todas as

suas propriedades (teoria BCS) [5]. Existem na literatura alguns autores que consideram a teoria BCS adequada para a descrição dos novos supercondutores de altas temperaturas [6], porém essas teorias não conseguem explicar todas as propriedades desses novos materiais, considerando a teoria BCS incompleta, faltando alguns ajustes teóricos. Outros grupos, menos conservadores, acreditam que deve existir uma nova teoria para descrever as propriedades desses novos materiais, no qual o magnetismo é um ingrediente essencial para explicar a origem das altas temperaturas dos novos supercondutores que apresentam uma característica em comum: são compostos formados por planos de CuO_2 [7]-[9]. Nesse contexto, o completo entendimento da influência das propriedades magnéticas dos planos de CuO_2 nas fases isolante e metálica dos compostos $La_{2-x}Ba_xCuO_4$, $La_{2-x}Sr_xCuO_4$, etc. reveste-se de uma importância fundamental para elucidação da origem do fenômeno da supercondutividade em altas temperaturas.

Evidências experimentais, incluindo espalhamento de nêutrons [10]-[12], rotação de muon-spin [13, 14], técnica de ressonância nuclear em quadrupolos [15], e medidas utilizando Mössbauer [16], dão suporte ao fato de que o magnetismo é um ingrediente importante para a compreensão do comportamento dos supercondutores baseados em óxidos metálicos de cobre.

O composto não dopado La_2CuO_4 é um isolante com interação antiferromagnética (AF) entre os spins do cobre (Cu), no plano CuO_2 ($J_A \cong 1300K$) e entre planos de CuO_2 ($J'_A \cong \lambda J_A$, $\lambda = 10^{-5}$) sendo, portanto, um sistema quase-bidimensional. Vários experimentos em espalhamento de nêutrons têm confirmado a ordem AF do La_2CuO_4 [4], com uma temperatura de transição de Néel da ordem de $T_N \cong 300K$ e que suas propriedades magnéticas podem ser descritas por um modelo de Heisenberg AF de spin- $\frac{1}{2}$ quase-bidimensional [17]. Devido ao teorema de Mermin-Wagner [18], o qual garante que o modelo de Heisenberg $2d$ na ausência de anisotropias apresenta $T_N = 0$, deve-se supor que o composto La_2CuO_4 , para ser descrito por um modelo de Heisenberg AF, deve apresentar algum tipo de anisotropia, por exemplo, anisotropia de troca (Δ) entre spins no plano de CuO_2 ou entre os planos (λ), pois só assim tem-se $T_N \neq 0$. O pequeno

valor de λ sugere um pequeno efeito sobre a correlação de spin $2d$ para $T < T_N$; por isso as propriedades calculadas a $T = 0$ para um plano isolado de CuO_2 são independentes de λ .

Quando se dopa com elemento alcalino, por exemplo, Ba ou Sr , o composto isolante antiferromagnético La_2CuO_4 , apresenta um desbalanceamento de carga criando assim um buraco (carga $+e$) com uma fração de x íons de oxigênio que estão situados entre átomos de cobre (Cu) dos planos de CuO_2 , resultando assim no composto $La_{2-x}(Sr, Ba)_xCuO_4$ (compostos $2 - 1 - 4$). A cada íon de oxigênio (O^{-2}) está associado um spin efetivo, de valor $S = \frac{1}{2}$, que passa a interagir ferromagneticamente com seus vizinhos de cobre mais próximos. Assim, a dopagem do La_2CuO_4 tem como efeito o de introduzir interações competitivas predominantemente nos planos de CuO_2 fazendo com que se tenha a presença de frustração magnética. A criação dos buracos de oxigênio nos compostos $2 - 1 - 4$ afeta as propriedades eletrônicas e magnéticas do sistema, com isto $T_N(x)$ decrescerá rapidamente com o aumento de x e tornar-se-á zero numa dada concentração crítica x_c , por exemplo, $x_c = 2,5\%$ para o composto $La_{2-x}Ba_xCuO_4$, onde o fenômeno da supercondutividade começa a se manifestar. Correlações magnéticas nos planos de CuO_2 existem sobre toda a fase supercondutora, [4, 19] na qual são as flutuações (quânticas) magnéticas as responsáveis pelas correntes supercondutoras [4, 7]. A destruição da fase supercondutora ocorre em torno de $x = x_1 = 25\%$ [20] e é acompanhada por uma transição de fase estrutural. O esquema do diagrama de fase é mostrado na Fig.(1.1).

Outro aspecto interessante observado nesses compostos supercondutores em altas temperaturas, e que tem sido investigado [21]-[25], é a influência da substituição (diluição) de átomos de cobre (magnético de spin $\frac{1}{2}$) por íons não magnéticos de zinco ou magnésio nas fases antiferromagnética e supercondutora. Essa diluição tem como objetivo destruir essas duas fases, diminuindo gradualmente a temperatura de transição. Por exemplo, no composto diluído $La_2Cu_{1-z}Zn_zO_4$, a ordem AF persiste até altas concentrações em torno de $z_c = 25\%$ (concentração de percolação $3d$), isto é, T_N vai a zero em $z = z_c$. Por outro lado, a presença de uma pequena concentração de elementos alcalinos (Ba ou Sr)

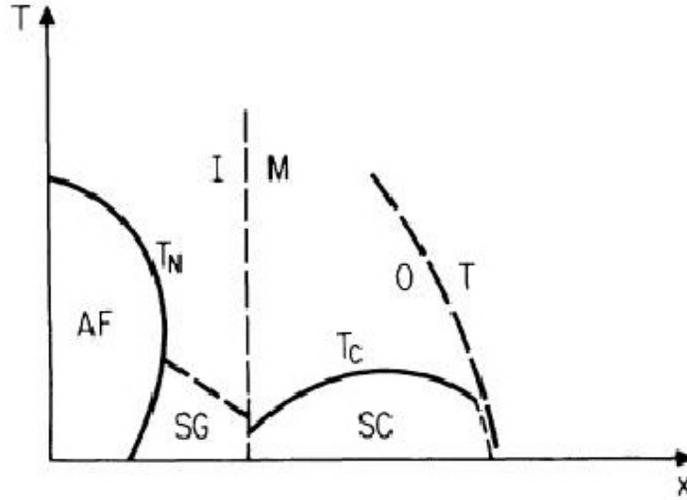


Figura 1.1: Esquema do diagrama de fase, como função da concentração dos buracos x . AF = antiferromagnética; SG = vidro de spin; I = isolante; M = metal; SC = supercondutor; O = ortorrômbica; T = tetragonal [9].

($x_c = 2,5\%$) a ordem AF no composto $2 - 1 - 4$ é drasticamente destruída, e esse efeito deve-se ao fenômeno de frustração magnética presente no sistema.

O estudo teórico de modelos magnéticos diluídos (sítio ou ligação) tem sido feito desde há muito tempo, onde citamos o excelente artigo de revisão do Stinchcombe [26]. Para descrever o diagrama de fase do composto $La_2Cu_{1-z}Zn_zO_4$, Cheong e colaboradores [22] têm argumentado que um modelo de Heisenberg quase $2d$ tem que ser utilizado para descrever a curva crítica $T_N(z)$ (veja Fig.1.2) e susceptibilidade magnética obtidas experimentalmente.

Hücker e colaboradores [24] estudaram o diagrama de fase do composto $La_{2-x}Sr_xCu_{1-z}Zn_zO_4$ e observaram resultados surpreendentes: i) a presença da impureza Zn afeta a concentração de buracos de oxigênio, introduzida pelo elemento alcalino Sr . Numa amostra de concentração de $z = 15\%$, a concentração crítica x_c de buracos é aproximadamente 3% , isto é, maior do que o sistema puro ($z = 0$) que é $x_c = 2\%$; ii) no plano T versus z e para $x = 0.017$ a temperatura de Néel tem um ponto de máximo. Estudos de grupo

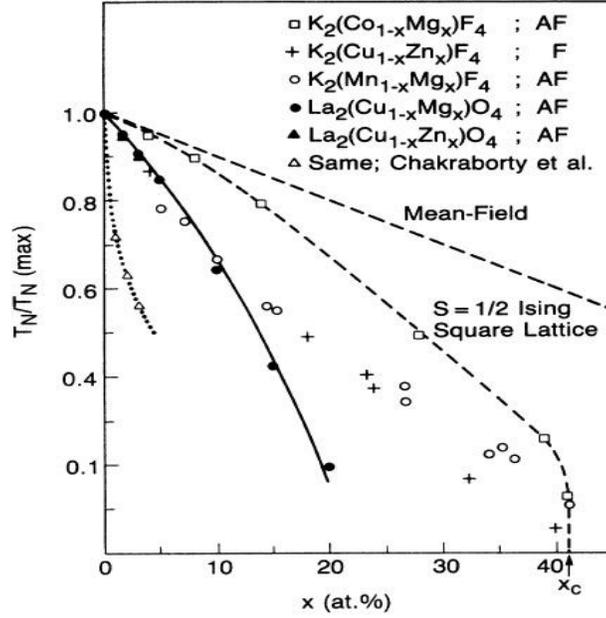


Figura 1.2: Temperatura de Néel normalizada $[T_N/T_N(\text{max})]$ vs concentração de íons não magnéticos em vários magnetos quase-2d [22].

de renormalização (modelo sigma não linear) [23] mostraram a sensibilidade do ponto de máximo (item ii) com a concentração x , porém o item i), que mostra $x_c(z) > x_c(z = 0)$, não foi esclarecido teoricamente. O modelo utilizado na Ref. [23] não reflete adequadamente todos os ingredientes microscópicos do sistema, faltando assim uma análise teórica mais precisa.

1.2 Ordenamento Magnético

Aos cristais quer sejam ferromagnéticos (F) ou antiferromagnéticos (AF) são lhes atribuídos grandezas para fins de caracterização de seus ordenamentos. De acordo com a experiência, microscopicamente os cristais são formados por vários elétrons resultando no spin total (spin + momento angular), os quais são propriedades que podem assumir números inteiros ou semi-inteiros, segundo as regras de Hund, e portanto, em função deles,

define-se nos cristais F ou AF grandezas macroscópicas que os caracterizam mediante esse efeito coletivo dos momentos magnéticos. A magnetização na matéria é medida através dos momentos de dipolo $\vec{\mu}$ ($= -g\mu_B \vec{J}$, onde $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$) que os dotam, ou seja, a soma dos momentos de dipolo por unidade de volume caracteriza a magnetização, definida como

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

onde $\langle \dots \rangle$ representa a média térmica. Além da magnetização várias outras grandezas termodinâmicas, como, por exemplo, calor específico podem ser calculadas. Experimentalmente e teoricamente, a magnetização total caracteriza o parâmetro de ordem, e no caso do sistema antiferromagnético o parâmetro de ordem é a magnetização alternada ou *staggered*.

A descrição microscópica de um sólido magnético envolve três problemas distintos: i) a natureza dos portadores de momentos magnéticos; ii) a origem das interações entre eles; iii) a termodinâmica do sistema constituído por um conjunto de portadores de momento magnético em interação. A interação entre os momentos magnéticos existente num sólido é responsável pela ordem magnética. Um cristal está ordenado ferromagneticamente, quando essa interação ordena em média os momentos magnéticos numa dada direção (eixo fácil), para temperatura inferior a T_c (temperatura de Curie), resultando assim numa magnetização espontânea não nula. Se a energia térmica $k_B T$ for maior que a energia de interação entre os momentos magnéticos J , a ordem ferromagnética é quebrada, e dizemos que o sistema sofreu uma transição de fase, como, por exemplo, ferro-paramagnética. Na figura (1.3) temos o comportamento da magnetização espontânea de um cristal ferromagnético de níquel.

Exemplos típicos de materiais ferromagnéticos são *Fe*, *Co* e *Ni*, e esses são todos metálicos e descritos microscopicamente através de modelos itinerantes (Hubbard). Porém, o tratamento qualitativo das propriedades magnéticas podem ser aproximadamente descrito pelo modelo de Heisenberg (spins localizados-isolante).

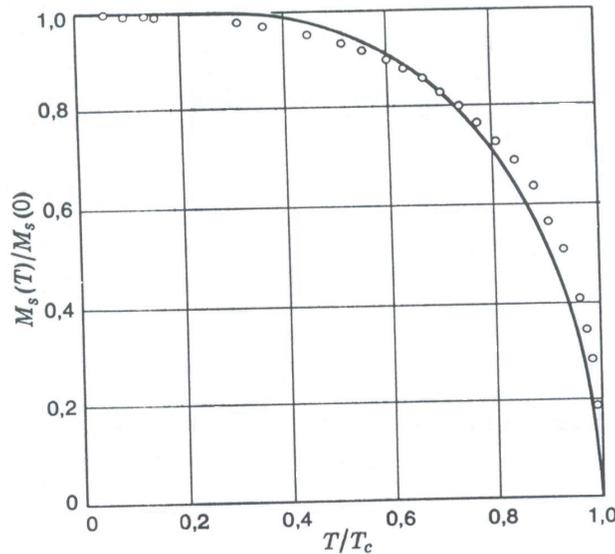


Figura 1.3: Comportamento da magnetização do níquel em função da temperatura, juntamente com a curva teórica para $S = \frac{1}{2}$ obtida por teoria de campo médio. Os valores experimentais foram obtidos por P. Weiss e R. Forrer, *Ann. Phys.* **5**, 153 (1926).

Em compostos antiferromagnéticos, por exemplo, MnF_2 , FeF_2 , CoF_2 , os momentos magnéticos em média se orientam antiparalelamente. Este ordenamento não é aleatório (paramagnético), mas cada spin da rede cristalina interage com seus primeiros vizinhos, cujo mínimo de energia corresponde os momentos magnéticos antiparalelos. Por esta razão, um antiferromagneto consiste de um conjunto de subredes A (spin $up \uparrow$) e B (spin $down \downarrow$), tendo cada uma um valor médio dos momentos magnéticos, que corresponde a magnetização de subrede, não nulo na ausência de campo externo. Este tipo de ordenamento magnético ocorre em temperatura do antiferromagneto inferior a T_N (temperatura de Néel).

Podemos citar outro tipo de ordenamento comum nos cristais denominado de ferrimagnetismo. Neste tipo de ordenamento, os momentos se ordenam antiparalelos, sendo que, as magnitudes dos momentos das duas subredes na ausência de campo externo são diferentes, ou seja, não há compensação da magnetização, como ocorre nos antiferromag-

netos ($M_A + M_B = 0$). Exemplos destes tipos de compostos temos os constituídos por metais de transição, tais como: $MnO.Fe_2O_3, 3Y_2O_3.5Fe_2O_3$. Existe uma temperatura crítica T_c para os ferrimagnetos no qual $M = M_A + M_B$ se anula, mas mesmo antes deste valor crítico T_c temos uma temperatura de compensação $T_{cp}(M_A = -M_B)$ onde M também se anula, não caracterizando uma transição de fase.

Outra grandeza importante para identificar a ordem magnética de um sistema, tanto do ponto de vista teórico como experimental, é a susceptibilidade magnética (χ). Essa grandeza macroscópica mede a resposta do material devido aos seus momentos magnéticos quando é colocado sob a ação de um campo magnético externo. Matematicamente essa grandeza χ é definida por

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

onde $\chi^{\alpha\beta}$ é o elemento (tensor de ordem dois) da matriz χ , M_α e H_α correspondem a componente $\alpha = x, y, z$ da magnetização e campo magnético, respectivamente. Neste trabalho de tese, limitaremos apenas a aplicação do campo magnético ao longo do eixo fácil de magnetização, portanto, só teremos com isto uma única componente para o tensor susceptibilidade χ que é expressa por

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

As primeiras medidas experimentais para χ foram feitas, em 1895, pelo físico francês Pierre Curie [27]. Ele mostrou que as substâncias paramagnéticas (ausência de magnetização espontânea, i.e., $M(T, H = 0) = 0$) apresentam uma susceptibilidade magnética à campo nulo (χ_0) positiva e inversamente proporcional à temperatura, conhecida como lei de Curie

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

onde C é a constante de Curie. A lei de Curie, expressa pela Eq.(1.4), é encontrada em

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

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

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

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

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

Uma característica marcante nos compostos antiferromagnéticos que diferenciam dos ferromagnéticos é que a susceptibilidade apresenta um ponto de máximo na temperatura de Néel (T_N), enquanto o ferromagneto diverge em T_c de acordo com a lei de Curie, Eq.(1.5).

Após apresentação de resultados experimentais de grandezas magnéticas por Pierre Curie, uma corrida crescente surgiu para reproduzir essas medidas. A primeira teoria bem sucedida foi apresentada por Weiss em 1905 [28], mas este não foi capaz de explicar a origem microscópica da interação existente entre os momentos magnéticos para resultar numa ordem (grande) magnética. Inicialmente, pensou-se que a interação entre os momentos magnéticos fosse do tipo dipolar. Mas, por um cálculo simples de ordem

de grandeza, é possível mostrar que a natureza da interação é eletrostática. Com efeito, sendo a energia J de interação magnética dipolar proporcional a $\frac{\mu_B^2}{a^3}$, sendo μ_B o magneton de Bohr e a o parâmetro da rede cristalina [$a \simeq 1\text{Å}$], obtém-se $J \simeq 10^{-16} - 10^{-17} \text{erg}$. Por outro lado, a destruição da ordem magnética corresponde ao seguinte balanceamento energético $k_B T_c \simeq J$, portanto, com esta interpretação microscópica estimamos $T_c \simeq 10^{-1} - 10^{-2} K$, muito menor que os valores experimentais $T_c \simeq 10^3 K$. No entanto, se assumirmos que a energia de interação J seja de origem eletrostática, isto é, $J \simeq \frac{e^2}{a}$, obtemos a estimativa correta para a temperatura crítica dos ferromagnetos tradicionais. Na primeira vista, parece ser muito estranho como uma energia de origem eletrostática faz com que os momentos magnéticos nos sólidos cristalinos (ou até amorfos) fiquem configurados numa dada direção específica. Deve-se resaltar que, no sólido temos a presença dos dois tipos de interações (eletrostática e dipolar), mas para explicar o forte magnetismo na matéria apenas a eletrostática é relevante. Por outro lado, alguns compostos metálicos diluídos, por exemplo o $Eu_xSr_{1-x}S$, no regime de altas concentrações (baixas temperaturas críticas) apresentam uma fase denominada de vidro de spin, no qual a energia dipolar é fundamental para o entendimento das medidas experimentais [29].

1.2.1 Modelo de Heisenberg

Somente com o desenvolvimento da mecânica quântica, principalmente a partir de 1926 quando a equação de Schrödinger foi proposta, que foi possível desvendar a verdadeira origem da forte interação responsável pelo magnetismo.

Para explicar o fenômeno do magnetismo, do ponto de vista microscópico, Heisenberg [30] propôs que o forte alinhamento dos spins num ferromagneto decorria de seus vizinhos mais próximos. Essa energia de troca, também proposta independentemente por Frenkel [31] e Dorfman [32], corresponde fisicamente a diferença de energia entre as configurações de spins paralelos ($\uparrow\uparrow$) e antiparalelos ($\uparrow\downarrow$). A interação existente entre os spins de uma dada rede não é originada (ou há pouquíssima contribuição) da interação dipolo-dipolo

dos momentos magnéticos discretos ou acoplamento spin-órbita.

Para elucidar a natureza da interação de troca devemos resolver o Hamiltoniano de dois elétrons via teoria de perturbação, já que a solução exata não é possível. A perturbação é atribuída ao potencial de interação elétron-elétron. Considerando a presença desse potencial resolve-se o problema com aproximação de primeira ordem na teoria de perturbação degenerada.

O princípio de exclusão de Pauli obriga que as auto-funções de onda total dos férmions sejam antisimétricas. Fisicamente, o estado singleto corresponde ao estado dos spins antiparalelos ($\uparrow\downarrow$), função de onda antisimétrica, e o tripleto paralelos ($\uparrow\uparrow$), função de onda simétrica. Com aplicação da teoria de perturbação em primeira ordem e tomando a diferença de energia entre esses estados, encontramos o valor da energia de troca, denominada por J . A energia de troca tem a propriedade de decrescer rapidamente (exponencial) com a distância entre os íons, em contraste com a interação coulombiana que decresce mais lentamente ($\simeq \frac{1}{r}$). A razão é que J contém o produto de funções de onda de elétrons ligados em diferentes núcleos, portanto, J dependerá do envolvimento (*overlap*) das funções de onda, e esse *overlap* decresce exponencialmente com a distância (r). Dessa maneira, a interação de troca corresponde a uma interação de curto alcance.

A solução da equação de Schrödinger para o Hamiltoniano do sistema de dois elétrons pode ser obtida com a definição de um operador que possua autovalor $E(S=0)$ no estado singleto e $E(S=1)$ no estado tripleto, onde $E(S=0)$ e $E(S=1)$ dependem da interação de troca J . Portanto, usando as relações dos operadores de spin \mathbf{S}^2 e \mathbf{S}_i^2 ($i=1,2$) com base na auto-função de onda e redefinindo o ponto zero das energias encontramos

$$\mathcal{H}_{12} = -J\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2. \quad (1.6)$$

Para um sistema de N partículas (elétrons) interagentes podemos escrever o Hamiltoniano (1.6), através de uma combinação de pares de ligações distintas, em um cristal, envolvendo acoplamento spin-spin descrito por

$$\mathcal{H} = -\sum_{ij} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (1.7)$$

onde J_{ij} é a energia de troca entre dois pares de íons i e j , o somatório é feito sobre todos os pares circundantes a um sítio i particular (primeiros, segundos, etc. vizinhos), $\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ é o operador de spin no sítio i da rede cristalina e S_i^ν ($\nu = x, y, z$) é a componente ν do operador de spin no sítio i . Se $J_{ij} > 0$ e $J_{ij} < 0$ correspondem às configurações dos spins (no estado fundamenta, $T = 0$) paralelos (estado ferromagnético) e antiparalelos (estado antiferromagnético), respectivamente. A Eq.(1.7) é conhecida como modelo de Heisenberg isotrópico pois as três direções no espaço da interação apresentam a mesma probabilidade de orientação (i.e., $\langle S_i^x \rangle = \langle S_i^y \rangle = \langle S_i^z \rangle$).

1.2.2 Outras Interações

A interação de troca (e supertroca) se caracteriza pelo fato de ser independente da orientação dos spins, conseqüentemente o Hamiltoniano deve ser invariante por rotação de spin. Essa transformação implica que o Hamiltoniano deve conter apenas termos pares de operadores S_i^ν , onde a forma aproximada (1.7) representa o Hamiltoniano bilinear. Vários outros termos de interações poderão ser incluídos para o verdadeiro entendimento microscópico do magnetismo, como, por exemplo, o termo biquadrático

$$\hat{\mathcal{H}}_1 = -\sum_{(i,j)} J'_{ij} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)^2 \quad (1.8)$$

o termo da interação antisimétrica Dzyaloshinski e Moriya (DM) (responsável pela explicação do pequeno ferromagnetismo nos compostos antiferromagnéticos),

$$\hat{\mathcal{H}}_{DM} = -\sum_{(i,j)} \mathbf{D}_{ij} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j), \quad (1.9)$$

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

$$\hat{\mathcal{H}}_4 = - \sum_{(i,j,l,k)} \tilde{J}_{ijkl} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) (\mathbf{S}_l \cdot \mathbf{S}_k), \quad (1.10)$$

etc..

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

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

$$\hat{\mathcal{H}}_{dipolar} = -4\mu_B^2 \sum_{(i,j)} \left\{ \frac{\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - 3(\hat{r}_{ij} \cdot \mathbf{S}_i)(\hat{r}_{ij} \cdot \mathbf{S}_j)}{r_{ij}^3} \right\}, \quad (1.11)$$

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

É importante mencionar que tanto no Hamiltoniano de Heisenberg, Eq.(1.7), como no dipolar, Eq.(1.11), as interações spin-spin são da forma quadrática em termos dos operadores de spin \mathbf{S}_i e \mathbf{S}_j (interação bilinear). Fisicamente, podemos interpretar a energia de troca como sendo a interação (acoplamento) do momento magnético $\boldsymbol{\mu}_i = g\mu_B\mathbf{S}_i$ ($\hbar \equiv 1$) com um campo molecular (teoria de Weiss) resultante de todos os outros momentos magnéticos vizinhos, gerando assim, um campo magnético muito intenso, da ordem de $10^4 Oe$, explicando microscopicamente a origem do forte magnetismo da matéria.

Um outro tipo importante de interação que o spin eletrônico ligado no átomo sente

é a ação do campo magnético gerado pelo núcleo devido ao movimento relativo (orbital) entre os elétrons e o núcleo. Essa interação, denominada spin-órbita, é a responsável pela estrutura hiperfina no espectro atômico, e é descrita pelo seguinte Hamiltoniano

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{L.S}} = \sum_i \xi(\mathbf{r}_i) \mathbf{L}_i \cdot \mathbf{S}_i, \quad (1.12)$$

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

Utilizando teoria de perturbação de 2ª ordem para a energia de interação spin-órbita, a Eq.(1.12) poderá ser reescrita na forma

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{L.S}} = \sum_{i,(\alpha,\beta)} \Lambda_{\alpha\beta}^i \mathbf{S}_i^\alpha \mathbf{S}_i^\beta, \quad (1.13)$$

sendo

$$\Lambda_{\alpha\beta}^i = 2\xi^2 \sum_{l \neq p} \frac{\langle p | L_i^\alpha | l \rangle \langle l | L_i^\beta | p \rangle}{E_p^0 - E_l^0}, \quad (1.14)$$

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

O Hamiltoniano usado, habitualmente, para descrever anisotropias ortorrômbicas leva apenas em conta os termos diagonais, isto é, $\Lambda_{\alpha\beta}^i = D_i \delta_{\alpha z} \delta_{\beta z} - E_i (\delta_{\alpha x} \delta_{\beta x} - \delta_{\alpha y} \delta_{\beta y})$, conseqüentemente o Hamiltoniano de anisotropia dado pela Eq.(1.13) ficará

$$\hat{\mathcal{H}}_{ion} = - \sum_i D_i (S_i^z)^2 + \sum_i E_i \left[(S_i^x)^2 - (S_i^y)^2 \right], \quad (1.15)$$

onde para $E_i = 0$ a Eq.(1.15) reduz-se ao caso da anisotropia uniaxial. Nesse caso para $D_i < 0$ os spins preferem, no mínimo de energia, o plano xy e isto corresponde a diminuição do valor médio da componente z do spin [$m_z = \langle S_i^z \rangle$], enquanto o caso contrário $D_i > 0$ a direção z é privilegiada. Vale salientar que o Hamiltoniano dado pela Eq.(1.15) só será relevante para magnitude de spin maior que $\frac{1}{2}$ ($S > \frac{1}{2}$), no caso de

$S = \frac{1}{2}$ a contribuição de anisotropia de íon único será constante pois da identidade de spin temos $(S_i^\nu)^2 = \frac{1}{4} (\nu = x, y, z)$.

O uso da anisotropia ortorrômbica Eq.(1.15) no Hamiltoniano de Heisenberg Eq.(1.7) com interação antiferromagnética ($J < 0$), e presença de um campo magnético externo axial ($\mathbf{H}=H\mathbf{k}$, eixo z), foi utilizado por Aharony [33] para explicar a transição de fase estrutural dos compostos $SrTiO_3$ e $LaAlO_3$. Teoricamente, esse tipo de Hamiltoniano é importante, também, para prever no diagrama de fase no plano (T, H) um **ponto bicrítico**.

Por outro lado, o caso da anisotropia uniaxial ($E = 0$) em conjunto com o modelo de Ising foi discutido por Blume [34] e Capel [35], hoje conhecido na literatura como **modelo Blume-Capel**, para descrever o comportamento da mistura de $He^3 - He^4$. Na região de anisotropia negativa ($D < 0$) um **ponto tricrítico** no plano (T, D) , onde separa uma linha crítica de segunda ordem de outra de primeira ordem (existência de um calor latente e descontinuidade na magnetização), é observado.

Por causa das anisotropias no Hamiltoniano (1.7) podemos aproximar o nosso sistema por um modelo particular, e que numa forma matemática escrevemos o seguinte Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} (\eta^x S_i^x S_j^x + \eta^y S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z), \quad (1.16)$$

onde $\eta^\nu \in [0, 1]$ é o parâmetro de anisotropia da componente $\nu = x, y$ da interação dos spins. O Hamiltoniano (1.16) é conhecido na literatura como modelo de Heisenberg anisotrópico e reduz-se aos casos particulares dos modelos Ising ($\eta^x = \eta^y = 0$), XY ($\eta^x = 0$ e $\eta^y = 1$) e Heisenberg isotrópico ($\eta^x = \eta^y = 1$).

Um resultado exato para o modelo de Heisenberg numa rede $d(= 1, 2)$ -dimensional é o teorema de Mermin e Wagner [4], que afirma que esse sistema não apresenta ordem de longo alcance a $T > 0$ no limite isotrópico para $d = 1, 2$, e resumidamente é expresso

através das seguintes desigualdades:

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

onde $W = \sum_{(\mathbf{r}, \mathbf{r}')} |J(\mathbf{r} - \mathbf{r}')| |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2 < \infty$, S é a magnitude do spin e H o campo magnético externo. No limite de campo nulo ($H = 0$), a partir das desigualdades (1.17) temos que $M(T, 0) = 0$, não apresentando ordem de longo alcance para $T > 0$. Se admitirmos uma interação de longo alcance do tipo $J(r) = \frac{J}{r^p}$, é fácil mostrar que $W < \infty$ se e somente se $p > d + 2$, e, portanto, é o limite de aplicabilidade do teorema de Mermin e Wagner. Para $p < d + 2$ observa-se que $W \rightarrow \infty$, e do teorema de Mermin e Wagner nada podemos afirmar sobre a existência ou não de ordem de longo alcance. Esse teorema foi generalizado por Bruno [36] para incluir interação de longo alcance, e foi provado que para $p \geq 2d$ ($d = 1, 2$) o modelo de Heisenberg isotrópico não apresenta ordem de longo alcance a $T > 0$, e para $d < p < 2d$ temos presença de uma transição de fase em temperatura finita $T_c(p) \neq 0$.

Esses resultados rigorosos são relevantes para certificarmos da pontencialidade de uma dada aproximação, haja visto não podermos resolver de forma exata o Hamiltoniano (1.16) para $d \geq 2$.

Modelo XY anisotrópico

Esse modelo XY foi introduzido por Matsubara e Matsuda [37] e tem solução exata em uma dimensão [38]. Apesar do modelo XY não exibir ordem de longo alcance (magnetização espontânea) em $d = 2$, este apresenta uma transição de fase (topológica) associada a divergência exponencial do comprimento de correlação $\xi = \xi_0 \exp[a(T - T_{KT})^{-\bar{\nu}}]$ ($T > T_{KT}$ e $\xi = \infty$ para $T < T_{KT}$), conhecida como transição Kosterlitz e Thouless [39], que é identificada topologicamente pela formação de vórtices. De um ponto de

vista experimental, o modelo XY tem sido usado na descrição dos compostos magnéticos $CoBr_2$, $CoCl_2$ (ver Jongh e Miedema [40]) e para explicar as configurações de vórtices na superfluidez no filme fino He^4 [41].

$$\mathcal{H} = -\sum_{ij} (J_{ij}^x S_i^x S_j^x + J_{ij}^y S_i^y S_j^y). \quad (1.18)$$

Modelo de Ising

A redução do Hamiltoniano geral dado pela Eq.(1.7) para uma única componente constitui o sistema mais simples e é solúvel exatamente em uma e duas (sem campo externo) dimensões. Até hoje não se obteve a solução exata para o modelo de Ising em três dimensões, mas resultados rigorosos de expansão em séries e simulação de Monte Carlo podem ser considerados soluções quase exatas. Esse modelo de Ising, que é descrito pelo seguinte Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -\sum_{ij} J_{ij} S_i^z S_j^z, \quad (1.19)$$

descreve muito bem sistemas magnéticos com anisotropia uniaxial do tipo $DyAlO_3$, $DyPO_4$, $FeCl_2$, $FeBr_2$, Rb_2CoF_4 e também é útil para estudar transições gás-líquido para fluidos de uma componente e para ligas binárias.

1.3 Sistemas Desordenados

Os sólidos reais não gozam da propriedade de invariância translacional pois apresentam, na maioria das vezes, algum grau de impurezas ou imperfeições. Esses defeitos são em geral de ponto, linha ou superfície dependendo se as regiões imperfeitas são limitadas na escala atômica em uma, duas ou três dimensões. As imperfeições pontuais mais comuns são impurezas químicas, sítios vazios, na rede e átomos extras situados em posições regulares da rede. As vacâncias são defeitos pontuais, caracterizados pela ausência de

íons (ou íons extras).

A desordem em sólidos pode ainda ser classificada em: Desordem substitucional, nesta, átomos tipo X numa estrutura cristalina perfeita são substituídos por átomos tipo Y de maneira completamente aleatória, sem haver contudo, alterações na estrutura da rede. Desordem espacial, onde o arranjo atômico ou molecular não é o de uma rede ordenada, ocorrendo principalmente em sólidos amorfos. E finalmente a desordem contínua, a mais drástica delas, apresentando uma distribuição completamente aleatória dos potenciais atômicos.

Os materiais magnéticos apresentam em geral, uma determinada concentração de defeitos, originados pela presença de impurezas magnéticas (não magnéticas) ou ainda, devido a falhas na rede cristalina (vacâncias). As propriedades magnéticas do sistema podem ser fortemente influenciadas, em virtude da presença destes defeitos. Um tipo particular de desordem que ocorre em sistemas magnéticos é a desordem substitucional, onde uma determinada concentração de átomos magnéticos são substituídos por átomos não magnéticos. Também é possível preparar o sistema de forma alternativa, para isto basta considerar um sistema hospedeiro ou solvente dopado de impurezas magnéticas. Em qualquer um dos casos é interessante estudar a resposta do sistema decorrente da introdução das impurezas.

1.3.1 Sistemas Magnéticos Diluídos

O efeito da desordem presente em quase todas as substâncias é o de quebrar alguma simetria do sistema. A diluição em materiais magnéticos é usualmente classificada em diluição de sítios e diluição de ligações, de acordo com a natureza dos componentes (sítios e ligações).

Na diluição de sítios, íons magnéticos na rede cristalina são substituídos por íons não magnéticos, enquanto que o processo de diluição de ligações consiste em desconectar ligações entre dois íons magnéticos adjacentes. A diferença entre os dois processos está no efeito provocado por ambos. Para visualizar isto basta verificar que, no problema de

diluição de ligações, a remoção de uma ligação extingue apenas a interação entre dois íons magnéticos, enquanto que, na diluição de sítios, a subtração de um íon magnético por um íon não magnético implica na quebra de q ligações diretamente relacionadas a este sítio. Tais diferenças tornam-se mais claras próximo da transição de fase, onde numa certa concentração crítica haverá a formação de um aglomerado de íons magnéticos de tamanho infinito. Essa concentração é em geral alcançada mais rapidamente nos problemas de diluição de ligações.

O Hamiltoniano para um sítio diluído localizado pode ser escrito na forma

$$\mathcal{H}_S = - \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{J} \cdot \mathbf{S}_j \cdot \eta_i \eta_j, \quad (1.20)$$

onde \mathbf{S}_i é a variável de spin do sítio i , e η_i é a variável relacionada a desordem no sítio i podendo assumir valores 0, 1 o que implica em

$$\langle \eta_i \rangle = p \quad (1.21)$$

onde $\langle \dots \rangle$ significa a média configuracional, p a concentração magnética e J a interação de troca.

Uma desordem por sítio do tipo *Quenched* acontece quando a média configuracional independe da média térmica (que é dada pela distribuição de probabilidade $\mathcal{P}(\eta_i)$) [42], isto é, a distribuição de desordem é fixa na rede, ela não pode evoluir, ao contrário do que acontece com os graus de liberdade do spin. Para o caso mostrado na Eq.(1.20) temos que

$$\mathcal{P}(\eta_i) = (1 - p)\delta(\eta_i) + p\delta(\eta_i - 1). \quad (1.22)$$

Essa é a situação mais usual para magnetos diluídos reais.

Existe ainda a chamada desordem *annealed*, onde as ligações ou sítios diluídos podem difundir pela rede, de forma a encontrar a configuração de mínima energia livre. Uma desordem por sítio do tipo *Annealed* acontece quando calcula-se a média da variável de

desordem $\{\eta_i\}$ da mesma forma que a das variáveis de spin $\{\mathbf{S}_i\}$, isto é obtém-se através do fator de Gibbs:

$$\rho \propto \exp \left[-\beta(\mathcal{H}_S - \mu \sum_i \eta_i) \right]. \quad (1.23)$$

Aqui, $\beta = \frac{1}{k_B T}$ e o potencial químico μ é a média de cada variável η_i , ou seja, é a própria concentração p . Podemos ver claramente que a desordem do tipo *Annealed* em diferentes sítios não são independentes.

Para a desordem magnética por ligação, a forma típica do Hamiltoniano é

$$\mathcal{H}_B = - \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{J} \cdot \mathbf{S}_j \eta_{ij}, \quad (1.24)$$

onde a variável de desordem η_{ij} está agora associada com as ligações (de troca). Diluição por ligação do tipo *Quenched* é quando a distribuição de probabilidade associada a variável de desordem é

$$\mathcal{P}(\eta_{ij}) = (1 - p)\delta(\eta_{ij}) + p\delta(\eta_{ij} - 1), \quad (1.25)$$

sendo p a concentração da ligação. Uma forma equivalente comumente usada é

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{J}_{ij} \cdot \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (1.26)$$

com

$$\mathcal{P}(\mathbf{J}_{ij}) = (1 - p)\delta(\mathbf{J}_{ij}) + p\delta(\mathbf{J}_{ij} - \mathbf{J}), \quad (1.27)$$

onde agora a desordem está incorporada ao parâmetro de interação de troca.

As figuras (1.4) e (1.5) ilustram os efeitos da diluição de sítios e ligações na rede quadrada.

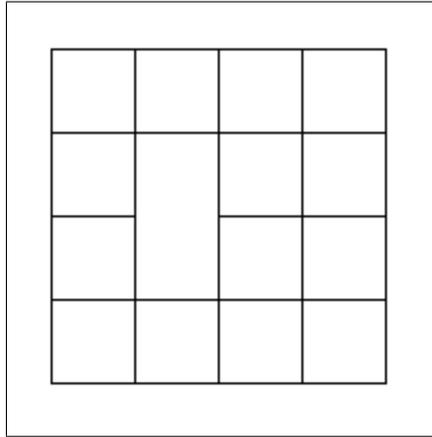


Figura 1.4: Desordem com remoção de uma ligação.

1.4 Sistemas magnéticos com interações competitivas

O estudo de sistemas magnéticos com interações competitivas surgiu inicialmente com a descoberta experimental (principalmente através da técnica de espalhamento de nêutrons) de estruturas magnéticas espacialmente moduladas, com configurações mais complexas que os casos antiferromagnéticos e ferrimagnéticos [43]-[45].

Do ponto de vista teórico, a origem dessas estruturas magnéticas moduladas está na combinação de dois efeitos contrários: cooperação e competição [45]. A cooperação tende a levar o sistema magnético, no regime de baixas temperaturas, a assumir uma configuração simples como a ferromagnética ou a antiferromagnética. Por sua vez, a competição pode surgir de várias maneiras, tais como: presença simultânea de interações ferromagnéticas (+) e antiferromagnéticas (-), aleatoriedade na distribuição espacial dos momentos magnéticos e/ou distribuição aleatória de interações de troca (em intensidade e em sinal), diluição, combinação simultânea destes mecanismos, etc.. Esses fatores podem em determinadas circunstâncias, fazer com que as configurações magnéticas simples não minimizem mais a energia do sistema, havendo a necessidade do aparecimento de

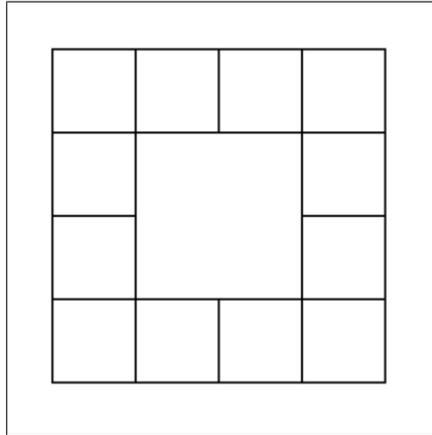


Figura 1.5: Desordem com remoção de um sítio.

estruturas moduladas, as quais podem apresentar aspectos bastante heterodoxos.

Entre esses aspectos estão o aparecimento de fases moduladas incomensuráveis com o parâmetro de rede, o surgimento de pontos multicríticos, um número muito grande de estados metaestáveis (como é o caso dos vidros de spin [46]), fases reentrantes, nas quais o sistema pode passar de uma fase desordenada para uma fase ordenada através da elevação da temperatura, fenômeno pela primeira vez observado no sal de Rochelle [47], etc.

Por trás de todas essas manifestações está um efeito, primeiramente identificado por Toulouse [48], denominado de efeito de frustração. A frustração pode ser entendida como o conflito entre dois ou mais tipos de interações experimentadas simultaneamente por alguns spins do sistema. Tal conflito torna impossível a satisfação simultânea de todas as interações e o sistema desenvolve fases moduladas, nem sempre comensuráveis com a rede, para minimizar a energia.

Na proposta inicial de Toulouse, a frustração é uma propriedade espacial de uma distribuição aleatória de interações ferromagnéticas e antiferromagnéticas do tipo (+ ou -) J . Esse conceito de frustração foi mais tarde generalizado por Anderson [49] para levar em conta a possibilidade de variação aleatória de intensidade, alcance e sinal das

interações e natureza dos spins.

Como um sistema frustrado não é capaz de atingir uma configuração que satisfaça inteiramente os seus vínculos, desenvolve uma multiplicidade de estados igualmente insatisfatórios. Por isso, um sistema frustrado apresenta metaestabilidade, com efeitos de histerese e relaxação com dependência nas histórias térmicas e magnéticas da amostra.

1.5 Modelos Decorados

Os modelos decorados de spins foram inicialmente introduzidos por Syozi [50] para determinar a temperatura de transição da rede Kagomé a partir do valor correspondente de T_c para rede honeycomb como segue na figura (1.6). Uma relação entre as funções de partição das duas redes era obtida quando o traço parcial sobre os spins de vértices da rede honeycomb decorada era tomado, gerando uma interação efetiva entre os spins decoradores, o que transformava a rede honeycomb numa rede kagomé com interações efetivas.

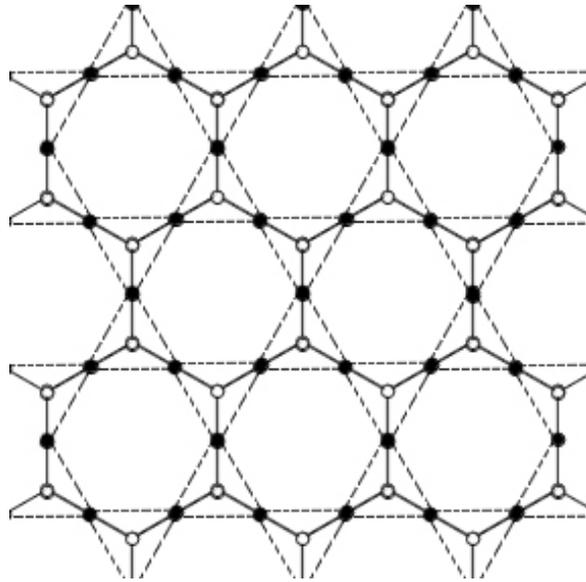


Figura 1.6: A rede Kagomé - - - construída por uma transformação estrela - triângulo a partir da rede honeycomb. O traço parcial é feito sobre os sítios (O) [51].

De um modo geral, um modelo decorado pode ser construído a partir de uma rede original qualquer (exemplo figura 1.7), sobre cujas ligações novos sítios são ocupados por outros spins (spins decoradores), (exemplo figura 1.8).

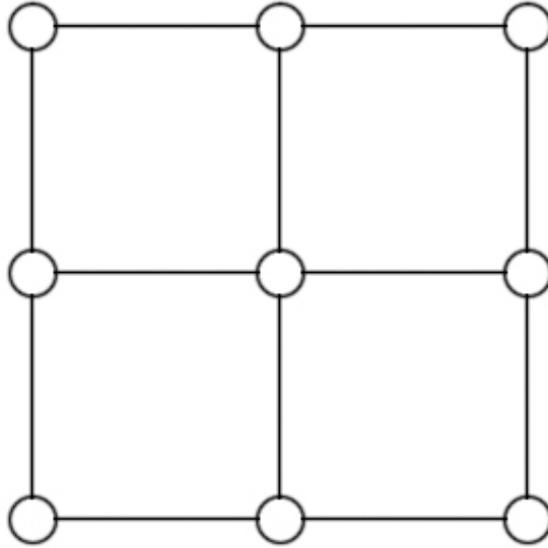


Figura 1.7: Rede original.

Em 1954, Naya [52] estendeu o método para incluir os efeitos de um campo magnético externo, conseguindo obter uma expressão para a magnetização espontânea da rede Kagomé a partir da expressão equivalente para a rede honeycomb.

Fisher [53] generalizou o que ele chamou de transformação de decoração-iteração, para o caso em que o elemento decorador é um sistema físico qualquer, com alguns graus de liberdade internos, e aplicou o método ao estudo de um sistema antiferromagnético para o qual a magnetização pode ser calculada exatamente, mesmo em presença de um campo magnético finito.

Os modelos decorados foram então largamente utilizados para estudar vários tipos de sistemas magnéticos, incluindo-se sistemas com interações competitivas. Para uma referência geral sobre modelos decorados ver [51].

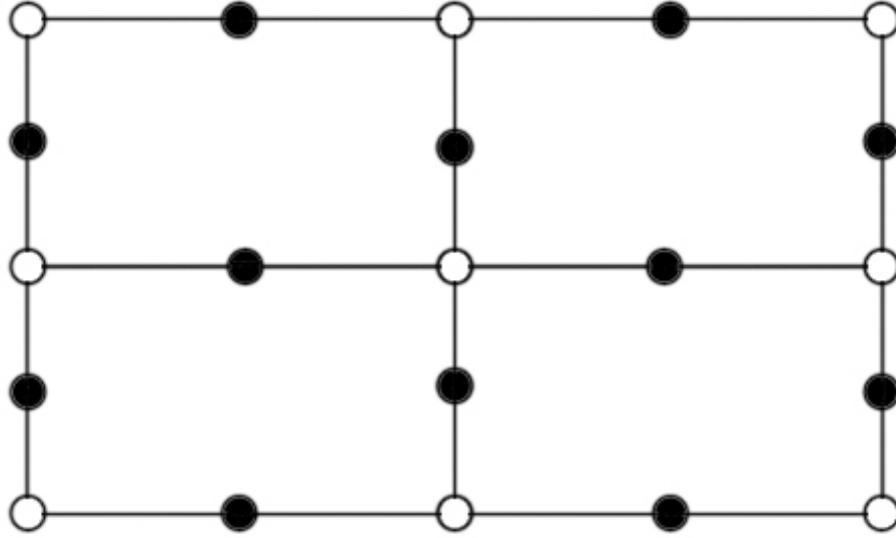


Figura 1.8: Rede Decorada. Os spins pretos são os decoradores.

1.6 Objetivo e Apresentação da Tese

O objetivo deste trabalho é descrever os efeitos de diluição e frustração nas propriedades termodinâmicas e os diagramas de fase nos modelos de Heisenberg e Ising quase-bidimensional. Para estudar o modelo de Heisenberg usaremos as funções de Green dependente de dois tempos e da temperatura. No modelo de Ising aleatoriamente decorado utilizaremos a técnica do operador diferencial unida à teoria de campo efetivo. Estes modelos simulam a fase antiferromagnética de compostos supercondutores de alta T_c do tipo $La_{2-x}(Ba, Sr)_xCu_{1-z}Zn_zO_4$ (onde Ba ou Sr são dopantes), entre outros.

No capítulo 2, com o uso das funções de Green, estudaremos o efeito da diluição e frustração no modelo de Heisenberg quase-bidimensional de spin $\frac{1}{2}$. Determinaremos o limite de estabilidade da fase antiferromagnética, apresentando os diagramas de fase para esse sistema, em função da concentração dos buracos no plano CuO_2 e da diluição do átomo de Cu pelo átomo de Zn . Simularemos o ponto de máximo do diagrama de fase no plano (T, z) previsto experimentalmente para o composto $La_{2-x}Sr_xCu_{1-z}Zn_zO_4$.

No capítulo 3, desenvolveremos a teoria de campo efetivo, aliada à técnica do operador diferencial, desenvolvida por Honmura e Kaneyoshi e a aplicaremos no modelo de Ising ferromagnético. Várias aproximações sucessivas são discutidas, mostrando a sua potencialidade e versatilidade.

No capítulo 4, desenvolveremos a técnica do operador diferencial na versão de aglomerado de um spin com aproximação de Zernike, conhecida na literatura como teoria de campo efetivo correlacionada (EFT-1, *effective field theory*), no modelo de Ising de spin $\frac{1}{2}$ antiferromagnético na presença de campo externo aleatoriamente decorado em rede quase-bidimensional. As propriedades termodinâmicas (magnetização, susceptibilidade, energia interna e calor específico) são obtidas para vários valores do campo, do parâmetro de frustração e da concentração dos buracos de oxigênio. Os diagramas de fase nos planos $H - T$, $T - p$ e $T - \alpha$ também são discutidos, analisando a linha de estabilidade entre as fases antiferromagnética (AF) e paramagnética (P), a qual é uma linha crítica de segunda ordem.

No capítulo 5, desenvolveremos a mesma técnica do capítulo 4 aplicada ao mesmo modelo acrescentando o efeito de diluição nas propriedades do sistema.

Finalmente, no capítulo 6 apresentaremos a conclusão do trabalho e nossas perspectivas para trabalhos futuros.

REFERÊNCIAS

- [1] Hase, M., Terasaki, I., Uchinokura, K., *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3651 (1993); Hase, M., Terasaki, I., Sasako, Y., Uchinokura, K., Obara, H., *Phys. Rev. Lett.* **71**, 4059 (1993); Hase, M., Terasaki, I., Uchinokura, K., Tokunaga, M., Miura, N., Obara, H., *Phys. Rev. B* **48**, 9616 (1993).
- [2] Manousakis, E., *Rev. Mod. Phys.* **63**, 1 (1991), e referências citadas.
- [3] Continentino, M. A., *Quantum Scaling in Many-Body Systems* (World Scientific, Singapore, 2001).
- [4] Bednorz, J. G., Müller, K. A., *Z. Phys. B* **64**, 188 (1986).
- [5] Barden, J., Cooper, L., Schrieffer, J. R., *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957).
- [6] Ginzburg, V. L., *Physica C* **209**, 1 (1993).
- [7] Anderson, P. W., *Science* **235**, 1196 (1993).
- [8] Emery, V. J., *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2794 (1987).
- [9] Aharony, A. et al., *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1330 (1988).
- [10] Vaknin, D., et al., *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2802 (1987).
- [11] Tranquada, J. M., et al., *Phys. Rev. Lett.* **60**, 156 (1988).
- [12] Shirane, G., et al., *Phys. Rev. Lett.* **59**, 1613 (1987)

- [13] Uemura, Y. J., *Phys. Rev. Lett.* **59**, 1045 (1987).
- [14] Nishida, N., et al., *Jpn. J. Appl. Phys.* **26**, L1856 (1987).
- [15] Kitaoka, Y., et al., *J. Phys. Soc. Japan* **57**, 734 (1988).
- [16] Worthington, T. K., Gallagher, W. J., Dinger, T. R., *Phys. Rev. Lett.* **59**, 1160 (1987).
- [17] Ding, H. Q., Makivic, M. S., *Phys. Rev. Lett.* **64**, 1449 (1990).
- [18] Mermin, N. D., Wagner, H., *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966).
- [19] Keimer, B., et al., *Phys. Rev. B* **45**, 7430 (1992)
- [20] Kastner, M. A., et al., *Phys. Rev. B* **38**, 6636 (1988).
- [21] Chakraborty, A., et al., *Phys. Rev. B* **40**, 5296 (1989).
- [22] Cheong, S. W., et al., *Phys. Rev. B* **44**, 9739 (1991).
- [23] Korenblit, I. Ya, Aharony, A., Entin-Wohlman, O., *Phys. Rev. B* **60**, R15017 (1999).
- [24] Hücker, M., et al., *Phys. Rev. B* **59**, R725 (1999).
- [25] Hücker, M., et al., *Phys. Rev. B* **65**, 214408 (2002).
- [26] Stinchcombe, R. B., *Dilute Magnetism, in: Phase Transition and Critical Phenomena*, Editores C. Domb e J. L. Lebowitz, Vol. 7, Academic Press, 1983.
- [27] Curie, P., *Chim. Phys.* **5**, 289 (1895).
- [28] Weiss, P. E., *J. Phys.* **6**, 661 (1907).
- [29] Binder, K., Kinzel, W., *J. Phys. Soc. Jpn.* **52**, 209 (1983); Walstedt, R. E., Walker, L. R., *Phys. Rev. Lett.* **47**, 1624 (1981); Morris, B. W., et al., *J. Phys. C* **19**, 1157 (1986).

- [30] Heisenberg, W. K., *J. Phys.* **49**, 619 (1928).
- [31] Frenkel, Y. , *Z. Phys.* **49**, 31 (1928).
- [32] Dorfman, Y., *Nature (London)* **119**, 353 (1928).
- [33] Aharony, A., *Ann. Israel Phys. Soc.* **2**, 13 (1978); *Ferroelectrics* **24**, 313 (1980).
- [34] Blume, M., *Phys. Rev.* **141**, 517 (1966).
- [35] Capel, H. A., *Physica* **32**, 966 (1966).
- [36] Bruno, P., *Phys. Rev. Lett.* **87**, 1372031 (2001).
- [37] Matsubara, T., Matsuda, H., *Progr. Theor. Phys.* **16**, 416 (1956).
- [38] Lieb, E. H., *Phys. Rev. Lett.* **18**, 1046 (1967); *Phys. Rev. Lett.* **19**, 108 (1967).
- [39] Kosterlitz, J. M., Thouless, D. J., *J. Phys. C* **6**, 1181 (1973). Ver também o trabalho de revisão do D. R. Nelson, *Phase Transitions and Critical Phenomena*, ed. C. Domb e J. L. Lebowitz, Vol. 7, " Defect-mediated Phase Transitions (Academic Press, 1983).
- [40] de Jongh, L. J., Miedema, A. R., *Adv. Phys.* **23**, 1 (1974).
- [41] Berker, A. N., Nelson, D. R., *Phys. Rev. B* **19**, 2488 (1979).
- [42] Brout, R., *Phys. Rev.* **115**, 824 (1959).
- [43] Yoshimori, A., *J. Phys. Soc. Japan* **14**, 807 (1959).
- [44] Nagamiya, T., Nagata, K., Kitano, Y., *Prog. Theor. Phys.* **27** **6**, 1253 (1962).
- [45] Hurd, C. M., *Contemp. Phys.* **23** **5**, 469 (1982).
- [46] Grest, G. S., Soukoulis, C. M., *Magnetic Phase Transitions - Springer Series in Solid State Sciences*, **vol. 48**, 223 (1983).

- [47] Landau, L. D., Lifshitz, E. M., *Statistical Physics* - Pergamon Press (1978).
- [48] Toulouse, G., *Comm. Phys.* **2**, 115 (1977).
- [49] Anderson, P. W., *Condensed Matter* (Amsterdam North Holland) (1979).
- [50] Syozi, I., *Prog. Theor. Phys.* **6**, 306 (1951).
- [51] Syozi, I., *Phase Transitions and Critical Phenomena - Coleção Domb e Green*, Vol.1, Cap. 7 (academic Press) (1972).
- [52] Naya, S., *Prog. Theor. Phys.* **11**, 53 (1954).
- [53] Fisher, M. E., *Phys. Rev.* **114**, 969 (1959).

Capítulo 2

Modelo de Heisenberg fenomenológico com frustração e diluição: Simulação do diagrama de fase do composto diluído



2.1 Formalismo da Função de Green de Zubarev

O método das funções de Green é proveniente da teoria de campos, onde estas são definidas como médias quânticas de operadores de campo. Sua aplicação na área da mecânica estatística é feita fazendo as médias no *ensemble* grande canônico, introduzindo assim a dependência com a temperatura do sistema e por isto é denominada de função de Green dependente de dois tempos e da temperatura. A principal diferença em relação às funções de Green usadas na teoria de campos é que, nesse caso, os valores médios são tomados com respeito ao estado fundamental ($T = 0$), enquanto na mecânica estatística tem interesse em médias no *ensemble* ($T \neq 0$). Obviamente ambas coincidem no limite

($T \rightarrow 0$).

As funções de Green representam uma técnica muito adequada na análise de sistemas de partículas interagentes. Com efeito, através das funções de Green podemos estudar vários processos, tais como: teoria de processos irreversíveis [1], estudo de ressonância ferromagnética [2], espalhamento elástico de neutrons [3], estudo do magnetismo itinerante [4], teoria da supercondutividade [5], teoria do ferromagnetismo [6], teoria do antiferromagnetismo [7] e vários outros sistemas. Nos últimos anos, o formalismo da função de Green ressurgiu na literatura na tentativa de descrever os diagramas de fases antiferromagnética dos novos supercondutores de altas temperaturas formados por planos de CuO_2 , como por exemplo: $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ (composto 1-2-3) e $La_{2-x}(Ba, Sr)_xCuO_{4-y}$ (composto 2-1-4) [8].

As funções de Green na mecânica estatística são apropriadas para o cálculo de funções de correlação e, conseqüentemente todas as grandezas termodinâmicas são obtidas para qualquer temperatura.

A função de Green definida por Zubarev [9] entre dois operadores $\hat{A}(t)$ e $\hat{B}(t')$ quaisquer é dada por

$$\begin{aligned} G_r(t, t') &= \left\langle \left\langle \hat{A}(t) \left| \hat{B}(t') \right. \right\rangle_r^{(\pm)} \right\rangle = -i\theta(t-t') \left\langle \left[\hat{A}(t), \hat{B}(t') \right]_\eta \right\rangle \\ G_a(t, t') &= \left\langle \left\langle \hat{A}(t) \left| \hat{B}(t') \right. \right\rangle_a^{(\pm)} \right\rangle = i\theta(t'-t) \left\langle \left[\hat{A}(t), \hat{B}(t') \right]_\eta \right\rangle \\ G_c(t, t') &= \left\langle \left\langle \hat{A}(t) \left| \hat{B}(t') \right. \right\rangle_c^{(\pm)} \right\rangle = i \left\langle T_\eta \hat{A}(t) \hat{B}(t') \right\rangle, \end{aligned} \quad (2.1)$$

sendo

$i) \left\langle \langle - - ; - - \rangle \right\rangle_{(k)}^{(-)}$ e $\left\langle \langle - - ; - - \rangle \right\rangle_{(k)}^{(+)}$ ($k = r, a, c$) são as representações das funções de Green com comutador e anticomutador respectivamente, do tipo: retardada ($k = r$), avançada ($k = a$) e causal ($k = c$).

$ii) \langle - - - \rangle$ é a média termodinâmica no *ensemble* grande canônico. O processo $\langle - - - \rangle$ na mecânica estatística é definido por

$$\frac{Tr \left\{ \dots e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} \right\}}{Tr(e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}})}, \quad (2.2)$$

($\beta = \frac{1}{k_B T}$), k_B é a constante de Boltzmann e T a temperatura absoluta. O operador $\hat{\mathcal{H}}$ é o Hamiltoniano generalizado, dado por

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{h} - \mu \hat{N}, \quad (2.3)$$

\hat{h} é o Hamiltoniano independente do tempo, \hat{N} o operador para o número total de partículas e μ o potencial químico.

$$\left[\hat{A}(t), \hat{B}(t') \right]_{\eta} = \hat{A}(t) \hat{B}(t') + \eta \hat{B}(t') \hat{A}(t), \quad (2.4)$$

sendo

$\eta = -1$: Função de Green com comutador (Bósons)

$\eta = 1$: Função de Green com anticomutador (Férmions).

$$\hat{T}_{\eta} \hat{A}(t) \hat{B}(t') = \theta(t - t') \hat{A}(t) \hat{B}(t') + \eta \theta(t' - t) \hat{B}(t') \hat{A}(t), \quad (2.5)$$

\hat{T} é o operador de ordenamento temporal que coloca à esquerda o operador de maior tempo, podendo haver uma mudança de sinal de η durante a inversão.

Na Eq.(2.1), $\hat{A}(t)$ e $\hat{B}(t')$ são os operadores na representação de Heisenberg, isto é,

$$\hat{A}(t) = e^{i\hat{\mathcal{H}}t} \hat{A} e^{-i\hat{\mathcal{H}}t}; \quad \hat{B}(t') = e^{i\hat{\mathcal{H}}t'} \hat{B} e^{-i\hat{\mathcal{H}}t'}; \quad \hbar \equiv 1 \quad (2.6)$$

e $\theta(t - t')$ é a função de Heaviside definida por

$$\theta(t - t') = \begin{cases} 1 & t > t' \\ 0 & t < t', \end{cases} \quad (2.7)$$

tal que,

$$\delta(t - t') = \frac{d\theta(t - t')}{dt}. \quad (2.8)$$

Observamos que das Eqs.(2.1) e (2.7), $G_r(t, t') \neq 0$ para $t > t'$, $G_r(t, t') = 0$ para $t < t'$ e $G_r(t, t')$ não está definida quando $t = t'$, por causa da descontinuidade de $\theta(t)$ em $t = 0$. O mesmo acontece com $G_a(t, t')$.

A grande diferença entre as funções de Green de Zubarev Eq.(2.1) e as de teoria quântica de campo, é que a primeira é calculada numa temperatura T finita e depende de dois tempos, e na segunda, a média é feita no estado fundamental (vácuo, $T = 0$) e depende de múltiplos tempos.

Os operadores $\hat{A}(t)$ e $\hat{B}(t')$ satisfazem a equação de evolução

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt} \hat{A}(t) &= \hat{A}(t) \hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}} \hat{A}(t) = [\hat{A}(t), \hat{\mathcal{H}}] \\ i \frac{d}{dt} \hat{B}(t') &= \hat{B}(t') \hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}} \hat{B}(t') = [\hat{B}(t'), \hat{\mathcal{H}}] \end{aligned} \quad (2.9)$$

na representação de Heisenberg.

Para determinar explicitamente as funções de Green é necessário conhecer as suas equações de movimento, que são obtidas derivando-se em relação a t as equações (2.1) e usando-se a equação de movimento de Heisenberg, dada pela Eq.(2.9). Para $G_r^{(\pm)}$ teremos

$$\frac{d}{dt} G_r^{(\pm)}(t, t') = -i \left\{ \frac{d}{dt} \theta(t - t') \left\langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')]_{\eta} \right\rangle + \theta(t - t') \left\langle \left[\frac{d}{dt} \hat{A}(t), \hat{B}(t') \right]_{\eta} \right\rangle \right\}. \quad (2.10)$$

Multiplicando por i ambos os lados da equação acima e substituindo as Eqs.(2.8) e (2.9) na Eq.(2.10) obtemos

$$i \frac{d}{dt} G_r^{(\pm)}(t, t') = \delta(t - t') \left\langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')]_{\eta} \right\rangle - i\theta(t - t') \left\langle [[\hat{A}(t), \hat{\mathcal{H}}], \hat{B}(t')]_{\eta} \right\rangle, \quad (2.11)$$

e usando a definição (2.1)

$$i \frac{d}{dt} G_r^{(\pm)}(t, t') = \delta(t - t') \left\langle \left[\widehat{A}(t), \widehat{B}(t') \right]_{\eta} \right\rangle + \left\langle \left\langle \widehat{A}^{(1)}(t) \left| \widehat{B}(t') \right. \right\rangle \right\rangle_r^{(\pm)}, \quad (2.12)$$

onde $\widehat{A}^{(p)} \equiv \left[\widehat{A}^{(p-1)}, \widehat{\mathcal{H}} \right]$, $\widehat{A}^{(0)} \equiv \widehat{A}(t)$. De forma análoga ao procedimento anterior obtemos uma equação de movimento para $G_a^{(\pm)}(t, t')$ e $G_c^{(\pm)}(t, t')$.

Desde que as funções de Green dependam somente da diferença nos tempos $\tau = t - t'$ podemos definir a transformada de Fourier das funções de Green por

$$G_{r,a,c}^{(\pm)}(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G_{r,a,c}^{(\pm)}(\tau) e^{iE\tau} d\tau, \quad (2.13)$$

e a sua inversa por

$$G_{r,a,c}^{(\pm)}(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} G_{r,a,c}^{(\pm)}(E) e^{-iE\tau} dE, \quad (2.14)$$

sendo a métrica da função delta de Dirac definida por

$$\delta(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iE\tau} dE. \quad (2.15)$$

Derivando a Eq.(2.14) com relação a variável t ficamos

$$i \frac{d}{dt} G_{r,a,c}^{(\pm)}(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} E G_{r,a,c}^{(\pm)}(E) e^{-iE\tau} dE \quad (2.16)$$

logo

$$E G_{r,a,c}^{(\pm)}(E) = \mathcal{F} \left\{ i \frac{d}{dt} G_{r,a,c}^{(\pm)}(\tau) \right\}. \quad (2.17)$$

Aplicando uma transformada de Fourier na Eq.(2.12), obtemos uma equação de movimento da função de Green $\left\langle \left\langle \widehat{A}(t) \left| \widehat{B}(t') \right. \right\rangle \right\rangle_E$ no espaço das energias dada por

$$E \left\langle \left\langle \hat{A}(t) \left| \hat{B}(t') \right. \right\rangle \right\rangle_E^{(\pm)} = \frac{1}{2\pi} \left\langle \left[\hat{A}(t), \hat{B}(t') \right]_{\eta} \right\rangle + \left\langle \left\langle \hat{A}^{(1)}(t) \left| \hat{B}(t') \right. \right\rangle \right\rangle_E^{(\pm)}. \quad (2.18)$$

Observamos da Eq.(2.18) que as equações de movimento acoplam funções de Green de ordem superior às funções de Green iniciais, isto é, elas envolvem um número maior de operadores que as do primeiro membro. Portanto, gera-se, através delas, uma cadeia infinita de equações, que geralmente não são solúveis exatamente. Esse fato decorre de que as funções de Green descrevem um sistema de muitos corpos. Esquemáticamente tem-se

$$\left\langle \left\langle \hat{A}(t) \left| \hat{B}(t') \right. \right\rangle \right\rangle_E^{(\pm)} \rightarrow \left\langle \left\langle \hat{A}^{(1)}(t) \left| \hat{B}(t') \right. \right\rangle \right\rangle_E^{(\pm)} \rightarrow \dots \left\langle \left\langle \hat{A}^{(n)}(t) \left| \hat{B}(t') \right. \right\rangle \right\rangle_E^{(\pm)} \rightarrow \dots \quad (2.19)$$

A solução do conjunto de equações da função de Green acopladas Eq.(2.19) é feita de forma aproximada "quebrando-se" a cadeia, ou seja

$$\left\langle \left\langle \hat{A}^{(n)}(t) \left| \hat{B}(t') \right. \right\rangle \right\rangle_E^{(\pm)} \simeq \sum_{l=0}^{n-1} \alpha_l \left\langle \left\langle \hat{A}^{(l)}(t) \left| \hat{B}(t') \right. \right\rangle \right\rangle_E^{(\pm)}. \quad (2.20)$$

A aproximação dada pela Eq.(2.20) é conhecida na literatura como "desacoplamento" de n-ésima ordem. Os coeficientes α_l dependem do desacoplamento adotado e dos operadores $\hat{A}^{(n)}(t)$ e $\hat{B}(t')$ escolhidos. O objetivo é calcular as funções de correlação $\left\langle \hat{A}(t) \hat{B}(t') \right\rangle$ e $\left\langle \hat{B}(t') \hat{A}(t) \right\rangle$ e conseqüentemente as grandezas termodinâmicas, que são relacionadas com a função de Green $\left\langle \left\langle \hat{A}(t) \left| \hat{B}(t') \right. \right\rangle \right\rangle$.

2.1.1 Funções de Correlação Dependentes do Tempo

Em geral, sempre trabalha-se com sistemas com muitas partículas, portanto é de grande utilidade introduzir uma função mais geral, as chamadas funções de correlação entre pares de operadores, pois essas funções podem ser obtidas das funções de Green

correspondentes.

As funções de correlação são definidas em termos dos operadores \hat{A} e \hat{B} na representação de Heisenberg como

$$F_{AB}(t, t') \equiv \langle \hat{A}(t) \hat{B}(t') \rangle \quad (2.21)$$

e

$$F_{BA}(t, t') \equiv \langle \hat{B}(t') \hat{A}(t) \rangle. \quad (2.22)$$

Para $t = t'$, a média temporal se reduz a uma simples média estatística,

$$F_{AB}(t, t') = F_{AB}(0) = \langle \hat{A}(0) \hat{B}(0) \rangle. \quad (2.23)$$

Se o Hamiltoniano é independente do tempo, e usando o fato da invariância do traço sobre as permutações cíclicas dos seus fatores, pode-se obter uma importante propriedade para as funções de correlação. Para isto, a média dos operadores $\hat{A}(t)$ e $\hat{B}(t')$ é

$$\langle \hat{A}(t) \hat{B}(t') \rangle = \frac{1}{\Xi} \text{Tr} \left\{ \hat{A}(t) \hat{B}(t') e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} \right\}, \quad (2.24)$$

sendo $\Xi = \text{Tr} e^{-\beta(\hat{\mathcal{H}} - \mu \hat{N})}$ a função grande partição do sistema.

Substituindo a Eq.(2.6) na Eq.(2.24), e aplicando a propriedade cíclica do funcional traço, obtemos

$$\begin{aligned} \langle \hat{A}(t) \hat{B}(t') \rangle &= \frac{1}{\Xi} \text{Tr} \left\{ e^{i\hat{\mathcal{H}}t} \hat{A} e^{-i\hat{\mathcal{H}}t} e^{i\hat{\mathcal{H}}t'} \hat{B} e^{-i\hat{\mathcal{H}}t'} e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} \right\} \\ \langle \hat{A}(t) \hat{B}(t') \rangle &= \frac{1}{\Xi} \text{Tr} \left\{ e^{i\hat{\mathcal{H}}(t-t')} \hat{A} e^{-i\hat{\mathcal{H}}(t-t')} \hat{B} e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} \right\}, \end{aligned}$$

e finalmente

$$\langle \hat{A}(t) \hat{B}(t') \rangle = \frac{1}{\Xi} \text{Tr} \left\{ \hat{A}(t-t') \hat{B} e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} \right\}. \quad (2.25)$$

Assim temos

$$F_{AB}(t, t') = \langle \hat{A}(t) \hat{B}(t') \rangle = \langle \hat{A}(t-t') \hat{B}(0) \rangle = F_{AB}(t-t'). \quad (2.26)$$

Analogamente

$$F_{BA}(t, t') = \langle \hat{B}(t') \hat{A}(t) \rangle = \langle \hat{B}(0) \hat{A}(t-t') \rangle = F_{BA}(t-t'). \quad (2.27)$$

As Eqs.(2.26) e (2.27) mostram que as funções de correlação (F_{AB} e F_{BA}) dependem somente da diferença ($t - t'$). Substituindo as Eqs.(2.26) e (2.27) em (2.1) vemos que as funções de Green dependem também somente da diferença de dois instantes de tempos. Esse fato ajuda na procura de uma representação espectral para essas equações, relacionando-as com a função de Green.

2.1.2 Representação Espectral

Foi apresentado, nas seções anteriores, que a função de Green e as funções de correlação dependem apenas da diferença $t - t'$. Isso é utilizado na procura de uma integral de Fourier para cada uma delas, que é chamada de representação espectral. Inicialmente estabelecemos a representação para a função de correlação, e em seguida para a função de Green, encontrando-se uma relação entre elas.

Das Funções de Correlação

Consideremos o espectro de um Hamiltoniano arbitrário, dado por

$$\hat{\mathcal{H}} |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle, \quad (2.28)$$

sendo $|\phi_n\rangle$ as autofunções de um Hamiltonino $\widehat{\mathcal{H}}$, independente do tempo e E_n seus autovalores.

Escrevendo as funções de correlação em função dos autoestados de $\widehat{\mathcal{H}}$ temos

$$F_{AB}(t-t') = \langle A(t)B(t') \rangle = \frac{1}{\Xi} \sum_n \langle \phi_n | A(t)B(t') e^{-\beta \widehat{\mathcal{H}}} | \phi_n \rangle, \quad (2.29)$$

aplicando relação de completeza, ficaremos

$$F_{AB}(t-t') = \frac{1}{\Xi} \sum_{n,m} \langle \phi_n | \widehat{A}(t) | \phi_m \rangle \langle \phi_m | \widehat{B}(t') | \phi_n \rangle e^{-\beta E_n}. \quad (2.30)$$

Utilizando a Eq.(2.6), a Eq.(2.30) pode ser reescrita da seguinte forma

$$F_{AB}(t-t') = \frac{1}{\Xi} \sum_{n,m} \langle \phi_n | \widehat{A} | \phi_m \rangle \langle \phi_m | \widehat{B} | \phi_n \rangle e^{-i(E_m-E_n)(t-t')} e^{-\beta E_n}. \quad (2.31)$$

Da mesma maneira teremos

$$F_{BA}(t-t') = \frac{1}{\Xi} \sum_{n,m} \langle \phi_n | \widehat{B} | \phi_m \rangle \langle \phi_m | \widehat{A} | \phi_n \rangle e^{-i(E_m-E_n)(t-t')} e^{-\beta E_m}. \quad (2.32)$$

A representação espectral das funções de correlação é dada por

$$F_{AB}(t-t') \equiv \langle \widehat{A}(t) \widehat{B}(t') \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) e^{\beta\omega} e^{-i\omega(t-t')} d\omega \quad (2.33)$$

e

$$F_{BA}(t-t') \equiv \langle \widehat{B}(t') \widehat{A}(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega, \quad (2.34)$$

onde a densidade espectral $J(\omega)$ é definida por

$$J(\omega) = \frac{1}{\Xi} \sum_{n,m} \langle \phi_n | \widehat{A} | \phi_m \rangle \langle \phi_m | \widehat{B} | \phi_n \rangle e^{-\beta E_m} \delta(\omega - E_m + E_n). \quad (2.35)$$

A função $J(\omega)$ é uma grandeza que está definida nos pontos de frequências tais que,

$\omega = E_m - E_n$, ou seja, nas excitações do sistema.

Das Funções de Green

Substituindo a Eq.(2.1) na transformada de Fourier Eq.(2.13) temos

$$G_r^{(\pm)}(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \theta(\tau) [F_{AB}(\tau) - \eta F_{BA}(\tau)] e^{iE\tau} d\tau \quad (2.36)$$

e

$$G_a^{(\pm)}(E) = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \theta(-\tau) [F_{AB}(\tau) - \eta F_{BA}(\tau)] e^{-iE\tau} d\tau. \quad (2.37)$$

Substituindo as Eqs.(2.33) e (2.34) nas Eqs.(2.36) e (2.37) obtemos

$$G_{r,a}^{(\pm)}(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) (e^{\beta\omega} - \eta) \int_{-\infty}^{\infty} \theta(\pm\tau) e^{\pm i(\omega-E)\tau} d\tau d\omega. \quad (2.38)$$

A função degrau de Heaviside $\theta(t)$ apresenta a seguinte representação integral

$$\theta(t) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ixt}}{x + i\varepsilon} dx \quad \varepsilon \rightarrow 0^+. \quad (2.39)$$

Substituindo essa expressão para $\theta(\tau)$ na Eq.(2.38), obtemos as representações espectrais das transformadas de Fourier das funções de Green, ou seja

$$G_r^{(\pm)}(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{J(\omega) (e^{\beta\omega} - \eta)}{E - \omega + i\varepsilon} d\omega \quad (2.40)$$

e

$$G_a^{(\pm)}(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{J(\omega) (e^{\beta\omega} - \eta)}{E - \omega - i\varepsilon} d\omega. \quad (2.41)$$

Propriedades Analíticas da Função de Green e sua Relação com a Função de Correlação

As Eqs.(2.40) e (2.41) diferem somente nos sinais do termo $i\varepsilon$. Assim considerando a energia E como uma variável complexa, podemos generalizar o resultado obtido em (2.40) e (2.41). Ambas as funções podem ser consideradas como dois ramos de uma única função $G^{(\pm)}(E)$ definida para E complexo, isto é,

$$G^{(\pm)}(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{J(\omega) (e^{\beta\omega} - \eta)}{E - \omega} d\omega, \quad (2.42)$$

onde

$$G^{(\pm)}(E) \begin{cases} G_r^{(\pm)}(E), & \text{Im } E > 0 \\ G_a^{(\pm)}(E), & \text{Im } E < 0 \end{cases}. \quad (2.43)$$

Dessa maneira podemos considerar G_r e G_a como componentes de uma mesma função E , variável e complexa, com uma singularidade no eixo real ($E = \omega$), que representará fisicamente as excitações do sistema.

A relação entre a função de Green e a função de correlação é obtida através do cálculo do salto da função de Green no eixo real, onde obtemos a função densidade espectral e portanto as funções de correlação.

Partindo da Eq.(2.42), calculamos o limite da diferença das funções de Green para ω real, ou seja,

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \{G(\omega + i\varepsilon) - G(\omega - i\varepsilon)\} &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\beta\omega'} - \eta) J(\omega') \cdot \\ &\cdot \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\{ \frac{1}{\omega - \omega' + i\varepsilon} - \frac{1}{\omega - \omega' - i\varepsilon} \right\} d\omega' \\ &= -i \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\beta\omega'} - \eta) J(\omega') \delta(\omega' - \omega) d\omega' \quad (2.44) \\ &= -i (e^{\beta\omega} - \eta) J(\omega), \end{aligned}$$

onde usamos na equação acima a representação da função delta de Dirac

$$2\pi i\delta(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\frac{1}{x - i\varepsilon} - \frac{1}{x + i\varepsilon} \right). \quad (2.45)$$

Da Eq.(2.44), obtemos

$$J(\omega) = \frac{i}{e^{\beta\omega} - \eta} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \{G^{(\pm)}(\omega + i\varepsilon) - G^{(\pm)}(\omega - i\varepsilon)\}. \quad (2.46)$$

Substituindo a Eq.(2.46) nas Eqs.(2.33) e (2.34), teremos

$$F_{AB}(t - t') = i \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\beta\omega}}{e^{\beta\omega} - \eta} \{G^{(\pm)}(\omega + i\varepsilon) - G^{(\pm)}(\omega - i\varepsilon)\} e^{-i\omega(t-t')} d\omega \quad (2.47)$$

e

$$F_{BA}(t - t') = i \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta\omega} - \eta} \{G^{(\pm)}(\omega + i\varepsilon) - G^{(\pm)}(\omega - i\varepsilon)\} e^{-i\omega(t-t')} d\omega. \quad (2.48)$$

Assim o conhecimento da função de Green permite obter a função de correlação e através dela as grandezas termodinâmicas.

2.2 Modelo de Heisenberg Antiferromagnético Anisotrópico

2.2.1 Considerações Gerais

Desde que foi proposto o modelo de Heisenberg em 1925, este tem sido extensivamente usado para descrever as propriedades físicas relevantes dos compostos magnéticos isolantes. Com a descoberta dos supercondutores em altas temperaturas, esse modelo tem sido revisitado na literatura para explicar as propriedades magnéticas nos compos-

tos formados por planos de CuO_2 , como por exemplo, o composto isolante La_2CuO_4 que, ao ser dopado com Ba ou Sr , torna-se um supercondutor em altas temperaturas. Além do composto já mencionado, citamos o $YBa_3Cu_3O_{7-x}$. Esses compostos têm sido estudado experimentalmente e é observado um fraco acoplamento entre os planos de CuO_2 [10, 11]. São compostos com alta anisotropia, havendo um forte acoplamento entre íons pertencentes ao mesmo plano de CuO_2 e um fraco acoplamento entre os planos. Em baixas temperaturas, as flutuações quânticas antiferromagnéticas são relevantes comparadas com as térmicas.

Na física, a procura de solução exata para sistemas de muitos corpos interagentes é intensa, porém é grande a dificuldade para se obter tal solução para um sistema que tem em seu constituinte um número de partículas N da ordem 10^{23} (número de Avogadro). Por isso é crescente na literatura o desenvolvimento de métodos aproximativos como alternativa para obtermos informações quantitativas e qualitativas do modelo escolhido. Lembremos que, para explicar o problema do fenômeno da supercondutividade em baixas temperaturas ($T_c \leq 20K$), por exemplo, foi utilizada a aproximação de campo médio-teoria BCS (conferindo o Prêmio Nobel aos físicos J. Bardeen, L. Cooper e R. Schrieffer [12]). No caso dos novos supercondutores em altas temperaturas ($T_c \geq 30K$), como $La_{2-x}Ba_xCuO_4$ (descoberto em 1986 pelos físicos K. A. Müller e G. Bednorz [13], aos quais foi conferido o Prêmio Nobel de 1987), o problema está ainda em aberto na física da matéria condensada, necessitando de uma teoria microscópica precisa, porque a teoria BCS não consegue explicar todas as propriedades destes novos compostos supercondutores.

Em 1988, Aharony e colaboradores [14] propuseram um modelo para explicar as propriedades dos novos supercondutores em altas temperaturas. Nesse modelo, consideraram que a formação dos pares de Cooper [12] está associada ao efeito de frustração magnética na ligação $Cu - O - Cu$ nos planos de CuO_2 , o que, efetivamente, torna as interações entre os cobres fortemente ferromagnética, causando assim uma ligação coerente necessária para explicar qualitativamente o processo da corrente supercondutora. Assumiram uma

distribuição *quenched* das ligações ferromagnéticas numa rede quadrada antiferromagnética, e mostraram que as ligações frustradas têm uma tendência de se atraírem para minimizar a energia, competindo com a repulsão coulombiana associada aos buracos, que se opõem a aproximação das ligações frustradas. Entretanto, a adoção de uma distribuição *quenched* para as ligações ferromagnéticas (associadas aos buracos, ou aos íons de O^{-2}), não é compatível com a necessária mobilidade dos portadores de carga na fase supercondutora. Do ponto de vista qualitativo, este modelo frustrado é capaz de explicar a extinção da fase antiferromagnética (isolante) presente nestes compostos formados por planos de CuO_2 , como, por exemplo, $La_{2-x}(Ba, Sr)_xCuO_4$, $YBa_3Cu_3O_{7-x}$.

Anos atrás, Hücker e colaboradores [15] estudaram o efeito da diluição no diagrama de fase do composto $La_{2-x}Sr_xCu_{1-z}Zn_zO_4$ e observaram resultados surpreendentes (ver Fig. 2.1): i) a presença da impureza Zn afeta a concentração crítica de buracos de oxigênio, introduzida pelo elemento alcalino Sr . Numa amostra de concentração de $z = 15\%$, a concentração crítica x_c de buracos é aproximadamente 3% , isto é, maior do que o sistema puro ($z = 0$) que é $x_c = 2\%$; ii) no plano T versus z e para $x = 0.017$, a temperatura de Néel tem um ponto de máximo. Estudos de grupo de renormalização (modelo sigma não linear) [16] têm mostrado a sensibilidade do ponto de máximo (item ii) com a concentração x , porém o item i), que mostra $x_c(z) > x_c(z = 0)$, não foi esclarecido teoricamente.

Neste capítulo descrevemos o diagrama de fase do composto antiferromagnético La_2CuO_4 sob o efeito de dopagem com o elemento alcalino Sr (efeito de frustração) e substituição pelo íon não magnético Zn (efeito de diluição), e para isto usamos um modelo de Heisenberg fenomenológico que incorpora os efeitos da frustração e diluição.

Para estudar as propriedades magnéticas desses materiais, utilizamos o modelo de Heisenberg antiferromagnético anisotrópico com $S = \frac{1}{2}$. Generalizamos a aproximação de duas subredes para o desenvolvimento dado ao tratamento de antiferromagnetos por Hewson e ter Haar [7] e usamos o formalismo da função de Green dependente da temperatura e dois tempos na aproximação RPA (*random phase approximation*) [17].

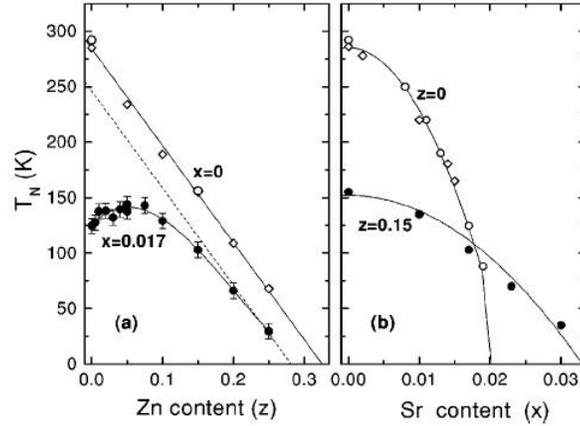


Figura 2.1: (a) T_N versus concentração de Zn com $x = 0.017$ (\bullet) e $x = 0$ (\circ, \diamond). (b) T_N versus concentração de Sr com $z = 0.15$ (\bullet) e $z = 0$ (\circ, \diamond). A linha tracejada em (a) representa uma extrapolação da parte linear da curva $T_N(x = 0.017, z)$ versus z .

Modelo e Formalismo

O modelo estudado nesta tese para descrever o diagrama de fase (fase isolante AF) desses compostos supercondutores consiste de um hamiltoniano de Heisenberg de spin $\frac{1}{2}$ antiferromagnético (AF), onde a combinação do efeito da frustração é simulado pelo valor de $\lambda = \lambda_o(1 - x/x_c)$, medindo a interação entre os planos de CuO_2 . O efeito da diluição, que está presente no plano xy , é teoricamente descrito fenomenologicamente para pequeno valor de z através de uma interação efetiva $J(1 - z)$ (aproximação tipo campo médio).

O Hamiltoniano para esse modelo é descrito pela seguinte expressão

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (2.49)$$

onde o operador \vec{S}_i é o spin localizado no sítio i da rede em unidades de \hbar . A soma se estende sobre todos os pares de spins localizados nos sítios i e j da rede. J_{ij} é o parâmetro de troca entre os spins de primeiros vizinhos, que vale J_{\parallel} e $J_{\perp} = \lambda J_{\parallel}$ quando

$(i, j) \in xy$ e $(i, j) \in z$, respectivamente. Dividimos os sítios da rede em duas subredes (A, B) interpenetrantes, onde uma subrede tem todos os spins para cima (direção do eixo z positiva) e a média dos spins é $m_a = \langle S_a^z \rangle$, enquanto que a outra subrede tem todos os spins orientados para baixo (direção z negativa) com a média dos spins $m_b = \langle S_b^z \rangle$. Aqui $\langle S_i^z \rangle$ é o valor médio do operador S_i^z .

Definindo os operadores de spin de levantamento e abaixamento por

$$S_i^\pm = S_i^x \pm iS_i^y, \quad (2.50)$$

e lembrando das equações de comutação entre os operadores de spin

$$[S_i^+, S_j^-] = 2S_i^z \delta_{ij} \quad \text{e} \quad [S_i^\pm, S_j^z] = \mp S_i^\pm \delta_{ij}, \quad (2.51)$$

o Hamiltoniano da Eq.(2.49) é reescrito na forma

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i, j \rangle} J_{ij} \left[\frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + S_i^z S_j^z \right]. \quad (2.52)$$

O valor médio de $S_{i\mu}^z$ pode ser expresso em termos dos operadores $S_{i\mu}^\pm$ para o caso de spin $\frac{1}{2}$ por

$$\langle S_{i\mu}^z \rangle = \frac{1}{2} - \langle S_{i\mu}^- S_{i\mu}^+ \rangle, \quad (2.53)$$

onde o valor médio $\langle S_i^- S_i^+ \rangle$ pode ser obtido pelo método da função de Green dependente de dois tempos e da temperatura [9] descrita na seção anterior e $\mu = a, b$ representa a subrede.

A função de correlação que interessa calcular é $\langle S_{la}^- S_{ga}^+ \rangle$ e, portanto, necessitamos da função de Green $\langle \langle S_{ga}^+ | S_{la}^- \rangle \rangle_E$. Entretanto, a equação dessa função de Green para o Hamiltoniano de Heisenberg anisotrópico ficará acoplada com a função de Green $\langle \langle S_{gb}^+ | S_{la}^- \rangle \rangle_E$. Assim sendo, será necessário definir duas funções de Green:

$$G_{gl}^{aa}(E) \equiv \langle \langle S_{ga}^+ | S_{la}^- \rangle \rangle_E \quad (2.54)$$

e

$$G_{gl}^{ba}(E) \equiv \langle \langle S_{gb}^+ | S_{la}^- \rangle \rangle_E. \quad (2.55)$$

A transformada de Fourier temporal da equação de movimento da função de Green $G_{gl}^{aa}(E)$ é escrita na forma

$$E \langle \langle S_{ga}^+ | S_{la}^- \rangle \rangle_E = \frac{1}{2\pi} \langle [S_{ga}^+, S_{la}^-] \rangle + \langle \langle [S_{ga}^+, \mathcal{H}] | S_{la}^- \rangle \rangle_E. \quad (2.56)$$

Substituindo as Eqs.(2.51) e (2.52) na Eq.(2.56) temos

$$EG_{gl}^{aa} = \frac{\delta_{gl}}{\pi} \langle S_{ga}^z \rangle + \sum_{\vec{j}-\vec{g}} J_{jg} \left\{ \langle \langle S_{ga}^z S_{(\vec{g}+\vec{\delta})b}^+ | S_{la}^- \rangle \rangle - \langle \langle S_{ga}^+ S_{(\vec{g}+\vec{\delta})b}^z | S_{la}^- \rangle \rangle \right\} \quad (2.57)$$

onde l e g são dois sítios da rede. Utilizando procedimento análogo ao da Eq.(2.57), a equação de movimento para a função de Green G_{gl}^{ba} será

$$EG_{gl}^{ba} = \sum_{\vec{j}-\vec{g}} J_{jg} \left\{ \langle \langle S_{(\vec{g}+\vec{\delta})a}^+ S_{gb}^z | S_{la}^- \rangle \rangle - \langle \langle S_{(\vec{g}+\vec{\delta})a}^z S_{gb}^+ | S_{la}^- \rangle \rangle \right\}. \quad (2.58)$$

As Eqs.(2.57) e (2.58) são exatas e representam um sistema de equações acopladas. O termo do lado direito destas equações apresenta funções de Green de ordem superior, portanto, devemos introduzir uma aproximação para baixar a ordem das funções (desacoplá-las) e assim torná-las solúveis.

Nas últimas décadas, um grande número de sofisticadas aproximações foram usadas no magnetismo. A aproximação mais simples foi proposta por Bogolyubov e Tyablikov [17] para o caso de spin $\frac{1}{2}$, a chamada Aproximação de Fases Aleatórias (RPA - *random-phase approximation*). A RPA consiste em desprezar as correlações entre o operador

S^z em um sítio da rede, e os operadores S^+ e S^- em outro sítio da mesma rede. Essa aproximação faz com que os produtos de operadores sejam fatorados, ou seja, possam ser escritos como

$$\langle\langle S_i^z S_j^+ | S_l^- \rangle\rangle \cong \langle S_i^z \rangle \langle\langle S_j^+ | S_l^- \rangle\rangle. \quad (2.59)$$

Substituindo o desacoplamento (2.59) nas Eqs.(2.57) e (2.58), ficaremos

$$EG_{gl}^{aa} = \frac{\delta_{gl}}{\pi} \langle S_{ga}^z \rangle + \sum_{\vec{j}-\vec{g}} J_{jg} \left\{ \langle S_{ga}^z \rangle \langle\langle S_{(\vec{g}+\vec{\delta})b}^+ | S_{la}^- \rangle\rangle - \langle S_{(\vec{g}+\vec{\delta})b}^z \rangle \langle\langle S_{ga}^+ | S_{la}^- \rangle\rangle \right\} \quad (2.60)$$

e

$$EG_{gl}^{ba} = \sum_{\vec{j}-\vec{g}} J_{jg} \left\{ \langle S_{gb}^z \rangle \langle\langle S_{(\vec{g}+\vec{\delta})a}^+ | S_{la}^- \rangle\rangle - \langle S_{(\vec{g}+\vec{\delta})a}^z \rangle \langle\langle S_{gb}^+ | S_{la}^- \rangle\rangle \right\}. \quad (2.61)$$

As Eqs.(2.60) e (2.61) são aproximações das Eqs.(2.57) e (2.58), porém formam um conjunto fechado de equações que são agora solúveis. As funções de Green são todas de primeira ordem, mas ainda acopladas a diferentes sítios da rede devido à interação de troca, refletindo a natureza coletiva das excitações dos spins. Assumindo que as duas subredes têm simetria de translação, definimos as seguintes transformadas de Fourier no espaço dos momentos para as funções de Green

$$G_{\vec{k}}^{\mu a} = \frac{2}{N} \sum_{\vec{g}-\vec{l}=\vec{\delta}} G_{gl}^{\mu a} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{\delta}} \quad (2.62)$$

onde $\mu = a, b$. Finalmente, podemos representar a função delta de Kronecker do seguinte modo

$$\delta_{gl} = \frac{2}{N} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{g} - \vec{l})}. \quad (2.63)$$

Nas Eqs.(2.62) e (2.63) N é o número total de spins na rede e \vec{k} é o vetor da rede recíproca que se desloca sobre a primeira zona de Brillouin. Dessa forma, as equações de movimento para as funções de Green, Eqs.(2.60) e (2.61), no espaço dos momentos ficarão reescritas nas formas

$$EG_{\vec{k}}^{aa} = \frac{m_a}{\pi} + m_a J_{\vec{k}} G_{\vec{k}}^{ba} - m_b J_0 G_{\vec{k}}^{aa}, \quad (2.64)$$

e

$$EG_{\vec{k}}^{ba} = m_b J_{\vec{k}} G_{\vec{k}}^{aa} - m_a J_0 G_{\vec{k}}^{ba}, \quad (2.65)$$

sendo

$$J_{\vec{k}} = \sum_{\vec{j} - \vec{g} = \vec{\delta}} J_{jg} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{j} - \vec{g})} = \sum_{\vec{\delta} \in x,y} J_{\parallel} e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}} + \sum_{\vec{\delta} \in z} J_{\perp} e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}}, \quad (2.66)$$

e

$$J_0 = \sum_{\vec{j} - \vec{g} = \vec{\delta}} J_{jg} = \sum_{\vec{\delta} \parallel x,y} J_{\parallel} + \sum_{\vec{\delta} \parallel z} J_{\perp}, \quad (2.67)$$

onde J_{\parallel} e J_{\perp} são os acoplamentos nos planos de CuO_2 e perpendicular aos planos de CuO_2 , respectivamente.

Resolvendo o sistema das Eqs.(2.64) e (2.65), obtemos

$$2\pi G_{\vec{k}}^{aa} = m_a \left(\frac{1}{E - E_{1\vec{k}}} + \frac{1}{E - E_{2\vec{k}}} \right) + \frac{m_a(m_a - m_b)J_0}{2\Delta E_{\vec{k}}} \left(\frac{1}{E - E_{1\vec{k}}} - \frac{1}{E - E_{2\vec{k}}} \right) \quad (2.68)$$

sendo

$$E_{1,2\vec{k}} \equiv -\frac{1}{2}(m_a + m_b) J_0 \pm \sqrt{[(m_a - m_b)/2]^2 J_0^2 + J_k^2 m_a m_b}. \quad (2.69)$$

A função de correlação está relacionada com a função de Green através da seguinte expressão

$$\langle B(t') A(t) \rangle = i \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{\left[\exp\left(\frac{E}{k_B T}\right) - 1 \right] \{ [\exp -E(t-t')]^{-1} \}} \left[\langle \langle A(t) | B(t') \rangle \rangle_{E+i\varepsilon} - \langle \langle A(t) | B(t') \rangle \rangle_{E-i\varepsilon} \right]. \quad (2.70)$$

Substituindo as Eqs.(2.62) e (2.68) na Eq.(2.70) com $\vec{l} = \vec{g}$ e $t = t'$, teremos

$$\langle S_{la}^- S_{ga}^+ \rangle = \frac{2m_a}{N} \sum_{\vec{k}} \left\{ [n(E_{1\vec{k}}) + n(E_{2\vec{k}})] + \frac{(m_a - m_b) J_0}{\Delta E_{\vec{k}}} [n(E_{1\vec{k}}) - n(E_{2\vec{k}})] \right\}, \quad (2.71)$$

sendo

$$\Delta E_{\vec{k}} = E_{1\vec{k}} - E_{2\vec{k}} = 2\sqrt{[(m_a - m_b)/2]^2 J_0^2 + J_k^2 m_a m_b} \quad (2.72)$$

e $n(x) = [\exp(x/k_B T) - 1]^{-1}$ é a função de distribuição de Bose.

A quantidade termodinâmica de interesse é $m_a(T)$, (magnetização da subrede a), pois com ela podemos determinar a temperatura de Néel T_N quando $m_a \rightarrow 0$ ($m_b = -m_a$). Portanto, para obtê-la basta utilizar o resultado da Eq.(2.71) na Eq.(2.53). Dessa forma, a magnetização da subrede a será dada por

$$m_a = \frac{1}{2} (1 + \Phi)^{-1}, \quad (2.73)$$

sendo

$$\Phi = \frac{2}{N} \sum_{\vec{k}} \left\{ [n(E_{1\vec{k}}) + n(E_{2\vec{k}})] + \frac{(m_a - m_b) J_0}{\Delta E_{\vec{k}}} [n(E_{1\vec{k}}) - n(E_{2\vec{k}})] \right\}. \quad (2.74)$$

A dependência de m_a em T está implícita na Eq.(2.74), e sua solução é obtida de forma autoconsistente, pois Φ é uma função também de m_a .

O resultado da Eq.(2.73) é geral para os casos ferromagnético e antiferromagnético. Para o caso ferromagnético temos $m_a = m_b = m_F$ (com $J \rightarrow -J$), dessa forma a Eq.(2.73) torna-se

$$m_F = \frac{1}{2} (1 + \Phi_F)^{-1}, \quad (2.75)$$

com

$$\Phi_F = \frac{2}{N} \sum_{\vec{k}} [n(E_{1\vec{k}}^F) + n(E_{2\vec{k}}^F)], \quad (2.76)$$

sendo

$$E_{1,2\vec{k}}^F = m (J_0 \mp J_{\vec{k}}). \quad (2.77)$$

Para o caso antiferromagnético temos $m_a = -m_b = m_{AF}$, assim

$$m_{AF} = \frac{1}{2} (1 + \Phi_{AF})^{-1}, \quad (2.78)$$

com

$$\Phi_{AF} = \frac{2}{N} \sum_{\vec{k}} \left[\frac{J_0}{\omega_{\vec{k}}} \coth \left(\frac{m_{AF} \omega_{\vec{k}}}{2k_B T} \right) - 1 \right] \quad (2.79)$$

e

$$\omega_{\vec{k}} = \sqrt{J_0^2 - J_k^2}. \quad (2.80)$$

As temperaturas críticas (T_c) e (T_N) indicam o limite em que a magnetização vai a zero ($m \rightarrow 0$). Portanto, $\Phi(T)$ é muito grande ($1 \ll \Phi(T)$), e assim através de uma expansão em m determinamos uma expressão para (T_c) e (T_N). Dessa forma, das Eqs.(2.75) e (2.78) obtemos

$$T_c = T_N = \frac{1}{8k_B} \left[\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{J_0}{(J_0^2 - J_k^2)} \right]^{-1} \quad (2.81)$$

Da Eq.(2.81) observamos que a temperatura de Curie (T_c) é igual a temperatura de Néel (T_N), resultado este inconsistente com previsões de grupo de renormalização [19] e simulação de Monte Carlo [20], que predizem $T_N > T_c$. Por outro lado, esta inconsistência não tem inviabilizado a utilização deste formalismo para tratar o modelo de Heisenberg AF [21]. A partir das Eqs.(2.78) e (2.81) podemos simular o comportamento da magnetização e da temperatura de Néel para o composto $La_{2-x}Sr_xCu_{1-z}Zn_zO_4$, considerando o acoplamento de interação dos spins de Cu , J_{\parallel} nos planos de CuO_2 , com ênfase na mudança necessária para incluir as vacâncias dos íons de zinco.

Considerando que, no acoplamento J_{\parallel} só está presente a diluição dos íons de cobre pelos íons de zinco. Dessa forma, os acoplamentos J_{\parallel} e J_{\perp} assumem as seguintes formas:

$$J_{\parallel} = J(1 - z) \quad \text{e} \quad J_{\perp} = J\lambda, \quad (2.82)$$

com $\lambda = \lambda_0 \left(1 - \frac{x}{x_c}\right)$. Fisicamente, a razão de assumirmos fenomenologicamente esta dependência linear para λ é atribuído [21] ao fato de que na concentração crítica x_c , onde a fase AF é destruída e a fase supercondutora aparece, com característica marcante de condução elétrica apenas no plano, e, portanto, é razoável assumir $\lambda = 0$ para $x > x_c$.

No caso do plano, para pequena diluição (z), a aproximação do cristal virtual (ou campo médio) assume a dependência linear para a interação J_{\parallel} .

Para uma rede cúbica simples, as Eqs.(2.66) e (2.67) com o uso da Eq.(2.82) ficará

$$J_0 = 4J(1 - z) + 2J\lambda_0 \left(1 - \frac{x}{x_c}\right) \quad (2.83)$$

e

$$J_{\vec{k}} = 2J(1 - z)(\cos k_x a + \cos k_y a) + 2\lambda J \cos k_z a, \quad (2.84)$$

sendo a o parâmetro da rede, x a concentração dos buracos no plano CuO_2 e z a diluição do átomo de Cu pelo átomo de Zn .

Substituindo as Eqs.(2.83) e (2.84) na Eq.(2.81), encontramos

$$T_N = \frac{1}{8k_B} \left[\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{4J(1 - z) + 2J\lambda}{[4J(1 - z) + 2J\lambda]^2 - [2J(1 - z)(\cos k_x a + \cos k_y a) + 2\lambda J \cos k_z a]^2} \right]^{-1}. \quad (2.85)$$

No limite termodinâmico, mudamos o somatório sobre \vec{k} numa integração $3d$ na 1^a zona de Brillouin. Assim, a Eq.(2.85) torna-se

$$T_N = \frac{J_{\parallel}}{2k_B I(r)}, \quad (2.86)$$

onde $I(r)$ é dado por

$$I(r) = \frac{V}{16\pi^3} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk_x \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk_y \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{2(2 + r)dk_z}{(2 + r)^2 - (\cos k_x a + \cos k_y a + r \cos k_z a)^2}, \quad (2.87)$$

sendo, $r = \frac{J_{\perp}}{J_{\parallel}} = \frac{\lambda_0(1 - \frac{x}{x_c})}{(1 - z)} = r_0 \left(1 - \frac{x}{x_c}\right)$ e $V = a^3$ o volume da célula unitária. A concentração crítica é dada por $x_c \approx \frac{0.019}{(1 - z)^2}$ [16].

Fatorando a Eq.(2.87) em duas partes e observando que os termos dão a mesma contribuição para $I(r)$, desta forma a equação para $I(r)$ se reduz a seguinte forma:

$$I(r) = \frac{V}{\pi^3} \int_0^{\frac{\pi}{a}} dk_x \int_0^{\frac{\pi}{a}} dk_y \int_0^{\frac{\pi}{a}} \frac{dk_z}{(2 - \cos k_x a + \cos k_y a) + r(1 - \cos k_z a)}. \quad (2.88)$$

Fazendo a substituição $u = k_x a$, $v = k_y a$, $\varpi = k_z a$ e integrando inicialmente em ϖ encontramos

$$I(r) = \frac{1}{\pi^2} \int_0^{\pi} du \int_0^{\pi} \frac{dv}{\sqrt{(2 - \cos u - \cos v)}\sqrt{2 - \cos u - \cos v + 2r}}. \quad (2.89)$$

Realizando a integração na Eq.(2.89) em v temos

$$I(r) = \int_0^{\pi} F(u, r) K(u, r) du, \quad (2.90)$$

onde F e K são dados por

$$F(u, r) = \frac{2}{\sqrt{(1 - \cos u + 2r)(3 - \cos u)}} \quad (2.91)$$

e

$$K(u, r) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\theta}{\sqrt{1 - \alpha \sin^2 \theta}}, \quad (2.92)$$

sendo

$$\alpha = \frac{4r}{(1 - \cos u + r)(3 - \cos u)}. \quad (2.93)$$

Para valores pequenos de r , K torna-se igual a um valor constante de $\frac{\pi}{2}$, e a contribuição para a integração vinda de um u pequeno. Com a ajuda de cálculo numérico encontra-se que $I(r)$ é proporcional a $\ln(1/r)$ [21]. Incorporando essa dependência de $I(r)$ na Eq.(2.86) encontra-se que a temperatura de Néel depende inversamente de $\ln(1/r)$. Notamos que no limite de $r \rightarrow 0$ obtemos o resultado exato de Mermin-Wagner [18], ou seja, a temperatura de Néel tende a zero para a rede $2d$. Dessa forma, a tempe-

ratura de Néel para $r \rightarrow 0$ será

$$T_N = \frac{J(1-z)}{2k_B [0.1616 \ln(\frac{1}{r}) + 0.5055]}. \quad (2.94)$$

Magnetização

No limite termodinâmico mudamos o somatório sobre \vec{k} em uma integração $3d$ na 1^a zona de Brillouin, cujo volume corresponde a $\frac{N}{2}$ valores de k na Eq.(2.79). Dessa forma, temos

$$\Phi = \frac{V}{8\pi^3} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk_x \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk_y \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk_z \left[\frac{J_0}{\omega_{\vec{k}}} \coth \left(\frac{m\omega_{\vec{k}}}{2k_B T} \right) - 1 \right]. \quad (2.95)$$

A magnetização, Eq.(2.78), será calculada numericamente utilizando a Eq.(2.95). O parâmetro usado no cálculo numérico é $r_0 = 1 \times 10^{-4}$. A magnetização em $T = 0$ é aproximadamente $M(0) = 0.35$, valor quase invariante com a variação da diluição e da concentração dos buracos de oxigênio. Sendo a transição de fase de 2^a ordem, observamos claramente o decréscimo da magnetização a medida que a temperatura aumenta se anulando continuamente em $T = T_N$. Outro fato observado é a diminuição de T_N com o aumento da diluição, ao se manter constante e igual a zero a concentração dos buracos de oxigênio x conforme mostra a Fig.(2.2). Comportamento semelhante para a temperatura T_N foi observado ao se manter $z = 0$, e variando a concentração dos buracos x como mostra a Fig.(2.3).

Para valores da diluição e da concentração dos buracos de oxigênio diferentes de zero, encontramos que o efeito na diminuição na temperatura de Néel com o aumento da concentração (diluição) ao manter a diluição (concentração) constante e diferente de zero é ainda maior Figs.((2.4) e (2.5)) mantendo o mesmo comportamento qualitativo para a magnetização da subrede a .

Podemos observar qualitativamente uma maior dependência de $M(0)$ e de T_N com a concentração dos buracos de oxigênio, como citado na literatura das medidas experimentais [21].

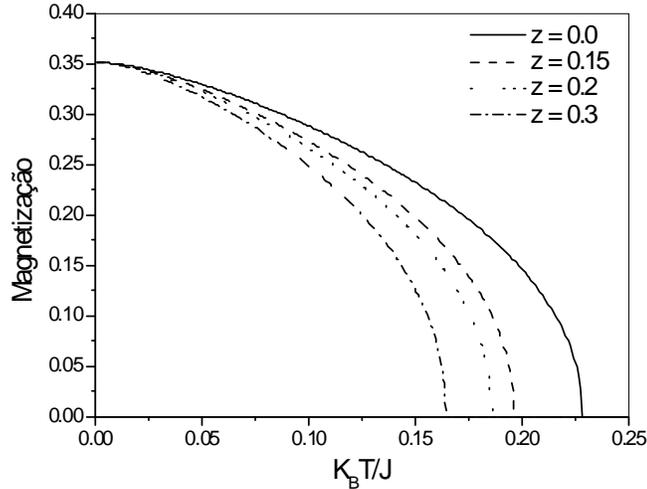


Figura 2.2: Comportamento da magnetização em função da temperatura reduzida. Considerando a concentração dos buracos $x = 0$ e para diferentes valores da diluição.

Diagrama de Fase

Da Eq.(2.94) estudamos a dependência da temperatura de Néel com as concentrações x e z . Para $z = 0$, apenas o efeito da frustração está presente e a ordem AF é destruída em $x = x_c$ e o sistema torna-se bidimensional, que segundo o teorema de Mermin e Wagner [18], o modelo com simetria contínua não apresenta ordem de longo alcance (i.e., $T_N = 0$). Esses resultados estão em boa concordância qualitativa com as medidas experimentais do composto $La_{2-x}Sr_xCuO_4$, conforme foi mostrado por Singh e colaboradores [21].

Por outro lado, o efeito da substituição do átomo magnético Cu pelo íon não-magnético Zn influencia no valor da concentração crítica x_c , que aumenta com o crescimento da concentração z do íon não magnético Zn . Por exemplo, para $z = 0.15$ a concentração crítica x_c para o composto $2 - 1 - 4$ é aproximadamente 0.026, um pouco maior que o caso puro $x_c(z = 0) = 0.019$. Na Fig.(2.6) mostramos a dependência de T_N como função da concentração de buracos de oxigênio, x , para os casos $q = 0$ e $q = 0.15$. Temos que, $x_c(z = 0) < x_c(z = 0.15)$ em concordância com os resultados experimentais [15], onde

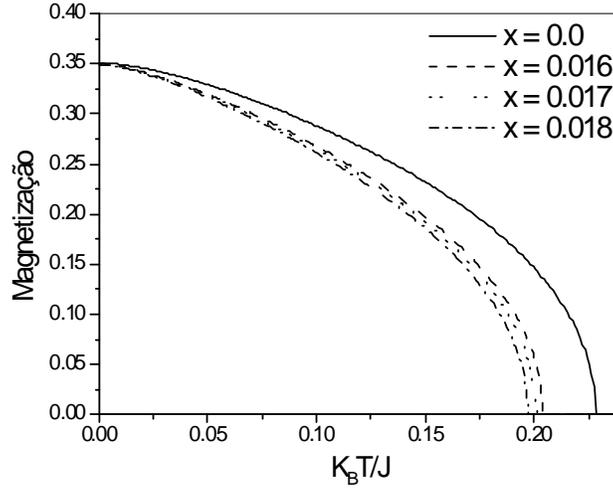


Figura 2.3: Comportamento da magnetização em função da temperatura reduzida. Considerando a diluição $z = 0$ e para diferentes valores da concentração dos buracos de oxigênio.

observamos que $T_N(x)$ decresce monotonicamente com o aumento da concentração x e tende a zero em $x_c(z)$. Outro resultado obtido desse modelo fenomenológico, é a dependência de T_N com a concentração de íons de zinco (z). Na Fig.(2.7) apresentamos T_N em função de z para os valores $x = 0$, $x = 0.016$, $x = 0.017$ e $x = 0.018$. Para $x = 0$, observamos o bem conhecido decréscimo linear com o aumento da diluição z característico de uma aproximação de campo médio. Também, em $x = 0.018$ a temperatura de Néel tem um máximo em função de z , implicando uma transição reentrante e a diminuição do estado AF é observado. Fazendo uma comparação entre os resultados experimentais [15] com os resultados numéricos da temperatura de Néel em função de x e de z , observamos que, em $z = 0.15$ a concentração crítica, $x_c \approx 0.026$, é inferior ao valor experimental ($x_c \approx 0.03$). Essa discrepância pode resultar de várias fontes. Por exemplo, a diluição pode ser afetada pela energia "exchange", J , com o vizinho mais próximo no plano, mais fortemente que a interação interplanar ou de anisotropia. Isso implica que r_0 aumenta com z . O ponto de máximo no cálculo numérico foi observado em $x = 0.018$, enquanto

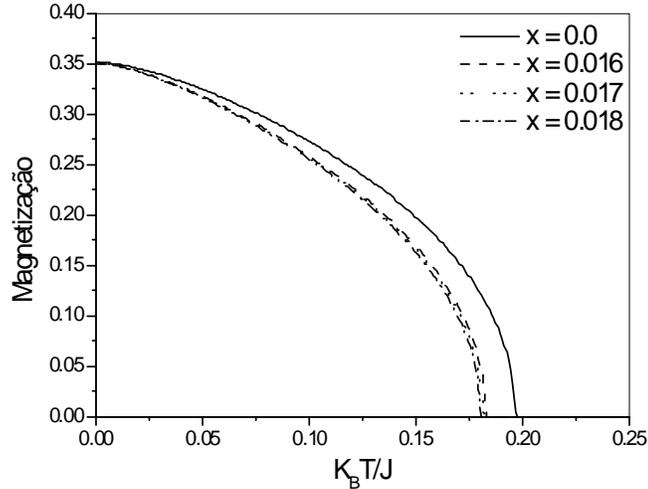


Figura 2.4: Comportamento da magnetização em função da temperatura reduzida. Considerando o valor da diluição $z = 0.15$ e para diferentes valores da concentração dos buracos de oxigênio.

no experimental em $x = 0.017 \pm 0.001$ (ver Fig.(2.1)). Uma predição importante da teoria é a alta sensibilidade do máximo em relação a concentração de buracos. O máximo existe somente em x suficientemente próximo a x_c , e desaparece para concentrações de x inferiores. Isto pode ser interessante para checar esta predição experimentalmente.

2.3 Cadeia de Heisenberg frustrada com Interação de Longo Alcance

Existem diferentes interesses no estudo de sistemas com interação de longo alcance. Do ponto de vista teórico, a investigação desses modelos com a influência do alcance da interação sobre as propriedades críticas e de universalidade são aspectos relevantes a serem analisados. Outro aspecto, tem-se diversas aplicações reais da influência dessas

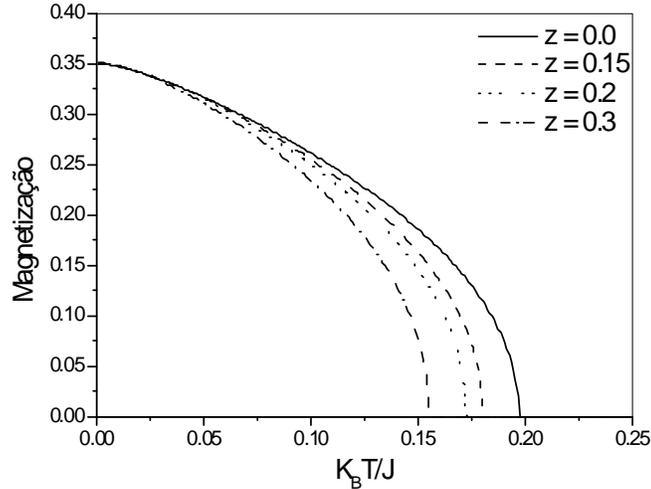


Figura 2.5: Comportamento da magnetização em função da temperatura reduzida. Considerando o valor da concentração dos buracos de oxigênio $x = 0.018$ e variando o valor da diluição.

interações. Tem sido mostrado que flutuações críticas podem causar na força de Casimir¹ de longo alcance entre partículas não carregadas imersas em um fluido crítico [22]. Foi observado que processos envolvendo *exchange* aleatório ("vôo de Levy") podem gerar uma interação efetiva que decai algebricamente com uma lei de potência da distância [23]. Outro exemplo que ocorre em sistemas de spins é a presença da interação de longo alcance tipo RKKY nos compostos metálicos vidro de spin [24] e fenômeno crítico em sistemas altamente iônicos [25]. Um problema de interesse particular é a interação do tipo $J_{ij} = \frac{J}{r_{ij}^2}$, onde o modelo de Ising com spin $\frac{1}{2}$ é mapeado no modelo Kondo de spin $\frac{1}{2}$ [26] e a sua generalização para spin $S > \frac{1}{2}$ [27].

O efeito da interação de longo alcance nos modelos de spins, decaindo com a distância

¹A força de Casimir é o fenômeno que ocorre quando duas placas metálicas paralelas, descarregadas separadas por uma distância d e preenchida por um campo eletromagnético, são atraídas devido as flutuações do vácuo. Uma explicação qualitativa é que a cavidade entre as placas suprime certos modos k de oscilação do vácuo, de forma que a pressão que o vácuo externo exerce sobre as placas se torna maior do que a pressão interna. Para uma revisão desse fenômeno ver Lamoreaux, S. K., *Phys. Rev. Lett.* **78**, 5 (1997).

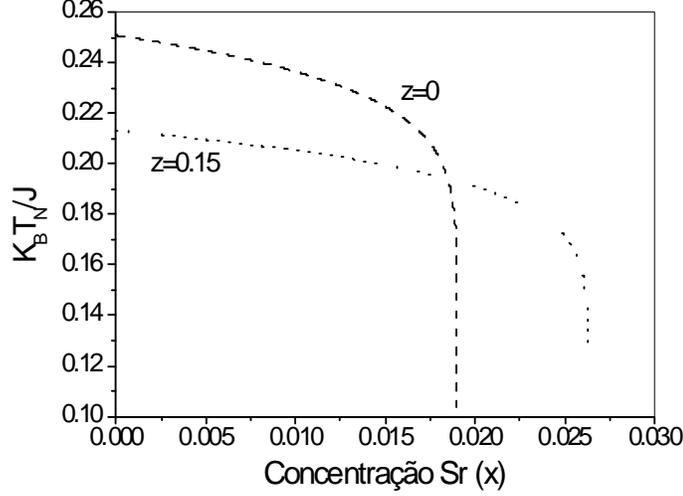


Figura 2.6: Temperatura de Néel reduzida em função da concentração dos buracos de oxigênio. Para os valores da diluição $z = 0$ e 0.15 .

na forma $J_{ij} = \frac{J}{r_{ij}^p}$ ($p > 0$), modifica drasticamente o comportamento crítico, obtendo-se expoentes críticos $\{\beta, \delta, \alpha, \gamma, \nu, \eta\}$ dependentes do valor do parâmetro p e transição de fases ($T_c > 0$) na região $d < p < 2d$ para qualquer dimensão $d \geq 1$. Por outro lado, sabe-se que modelos unidimensionais com interação de curto alcance ($p = \infty$ ou $J_{ij} \approx J e^{-\alpha r_{ij}}$) não apresentam ordem magnética para $T > 0$ (i.e., $T_c = 0$). A presença de interação de longo alcance decaindo com a distância induz ordem nos modelos ferromagnéticos unidimensionais para o parâmetro p no intervalo $1 < p < 2$, e que para $p > 2$ $T_c = 0$. Dyson [28] provou rigorosamente que o modelo de Ising unidimensional possui um ponto crítico na região $1 < p < 2$. Estudos numéricos têm confirmado essa previsão [29], e que $T_c(p)$ decresce monotonicamente com o aumento de p se anulando em $p = 2$. Essa previsão de ordem magnética em sistemas unidimensionais foi demonstrada analiticamente por Joyce [30] no modelo esférico. Fröhlich e Spencer [31] provaram que no ponto $p = 2$ ($d = 1$) o modelo de Ising apresenta uma magnetização espontânea, de acordo com os resultados de simulação de Monte Carlo [32], indicando uma descontinuidade

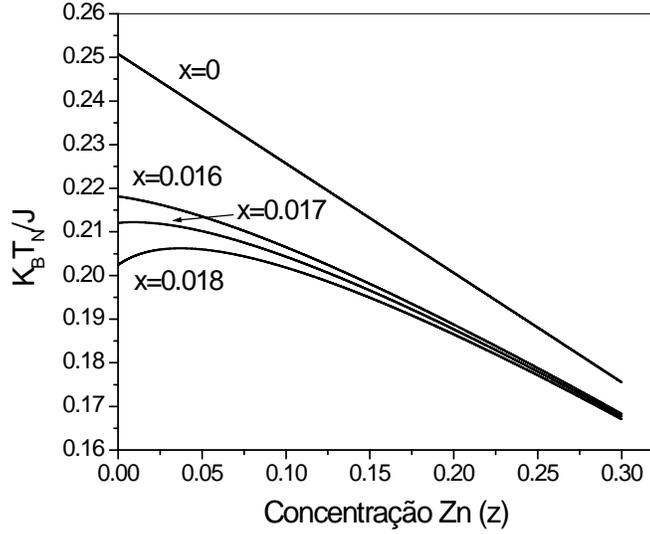


Figura 2.7: Temperatura de Néel reduzida em função da diluição z para valores diferentes da concentração dos buracos de oxigênio, $x = 0; 0.016; 0.017$ e 0.018 .

no ponto crítico $T_c(p = 2)$. Ou seja, $T_c(p)$ diminui monotonicamente e apresenta uma descontinuidade em $p = 2$ conhecida como transição de Kosterlitz-Thouless (KT)²[33].

Para o modelo de Heisenberg quântico $1d$ de spin $\frac{1}{2}$ com interação proporcional r^{-2} , a solução exata da susceptibilidade foi calculada tanto por Haldane [34] como por Shastry [35] e verificaram um comportamento exponencial divergente em baixas temperaturas indicando ausência de ordem magnética, ou seja, $T_c(p = 2) = 0$. Usando teoria de ondas de spins no modelo de Heisenberg ferromagnético com interação de longo alcance Nakano e Takahashi [36] mostraram que existe ordem magnética na região $d < p < 2d$ para $d = 1, 2$ e ausência para $p \geq 2d$, com uma descontinuidade de $T_c(p)$ em $p = 2d = 4$. Nakano e Takahashi [37] também usaram o formalismo da função de Green dependente de dois tempos e temperatura na aproximação RPA para tratar da criticalidade e ter-

²A transição KT em $p = 2$ para o modelo de Ising nada tem a ver com os vórtices presentes no caso do modelo XY, e está associada apenas a uma divergência exponencial no comprimento de correlação $\xi \approx e^{A(T_c - T)}$.

modinâmica desse modelo. Os resultados qualitativos para $T_c(p)$ em função de p para $d = 1, 2$ são análogos ao comportamento de $T_c(p)$ obtido pela teoria de ondas de spin [36], por exemplo, para $d = 1$ e ao redor de $p = 2$ [$T_c(2) = 0$] temos o seguinte comportamento assintótico para $T_c(p)$ [38]:

$$T_c(p) \simeq \frac{\pi^2}{3} S(S+1) J_o(2-p),$$

onde $J_o = J \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^p} = J\xi(p)$ e S é o valor do spin, enquanto tratamento via ondas de spin [36] obteve

$$T_c(p) \simeq \pi^2 S^2 J_o(2-p),$$

o que mostra claramente a diferença quantitativa entre os resultados encontrados pelos dois métodos citados.

Recentes simulações de Monte Carlo quântico [39] no modelo unidimensional verificaram que os resultados obtidos por função de Green [38] estão em boa concordância. O teorema de Mermin e Wagner [18] foi generalizado por Bruno [40], incluindo interações de longoalcance, sendo provado que para $p \geq 2d$ ($d = 1, 2$), os modelos XY e Heisenberg não podem ter ordem ferromagnética em $T > 0$.

Por outro lado, modelos quânticos (e também clássicos) $d(1, 2)$ dimensional com interação de longoalcance antiferromagnética têm sido pouco explorados, e não existe teorema afirmando a existência ou ausência de ordem antiferromagnética para $d < p < 2d$. Para o limite de spin clássico, o modelo Heisenberg F e AF são equivalentes, e tem sido estudado para o caso $d = 1$ por Fröhlich e colaboradores [41], que verificaram uma ordem AF na região $1 < p < 2$. Motivado por falta de resultados no modelo de Heisenberg AF quântico com interação de longo alcance, nesta seção analisaremos uma cadeia frustrada com interação do tipo $J_n = (-1)^n / n^p$ ($n = 1, 2, \dots, \infty$) usando o formalismo da função de Green dependente de dois tempos e da temperatura [42]. Dividimos o sistema em duas subredes interpenetrantes. Para desacoplar as equações de movimento, usaremos a

aproximação RPA.

O Hamiltoniano para esse modelo é descrito pela seguinte expressão

$$\mathcal{H} = \sum_{i,n=1}^{\infty} J_n \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+n}, \quad (2.96)$$

com

$$J_n = \frac{(-1)^n J}{n^p}, \quad J > 0 \quad (2.97)$$

e

$$\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z). \quad (2.98)$$

O Hamiltoniano (2.96) foi estudado em $T = 0$ por grupo de renormalização no espaço real [43], observando uma possível transição de fases em $p = 1.85$ caracterizada pela mudança do comportamento da função de correlação. Para $p \gtrsim 1.85$ a física em grandes distâncias é governada pela função de correlação dos primeiros vizinhos, enquanto que para $p < 1.85$ existe uma linha de pontos fixos. Rabin [43] também especula que $p \simeq 1.85$ marca uma transição ordem - desordem em temperatura finita assim como ocorre no modelo de Ising com interação de lei de potência. Simulação de Monte Carlo clássico nos modelos de Heisenberg ferromagnético [44] e antiferromagnético [45] com interação de longo alcance em $d(= 1, 2)$ dimensional confirmaram que a ordem de longo alcance ferromagnética existe na temperatura finita quando $d < p < 2d$, e somente conjecturaram que não existe ordem de longo alcance antiferromagnética em temperatura finita para $p > d$. Note que $p \rightarrow \infty$, o modelo descrito pelo Hamiltoniano acima se aproxima ao modelo de primeiros vizinhos, que para $d = 1, 2$ não tem transição ordem-desordem [18].

Dividimos a rede em duas subredes a e b e introduzindo duas funções de Green correspondentes para investigar o Hamiltoniano acima como seguem

$$G_{gl}^{aa}(E) \equiv \langle \langle S_{ga}^+ | S_{la}^- \rangle \rangle, \quad (2.99)$$

e

$$G_{gl}^{ba}(E) \equiv \langle\langle S_{gb}^+ | S_{la}^- \rangle\rangle, \quad (2.100)$$

onde $S^\pm = S^x \pm iS^y$ são os operadores de levantamento (+) e abaixamento (-).

A transformada de Fourier temporal da equação de movimento da função de Green G_{gl}^{aa} pode ser escrita como

$$EG_{gl}^{aa}(E) = \frac{1}{2\pi} \langle[S_{ga}^+, S_{la}^-]\rangle + \langle\langle [S_{ga}^+, \mathcal{H}] | S_{la}^- \rangle\rangle, \quad (2.101)$$

onde l e g são dois sítios da rede. Usando as seguintes relações de comutação

$$[S_{ga}^+, S_{la}^-] = 2S_{la}^z \delta_{gl} \quad \text{e} \quad [S_{ga}^\pm, S_{la}^z] = \mp S_{ga}^\pm \delta_{gl}, \quad (2.102)$$

obtemos as seguintes equações de movimento relativas as duas funções de Green, Eqs.(2.99) e (2.100)

$$EG_{gl}^{aa} = \frac{\delta_{gl}}{\pi} m_a + \langle\langle [S_{ga}^+, \mathcal{H}] | S_{la}^- \rangle\rangle \quad (2.103)$$

e

$$EG_{gl}^{ba} = \langle\langle [S_{gb}^+, \mathcal{H}] | S_{la}^- \rangle\rangle \quad (2.104)$$

onde $m_\mu = \langle S_{i\mu}^z \rangle$ ($\mu = a, b$) é a magnetização por sítio da subrede μ .

Usando a aproximação de Fases Aleatórias (RPA – random-phase approximation) [17] para desacoplar as Eqs.(2.103) e (2.104) obtemos

$$EG_{gl}^{aa} = \frac{\delta_{gl}}{\pi} m_a + 2m_a \sum_{n=par}^{\infty} J_n \{G_{(g+n)l}^{aa} - G_{gl}^{aa}\} + \sum_{n=ímpar}^{\infty} J_n \{2m_a G_{(g+n)l}^{ba} - m_b G_{gl}^{aa}\} \quad (2.105)$$

e

$$EG_{gl}^{ba} = 2m_b \sum_{n=par}^{\infty} J_n \{G_{(g+n)l}^{ba} - G_{gl}^{ba}\} + \sum_{n=impar}^{\infty} J_n \{2m_b G_{(g+n)l}^{aa} - m_a G_{gl}^{ba}\}. \quad (2.106)$$

E assumindo que as duas subredes têm simetria de translação, definimos a transformada de Fourier no espaço dos momentos para as funções de Green

$$G_k^{\mu a} = \frac{2}{N} \sum_{g,l} G_{gl}^{\mu a} e^{ik(g-l)}, \quad (2.107)$$

$$\delta_{gl} = \frac{2}{N} \sum_k e^{ik(g-l)}.$$

Desta forma, as equações de movimento para a função de Green tornam-se

$$\left[E + m_b J_o^{(i)} - 2m_a \left(J_k^{(p)} - J_o^{(p)} \right) \right] G_k^{aa} = \frac{m_a}{\pi} + 2m_a J_k^{(i)} G_k^{ba} \quad (2.108)$$

e

$$2m_b J_k^{(i)} G_k^{aa} = \left[E + m_a J_o^{(i)} - 2m_b \left(J_k^{(p)} - J_o^{(p)} \right) \right] G_k^{ba} \quad (2.109)$$

na ausência de campo externo no antiferromagneto as magnetizações das subredes são anti-simétricas, i.e., $m_a = -m_b = m$, logo as Eqs.(2.108) e (2.109) assumirão as formas

$$\left[E + m J_o^{(i)} + 2m \left(J_k^{(p)} - J_o^{(p)} \right) \right] G_k^{aa} = \frac{-m}{\pi} - 2m J_k^{(i)} G_k^{ba} \quad (2.110)$$

e

$$2m J_k^{(i)} G_k^{aa} = \left[E - m J_o^{(i)} - 2m \left(J_k^{(p)} - J_o^{(p)} \right) \right] G_k^{ba} \quad (2.111)$$

ou na forma matricial

$$\begin{bmatrix} E + m\Omega_k & 2mJ_k^{(i)} \\ 2mJ_k^{(i)} & -[E - m\Omega_k] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} G_k^{aa} \\ G_k^{ba} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{m}{\pi} \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.112)$$

sendo

$$\Omega_k = J_o^{(i)} - 2 \left[J_o^{(p)} - J_k^{(p)} \right] \quad (2.113)$$

$$J_o^{(p)} - J_k^{(p)} = \frac{1}{2^p} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J}{n^p} [1 - \cos(2kn)] \quad (2.114)$$

$$J_o^{(i)} = - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{J}{(2n+1)^p} \quad (2.115)$$

$$J_k^{(i)} = - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{J}{(2n+1)^p} \cos[k(2n+1)]. \quad (2.116)$$

Resolvendo o sistema de Eqs.(2.112) obtemos

$$G_k^{aa} = \frac{\Delta_1}{\Delta} = \frac{-m(E - m\Omega_k)}{\pi(E - E_{1k})(E - E_{2k})} \quad (2.117)$$

$$G_k^{ba} = \frac{\Delta_2}{\Delta} = \frac{2m^2 J_k^{(i)}}{\pi(E - E_{1k})(E - E_{2k})} \quad (2.118)$$

onde

$$\Delta = -(E + m\Omega_k)(E - m\Omega_k) - 4m^2 \left(J_k^{(i)} \right)^2 \quad (2.119)$$

e

$$E_{1k} = -E_{2k} = m \left[\Omega_k^2 - 4 \left(J_k^{(i)} \right)^2 \right]^{1/2}. \quad (2.120)$$

Fatorando as Eqs.(2.117) e (2.118) ficamos

$$G_k^{aa} = \frac{1}{\pi} \left[\frac{R_{1k}^{aa}}{(E - E_{1k})} + \frac{R_{2k}^{aa}}{(E - E_{2k})} \right] \quad (2.121)$$

$$G_k^{ba} = \frac{1}{\pi} \left[\frac{R_{1k}^{ba}}{(E - E_{1k})} - \frac{R_{2k}^{ba}}{(E - E_{2k})} \right] \quad (2.122)$$

sendo

$$R_{1k}^{aa} = \frac{m^2 \Omega_k - m E_{1k}}{E_{1k} - E_{2k}} \quad (2.123)$$

$$R_{2k}^{aa} = \frac{-m^2 \Omega_k + m E_{2k}}{E_{1k} - E_{2k}} \quad (2.124)$$

$$R_{1k}^{ba} = R_{2k}^{ba} = \frac{2m^2 J_k^{(i)}}{E_{1k} - E_{2k}}. \quad (2.125)$$

Da Eq.(2.121) obtemos a função de correlação $\langle S_{la}^- S_{ga}^+ \rangle$, que para $l = g$ teremos

$$\langle S^- S^+ \rangle = \frac{4}{N} \sum_k \left\{ \frac{R_{1k}^{aa}}{e^{\beta E_{1k}} - 1} + \frac{R_{2k}^{aa}}{e^{\beta E_{2k}} - 1} \right\}. \quad (2.126)$$

Para spin $\frac{1}{2}$ vale a seguinte relação

$$\langle S^- S^+ \rangle = \frac{1}{2} - m. \quad (2.127)$$

Substituindo Eq.(2.127) na Eq.(2.126), encontramos uma expressão para a magnetização de subrede do sistema,

$$m = \frac{1}{2(1 + 4\Phi)} \quad (2.128)$$

com

$$\Phi = \frac{m}{N} \sum_k \frac{1}{2E_{1k}} \left\{ \frac{\Omega_k - \left[\Omega_k^2 - 4 \left(J_k^{(i)} \right)^2 \right]^{1/2}}{e^{\beta E_{1k}} - 1} - \frac{\Omega_k + \left[\Omega_k^2 - 4 \left(J_k^{(i)} \right)^2 \right]^{1/2}}{e^{-\beta E_{1k}} - 1} \right\}. \quad (2.129)$$

Como E_{1k} é proporcional a m , nas proximidades da temperatura crítica, reescrevemos (2.129) da seguinte maneira

$$\Phi = \frac{1}{m\beta_c N} \sum_k \frac{\Omega_k}{\Omega_k^2 - 4 \left(J_k^{(i)} \right)^2} \quad (2.130)$$

De (2.128) e (2.130) e tomando o limite $m \rightarrow 0$, determinamos a temperatura crítica do sistema

$$k_B T_N = \frac{1}{8} \frac{1}{\frac{1}{N} \sum_k \frac{\Omega_k}{\Omega_k^2 - 4 \left(J_k^{(i)} \right)^2}}. \quad (2.131)$$

Com a aproximação da soma por uma integral na primeira zona de Brillouin, encontramos

$$T_N^{-1} = \frac{4k_B}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\Omega_k dk}{\Omega_k^2 - 4 \left(J_k^{(i)} \right)^2}. \quad (2.132)$$

Resolvendo numericamente a integral acima, provamos que esta diverge para todos os valores de $p > 1$, predizendo assim uma desordem orientacional em toda temperatura finita ($T_N = 0$) em contraste com as conjecturas de Rabin [43], que indica uma possível transição de fase em $p \simeq 1.85$.

Mostramos que o método da função de Green com a aproximação RPA parece ser consistente com os argumentos de ondas de spins [45] na cadeia de Heisenberg com interações de longo alcance antiferromagnética. Isto acontece porque para todo $p > 1$ não existe uma transição de fase em temperatura finita (i.e., $T_N = 0$), em contraste com

os estudos de grupo de renormalização [43] em temperatura zero ($T = 0$) que predizem uma transição de fase em $p \simeq 1.85$. Na ausência de resultados rigorosos conjecturamos que esse modelo produz desordem orientacional em todas as temperaturas finitas para $d = 1$ e $p > 1$, que pode ser verificado por técnicas mais elaboradas, como por exemplo simulação quântica de Monte Carlo.

A princípio, podemos generalizar o resultado acima para spin $S > \frac{1}{2}$, assim como foi feito para interação de curto alcance ($p = \infty$) [7, 46, 47], bem como outros tipos de desacoplamentos, tais como Callen (simétrico) [48], Dembinnski e outras [49], mas conjecturamos que teremos ainda ausência de ordem AF para $p > 1$.

REFERÊNCIAS

- [1] Kubo, R., *J. Phys. Soc. Japan.* **12**, 344 (1957); Kubo, R., et al., *J. Phys. Soc. Japan.* **12**, 1203 (1957); Zubarev, D. N., *Sov. Phys. Usp.* **3**, 320 (1960).
- [2] Kubo, R., et al., *J. Phys. Soc. Japan.* **9**, 888 (1954); Tyablikov, S. V., *Fiz. Tverd. Tela* **2**, 2009 (1960).
- [3] Van Hove, L., *Phys. Rev.* **95**, 249 e 1374 (1954).
- [4] Tahir-Kheli, R. A., Ter Haar, D., *Phys. Rev.* **130**, 108 (1963).
- [5] Abrikosov, A. A., Gorkov, L. P., *Sov. Phys. JETP* **35**, 1558 (1958); *Sov. Phys. JETP* **8**, 182 (1959).
- [6] Bogolyubov, N. N., Tyablikov, S. V., *Sov. Phys. Dokl.* **4**, 589 (1959); Tyablikov, S. V., *Ukrain Mat. Zh.* **11**, 287 (1959); Zubarev, D. N., *Sov. Phys. Usp.* **3**, 320 (1960).
- [7] Hewson, A. C., ter Haar, D., *Physica* **30**, 890 (1964).
- [8] Singh, *Sol. State Comm.*, **70**, 751 (1989); Liu, *Phys. Rev. B* **41**, 9563 (1990); *J. Phys. Cond. Matt.* **4**, 8339 (1992); *J. Phys. Cond. Matt.* **2**, 6007 (1990); Singh, R. P., Tao, Z. C., Singh, M., *Phys. Rev. B* **46**, 1244 (1992).
- [9] Zubarev, D. N., *Sov. Phys. Usp.* **3**, 320 (1960).
- [10] Shirane, G., Endoh, Y., Birgeneau, R. J., Kastner, M. A., Hidaka, Y., Oda, M., Suzuki, M., Murakami, T., *Phys. Rev. Lett.* **59**, 1613 (1987).

- [11] Endoh, Y., et. al., *Phys. Rev. B* **37**, 7443 (1988).
- [12] Barden, J., Cooper, L., Schrieffer, J. R., *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957). Aharony, A., et. al., *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1330 (1988).
- [13] Bednorz, J. G., Müller, K. A., *Z. Phys. B* **64**, 189 (1986). Aharony, A., et. al., *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1330 (1988).
- [14] Aharony, A., et. al., *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1330 (1988).
- [15] Hücker, M., et al., *Phys. Rev. B* **59**, R725 (1999).
- [16] Korenblit, I. Ya., Aharony, A., Entin-Wohlman, O., *Phys. Rev. B* **60**, 15017 (1999).
- [17] Bogoliubov, N. N., Tyablikov, S. V., *Dokl. Akad. Nauk. (SSSR)* **126**, 53 (1959). Ver também Tyablikov, S. V., *Methods in the Quantum Theory of Magnetism* (Plenum, New York, 1967).
- [18] Mermin, N. D., Wagner, H., *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966).
- [19] de Sousa, J. R., Araújo, I. G., *J. Mag. Mag. Mater.* **202**, 231 (1999).
- [20] de Souza, A. J. F., Costa, U. M. S., Lyra, M. L., *Phys. Rev. B* **62**, 8909 (2000).
- [21] Singh, R. P., Singh, M., *Phys. Rev. B* **46**, 14069 (1992); Anderson, P. W., *Phys. Rev.* **86**, 694 (1952); Tang, H., et al., *J. Appl. Phys.* **67**, 4518 (1990); Singh, R. P., Tao, Z. C., Singh, M., *Phys. Rev. B* **46**, 1244 (1992).
- [22] Bergersen, B., Racz, Z., *Phys. Rev. Lett.* **67**, 3047 (1991).
- [23] Ford, P. J., *Contemp. Phys.* **23**, 141 (1982); Binder, K., Young, A. P., *Rev. Mod. Phys.* **58**, 801 (1986).
- [24] Pitzer, K. S., de Lima, M. C. P., Schreiber, D. R., *J. Phys. C* **89**, 1854 (1985).
- [25] Anderson, P. W., Yuval, G., *J. Phys. C* **4**, 607 (1971).

- [26] Cardy, J. L., *J. Phys. A* **14**, 1407 (1981).
- [27] Peirs, R. E., *Proc. Camb. Phil. Soc.* **32**, 471, 477 (1936).
- [28] Dyson, F. J., *Commun. Math. Phys.* **12**, 91 e 212 (1969).
- [29] Nagle, J. F., Bonner, J. C., *J. Phys. C* **3**, 352 (1970).
- [30] Joyce, G. S., *Phys. Rev.* **146**, 349 (1966); *J. Phys. C* **2**, 1531 (1969).
- [31] Fröhlich, J., Spencer, T., *Commun. Math. Phys.* **84**, 87 (1982).
- [32] Bhattacharjee, J., Chakravarty, S., Richardson, J. L., Scalapino, D. J., *Phys. Rev. B* **24**, 3862 (1981).
- [33] Kosterlitz, J. M., *Phys. Rev. Lett.* **37**, 1577 (1976).
- [34] Haldane, F. D. M., *Phys. Rev. Lett.* **60**, 635 (1988); **66**, 1529 (1991).
- [35] Shastry, B. S., *Phys. Rev. Lett.* **60**, 639 (1988).
- [36] Nakano, H., Takahashi, M., *Phys. Rev. B* **50**, 10331 (1994); *J. Phys. Soc. Jpn.* **63**, 926 (1994).
- [37] Nakano, H., Takahashi, M., *Phys. Rev. B* **52**, 6606 (1995).
- [38] Hamedoun, M., Cherriet, Y., Hourmatallah, A., Benzakour, N., *Phys. Rev. B* **63**, 172402 (2001).
- [39] Vassiliev, O. N., Rojdestvenski, I. V., Cottam, M. G., *Physica A* **294**, 139 (2001) e referências citadas.
- [40] Bruno, P., *Phys. Rev. Lett.* **87**, 137203 (2001).
- [41] Fröhlich, J., Israel, R., Lieb, E. H., Simon, B., *Commun. Math. Phys.* **62**, 1 (1978)
- [42] Pacobahyba, J. T. M., Nunes, W., de Sousa, J. R., *Phys. Rev. B* **69**, 92410 (2004).

- [43] Rabin, J. M., *Phys. Rev. B* **22**, 2027 (1980); **22**, 2429 (1980).
- [44] Romano, S., *Phys. Rev. B* **40**, 4970 (1989); **46**, 5420 (1992).
- [45] Romano, S., *Phys. Rev. B* **42**, 6739 (1990); **44**, 7066 (1991).
- [46] Lines, M. E., *Phys. Rev.* **135**, 1336 (1964); *ibid* **131**, 540 (1963).
- [47] Li, Q., *Phys. Rev. B* **70**, 14406 (1980); Al-Wahsh, H., Bria, D., Akjouj, A., Zielinski, P, *Phys. Rev. B* **70**, 144051 (2004) e referências citadas.
- [48] Callen, H. B., *Phys. Rev.* **130**, 890 (1963).
- [49] Ver dissertações de mestrado de I. P. Fittipaldi, "*Ferromagnetismo do spin $\frac{1}{2}$ em um modelo solúvel*" (IF-USP, 1970); M.D.Coutinho Filho, "*As aproximações de Tyablikov e de Callen em modelo solúvel*" (IF-USP, 1970); e tese de doutorado de J. Galvão Ramos, "*Ferromagnetismo Heisenberg pelo método da Função de Green*" (IF-USP, 1970) para detalhes do formalismo da F.G. e diversas aproximações.

Capítulo 3

Teoria de Campo Efetivo

3.1 Considerações Gerais

Os fenômenos físicos, onde a mecânica estatística se aplica, podem ser divididos em duas categorias. Na primeira, os componentes microscópicos do sistema não interagem entre si, e como resultado, as funções termodinâmicas do sistema seguem diretamente do cálculo dos níveis de energia desses constituintes individuais. Exemplos dessa categoria são os calores específicos dos gases e sólidos, a distribuição espectral da radiação do corpo negro, entre outros.

Fenômenos pertencentes à segunda categoria apresentam, nas funções termodinâmicas do sistema, singularidades, e levam a ocorrência de várias espécies de transições de fase. Exemplos dessa categoria são a condensação dos gases, fenômenos associados com a coexistência de fases (especialmente na vizinhança do ponto crítico), fenômeno do ferromagnetismo e antiferromagnetismo, transição do superfluido do hélio líquido I para o hélio líquido II, etc.. A característica das interações interpartículas, para esses casos, é que não podem ser removidas por meio de transformações de coordenadas do problema, i.e., os níveis de energia do sistema total não têm relação com os níveis de energia dos constituintes individuais.

O estudo do comportamento magnético dos sólidos vem sendo por longo tempo uma

das mais ativas sub-área da mecânica estatística, tanto por causa de sua significância na física fundamental, como por sua importância tecnológica. O tratamento teórico dado aos modelos magnéticos com base na mecânica estatística é calcular a soma da expressão $e^{-\beta E_i}$, onde $\beta = \frac{1}{k_B T}$ e E_i é a energia de um determinado estado i , como sendo proporcional ao peso estatístico para esse estado sobre todos os estados acessíveis ao sistema, ou seja devemos efetuar o somatório

$$Z = Tr \{ e^{-\beta \mathcal{H}} \} = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta E\{\sigma_i\}}, \quad (3.1)$$

onde \mathcal{H} é o Hamiltoniano, $E\{\sigma_i\}$ é o autovalor e Z é conhecida na literatura como função de partição. Na obtenção da função de partição para um sistema de N partículas, o somatório do lado direito da Eq. (3.1) representa matematicamente uma soma sobre $(2S + 1)^N$ configurações de spins. No intuito de eliminar as flutuações estatísticas ($\sim N^{-1/2}$), a mecânica estatística de equilíbrio analisa o sistema no chamado limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$).

A partir da função de partição podemos obter todas as propriedades termodinâmicas e magnéticas do modelo considerado, uma vez que ela nos permite conhecer a sua energia livre associada, dada por

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z. \quad (3.2)$$

Em função do somatório realizado na função Z ser infinito, infelizmente, com exceção de alguns modelos simples em uma ou duas dimensões, um cálculo mecânico estatístico completo não pode ser realizado exatamente para a maioria dos sistemas interagentes. Muitos métodos aproximativos foram propostos na literatura, cujo teste fundamental é reproduzir os resultados exatos (por exemplo o modelo de Ising 2d sem campo).

Nesse sentido, a busca de técnicas simples que reproduzam com certa confiabilidade, qualitativamente os resultados experimentais e que ao mesmo tempo não se afaste quantitativamente dos resultados exatos para alguns modelos solúveis, tem sido uma alternativa

dos sistemas derivados do modelo de Ising. Métodos como Monte Carlo e expansão em série constituem os mais precisos e complexos para tratar modelos estatísticos. Por causa da complexidade desses métodos originaram-se outras propostas tendo como parâmetro de avaliação resultados de modelos solúveis. Um desses métodos propostos é a teoria de campo efetivo (“*effective field theory*”-**EFT**) que apresenta resultados qualitativamente satisfatórios.

Neste capítulo vamos tratar formalmente a **EFT** em aglomerado finito usando a técnica do operador diferencial para sistemas de spins descritos por um dado Hamiltoniano.

3.2 Teoria de Campo Efetivo Correlacionado

O suporte da teoria de campo efetivo fundamenta-se nas rigorosas identidades de correlações de spins de Ising propostas por Callen [1] em 1963 para o modelo de Ising- $\frac{1}{2}$, e generalizado para spin qualquer ($S \geq \frac{1}{2}$) por Suzuki [2] em 1965. Este conjunto de identidades tem servido, desde sua introdução, como base para um grande número de aproximações.

Tahir Kheli e Taggart [3] foram os primeiros a utilizar as identidades de Callen-Suzuki, ao introduzi-las no método de expansão em série de altas temperaturas, cuja finalidade era calcular funções de correlação e temperatura crítica do modelo de Ising $2d$.

Em 1979 um esquema simples e versátil proposto por Honmura e Kaneyoshi [4], chamado de técnica do operador diferencial, na época apresentada para o modelo de Ising deu uma nova roupagem às identidades de Callen, facilitando assim o manuseio das variáveis de spin- $\frac{1}{2}$. Basicamente, até a década de noventa somente sistemas Ising eram tratados via técnica do operador diferencial, mas com a generalização para aglomerados maiores (dois spins) o modelo de Heisenberg de spin- $\frac{1}{2}$ ferromagnético [5]-[11] foi tratado com relativo sucesso para redes tridimensionais, pois o tratamento em redes bidimensionais não apresenta resultados satisfatórios, principalmente pelo fato de que, no limite do modelo de Heisenberg isotrópico obtém-se $T_c \neq 0$ em contradição com o

teorema de Mermin-Wagner [12] ($T_c = 0$). Desde então, esta técnica tem sido aplicada para estudar uma grande variedade de modelos magnéticos, tais como fase de vidro de spin [13], sistemas desordenados [14], efeitos de superfícies [15], sistemas amorfos [16], modelo BEG [17], modelo de Potts [18], metamagneto Ising com campo transversal [19], e, mais recentemente, esta tem sido estendida para estudar o metamagneto de Heisenberg [20], Heisenberg quântico antiferromagnético [21] e para tratar de filmes finos e super-redes [22]. Neste trabalho, desenvolveremos esta técnica para tratar o modelo de Ising.

Às vezes, estamos interessados apenas nos valores médios de algumas grandezas em vez de toda a termodinâmica do sistema. Do formalismo da mecânica estatística de equilíbrio, temos que o valor médio de uma grandeza A no *ensemble canônico* é obtido por

$$\langle A \rangle = \frac{Tr [Ae^{-\beta\mathcal{H}}]}{Tr [e^{-\beta\mathcal{H}}]}, \quad (3.3)$$

onde Tr é o funcional traço no espaço de todos os spins e a função de partição $Z = Tr [e^{-\beta\mathcal{H}}]$.

Sendo \mathcal{H} um Hamiltoniano que descreve um sistema interagente de N partículas é sempre possível separar o sistema em duas partes como segue

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_\Omega + \mathcal{H}_{\Omega'}, \quad (3.4)$$

onde \mathcal{H}_Ω representa a parte do Hamiltoniano \mathcal{H} para um aglomerado finito com $n < N$ spins que descreve as interações dentro do aglomerado e com a sua vizinhança e $\mathcal{H}_{\Omega'}$ representa a parte restante Ω' que não possui spins do aglomerado Ω (conforme Fig.(3.1)).

Caso \mathcal{H}_Ω e $\mathcal{H}_{\Omega'}$ comutem, isto é, $[\mathcal{H}_\Omega, \mathcal{H}_{\Omega'}] = 0$, o traço na Eq.(3.3) pode ser efetuado em dois passos: primeiro o traço sobre o aglomerado finito Tr_Ω é realizado, e em seguida sobre os spins da vizinhança não pertencentes aos spins do aglomerado Ω , que é chamado de $Tr_{\Omega'}$. Escolhendo $A = O(\Omega)$ uma função com variáveis de spin do aglomerado Ω , então o valor médio (3.3) ficará reescrito na forma

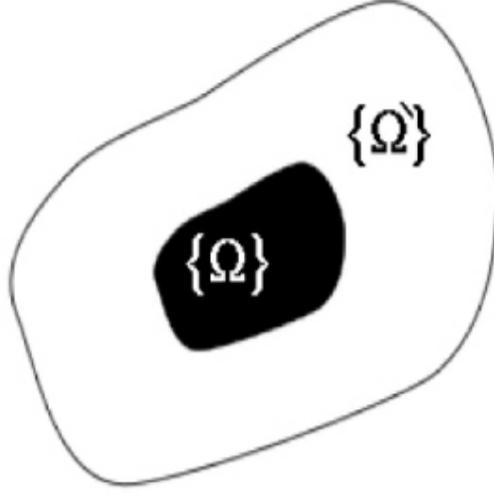


Figura 3.1: Representação esquemática de um sistema com N partículas (sistema $=\Omega \cup \Omega'$).

$$\langle O(\Omega) \rangle = \frac{\text{Tr}_{\Omega'} \text{Tr}_{\Omega} \left\{ O(\Omega) e^{-\beta[\mathcal{H}_{\Omega} + \mathcal{H}_{\Omega'}]} \right\}}{\text{Tr}_{\Omega'} \text{Tr}_{\Omega} \left\{ e^{-\beta[\mathcal{H}_{\Omega} + \mathcal{H}_{\Omega'}]} \right\}}. \quad (3.5)$$

Assumindo na Eq.(3.5) que $[\mathcal{H}_{\Omega}, \mathcal{H}_{\Omega'}] = 0$ a expressão acima ficará reescrita na forma

$$\langle O(\Omega) \rangle = \frac{\text{Tr}_{\Omega'} \left(e^{-\beta\mathcal{H}_{\Omega'}} \right) \text{Tr}_{\Omega} \left\{ O(\Omega) e^{-\beta\mathcal{H}_{\Omega}} \right\}}{\text{Tr}_{\Omega'} \left(e^{-\beta\mathcal{H}_{\Omega'}} \right) \text{Tr}_{\Omega} \left\{ e^{-\beta\mathcal{H}_{\Omega}} \right\}}. \quad (3.6)$$

Multiplicando a Eq.(3.6) pelo fator $\frac{\text{Tr}_{\Omega} \left\{ e^{-\beta\mathcal{H}_{\Omega}} \right\}}{\text{Tr}_{\Omega} \left\{ e^{-\beta\mathcal{H}_{\Omega}} \right\}}$ e combinando adequadamente mediante as propriedades da separação do traço obtemos

$$\langle O(\Omega) \rangle = \frac{\text{Tr} \left\{ \frac{\text{Tr}_{\Omega} [O(\Omega) e^{-\beta\mathcal{H}_{\Omega}}]}{\text{Tr}_{\Omega} [e^{-\beta\mathcal{H}_{\Omega}}]} e^{-\beta\mathcal{H}} \right\}}{\text{Tr} \left\{ e^{-\beta\mathcal{H}} \right\}}. \quad (3.7)$$

Comparando a Eq.(3.7) com a Eq.(3.3) temos que o valor médio $O(\Omega)$ fica reduzido

ao cálculo parcial no aglomerado finito, ou seja,

$$\langle O(\Omega) \rangle = \left\langle \frac{\text{Tr}_\Omega \{ O(\Omega) e^{-\beta \mathcal{H}_\Omega} \}}{\text{Tr}_\Omega \{ e^{-\beta \mathcal{H}_\Omega} \}} \right\rangle. \quad (3.8)$$

A Eq.(3.8) é exata para sistemas clássicos, pois neste limite as variáveis de spin presentes no Hamiltoniano comutam e significa que em lugar de calcularmos a média térmica para um sistema infinito, podemos reescrevê-la como uma média de um sistema finito (aglomerado Ω) com o traço parcial Tr_Ω interno. Por outro lado, para modelos descritos por Hamiltonianos quânticos, a Eq.(3.8) não é exata uma vez que $[\mathcal{H}_\Omega, \mathcal{H}_{\Omega'}] \neq 0$. Para modelos quânticos, Sá Barreto e colaboradores [23] aplicaram a Eq.(3.8) de forma aproximada ao modelo de Ising- $\frac{1}{2}$ com campo transverso.

Se considerarmos $A = \{n\} O(\Omega)$, onde $\{n\}$ é qualquer variável de spin não pertencente ao aglomerado Ω , é imediata a generalização da Eq.(3.8) para a forma

$$\langle \{n\} O(\Omega) \rangle = \left\langle \{n\} \frac{\text{Tr}_\Omega \{ O(\Omega) e^{-\beta \mathcal{H}_\Omega} \}}{\text{Tr}_\Omega \{ e^{-\beta \mathcal{H}_\Omega} \}} \right\rangle. \quad (3.9)$$

3.2.1 Identidade de Callen-Suzuki

Para ilustrar o uso da Eq.(3.8), e em particular demonstrar a identidade de Callen-Suzuki, vamos aplicar ao Hamiltoniano de Ising com dois estados (spin- $\frac{1}{2}$) descrito por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad (3.10)$$

onde J é o parâmetro de interação de troca ($J > 0$ e $J < 0$ correspondem os sistemas ferromagnético e antiferromagnético, respectivamente), $\langle i, j \rangle$ representa a soma sobre os primeiros vizinhos z e $\sigma_i = \pm 1$ é a variável de spin $\frac{1}{2}$. Vamos considerar um aglomerado com apenas um spin, assim o Hamiltoniano (3.10) ficará

$$\mathcal{H}_1 = -J \sigma_1 \sum_{\vec{\delta}}^z \sigma_{1+\vec{\delta}}, \quad (3.11)$$

onde $\vec{\delta}$ é o vetor de primeiros vizinhos e z é o número de coordenação da rede. Substituindo (3.11) em (3.8) e escolhendo $O(\Omega) = \sigma_1$ obtemos

$$\langle \sigma_1 \rangle = \left\langle \frac{\text{Tr}_1 \left(\sigma_1 e^{K \sigma_1 \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}}} \right)}{\text{Tr}_1 \left(e^{K \sigma_1 \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}}} \right)} \right\rangle, \quad (3.12)$$

ou seja,

$$\langle \sigma_1 \rangle = \left\langle \frac{\sum_{\sigma_1=-1}^1 \left(\sigma_1 e^{K \sigma_1 \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}}} \right)}{\sum_{\sigma_1=-1}^1 \left(e^{K \sigma_1 \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}}} \right)} \right\rangle, \quad (3.13)$$

onde $K = \beta J$, $\beta = \frac{1}{k_B T}$, k_B é a constante de Boltzmann.

O valor médio da magnetização por spin, $m = \langle \sigma_1 \rangle$, é dado por

$$m = \left\langle \tanh \left(K \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}} \right) \right\rangle. \quad (3.14)$$

A Eq.(3.14) foi deduzida pela primeira vez por Callen [1] usando o formalismo da função de Green dependente de dois tempos e temperatura e generalizada para spin S por Suzuki [2]. Desta forma, com isso ficou conhecida na literatura por identidade de Callen-Suzuki.

3.2.2 Técnica do Operador Diferencial

Definindo o operador diferencial $D_x = \frac{\partial}{\partial x}$, então uma identidade deste operador é dada por

$$e^{\alpha D_x} F(x) = F(x + \alpha), \quad (3.15)$$

onde $F(x)$ é uma função analítica que admite ser escrita através de uma série de Taylor. Aplicando a Eq.(3.15) na Eq.(3.14) obtemos

$$m = \langle \sigma_1 \rangle = \left\langle \exp \left[\left(K \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}} \right) D_x \right] \right\rangle \tanh(x)|_{x=0}, \quad (3.16)$$

expandindo o somatório na equação acima obtemos

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^z \exp \left[\left(K \sigma_{1+\vec{\delta}} \right) D_x \right] \right\rangle \tanh(x)|_{x=0}. \quad (3.17)$$

Usando a identidade de van der Waerden para spin- $\frac{1}{2}$, i.e., $\exp(\lambda\sigma_i) = \cosh(\lambda) + \sigma_i \sinh(\lambda)$ ($\sigma_i = \pm 1$), pela qual podemos reescrever a Eq.(3.17) na forma

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^z \left(\alpha_x + \sigma_{1+\vec{\delta}} \beta_x \right) \right\rangle \tanh(x)|_{x=0}, \quad (3.18)$$

onde $\alpha_x = \cosh(KD_x)$ e $\beta_x = \sinh(KD_x)$. A expressão (3.18) é geral e exata valendo para redes com qualquer número de coordenação, mas de difícil manipulação matemática, pois envolve no segundo membro funções de correlação de muitos spins, gerando um conjunto infinito de equações acopladas de funções de correlação. Para o caso do modelo de Ising- $\frac{1}{2}$ numa rede unidimensional ($z = 2$), Sá Barreto e Fittipaldi [24] mostraram que não é necessário a aplicação de nenhum desacoplamento, pois consegue-se um número finito de equações (duas) de funções de correlação entre spins.

Desejando melhor ilustrar as dificuldades envolvidas na Eq.(3.18), vamos desenvolvê-la para uma rede quadrada, cujo número de coordenação é $z = 4$. Designando pelo índice $i = 1$ o spin central pertencente ao aglomerado com um spin, conforme o Hamiltoniano (3.11) e $\{\sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \sigma_5\}$ como sendo os spins externos, primeiros vizinhos do aglomerado $\Omega = \{\sigma_1\}$, portanto, a Eq.(3.18) expandida ficará

$$m = \langle (\alpha_x + \sigma_2 \beta_x) (\alpha_x + \sigma_3 \beta_x) (\alpha_x + \sigma_4 \beta_x) (\alpha_x + \sigma_5 \beta_x) \rangle \tanh(x)|_{x=0}. \quad (3.19)$$

Observe que a função $F(x) = \tanh(x)$ é ímpar [i.e., $F(-x) = -F(x)$], então é fácil

mostrar que a combinação de operadores diferenciais pares envolvidos na expansão (3.19) aplicada nesta função e fazendo o limite de $x \rightarrow 0$ é nula, ou seja $\widehat{\varphi}_{par}(D_x)F(x)|_{x=0} = 0$. Portanto, concluímos que apenas contribuições de funcionais ímpares são significantes (não nulos), e a Eq.(3.19) ficará reduzida a

$$m = A_1(K) \langle \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4 + \sigma_5 \rangle + A_3(K) \langle \sigma_2\sigma_3\sigma_4 + \sigma_2\sigma_3\sigma_5 + \sigma_3\sigma_4\sigma_5 + \sigma_2\sigma_4\sigma_5 \rangle, \quad (3.20)$$

ou usando a propriedade da invariância translacional $\langle \sigma_i \rangle = m \forall i$, ficamos

$$m = A_1(K) m + A_3(K) \langle \sigma_2\sigma_3\sigma_4 \rangle, \quad (3.21)$$

onde $A_1(K) = 4\alpha_x^3\beta_x \tanh x|_{x=0} = \frac{4F_4+8F_2}{8}$, $A_3(K) = 4\alpha_x\beta_x^3 \tanh x|_{x=0} = \frac{4F_4-8F_2}{8}$ e $F_n = \tanh(nK)$.

Muitas expressões similares a Eq.(3.21) podem ser obtidas para as funções de correlação, e são mais conhecidas na literatura pelas equações de Dobrushin-Lanford-Ruelle [25, 26], e usadas em teoria de campos para escrever a distribuição de probabilidade no limite de um certo volume infinito de uma forma rigorosa [27].

A dificuldade de se obter de forma exata a magnetização por este método é a presença da função de correlação de três spins no segundo membro da Eq.(3.21), e para contornar esta dificuldade devemos usar um desacoplamento. Numa primeira aproximação, as funções de correlação dos spins são desacopladas na forma

$$\langle \sigma_i\sigma_j\dots\sigma_l \rangle \simeq \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \dots \langle \sigma_l \rangle, \quad (3.22)$$

onde $i \neq j \neq \dots \neq l$, e é conhecida como aproximação de Zernike [28]. Usando a aproximação (3.22) na Eq.(3.21) obtemos

$$m = \sqrt{\frac{1 - A_1(K)}{A_3(K)}}. \quad (3.23)$$

O resultado aproximado (3.23) representa a teoria de campo efetivo em aglomerado com um spin (EFT-1), e tem como consequência direta valores clássicos para os expoentes críticos nos diversos modelos analisados. A temperatura crítica da rede é obtida a partir da Eq.(3.23) fazendo $m \rightarrow 0$, resultando na seguinte expressão

$$A_1(K_c) = 1. \quad (3.24)$$

O valor para o modelo de Ising- $\frac{1}{2}$ numa rede quadrada é $T_c \equiv K_c^{-1} = 3.09$, que pode ser comparada com a solução exata $T_c = 2.269$. Da Eq.(3.23) podemos mostrar que próximo da criticalidade a magnetização se anula segundo uma lei de potência com um expoente crítico $\beta = 1/2$.

Podemos aplicar o desacoplamento (3.22) para qualquer rede com número de coordenação z , o que equivale na EFT-1 aproximar a Eq.(3.18) por

$$m = (\alpha_x + m\beta_x)^z \tanh(x)|_{x=0}, \quad (3.25)$$

usando a propriedade $\hat{\varphi}_{par}(x) F(x)|_{x=0} = 0$ podemos reescrever a Eq.(3.25) na forma

$$m = \sum_{p=0} A_{2p+1}^z(K) m^{2p+1}, \quad (3.26)$$

sendo

$$A_{2p+1}^z(K) = \frac{z! \theta_p(x)}{(z-1-2p)!(2p+1)!} \alpha_x^{z-1-2p} \beta_x^{2p+1} \tanh(x)|_{x=0}, \quad (3.27)$$

onde $\theta_p(x) = 1$ e 0 quando $x \leq 0$ e $x > 0$, respectivamente e $x = z - 1 - 2p$. Da mesma forma, próximo da região crítica ($T \simeq T_c$, $m \rightarrow 0$) obtemos a partir da Eq.(3.26) o expoente clássico $\beta = 1/2$ e a temperatura crítica é calculada resolvendo numericamente a expressão

$$A_1^z(K) = 1, \quad (3.28)$$

que para uma rede linear ($z = 2$) obtemos a solução exata $T_c = 0$. À medida que o número de coordenação aumenta, a temperatura $T_c(z)$ cresce monotonicamente, por exemplo, $T_c(z = 4) = 3.090$ e $T_c(z = 6) = 5.073$, e no limite $z \rightarrow \infty$ obtemos o resultado de campo médio $\frac{T_c}{z} = 1$. Fisicamente, é esperado este crescimento no valor de T_c com o aumento de z , isto porque o sistema fica mais correlacionado e portanto necessitamos de mais energia térmica ($k_B T_c$) para destruir a ordem magnética. No limite de coordenação $z \rightarrow \infty$ teremos que o íon i interage (em média) com a mesma magnitude com todos os sítios da rede cristalina, introduzindo assim no sistema uma interação de longo alcance apresentando os mesmos resultados da aproximação de campo médio de Curie-Weiss.

A aproximação de campo médio em aglomerado com um spin (*mean field approximation*, **MFA-1**) consiste em que façamos uma média não sobre a função hiperbólica, mas sim sobre o seu argumento. Logo, podemos escrever (3.14) na forma

$$m = \tanh \left(K \sigma_{1+\delta} \right) \simeq \tanh K \left\langle \sigma_{1+\delta} \right\rangle, \quad (3.29)$$

ou

$$m = \tanh (zKm), \quad (3.30)$$

que reproduz o mesmo resultado de **MFA-1**, mas que nos leva a um resultado errado em uma dimensão, i.e., $T_c(z = 2) \neq 0$. O uso de EFT-1 (3.26) que usa o desacoplamento (3.22), onde as funções de correlação entre diferentes spins são tratados com uma aproximação, trata de forma exata a relação de cinemática de spins $\sigma_i^{2n} = 1$ ($\sigma_i = \pm 1$) através da identidade de van der Waerden, enquanto que **MFA** trata aproximadamente tanto as correlações como as auto-correlações σ_i^{2n} . Sendo o **MFA** um dos métodos teóricos mais utilizados para resolução de problemas de muitos corpos na mecânica estatística, é possível encontrar na literatura uma variedade de modelos estudados, para sistemas com dimensões superiores a dois, tais como: metamagneto [29], vidro de spin [30], modelo de Heisenberg AF [31], modelo de Heisenberg com interação Dzyaloshinski-Moriya [32],

entre outros.

Em contrapartida, EFT apresenta melhorias nos processos qualitativos e quantitativos com relação a **MFA**, como, por exemplo: numa rede unidimensional EFT obtém resultados exatos para as propriedades termodinâmicas do modelo de Ising- $\frac{1}{2}$ [24] com $T_c = 0$. Metodologicamente, **EFT** trata exatamente a cinemática de spin fazendo com que o modelo com interação de curto alcance não apresente ordem de longo alcance em uma dimensão. É preciso mencionar que a medida em que crescemos os sistemas de aglomerados e também se utilizando de desacoplamento [33], temos melhorias na parte quantitativa para estas grandezas críticas, com uma relativa convergência em direção ao resultado exato.

Um estudo sistemático do aumento dos aglomerados no esquema **MFA** foi realizado por Suzuki e Katori [34] para calcular a temperatura crítica do modelo de Ising numa rede quadrada. Sugeriram que o limite do tamanho do aglomerado (N) infinito a temperatura crítica converge para a solução exata de Onsager. Para melhor ilustrar esta convergência de T_c , vamos desenvolver **MFA** em aglomerado com dois spins (**MFA-2**), designada na literatura de aproximação de Oguchi [35], onde o Hamiltoniano de Ising (3.10) é escrito na forma aproximada por

$$\mathcal{H}_2^{MFA} = -J\sigma_1\sigma_2 - J(z-1)m(\sigma_1 + \sigma_2) \quad (3.31)$$

sendo o último termo a soma das médias realizadas aos redores dos spins σ_1 e σ_2 pertencentes ao aglomerado, excluindo o par da interação, e $m = \langle \frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2) \rangle$ é a magnetização por spins nesta aproximação dada por

$$m = \frac{\sinh [2K(z-1)m]}{\cosh [2K(z-1)m] + e^{-2K}}, \quad (3.32)$$

com $K = \beta J$.

No limite de $m \rightarrow 0$ na Eq.(3.32) obtemos a temperatura crítica pela expressão

$$\frac{2(z-1)}{T_c} = 1 + \exp\left(\frac{-2}{T_c}\right), \quad (3.33)$$

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

Todas as teorias de campo efetivo (**MFA** e **EFT**, por exemplo) têm em comum uma expressão auto-consistente para o parâmetro de ordem do tipo $m = \Psi(m, T)$, e que ao redor da criticalidade os expoentes críticos são universais (clássicos) independentes da dimensão espacial (d) e da simetria do Hamiltoniano, contradizendo assim as experiências em compostos magnéticos (classe de universalidade). Uma alternativa para encontrar valores não clássicos de expoentes críticos, mas mantendo a idéia de **MFA**, foi apresentada por Suzuki [36] quando propôs o formalismo **CAM** (*coherent Anomaly Method*) e que tem sido aplicado numa série de modelos.

3.2.3 Outras Aproximações

De forma análoga a Eq.(3.14), podemos obter, usando (3.12) em (3.9) a identidade de Callen generalizada

$$\langle \{n\} \sigma_1 \rangle = \left\langle \{n\} \tanh \left(K \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}} \right) \right\rangle, \quad (3.34)$$

onde $\{n\}$ representa qualquer variável com spins não pertencentes ao aglomerado $\Omega = \{\sigma_1\}$. Usando os mesmos procedimentos para obtenção da Eq.(3.20) numa rede quadrada, a Eq.(3.34) será reescrita como

$$\begin{aligned} \langle \{n\} \sigma_1 \rangle &= A_1(K) \langle \{n\} (\sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4 + \sigma_5) \rangle + \\ &A_3(K) \langle \{n\} (\sigma_2\sigma_3\sigma_4 + \sigma_2\sigma_3\sigma_5 + \sigma_3\sigma_4\sigma_5 + \sigma_2\sigma_4\sigma_5) \rangle. \end{aligned} \quad (3.35)$$

Escolhendo $\{n\} = 1$ e $\{n\} = \sigma_2$, da Eq.(3.35) obtemos

$$m = 4A_1(K) m + 4A_3(K) \Gamma \quad (3.36)$$

e

$$\begin{aligned} \langle \sigma_2 \sigma_1 \rangle &= A_1(K) [1 + \langle \sigma_2 \sigma_3 \rangle + \langle \sigma_2 \sigma_4 \rangle + \langle \sigma_2 \sigma_5 \rangle] + \\ &A_3(K) [\langle \sigma_3 \sigma_4 \rangle + \langle \sigma_3 \sigma_5 \rangle + \langle \sigma_4 \sigma_5 \rangle + \langle \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 \sigma_5 \rangle], \end{aligned} \quad (3.37)$$

onde usamos a identidade de cinemática de spin $\sigma_i^2 = 1$, $m = \langle \sigma_i \rangle \forall i = (1 - N)$ e $\Gamma = \langle \sigma_i \sigma_j \sigma_l \rangle \forall i \neq j \neq l \neq 1$. As Eq.(3.36) e (3.37) são exatas, mas de difícil manipulação matemática, assim para resolvê-las vamos usar um desacoplamento nas funções de correlação.

A primeira tentativa de melhorar o valor de T_c foi apresentada por Kaneyoshi e colaboradores [37], onde utilizaram um desacoplamento em que as flutuações no dado sítio $i \neq 1$ são proporcionais as flutuações do spin do aglomerado Ω , ou seja

$$\sigma_i \simeq \langle \sigma_i \rangle + \lambda (\sigma_1 - \langle \sigma_1 \rangle), \quad (3.38)$$

onde λ representa o campo de reação de Onsager [38] que mede a correlação de curto alcance dos spins σ_i (externos ao aglomerado) com o spin σ_1 (pertencente ao aglomerado).

Substituindo (3.38) nas Eqs.(3.36) e (3.37), obtemos duas equações acopladas para a magnetização m e para o parâmetro λ que podem ser resolvidas simultaneamente para cada valor de temperatura, ou seja

$$m = [4A_1(K) + 12A_3(K)\lambda^2 - 8A_3(K)\lambda^3]m + [4A_3(K)(1 - 3\lambda^2 + 2\lambda^3)]m^3 \quad (3.39)$$

e

$$\begin{aligned} m^2 + \lambda(1 - m^2) &= A_1(K) + 3[A_1(K) + A_3(K)]m^2 + A_3(K)m^4 + \\ &3[A_1(K) + A_3(K) + 2A_3(K)m^2](1 - m^2)\lambda^2 - \\ &8A_3(K)m^2(1 - m^2)\lambda^3 + A_3(K)(1 + 3m^2)(1 - m^2)\lambda^4. \end{aligned} \quad (3.40)$$

Como estamos interessados na criticalidade, então fazamos $m \rightarrow 0$ nas Eqs.(3.39) e (3.40) e teremos

$$1 = 4A_1(K_c) + 12A_3(K_c)\lambda_c^2 - 8A_3(K_c)\lambda_c^3 \quad (3.41)$$

e

$$\lambda_c = A_1(K_c) + 3[A_1(K_c) + A_3(K_c)]\lambda_c^2 + A_3(K_c)\lambda_c^4. \quad (3.42)$$

Das Eqs.(3.41) e (3.42) a temperatura crítica apresenta resultado equivalente à aproximação de Bethe e Peierls, ou seja $\frac{k_B T_c}{J} = \frac{2}{\ln 2}$ e $\lambda_c = \frac{1}{3}$. Generalizando para qualquer número de coordenação z obtemos

$$\begin{cases} \frac{k_B T_c}{J} = \frac{2}{\ln\left(\frac{z}{z-2}\right)} \\ \lambda_c = \frac{1}{z-1}. \end{cases} \quad (3.43)$$

Taggart e Fittipaldi [39] sugeriram uma alternativa para se obter as funções de correlação, e denominaram de aproximação do tripleto médio. Escolhendo $\{n\} = \coth K \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}}$ na Eq.(3.34) obtemos

$$\left\langle \sigma_1 \coth K \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}} \right\rangle = 1. \quad (3.44)$$

Aplicando os mesmos procedimentos da obtenção da Eq.(3.21), podemos reescrever a Eq.(3.44) numa rede quadrada ($z = 4$) na forma

$$1 = 4\tilde{A}(K) \langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle + 4\tilde{B}(K) \langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 \rangle, \quad (3.45)$$

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

Calculando $m = \langle \sigma_p \rangle$ ($p \neq 1, 2, 3, 4, 5$) e tomando como base a Eq.(3.45) encontramos

$$m = 4\tilde{A}(K) \langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_p \rangle + 4\tilde{B}(K) \langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 \sigma_p \rangle, \quad (3.46)$$

fazendo $\Gamma = \langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_p \rangle$ e $\Lambda = \langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 \sigma_p \rangle$, a Eq.(3.46) será reescrita por

$$m = 4\tilde{A}(K) \Gamma + 4\tilde{B}(K) \Lambda. \quad (3.47)$$

Na aproximação do tripleto médio, Taggart e Fittipaldi sugeriram que em $T = T_c$ a função de correlação Λ tende a zero mais rapidamente que Γ , portanto, usando as Eq.(3.36) e (3.47) obtemos a temperatura crítica auto-consistentemente pela expressão

$$B(K_c) = \tilde{A}(K_c) [1 - 4A(K_c)], \quad (3.48)$$

que resolvendo numericamente, encontramos $T_c = 2.680$. Usando a aproximação (3.38) nas Eqs.(3.45) e (3.47), Taggart [40] obteve resultados mais próximos ($T_c = 2.490$) do valor exato $T_c = 2.262$ para o modelo de Ising- $\frac{1}{2}$ na rede quadrada.

Vimos que até agora as aproximações aplicadas na técnica do operador diferencial utilizaram aglomerado com apenas um spin, ou seja, teve como ponto de partida o Hamiltoniano (3.11). A fim de ilustrar a técnica do operador diferencial para aglomerado finito,

vamos escolher um aglomerado com dois spins, e assim o Hamiltoniano de Ising (3.10) para este aglomerado é dado por

$$\mathcal{H}_2 = -J\sigma_1\sigma_2 - a_1\sigma_1 - a_2\sigma_2, \quad (3.49)$$

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

Escolhendo $O(\Omega) = \frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2)$ e usando (3.49) na Eq.(3.8) obtemos a magnetização por spin

$$m = \left\langle \frac{\sinh\beta(a_1 + a_2)}{\cosh\beta(a_1 + a_2) + e^{-2K} \cosh\beta(a_1 - a_2)} \right\rangle, \quad (3.50)$$

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

A Eq.(3.50) foi obtida independentemente por Siqueira [41] e Jascur [42]. Uma análise simples desta expressão evidencia a presença de dois tipos de vizinhos presentes nos somatórios em $\vec{\delta}_n$. Para desenvolvermos a Eq.(3.50) vamos definir dois operadores diferenciais $D_x \equiv \frac{\partial}{\partial x}$ e $D_y \equiv \frac{\partial}{\partial y}$, com isto é possível generalizar a identidade dada por uma variável, Eq.(3.15), ou seja

$$\exp(aD_x + bD_y)g(x, y) = g(x + a, y + b), \quad (3.51)$$

onde $g(x, y)$ é uma função analítica. Usando a identidade (3.51), podemos reescrever a Eq.(3.50) na forma

$$m = \left\langle \exp \left(K D_x \sum_{\vec{\delta}_1} \sigma_{1+\vec{\delta}_1} + K D_y \sum_{\vec{\delta}_2} \sigma_{2+\vec{\delta}_2} \right) \right\rangle g(x, y) |_{x,y=0}, \quad (3.52)$$

sendo

$$g(x, y) = \frac{\sinh(x + y)}{\cosh(x + y) + e^{-2K} \cosh(x - y)}. \quad (3.53)$$

Na Eq.(3.52) as somatórias $\sum_{\vec{\delta}_1}$ e $\sum_{\vec{\delta}_2}$ são feitas sobre todos os primeiros vizinhos dos

spins σ_1 e σ_2 externos ao aglomerado com dois spins, respectivamente. Dependendo da topologia da rede, os spins σ_1 e σ_2 podem admitir vizinhos comuns (i.e., spins comuns circundantes aos sítios σ_1 e σ_2), então a Eq.(3.52) pode ser reescrita como

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}_1}^{z-1-z'} \exp \left(K D_x \sigma_{1+\vec{\delta}_1} \right) \prod_{\vec{\delta}_2}^{z-1-z'} \exp \left(K D_y \sigma_{2+\vec{\delta}_2} \right) \prod_{\vec{\delta}}^{z'} \exp \left[K (D_x + D_y) \sigma_{\vec{\delta}} \right] \right\rangle g(x, y)|_{x,y=0}, \quad (3.54)$$

onde z' é o número de primeiros vizinhos comuns aos spins σ_1 e σ_2 do aglomerado. Claramente, a forma explícita de vizinhos, comuns ou não, aos sítios 1 e 2 no aglomerado de dois spins assegura a distinção entre redes de estruturas (topologias) diferentes. Para ilustrar a topologia da rede no aglomerado com dois spins, na Fig.(3.2) apresentamos as rede kagomé ($z = 4, z' = 1$), quadrada ($z = 4, z' = 0$), triangular ($z = 6, z' = 2$) e a cúbica simples ($z = 6, z' = 0$).

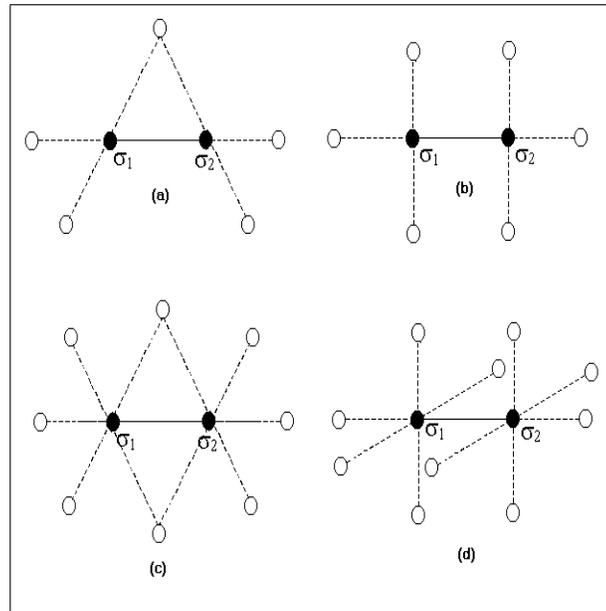


Figura 3.2: Topologias das redes (a) rede kagomé, (b) quadrada, (c) triangular e (d) cúbica simples com aglomerado com dois spins.

Aplicando a identidade de van der Waerden na Eq.(3.54) ficaremos

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}_1}^{z-1-z'} (\alpha_x + \sigma_{1+\vec{\delta}_1} \beta_x) \prod_{\vec{\delta}_2}^{z-1-z'} (\alpha_y + \sigma_{2+\vec{\delta}_2} \beta_y) \prod_{\vec{\delta}}^{z'} (\alpha_{x+y} + \sigma_{\vec{\delta}} \beta_{x+y}) \right\rangle g(x, y)|_{x,y=0}, \quad (3.55)$$

onde $\alpha_\nu (\nu = x, y) = \cosh(KD_\nu)$, $\beta_\nu = \sinh(KD_\nu)$, $\alpha_{x+y} = \cosh[K(D_x + D_y)]$ e $\beta_{x+y} = \sinh[K(D_x + D_y)]$. A Eq.(3.55) é exata, porém de difícil manipulação matemática por envolver funções de correlação de vários spins, gerando desta maneira um conjunto infinito de equações acopladas. Desacoplando as funções de correlação da Eq.(3.55) segundo a aproximação de Zernike (3.22), ficaremos

$$m = (\alpha_x + m\beta_x)^{z-1-z'} (\alpha_y + m\beta_y)^{z-1-z'} (\alpha_{x+y} + m\beta_{x+y})^{z'} g(x, y)|_{x,y=0}. \quad (3.56)$$

Da Eq.(3.53) temos que a função $g(x, y)$ é ímpar [i.e., $g(-x, -y) = -g(x, y)$], e a aplicação de qualquer operador par $\hat{\varphi}_{par}(D_x, D_y)$ nesta função $g(x, y)$ é zero no limite de $x, y \rightarrow 0$, isto é, $\hat{\varphi}_{par}g(x, y)|_{x,y=0} = 0$. Usando esta propriedade de paridade para a função $g(x, y)$, a Eq.(3.56) pode ser expandida em potências ímpares de m , que fisicamente é esperado, isto porque esta equação de estado é invariante pela mudança de m por $-m$ (não existe direção axial privilegiada) e até primeira ordem é dada por

$$m \simeq A_1^{z,z'}(K) m, \quad (3.57)$$

sendo

$$A_1^{z,z'}(K) = \left[2(z-1-z') \alpha_x^{z-z'-2} \alpha_y^{z-z'-1} \beta_x + z' \alpha_x^{z-z'-1} \alpha_y^{z-z'-1} \alpha_{x+y}^{z'-1} \beta_{x+y} \right] g(x, y)|_{x,y=0}. \quad (3.58)$$

Nesta nova teoria de campo efetivo em aglomerados de dois spins (EFT-2), a tempe-

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

Tabela III.1: Valores da Temperatura crítica T_c para o modelo de Ising-1/2 em diversas topologias de rede.

ratura crítica é obtida da Eq.(3.57) com o limite $m \rightarrow 0$, ou seja

$$A_1^{z,z'}(K_c) = 1, \quad (3.59)$$

onde percebemos da Eq.(3.59) a possibilidade de distinguir T_c para redes com topologias diferentes.

Resolvendo numericamente a Eq.(3.59) encontramos os valores de $T_c \equiv K_c^{-1}$ do modelo de Ising- $\frac{1}{2}$ para várias topologias de rede. Os valores de T_c obtidos através das aproximações **EFT-1** e **EFT-2** para as redes Kagomé, quadrada, triangular e cúbica simples estão apresentados na Tabela (III.1) e são comparados com os resultados exatos para os casos de redes $2d$ e simulação de Monte Carlo ($3d$). Observamos que **EFT-2** apresenta resultados quantitativos ligeiramente melhores que os obtidos por **EFT-1** em comparação com os resultados exatos. Devemos mencionar, ainda que sendo esta **EFT-2** uma aproximação tipo campo médio [i.e., $m = \Psi(m, T)$], os expoentes críticos continuam universais (independe da dimensionalidade) e iguais aos valores clássicos ($\beta = 1/2, \gamma = 1, \alpha = 0, \nu = 1/2, \eta = 0, \delta = 3$).

3.3 Outros Modelos

Diversos modelos quânticos na mecânica estatística têm sido estudados, como por exemplo; Heisenberg, Ising com campo transversal, Hubbard, Kondo. Ao contrário de sistemas clássicos que apresentam certas dificuldades com interações microscópicas presentes nos termos do Hamiltoniano, os modelos quânticos acrescentam mais uma dificuldade que

são as diversas relações de comutação entre os operadores do Hamiltoniano. O modelo de Heisenberg é descrito pelo seguinte Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} (\eta_x \sigma_i^x \sigma_j^x + \eta_y \sigma_i^y \sigma_j^y + \sigma_i^z \sigma_j^z), \quad (3.60)$$

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

A técnica do operador diferencial em aglomerado com dois spins foi desenvolvida para o Hamiltoniano (3.60) por Idogaki e Uryû [5, 43] para o caso do sistema ferromagnético. Numa rede quadrada ($2d$) foi encontrado erroneamente que este modelo no limite isotrópico ($\eta_x = \eta_y = 1$) apresenta ordem de longo alcance, em contradição com o teorema de Mermin e Wagner [12]. Por outro lado, quando aplicada essa técnica nesse modelo numa rede tridimensional, os resultados qualitativos das propriedades termodinâmicas e temperatura crítica são satisfatórios, estabelecendo-se assim a desigualdade $T_c(\text{Ising}) > T_c(\text{XY}) > T_c(\text{Heisenberg})$. Do ponto de vista quantitativo, os resultados de T_c não são comparáveis com os obtidos por simulação de Monte Carlo [44]-[46] e expansão em série [47].

O modelo (3.60) com interação antiferromagnética foi estudado pela técnica do operador diferencial por Araújo e colaboradores [8], onde o comportamento da magnetização de subrede em função da temperatura foi analisado. Os resultados foram satisfatórios em comparação com os resultados mais rigorosos.

A generalização do modelo (3.60) para spins clássicos usando a técnica do operador diferencial foi também realizada [33, 48, 49], onde foi mostrado que $T_c = T_N$ para todo modelo clássico analisado [33] de acordo com resultados de simulação de Monte Carlo [49]-[51]. Desses resultados [8, 33, 48] são mostrados que $T_{c,N}(\text{clássico}) > T_N(\text{quântico}) \geq T_c(\text{quântico})$. Diante desta consistência qualitativa, outros sistemas quânticos mais com-

plexos foram estudados usando a técnica do operador diferencial em aglomerados com dois spins. A técnica do operador diferencial em aglomerados com dois spins aplicada ao modelo de Heisenberg ferromagnético com a inclusão da interação biquadrática e íon-único, que é descrito pelo Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \hat{p}_{ij} - J' \sum_{\langle ij \rangle} \hat{p}_{ij}^2 - D \sum_i (S_i^z)^2, \quad (3.61)$$

onde $\hat{p}_{ij} = S_i^z S_j^z + \gamma (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y)$ ($S_i^z = 0, \pm 1$), J é a interação de troca bilinear, J' é a interação biquadrática e D a anisotropia de íon-único, foi estudada por Idogaki e colaboradores [52].

Outro modelo onde tem-se aplicado a técnica do operador diferencial para analisar o comportamento tricrítico é o modelo de Heisenberg ferromagnético, que consiste do Hamiltoniano (3.60) com a inclusão da interação de Dzyaloshinski-Moriya (**DM**) dada por

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} \vec{D}_{ij} \cdot (\vec{S}_i \wedge \vec{S}_j), \quad (3.62)$$

onde $D_{ji} = -D_{ij}$ é o tensor anti-simétrico da interação **DM**. Incluindo a interação **DM** (3.62) na Eq.(3.60), Lacerda, de Sousa e Fittipaldi [53] mostraram que o sistema ferromagnético com $\vec{D}_{ij} = D\hat{z}$ (direção axial) apresenta no diagrama de fases no plano (T, D) , transições de 1ª e 2ª ordem. Para interações antiferromagnéticas ($J < 0$), Gil e de Sousa [54] usando método variacional mostraram ausência de transição de primeira ordem. Alguns resultados preliminares usando a técnica do operador diferencial confirmam a ausência do ponto tricrítico no diagrama (T, D) para o modelo **DM** antiferromagnético [55].

Na Tabela (III.2) apresentamos os resultados de T_c (caso F) e T_N (caso AF) para os modelos Ising, XY (clássico e quântico) e Heisenberg (clássico e quântico) numa rede cúbica simples ($z = 6$) obtidas por MFA-2, EFT-2, Monte Carlo [44, 45, 46, 50, 51] e expansão em série [47]. Apesar dos resultados quantitativos para T_c e T_N obtidos

Modelo	Métodos	T_c	T_N
Ising	MFA-2	5.847	5.847
	EFT-2	5.039	5.039
	Monte Carlo [44]	4.511	4.511
XY Clássico	MFA-2	5.843	5.843
	EFT-2	5.034	5.034
	Monte Carlo [50]	4.405	4.405
XY Quântico	MFA-2	5.787	5.787
	EFT-2	4.980	4.980
	Séries [47]	4.001	4.001
Heisenberg Clássico	MFA-2	5.841	5.841
	EFT-2	5.031	5.031
	Monte Carlo [51]	4.329	4.329
Heisenberg Quântico	MFA-2	5.719	5.771
	EFT-2	4.891	4.947
	Monte Carlo [45, 46]	3.360	3.593

Tabela III.2: Valores da temperatura crítica para modelos clássicos e quânticos com interações F e AF numa rede cúbica simples.

por MFA-2 e EFT-2 não serem bons quando comparados com resultados rigorosos de expansão em séries e Monte Carlo, esses são qualitativamente corretos [$T_c(\text{clássico}) = T_N(\text{clássico}) > T_N(\text{quântico}) \geq T_c(\text{quântico})$]; $T_c(I) > T_c(XY) > T_c(H)$. Entretanto para uma rede quadrada observamos a violação do teorema de Mermin-Wagner, ou seja, encontramos $T_c = T_N \neq 0$.

REFERÊNCIAS

- [1] H. B. Callen, *Phys. Lett.* **4**, 161 (1963).
- [2] N. Suzuki, *Phys. Lett.* **19**, 267 (1965).
- [3] R. A. Tahir-Kheli, *Phys. Rev.* **188**, 1142 (1969); G. B. Taggart e R. A. Tahir-Kheli, *Physica* **68**, 93 (1973).
- [4] R. Honmura e T. Kaneyoshi, *Progr. Theor. Phys.* **60**, 635 (1978).
- [5] Idogaki, T., Uryu, N., *Physica A* **181**, 173 (1992).
- [6] Idogaki, T., Miyoshi, Y., Tucker, J. W., *J. Mag. Mag. Mat.* **154**, 221 (1996).
- [7] Lacerda, F., de Sousa, J. R., Fittipaldi, I. P., *J. Appl. Phys.* **75**, 5829 (1994).
- [8] Araújo, I. G., Cabral Neto, J., de Sousa, J. R. *Physica A* **260**, 150 (1998).
- [9] Cabral Neto, J., de Sousa, J. R., *Phys. Stat. Sol. B* **212**, 343 (1999).
- [10] Cabral Neto, J., de Sousa, J. R., *Phys. Stat. Sol. B* **225**, 223 (2001).
- [11] Cabral Neto, J., de Sousa, J. R., *Physica A* **319**, 319 (2003).
- [12] Mermin, N. D., Wagner, H., *Phys. Rev. Lett.* **22**, 1133 (1966).
- [13] de Almeida, J. R. L., Fittipaldi, I. P., Sá Barreto, F. C., *J. Phys. C* **14**, 103 (1981); Kaneyoshi, T., *Phys. Rev. B* **24**, 2693 (1981).

- [14] Sarmiento, E. F., Tsallis, C., *Phys. Rev. B* **27**, 5784 (1983); Kaneyoshi, T., Tamura, I., Honmura, R., *Phys. Rev. B* **29**, 2769 (1984).
- [15] Tamura, I., Sarmiento, E. F., Fittipaldi, I. P., Kaneyoshi, T., *Phys. Stat. Solidi B* **118**, 409 (1983).
- [16] Kaneyoshi, T., Fittipaldi, I. P., *Phys. Stat. Solidi B* **105**, 629 (1981).
- [17] Siqueira, A. F., Fittipaldi, I. P., *Phys. Rev. B* **31**, 6092 (1985); *Phys. Stat. Sol. B* **119**, K31 (1983).
- [18] Honmura, R., Sarmiento, E. F., Tsallis, C., Fittipaldi, I. P., *Phys. Rev. B* **29**, 2761 (1984).
- [19] Neto, M. A., De Sousa, J. R., *Phys. Lett. A* **330**, 322 (2004); *Phys. Rev. B* . Ver também dissertação de mestrado do Minos Neto, *Modelo de Ising Antiferromagnético com Campo Transverso: Criticalidade e Termodinâmica*, UFAM (2004).
- [20] Bublitz, E., de Sousa, J. R., *Phys. Lett. A* **323**, 9 (2004). Ver também dissertação de mestrado do Edgar Bublitz, *Transição de Fase Quântica Induzida por Campo Externo*, UFAM (2003).
- [21] de Sousa, J. R., Araújo, I. G., *J. Mag. Mag. Mat.* **202**, 231 (1999). Ver também tese de doutorado do Ijanílio Araújo, *Estudo Sistemático da Fase Antiferromagnética do Modelo de Heisenberg Anisotrópico*, UFSCar (2004).
- [22] Cabral Neto, J., de Sousa, J. R., Plascak, J. A., *Phys. Rev. B* **66**, 064417 (2002).
- [23] Sá Barreto, F. C., Fittipaldi, I. P., *Physica A* **129**, 360 (1985).
- [24] Sá Barreto, F. C., Fittipaldi, I. P., *Rev. Bras. Fis.* **11**, 745 (1981).
- [25] Dobrushin, R. L., *Theor. Prob. Appl.* **13**, 197 (1969).
- [26] Lanford, O. E. e Ruelle, D., *Comm. Math. Phys.* **13**, 194 (1969).

- [27] Parisi, G., *Statistical Field Theory*, Addison-Wesley, (1988).
- [28] Zernike, F., *Physica* **1**, 565 (1940).
- [29] Runehr, E. E. e Figueiredo, W., *Phys. Lett. A* **244**, 165 (1998).
- [30] Li, M. S., Walasek, K., Cieplak, M., *Phys. Rev. B* **56**, 11715 (1997).
- [31] Trudeau, Y., Plumer, M. L., Preprint.
- [32] de Sousa, J. R., Fittipaldi, I. P., *J. Appl. Phys.* **75**, 5835 (1994).
- [33] de Sousa, J. R., *Physica A* **256**, 383 (1998).
- [34] Suzuki, M., Katori, M., *J. Phys. Soc. Jpn.* **55**, 1 (1986).
- [35] Smart, J. S., *Effective Field Theories of Magnetism*, Saunders, Philadelphia, 1966.
- [36] Suzuki, M. *Coherent Anomaly Method: Mean Field, Fluctuation and Systematics* , Word Scientific, 1995.
- [37] Kaneyoshi, T., Fittipaldi, I. P., Honmura, R., Manabe, T., *Phys. Rev. B* **24**, 481 (1981).
- [38] Onsager, L., *J. Am. Chem. Soc.* **58**, 1486 (1936); ver também Brout, R., Thomas, H., *Physics* **3**, 317 (1967).
- [39] Taggart, G. B., Fittipaldi, I. P., *Phys. Rev. B* **25**, 7026 (1982).
- [40] Taggart, G. B., *Physica A* **113**, 535 (1982).
- [41] Siqueira, A. F., *Tese de Doutorado*, DF-UFPE, 1986.
- [42] Bobak, A., Jascur, M., *Phys. Stat. Sol. B* **135**, K9 (1986).
- [43] Idogaki, T., Tanaka, A., Tucker, J. W., *J. Mag. Mag. Mat.* **177-181**,157 (1998).

- [44] Landau, D. P., Binder, K., *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge University Press, 2000.
- [45] Murtazaev, A. K., Favorskii, I. A., *Fiz. Nizk. Temp.* **18**, 144 (1999); Kamilov, I. K., Murtazaev, A. K., Aliev, Hh K., *Phys. Uspekhi***42**,698 (1999).
- [46] de Sousa, A. J. F., Costa, U. M. S., Lyra, M. L., *Phys. Rev. B* **62**, 8909 (2000).
- [47] Rushbrooke, G. S., Wood, P. J., *Mol. Phys.* **11**, 409 (1967).
- [48] de Sousa, J. R., Albuquerque, D. F. *Physica A* **236**, 419 (1997).
- [49] Albuquerque, D. F. *Physica A* **287**, 185 (2000).
- [50] Gottlob, A. P., Hansenbusch, M., *Physica A* **201**,593 (1993); *J. Stat. Phys.* **77**, 919 (1994).
- [51] Chen, K., Ferrenberg, A. M., Landau, D. P., *Phys. Rev. B* **48**, 3249 (1993).
- [52] Idogaki, T., Tanaka, A., Tucker, J. W., *J. Mag. Mag. Mat.* **177-181**, 773 (1998); Miyoshi, Y., Tanaka, A., Tucker, J. W., Idogaki, T., *J. Mag. Mag. Mat.* **205**,110 (1999).
- [53] de Sousa, J. R., Lacerda, F., Fittipaldi, I. P., *J. Mag. Mag. Mat.* **140-144**, 1501 (1995) e referências citadas.
- [54] Gil, J. X., de Sousa, J. R., *Phys. Stat. Sol. B* **213**, R5 (1999).
- [55] de Sousa, J. R., Arruda, A. S. (comunicação privada).

Capítulo 4

Modelo de Ising quase-2d aleatoriamente decorado com interações competitivas

4.1 Considerações Gerais

A investigação sistemática do antiferromagnetismo surgiu com o trabalho fenomenológico de Néel em 1932 [1] quando determinou a temperatura crítica (T_N) na qual as magnetizações de subredes se anulam para um modelo de Ising com interação entre primeiros vizinhos. A grande motivação de se estudar modelos antiferromagnéticos reside no fato de existir transições de fases induzidas por campo externos e presença de diversos pontos multicríticos (tricrítico, bicrítico, etc.) no diagrama de fase [2].

Do ponto de vista experimental, exemplos de metamagnetos de Ising são os compostos $FeCl_2$ e $FeBr_2$, onde as medidas das propriedades termodinâmicas indicam a presença de um ponto tricrítico no composto $FeCl_2$ [3], enquanto espalhamento de nêutrons tem indicado a presença de um ponto bicrítico no diagrama de fase T versus H no composto $FeBr_2$ [4]. A explicação teórica para a decomposição de ponto tricrítico no ponto bicrítico terminal no metamagneto Ising está associado ao valor da interação de segundos

vizinhos (J'), que sendo ferromagnética ($J' > 0$), cálculos de campo médio [3] mostram que para $\alpha > \alpha_c$ ($\alpha = \frac{J'}{J}$) observa-se a decomposição para o ponto bicrítico no diagrama de fase T versus H . Resultados de simulação de Monte Carlo neste modelo não prevê tal decomposição[5].

Uma classe especial de metamagnetos são aqueles que apresentam transição de fase induzida por campo externo; por exemplo, o composto antiferromagnético La_2CuO_4 [6]-[8]. O comportamento da susceptibilidade obtido através da técnica de espalhamento de nêutrons [9], apresenta para altos campos magnéticos um comportamento anômalo, caracterizado por um ponto de mínimo e depois um ponto de máximo na temperatura de transição $T_N(H)$. Na Fig.(4.1) apresentamos os resultados experimentais da susceptibilidade em função da temperatura para o composto La_2CuO_4 na presença de um campo externo $H = 3.0T$ [9], verificando assim o comportamento anômalo. Na ausência de campo externo (ou pequenos valores do campo H) esta anomalia na susceptibilidade não é verificada.

Na Fig.(4.2) mostramos os resultados experimentais do diagrama de fase no plano $(T - H)$ e o comportamento da magnetização como função da temperatura ao longo da linha crítica $T_N(H)$, que ao redor de $T_N(0)$ a magnetização vai a zero segundo a lei de potência $M_s \simeq (T_N - T)^\beta$ com $\beta = 0.5 \pm 0.02$ (valor de campo médio) [10]. A notação WFM na Fig.(4.2) significa um pequeno ferromagnetismo (*weak ferromagnetism*) no sistema, caracterizado pela presença de uma anisotropia anti-simétrica conhecida como interação de Dzyaloshinski e Moriya (DM) [11].

Usando teoria de campo efetivo em aglomerado com dois spins (EFT-2), Neto e de Sousa [12] estudaram o modelo de Heisenberg AF de spin- $\frac{1}{2}$ quase-bidimensional ($\lambda = 10^{-5}$) e encontraram para $H \gtrsim 2.0J$ a presença de um comportamento anômalo, com aparecimento de um ponto de mínimo antes da ocorrência da transição de fase (ponto de máximo) na susceptibilidade em função da temperatura.

Com a descoberta dos compostos supercondutores de altas temperaturas, por Bednorz e Müller em 1986 [13], diversos modelos fenomenológicos foram propostos para

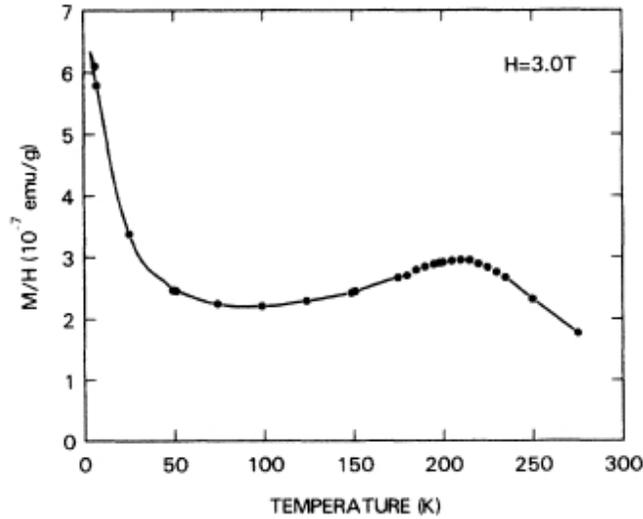


Figura 4.1: Comportamento experimental da susceptibilidade magnética em função da temperatura para o composto La_2CuO_4 na presença de um campo magnético externo $H = 3.0T$ [9].

descrever suas propriedades de transporte e magnéticas. Para compostos formados por planos de CuO_2 , o magnetismo é o ingrediente fundamental para uma possível teoria microscópica. Sabe-se que na fase pura (por exemplo, os compostos La_2CuO_4 (2 – 1 – 4) e $YBa_2Cu_3O_6$ (1 – 2 – 3)), os íons de cobre interagem antiferromagneticamente com um acoplamento J_A no plano e λJ_A entre planos [14], e é descrito teoricamente pelo modelo de Heisenberg antiferromagnético quase- $2d$ de spin- $\frac{1}{2}$, conforme resultados dos experimentos de espalhamento de nêutrons [6, 15, 16]. Dopando, por exemplo, com átomos de bário (Ba) o composto 2 – 1 – 4, os íons de oxigênio situados entre os átomos de Cu no plano apresentam um desbalanceamento de carga, surgindo assim um spin efetivo $\frac{1}{2}$ que interage ferromagneticamente [17] com estes átomos (Cu), provocando desta maneira o fenômeno da frustração. Fisicamente, esse efeito competitivo de interações nos planos de CuO_2 causa uma redução drástica na ordem antiferromagnética do sistema, e conseqüentemente a temperatura de Néel (T_N) diminui à medida que a concentração de buracos aumenta, se anulando no valor crítico x_c . Para $x > x_c$, a fase supercondutora

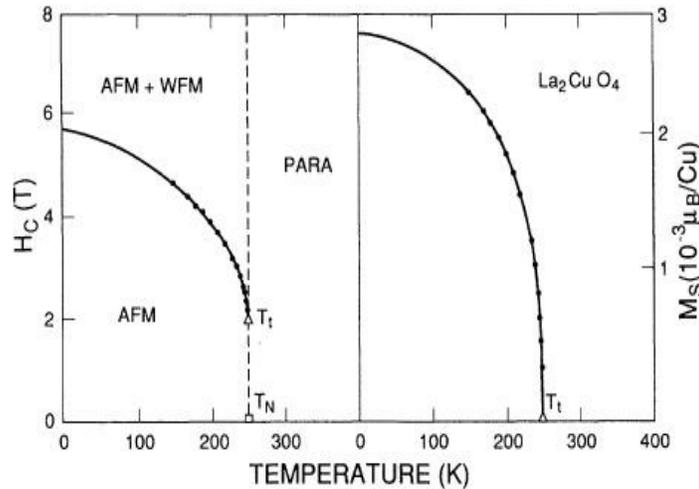


Figura 4.2: Diagrama de fase no plano $T - H$ para o composto La_2CuO_4 . Lado direito temos o comportamento da magnetização em função da temperatura obtida ao longo da linha crítica $T_N(H)$ [10].

aparece, onde as correntes são oriundas dos pares de Cooper [14] nos planos de CuO_2 cuja interação entre os elétrons é de origem elétrica (*exchange*).

Transição de fase em sistemas de spin com frustração surgem em uma variedade de sistemas. Em alguns casos, o fenômeno reentrante foi observado [18]-[21] e é importante para estabelecer conexão com transições vidro de spin (*spin-glass transitions*). A presença de frustração causa, primeiro de tudo, a degenerescência e o crescimento na energia do estado fundamental, como também um decréscimo na temperatura de transição sobre o estado ordenado.

O modelo de Ising aleatoriamente decorado é usado com sucesso para descrever as propriedades críticas dos compostos de altas temperaturas [22]-[28], embora acredite-se que sistemas com spins sejam melhores descritos por modelos Heisenberg (como as temperaturas próximas as temperaturas de Néel). A presença de ligações decoradas causa frustração no sistema e, conseqüentemente decresce o ordenamento na subrede e resulta em sucessivas transições de fase em $T \neq 0$.

Utilizando transformações do tipo decoração-iteração [29, 30] vários autores [21, 24, 26] e [31]- [33] tem estudado o modelo de Ising decorado, onde suas propriedades termodinâmicas e diagramas de fase foram analisados. Para descrever qualitativamente as propriedades magnéticas desses compostos supercondutores, usamos como protótipo o modelo de Ising aleatoriamente decorado usando a técnica do operador diferencial.

4.2 Modelo e Formalismo

Neste capítulo vamos simular (qualitativamente) as propriedades termodinâmicas da fase isolante de compostos supercondutores de altas temperaturas formados por planos de CuO_2 usando um modelo magnético. O modelo é descrito por um Hamiltoniano Ising aleatoriamente decorado, temperado (*quenched*), quase- $2d$, com interações competitivas, cujo objetivo é simular o limite de estabilidade da fase antiferromagnética de compostos *cupratos* supercondutores de altas temperaturas.

Para ilustrarmos a estrutura topológica do sistema considerado, na Fig.(4.3) mostramos parte de uma rede cúbica simples decorada. Nela, os círculos pretos indicam os íons de Cu^{2+} de spin- $\frac{1}{2}$ (representado por S_i^ν , onde ν representa a subrede relacionada A ou B) e os círculos brancos indicam os íons de O^- de spin- $\frac{1}{2}$ no plano (representado por σ_i). Para completar a situação que pretendemos estudar, expomos o sistema a um campo magnético externo (H) na mesma direção dos vetores de spin.

Portanto, o modelo é descrito pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = J_A \sum_{\langle i,j \rangle \in x,y} S_i^A S_j^B + \lambda J_A \sum_{\langle i,j \rangle \in z} S_i^A S_j^B - J_F \sum_{\langle i,j \rangle \in x,y} \sigma_i (S_j^A + S_j^B) - H \sum_{i,j,k} (\sigma_i + S_j^A + S_k^B) \quad (4.1)$$

onde $J_A > 0$ representa a interação antiferromagnética de troca no plano formado entre os spins nodais das duas subredes, A e B , interpenetrantes (simulando a interação $Cu - Cu$), λ é o parâmetro de anisotropia (ao qual utilizamos $\lambda = 10^{-5}$ para representar

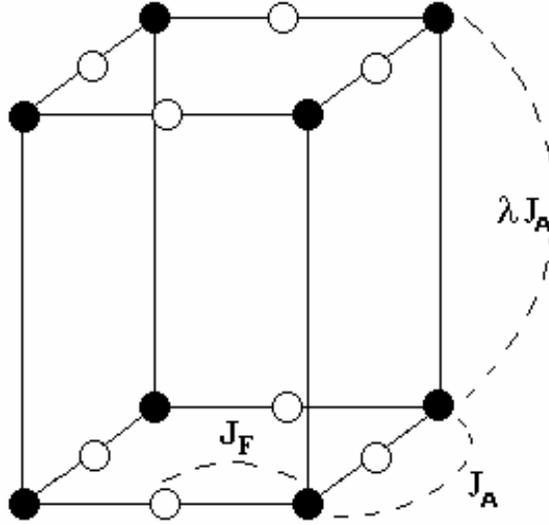


Figura 4.3: Representação esquemática de uma rede cúbica simples decorada. Os círculos pretos indicam os íons de Cu^{2+} de $\text{spin}-\frac{1}{2}$ (representado por S_i^ν , onde ν representa a subrede relacionada A ou B) e os círculos brancos indicam os íons de O^- de $\text{spin}-\frac{1}{2}$ no plano (representado por σ_i).

um sistema quase-bidimensional), que simula a fraca interação entre os planos. J_F é o acoplamento de troca aleatório, ferromagnético entre o spin decorador e o spin nodal (simulando a interação $Cu - O$). S_i^ν ($\nu = A, B$) é o $\text{spin}-\frac{1}{2}$ nodal da subrede ν no sítio i , H é campo magnético externo e finalmente σ_i é o $\text{spin}-\frac{1}{2}$ decorador que interage ferromagneticamente com dois spins nodais de subredes vizinhas. Na Eq.(4.1), $\langle i, j \rangle \in xy$ representa o somatório sobre os quatro spins primeiros vizinhos pertencentes ao plano (simulando o plano de CuO_2) e $\langle i, j \rangle \in z$ é o somatório sobre os dois spins primeiros vizinhos interplanos.

O Hamiltoniano (4.1) pode também descrever vários outros tipos de sistemas bastando apenas alterar o valor do parâmetro de anisotropia, dois casos particulares são: Caso (i) *Bidimensional* – $2d$ ($\lambda = 0$) e caso (ii) *Tridimensional* – $3d$ ($\lambda = 1$), tais casos já foram estudados utilizando a técnica do operador diferencial [34] nas referências [27] e [28], respectivamente.

Usando a transformação de decoraç~ao-iteraç~ao de Fisher [35], obtemos um Hamiltoniano efetivo dado por

$$\mathcal{H}_{eff} = \sum_{\langle i,j \rangle \in x,y} J_{ij} S_i^A S_j^B + \lambda J_A \sum_{\langle i,j \rangle \in z} S_i^A S_j^B - \sum_{i,j,k} H_i (S_j^A + S_k^B). \quad (4.2)$$

A transformaç~ao decoraç~ao-iteraç~ao consiste na obtenç~ao de par~ametros efetivos de interaç~ao para os spins da rede matriz, a partir da realizaç~ao do traço parcial sobre as variáveis decoradoras. Para obtermos uma interaç~ao equivalente entre os spins S_1 e S_2 , independente da configuraç~ao do sistema decorador, veja figura(4.4), impomos a seguinte igualdade

$$A \exp [-\beta J_{eff} S_1 S_2 + \beta H_{eff} (S_1 + S_2)] = \quad (4.3)$$

$$Tr_{\sigma_0} \exp [-\beta J_A S_1 S_2 + \beta J_F \sigma_0 (S_1 + S_2) + \beta H (S_1 + S_2 + \sigma_0)]$$

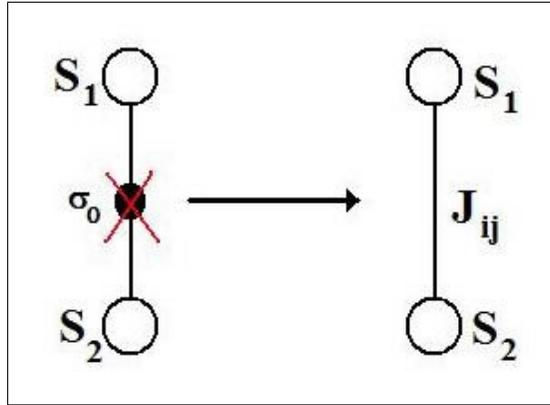


Figura 4.4: Uma ligaç~ao decorada com íons de oxigênio na parte (a). Transformaç~ao decoraç~ao-iteraç~ao na parte (b) excluindo o átomo de oxigênio.

Desta express~ao obtemos

$$L_{eff} = L + \frac{1}{4} \ln \left[\frac{\cosh(L + 2K_F)}{\cosh(L - 2K_F)} \right], \quad (4.4)$$

e assumimos, também, uma distribuição para o campo magnético do tipo

$$K_{eff} = \alpha K_F - \frac{1}{4} \ln \left[\frac{\cosh(L + 2K_F) \cosh(L - 2K_F)}{\cosh^2 L} \right], \quad (4.5)$$

onde $L_{eff} = \beta H_{eff}$, $K_{eff} = \beta J_{eff}$, $K_F = \beta J_F$, $K_A = \beta J_A$ e definimos o parâmetro de frustração por $\alpha = \frac{J_A}{J_F}$. No plano xy , as interações entre os spins Ising nodais são descritas por uma distribuição de probabilidade (*quenched*) do tipo

$$\mathcal{P}(J_{ij}) = p\delta(J_{ij} - J_{eff}) + (1 - p)\delta(J_{ij} - J_A) \quad (4.6)$$

e

$$\mathcal{P}(H_i) = p\delta(H_i - H_{eff}) + (1 - p)\delta(H_i - H), \quad (4.7)$$

onde $p \in [0, 1]$ é a concentração de ligações decoradoras e os operadores σ_i , S_i^ν são restritos aos valores ± 1 . A razão da proposta da distribuição (4.7) está no fato que na ausência do spin decorador ($p = 0$) temos apenas um campo H aplicado nos spins nodais S_i^A e S_j^B que interagem antiferromagneticamente com um acoplamento J_A . Introduzindo o spin decorador ($p \neq 0$), que simula a presença de buracos no material supercondutor, teremos, dependendo da concentração p , um valor efetivo para o campo magnético H_{eff} . Assim sendo, é bastante razoável admitir uma distribuição aleatória tanto para o campo como para a interação de troca entre os spins nodais.

A concentração de buracos criados nas bandas do oxigênio devido à frustração pode variar no intervalo $0 \leq x \leq 2$, tendo o conhecimento de que a supercondutividade substitui o antiferromagnetismo para $x \simeq 0,05 - 0,1$ para o composto $La_{2-x}(Sr, Ba)_xCuO_4$ ($T_c \simeq 40K$) [13] ou para $x \geq 0,30$ no composto $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ ($T_c = 90K$) [36], e a concentração p de ligações decoradas é um número que varia de 0 a 1. Então, existe uma

correspondência de um para um entre a densidade de buracos e p , do tipo $x = 2p$ que nos permitirá fazer inferências com os compostos supercondutores. Portanto, o presente modelo simula qualitativamente o comportamento dos compostos supercondutores *cupratos* de altas temperaturas na sua fase isolante (antiferromagnética). Para o tratamento da fase supercondutora, tem sido utilizado o modelo de Ising decorado aleatoriamente *annealed* [24, 26], onde somente foram obtidos os resultados qualitativos.

Objetivando estudar as propriedades termodinâmicas e a criticalidade do modelo de Ising usando a técnica do operador diferencial via EFT-1, escrevemos o Hamiltoniano (4.2), para um aglomerado de um spin, numa rede cúbica simples (veja figura (4.5)) como

$$\mathcal{H}_1^\nu = S_1^\nu \left[\sum_{\delta_{xy}}^4 J_{1\delta_{xy}} S_{1+\delta_{xy}}^\mu + \lambda J_A \sum_{\delta_z}^2 S_{1+\delta_z}^\mu - H_i \right], \quad (4.8)$$

onde $\nu = A(B)$ e $\mu = B(A)$.

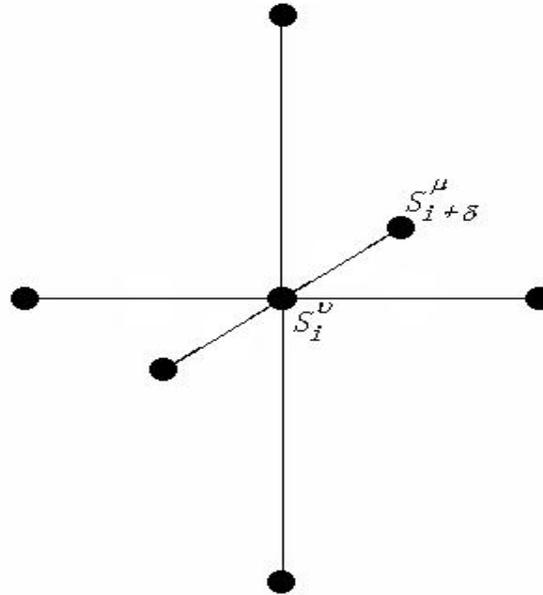


Figura 4.5: Análise por sítio: Primeiros vizinhos do ponto de vista dos átomos de Cobre.

O valor médio da magnetização por spin da subrede ν é escrito como

$$m_\nu = \langle \langle S_1^\nu \rangle \rangle_c, \quad (4.9)$$

onde $\langle \dots \rangle$ é a média térmica e $\langle \dots \rangle_c$ corresponde a média configuracional que será calculada sobre as probabilidades dadas pelas Eqs.(4.6) e (4.7). Portanto, a magnetização da subrede ν fica

$$m_\nu = \langle \langle S_1^\nu \rangle \rangle_c = \left\langle \left\langle \frac{\text{Tr} [S_1^\nu \exp(-\beta \mathcal{H}_1^\nu)]}{\text{Tr} [\exp(-\beta \mathcal{H}_1^\nu)]} \right\rangle \right\rangle_c = \left\langle \left\langle \frac{\partial \ln \mathcal{Z}_1^\nu}{\partial (a^\nu + L_i)} \right\rangle \right\rangle_c, \quad (4.10)$$

sendo $a^\nu = -\sum_{\delta_{xy}}^4 K_{1\delta_{xy}} S_{1+\delta_{xy}}^\mu - \lambda K_A \sum_{\delta_z}^2 S_{1+\delta_z}^\mu$, $K_{1\delta_{xy}} = \beta J_{1\delta_{xy}}$, $K_A = \beta J_A$, $L_i = \beta H_i$ e $\mathcal{Z}_1^\nu = \text{Tr} [\exp(-\beta \mathcal{H}_1^\nu)]$. Substituindo a Eq.(4.8) na Eq.(4.10) e desenvolvendo os cálculos encontramos

$$m_\nu = \langle \langle \tanh(a^\nu + L_i) \rangle \rangle_c. \quad (4.11)$$

Aplicando a técnica do operador diferencial para um aglomerado de um spin que consiste na identidade $e^{aD_x} F(x) = F(x+a)$, a Eq.(4.11) pode ser reescrita como

$$m_\nu = \langle \langle \exp(a^\nu D_x) \tanh(x + L_i)|_{x=0} \rangle \rangle_c. \quad (4.12)$$

Para avaliarmos as exponenciais que aparecem na Eq.(4.12), utilizamos a identidade de Van der Waerden para um sistema de spins com dois estados, isto é, $e^{aS_i^\nu} = \cosh(a) + S_i^\nu \sinh(a)$ que nos expressará as magnetizações das subredes m_A e m_B em termos de múltiplas funções de correlações de spins, como segue

$$m_\nu = \left\langle \left\langle \prod_{\delta_{xy}}^4 (\alpha_x - S_{1+\delta_{xy}}^\mu \beta_x) \prod_{\delta_z}^2 (\alpha_{\lambda x} - S_{1+\delta_z}^\mu \beta_{\lambda x}) \tanh(x + L_i)|_{x=0} \right\rangle \right\rangle_c, \quad (4.13)$$

onde $\alpha_x = \cosh(K_{1\delta_{xy}} D_x)$, $\beta_x = \sinh(K_{1\delta_{xy}} D_x)$, $\alpha_{\lambda x} = \cosh(\lambda K_A D_x)$, $\beta_{\lambda x} = \sinh(\lambda K_A D_x)$.

A Eq.(4.13) é exata mas de difícil manipulação matemática, pois envolve um conjunto infinito de equações acopladas de funções de correlação. A média térmica (e configuracional) que aparece do lado direito desta equação é apenas sobre os spins ligados, e desta forma é particularmente aceitável fazermos uma aproximação a qual os efeitos de correlação de ordens superiores a primeira sejam desconsiderados, ou seja,

$$\langle\langle S_i^\nu . S_j^\nu . S_p^\nu \dots \rangle\rangle_c \simeq \langle\langle S_i^\nu \rangle\rangle_c . \langle\langle S_j^\nu \rangle\rangle_c . \langle\langle S_p^\nu \rangle\rangle_c \dots, \quad (4.14)$$

com $i \neq j \neq p \dots$ e adotamos $m_\nu = \langle\langle S_1^\nu \rangle\rangle_c$. A aproximação (4.14) desconsidera a correlação entre diferentes spins, porém as relações do tipo $\langle\langle (S_i^\nu)^2 \rangle\rangle = \langle\langle (\sigma_i)^2 \rangle\rangle = 1$ são tomadas exatamente na contagem, enquanto a aproximação de campo médio usual despreza todo tipo de correlação. Usando a aproximação (4.14), a Eq.(4.13) ficará

$$m_\nu \simeq \left\langle \left(X_A - S_{1+\delta_{xy}}^\mu Y_A \right)^4 \left(X_{\lambda A} - S_{1+\delta_z}^\mu Y_{\lambda A} \right)^2 g(x) \Big|_{x=0} \right\rangle_c, \quad (4.15)$$

sendo

$$X_{\lambda A} = \langle\alpha_{\lambda x}\rangle_c = \cosh(\lambda K_A D_x), \quad (4.16)$$

$$Y_{\lambda A} = \langle\beta_{\lambda x}\rangle_c = \sinh(\lambda K_A D_x), \quad (4.17)$$

$$X_A = \langle\alpha_x\rangle_c = p \cosh(K_{eff} D_x) + (1-p) \cosh(\alpha K_F D_x), \quad (4.18)$$

$$Y_A = \langle\beta_x\rangle_c = p \sinh(K_{eff} D_x) + (1-p) \sinh(\alpha K_F D_x), \quad (4.19)$$

e

$$g(x) = \langle\tanh(x + L_i)\rangle_c = p \tanh(x + L_{eff}) + (1-p) \tanh(x + L), \quad (4.20)$$

onde devemos lembrar que a presença do campo magnético faz com que a função $g(x)$ não tenha mais uma paridade bem definida, conforme temos discutido no capítulo 3 desta

tese. Assim sendo, expandindo a Eq.(4.15) em potências de m_A e m_B ficaremos

$$m_\nu = \sum_{n=0}^4 \sum_{q=0}^2 C_{nq}(T, \lambda, H, \alpha, p) m_\mu^{n+q}, \quad (4.21)$$

com

$$C_{nq}(T, \lambda, H, \alpha, p) = (-1)^{n+q} \binom{4}{n} \binom{2}{q} X_A^{4-n} X_{\lambda A}^{2-q} Y_A^n Y_{\lambda A}^q g(x)|_{x=0}, \quad (4.22)$$

onde os coeficientes $C_{nq}(T, \lambda, H, \alpha, p)$ são obtidos analiticamente através da relação $e^{(aD_x)}F(x) = F(x+a)$, porém omitiremos por serem demasiadamente grandes.

4.3 Limite de estabilidade da fase Antiferromagnética

Introduzindo as variáveis $m = \frac{1}{2}(m_A + m_B)$, definida como a magnetização uniforme ou magnetização total do sistema e $m_s = \frac{1}{2}(m_A - m_B)$, definida por magnetização *staggered*, podemos reescrever a Eq.(4.21) em termos dessas novas variáveis m e m_s , ou seja,

$$m + m_s = \sum_{n=0}^4 \sum_{q=0}^2 C_{nq}(T, \lambda, H, \alpha, p) [m - m_s]^{n+q} \quad (4.23)$$

e

$$m - m_s = \sum_{n=0}^4 \sum_{q=0}^2 C_{nq}(T, \lambda, H, \alpha, p) [m + m_s]^{n+q}, \quad (4.24)$$

onde usamos o fato de que $m_A = m + m_s$ e $m_B = m - m_s$. Entretanto, estamos interessados em estudar a criticalidade desse sistema, ou seja, próximo à temperatura crítica. Neste caso, a magnetização *staggered*, m_s (parâmetro de ordem do sistema) tende a zero com a aproximação da temperatura de Néel, permitindo considerar apenas os termos lineares em m_s na Eq.(4.23) ou na Eq.(4.24). Este processo gera um conjunto de

duas equações acopladas que resolvidas simultaneamente, obtém-se assim os diagramas de fase, ou seja,

$$A_o(T, \lambda, H, \alpha, m_o, p) = m_o, \quad (4.25)$$

e

$$A_1(T, \lambda, H, \alpha, m_o, p) = 1, \quad (4.26)$$

com

$$A_o(T, \lambda, H, \alpha, m_o, p) = \sum_{n=0}^4 \sum_{q=0}^2 m_o^{n+q} C_{nq}(T, \lambda, H, \alpha, p), \quad (4.27)$$

e

$$A_1(T, \lambda, H, \alpha, m_o, p) = \sum_{n=0}^4 \sum_{q=0}^2 (-1)^{p+q} m_o^{n+q-1} C_{nq}(T, \lambda, H, \alpha, p), \quad (4.28)$$

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

Resolvendo numericamente as Eqs.(4.25) e (4.26) construímos os diagramas de fases nos planos (T_N, H) para diferentes valores de p e α e (T_N, p) para vários valores de H e α .

Nas Figs.(4.6) e (4.7) apresentamos os diagramas de fases do metamagneto de Ising quase-2d no plano $H - T$ para diferentes valores de α e p com o parâmetro de anisotropia $\lambda = 10^{-5}$. Obtemos linhas críticas de transição de segunda ordem que dividem a fase antiferromagnética com campo induzido, cujo parâmetro de ordem $m_s \neq 0$, da fase paramagnética, onde $m_s = 0$. Da Fig.(4.6) observamos que $H_c(p, \alpha)$ aumenta com o parâmetro de frustração α assim como $T_N(p, \alpha)$ indica a mudança na criticalidade do sistema com o parâmetro α . Observamos na Fig.(4.7) que T_N diminui à medida que a concentração de buracos p aumenta, porém o campo crítico H_c independe da concentração p . Em ambos os gráficos temos um comportamento regular para T_N , que decresce monotonicamente com o aumento do campo magnético se anulando no campo crítico H_c .

Na Fig.(4.8) apresentamos o comportamento de T_N *versus* p para diversos valores do campo H com $\alpha = 0.6$, onde observamos também um decréscimo de T_N à medida que au-

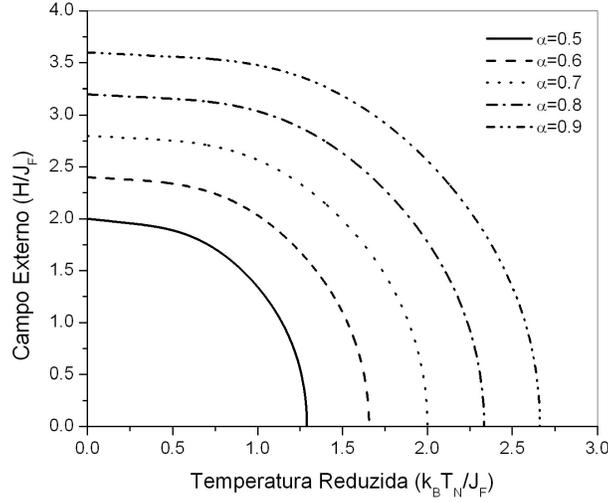


Figura 4.6: Diagrama de fase no plano (T, H) para o metamagneto de Ising quase- $2d$ aleatoriamente decorado com diferentes valores do parâmetro da frustração α e a concentração $p = 0.1$.

mentamos a concentração de buracos p , e se anulando numa concentração crítica p_c , como esperado fisicamente. Para os valores do campo $H = 0.5, 1.0$ e 1.5 , o fenômeno da reen-trância é observado sendo sua origen relacionada com as flutuações térmicas na frustração e nas funções de correlações spin-spin. Ou seja, podemos considerar que o Hamiltoniano de interação entre os spins decoradores e os spins nodais é da forma $-J_F \sigma(S_1 + S_2)$. À medida que p aumenta, em baixas temperaturas o estado antiferromagnético se torna instável devido a "diluição" do acoplamento ferromagnético efetivo induzido nas ligações decoradas. Como esta concentração é ainda muito pequena para suportar uma ordem ferromagnética de longo alcance, o sistema tenderá a fazer uma transição de fase para um estado paramagnético de modo a minimizar sua energia livre. Contudo, à medida que a temperatura aumenta o sistema preferirá retornar sua ordem antiferromagnética, uma vez que este estado satisfaz diretamente a interação antiferromagnética $J_A S_1 S_2$ entre os spins nodais e liberará o spin decorador para fazer uma grande contribuição à entropia

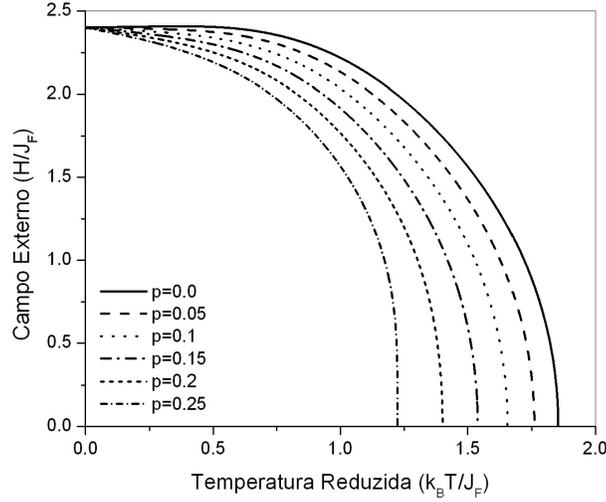


Figura 4.7: Diagrama de fase no plano (T, H) para o metamagneto de Ising quase- $2d$ aleatoriamente decorado com diferentes valores da concentração de buracos p e parâmetro de frustração $\alpha = 0.6$.

do sistema, minimizando desta forma sua energia livre. Essa idéia é baseada no fato de que o comportamento reentrante foi experimentalmente observado em supercondutores de alta T_c $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ em baixas temperaturas [36]. Na Fig.(4.9) apresentamos o comportamento de T_N versus p para diversos valores do parâmetro de frustração α e o campo externo $H = 1.0$, onde também observamos um decréscimo de T_N à medida que aumentamos a concentração dos íons de oxigênio p , novamente se anulando à uma concentração crítica p_c . Para o estado fundamental ($T = 0$), a partir das equações (4.25) e (4.26) conseguimos obter uma complexa seqüência não uniforme de convergência para uma determinada concentração crítica, sendo elas: $p_c(0.3 \leq \alpha < 0.4) = 0.111$, $p_c(0.4 \leq \alpha < 0.5) = 0.2806$, $p_c(\alpha = 0.5) = 0.3312$, $p_c(0.5 < \alpha < 0.6) = 0.4237$, $p_c(0.6 \leq \alpha < 0.7) = 0.6510$, $p_c(\alpha = 0.75) = 0.7349$ e $p_c(0.75 < \alpha < 0.88) = 0.8450$. O estado reentrante aparece para alguns valores do parâmetro de frustração.

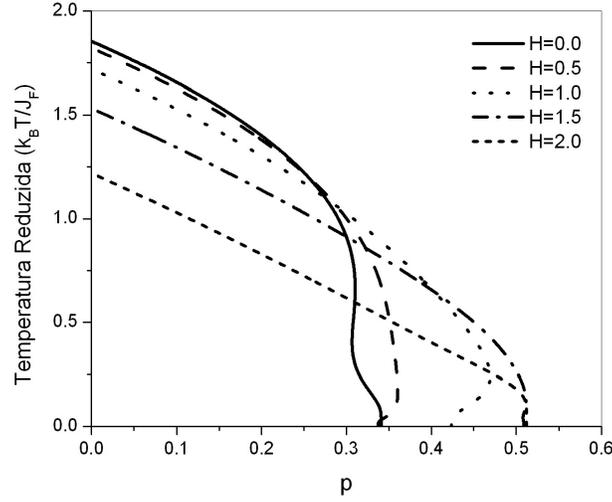


Figura 4.8: Dependência da temperatura crítica como função da concentração p para o metamagneto Ising quase- $2d$ aleatoriamente decorado com $\alpha = 0.6$ e vários valores de H .

4.3.1 Na ausência de campo externo

No caso particular de ausência de campo externo, temos que a condição de ligação para a fase antiferromagnética nos mostra que

$$m_A = -m_B. \quad (4.29)$$

Desta forma a termodinâmica pode ser descrita analisando apenas uma subrede, uma vez que as propriedades da outra é idêntica, porém de sinal contrário. Usando a condição de contorno (4.29) na Eq.(4.21) obtemos a equação de estado

$$m_A = (X_A + m_A Y_A)^4 (X_{\lambda A} + m_A Y_{\lambda A})^2 \tanh(x)|_{x=0}. \quad (4.30)$$

Por outro lado, sendo a função $\tanh(x)$ ímpar, então o resultado de qualquer combinação de operadores diferenciais pares $\hat{\varphi}_{par}(D_x)$ aplicadas nessas funções será identicamente

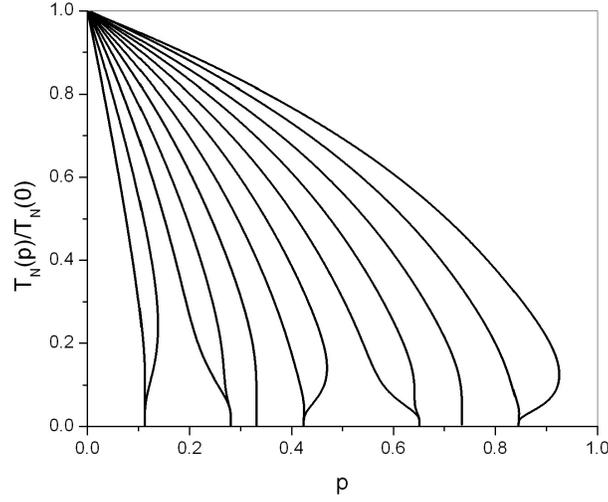


Figura 4.9: Dependência da temperatura crítica do metamagneto Ising quase- $2d$ aleatoriamente decorado com o parâmetro p com $H = 1.0$ e diferentes valores do parâmetro de frustração α indicado nas curvas crítica em ordem crescente $\alpha = 0.3, 0.35, 0.4, 0.45, 0.5, 0.55, 0.6, 0.65, 0.7, 0.75, 0.8$ e 0.85 .

nulo. Portanto, a Eq.(4.30) ficará reescrita como

$$m_A = A_1 m_A + A_3 m_A^3 + A_5 m_A^5, \quad (4.31)$$

com

$$A_1(T, \lambda, \alpha, p) = (2X_{\lambda A} Y_{\lambda A} X_A^4 + 4X_A^3 Y_A X_{\lambda A}^2) \tanh(x) |_{x=0}, \quad (4.32)$$

$$A_3(T, \lambda, \alpha, p) = (4Y_{\lambda A}^2 Y_A X_A^3 + 4X_{\lambda A}^2 X_A Y_A^3 + 12X_{\lambda A} Y_{\lambda A} X_A^2 Y_A^2) \tanh(x) |_{x=0} \quad (4.33)$$

e

$$A_5(T, \lambda, \alpha, p) = (4Y_{\lambda A}^2 Y_A^3 X_A + 2X_{\lambda A} Y_{\lambda A} Y_A^4) \tanh(x) |_{x=0}. \quad (4.34)$$

A temperatura crítica T_N como função dos parâmetros p , λ e α são obtidos da

Eq.(4.31) com o limite de $m_A \rightarrow 0$, o que nos dá

$$A_1(T, \lambda, \alpha, p) = 1. \quad (4.35)$$

Resolvendo numericamente a Eq.(4.35) para diferentes valores de α , observamos que T_N decresce quando aumenta a concentração p , se anula em uma concentração crítica p_c . Novamente, porém para o caso em que $H = 0$, vemos que a partir da Eq.(4.35) obtemos uma seqüência, não uniforme, convergindo para uma determinada concentração crítica, como mostra a figura (4.10).

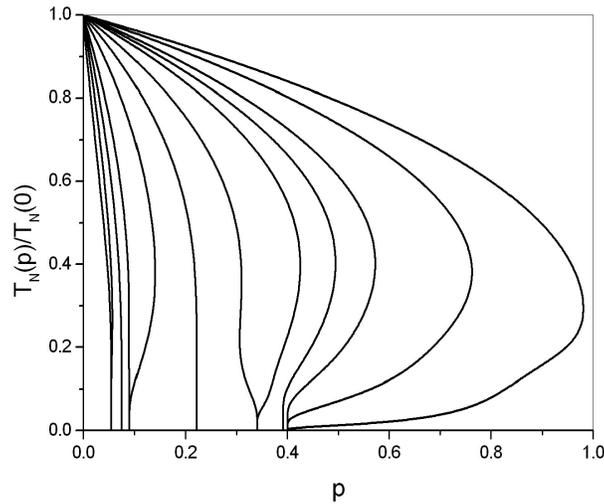


Figura 4.10: Diagrama de fase no espaço (T, p) para o modelo de Ising quase- $2d$ aleatoriamente decorado e diferentes valores do parâmetro de frustração α indicado nas curvas crítica em ordem crescente $\alpha = 0.1, 0.2, 0.25, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.75, 0.8, 0.9$ e 0.98 .

Na tabela (IV.1) apresentamos os possíveis valores para p_c para o caso quase bi-dimensional ($\lambda = 10^{-5}$) utilizando o método da mecânica estatística usual (I) [37] e o do nosso trabalho utilizando o modelo de transformação decoração (II). O resultado obtido aqui nos indica claramente que a utilização do método (I) apresenta resultado

Método	$[0, \frac{1}{4})$	$\alpha = \frac{1}{4}$	$(\frac{1}{4}, \frac{1}{2})$	$\alpha = \frac{1}{2}$	$(\frac{1}{2}, \frac{3}{4})$	$\alpha = \frac{3}{4}$	$(\frac{3}{4}, 1]$
Ref. [37]	0.1056	0.1315	0.1712	0.3703	0.782	0.817	0.852
Presente trabalho	0.0552	0.0753	0.0909	0.2224	0.3409	0.3914	0.4005

Tabela IV.1: Valores da concentração crítica p_c para o modelo de Ising quase- $2d$ aleatoriamente decorada utilizando o método da mecânica estatística usual (I) [37] e utilizando a transformação decoração (II) para vários valores do parâmetro de frustração α .

superestimado comparado com o método (II), ou seja, $\{p_c^I \simeq 2p_c^{II}\}$, mostrando assim a grande diferenciação nos resultados.

A influência do parâmetro α (decréscimo) é enfraquecer a ordem AF , onde a temperatura de Néel T_N decresce assim que p cresce, tornando-se nula para $p \geq p_c(\alpha)$. Para certos valores de α , por exemplo, $\alpha = 0.4, 0.7$ e 0.8 , o fenômeno da reentrância é observado.

Para ilustrarmos melhor o efeito de frustração, apresentamos a figura (4.11) que mostra o comportamento crítico da temperatura reduzida $\frac{K_B T}{J_F}$ versus o parâmetro de frustração α para diferentes valores da concentração p . Observamos que T_N decresce monotonicamente quando α cresce e tende a zero para $\alpha_c(p) = 0, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}$ e 1 , tal valor crítico depende da concentração. Nesta figura observamos o fenômeno da reentrância, dependendo do valor da concentração.

Na Fig.(4.12) apresentamos uma comparação entre os resultados experimentais dos compostos $LaCuO$ [38, 39] e $YBaCu$ [39, 40] com os resultados numéricos da temperatura de Néel normalizada $T_N(x)/T_N(0)$ em função da concentração dos buracos normalizada x/x_c . Os valores do parâmetro de frustração α que melhor se ajustam aos dados experimentais são $\alpha = 0.2, 0.3$ e 0.5 . Para estes mesmos valores de α apresentamos o comportamento da temperatura em função da concentração x na presença de um campo externo. Porém, não existe na literatura resultados experimentais com os quais possamos comparar nossos resultados numéricos, no caso acima citado.

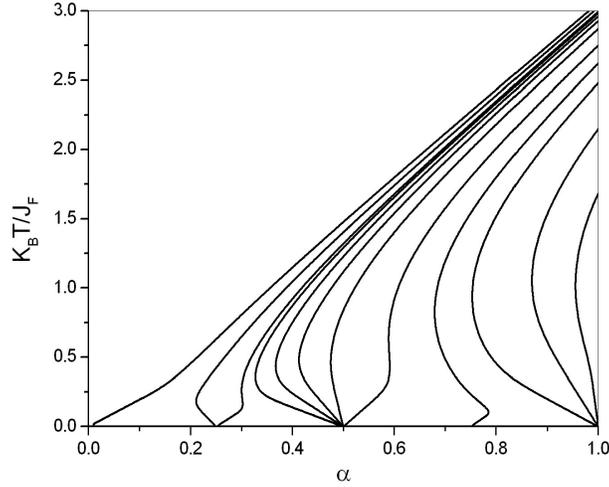


Figura 4.11: Diagrama de fase no espaço (T, α) para o modelo de Ising quase- $2d$ aleatoriamente decorado e diferentes valores da concentração p indicado nas curvas crítica em ordem crescente $p = 0.03, 0.06, 0.09, 0.1, 0.12, 0.15, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.7$ e 0.9 .

4.4 Propriedades Termodinâmicas

4.4.1 Magnetização Total e Alternada (*Staggered*)

Resolvendo numericamente o conjunto de Eqs.(4.23) e (4.24) para T, λ, H, α, p fixos, obtemos as dependências de $m(T)$ e $m_s(T)$ em função da temperatura. Na ausência de campo externo ($H = 0$), esperamos fisicamente que as magnetizações das subredes A e B sejam opostas (i.e., $m_A = -m_B$) e diferentes de zero para $T < T_N(0)$, portanto, como resultado das Eqs.(4.23) e (4.24), temos que a magnetização induzida m é nula e m_s decrescerá gradualmente a zero com o aumento da temperatura T . O comportamento assintótico para o parâmetro de ordem m_s quando se aproxima de $T = T_N(0)$ segue uma lei de potência com expoente crítico $\beta = \frac{1}{2}$, sendo igual ao resultado clássico (campo médio). Por outro lado, à medida que aumentamos o campo magnético H temos o surgimento de uma magnetização induzida m , que, para pequenos valores de H , satisfaz

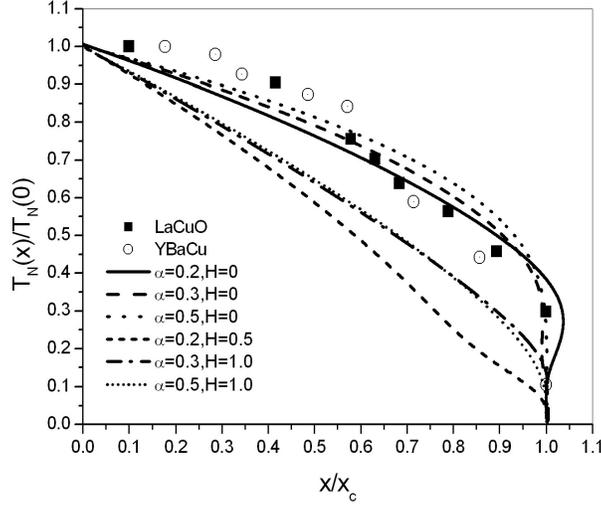


Figura 4.12: $T_N(x)/T_N(0)$ versus a concentração de buracos normalizada x/x_c . As linhas cheias representam os resultados numéricos para $\alpha = 0.2, 0.3; 0.5$. Os símbolos são dos resultados experimentais; LaCuO: (■)[38, 39] e YBaCu: (○)[39, 40].

a relação linear $m \simeq \chi_0 H$, onde χ_0 é a susceptibilidade magnética a campo nulo.

Nas figuras (4.13) - (4.17) apresentamos o comportamento da magnetização alternada (*staggered*) m_s em função da temperatura para valores das variáveis p , α e H . Um comportamento contínuo do parâmetro de ordem m_s indica uma transição de fase de segunda ordem entre o estado ordenado (AF) e paramagnético (P) e, diminui à medida que a temperatura aumenta, se anulando em $T = T_N(p, H, \alpha)$. Para p e α fixos, observamos que o parâmetro de ordem m_s em $T = 0$ (também para $T \neq 0$) diminui à medida que o campo aumenta e se anula no campo crítico $H_c(p, \alpha)$ como está explicitado nas Figs.(4.14) e (4.15). Verificamos, também, que à medida que aumentamos a concentração dos buracos de oxigênio p ou diminuimos o parâmetro de frustração α o valor da magnetização m_s em $T = 0$ é menor do que 1, de acordo com as figuras (4.13), (4.15), (4.16) e (4.17). A temperatura crítica diminui, o que é fisicamente esperado, pois uma vez que o número de íons de oxigênio aumenta, mais ferromagnético fica o sistema, enfraquecendo desta forma

a ordem antiferromagnética e assim diminuindo sua temperatura crítica e o valor da magnetização. Nas Figs.(4.16) e (4.17) quando a concentração p aumenta, a magnetização em $T = 0$ decresce, e, para certos valores de p (em particular para $\alpha = 0.6$ temos $p \geq 0.2$), observamos um aumento de $m_s(T)$ com a presença de um ponto de máximo. Quando a concentração do spin decorador (aumento do efeito da frustração) é maior que um certo valor crítico, o estado fundamental é desordenado e o comportamento reentrante aparece com a presença de duas temperaturas críticas (curva com concentração $p = 0.46$). Para valores de concentrações $p > p_c$, a fase antiferromagnética é completamente destruída (ausência do parâmetro de ordem, i.e., $m_s(T) = 0$ para qualquer valor de T).

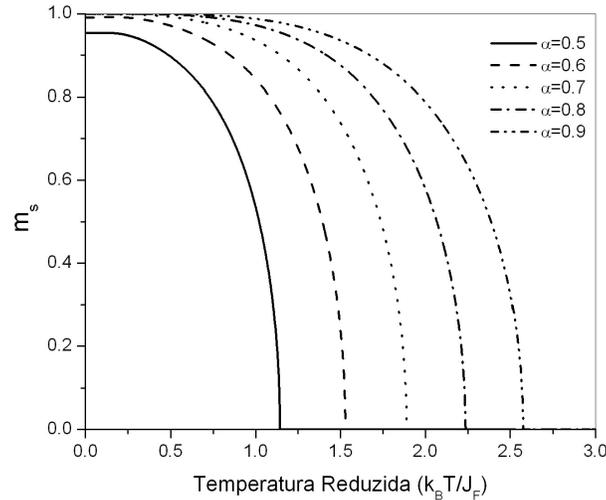


Figura 4.13: Magnetização alternada do modelo de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do parâmetro de frustração α com $H = 1.0$ e $p = 0.1$.

Nas figuras (4.18) - (4.22) temos o comportamento da magnetização total m para vários valores de p , α e H , onde o ponto máximo indica a temperatura de transição do sistema.

A presença do campo externo ($H > 0$) neste modelo AF faz com que $|m_A| > |m_B|$, por

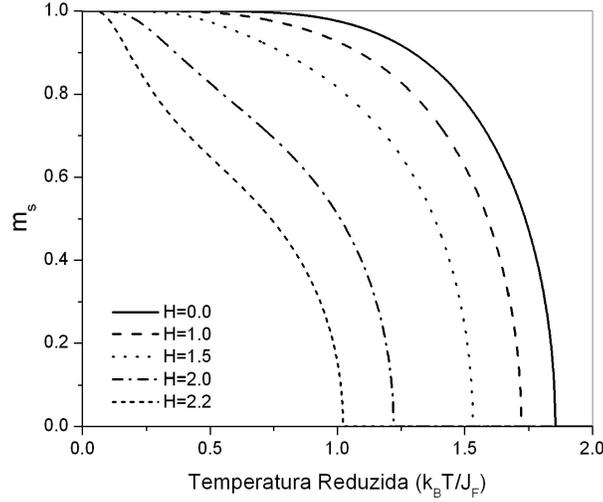


Figura 4.14: Magnetização alternada do modelo de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do campo externo com $\alpha = 0.6$ e $p = 0.0$.

causa da indução da magnetização na direção axial (direção de m_A). Em baixas temperaturas [$T < T_N$], temos um crescimento da magnetização em consequência da existência de uma ordem AF ($m_s \neq 0$) no sistema. Já em altas temperaturas [$T > T_N$] a ordem AF é destruída ($m_s = 0$) e a magnetização decresce com o aumento da temperatura, representando o comportamento da magnetização induzida por campo de um sistema paramagnético [$T > T_N$]. Assim sendo, para vários valores do campo $H < H_c(p, \alpha)$ a magnetização apresenta um pico com derivada descontínua em $T = T_N(H, p, \alpha)$ caracterizando, desta forma, a transição de segunda ordem deste modelo.

Para altos valores do campo magnético ($H > H_c$), a ordem AF é destruída ($m_s = 0$) e o comportamento da magnetização é semelhante a de um sistema paramagnético, isto é, $m(T, H, p, \alpha)$ decresce com o aumento da temperatura. Nas Figs.(4.18), (4.20) - (4.22), o valor da magnetização total em $T = 0$, cresce com o aumento da concentração dos íons de oxigênio ou com a diminuição do parâmetro de frustração α . O comportamento reentrante apresentado na Fig.(4.8), com $H = 1.0$ e $\alpha = 0.6$, é também refletido na

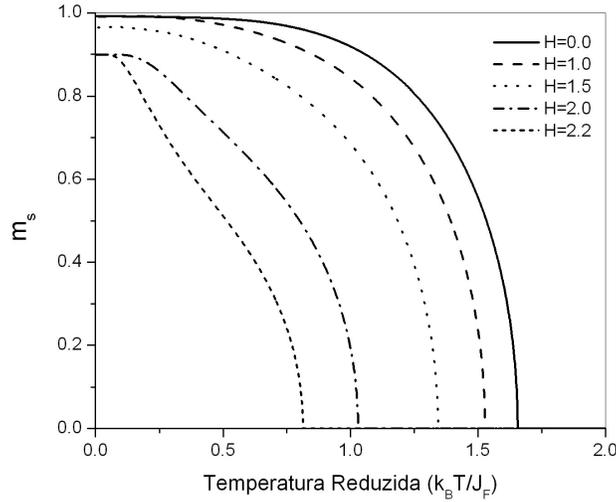


Figura 4.15: Magnetização alternada do modelo de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do campo externo com $\alpha = 0.6$ e $p = 0.1$.

magnetização total, pois próximos a uma região de reentrância a mesma apresenta um mínimo (veja Fig.(4.22)).

4.4.2 Susceptibilidade Magnética

A susceptibilidade é, talvez, a grandeza física mais importante no estudo de sistemas magnéticos, uma vez que descreve as características na mudança da magnetização com um campo aplicado e apresenta como principal característica um comportamento singular na temperatura crítica quando o campo externo é nulo. Portanto, sua determinação é feita na presença de um campo aplicado ao sistema.

Matematicamente, a susceptibilidade de um sistema magnético a campo nulo é obtida através da seguinte relação

$$\chi = \left(\frac{\partial m}{\partial H} \right)_{H=0}. \quad (4.36)$$

Aqui, no entanto, estamos interessados em calcular a susceptibilidade magnética total

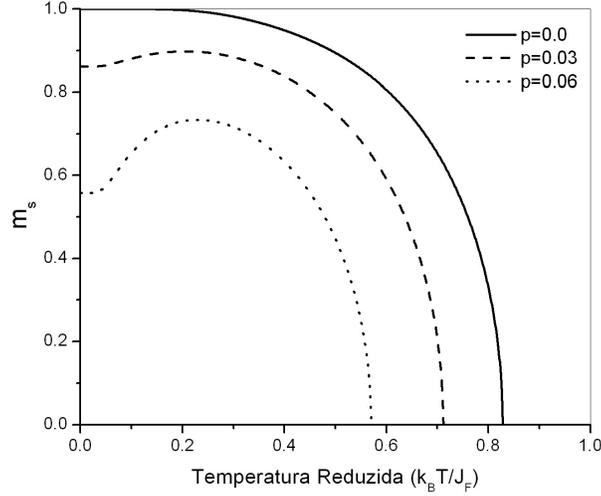


Figura 4.16: Magnetização alternada do modelo de Ising quase-2d em função da temperatura reduzida para diversos valores da concentração com $\alpha = 0.3$ e $H = 0.6$.

do sistema, χ , e a susceptibilidade magnética alternada (*staggered*) χ_s . Nesse caso é importante introduzirmos o chamado campo *staggered* H_{st} conjugado ao parâmetro de ordem m_s . A adição do campo H_{st} age diretamente na magnetização de subrede com as seguintes considerações: sobre sítios pertencentes a subrede A (spin *up*), o termo do campo externo no Hamiltoniano (4.2) será dado

$$\mathcal{H}_A = -H_A \sum_{i \in A} S_i^A, \quad (4.37)$$

e nos sítios pertencentes a subrede B (spin *down*), o termo do campo fica

$$\mathcal{H}_B = -H_B \sum_{i \in B} S_i^B. \quad (4.38)$$

Onde $H_A = H + H_{st}$ e $H_B = H - H_{st}$ são os campos atuantes nas subredes A e B , respectivamente.

A susceptibilidade *staggered* é obtida a partir da definição

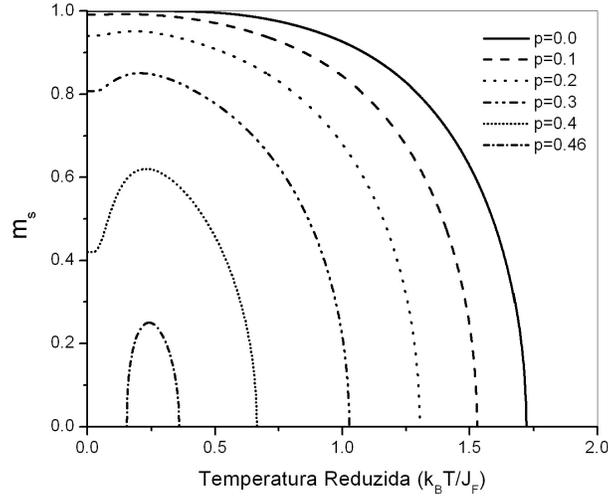


Figura 4.17: Magnetização alternada do modelo de Ising quase-2d em função da temperatura reduzida para diversos valores da concentração com $\alpha = 0.6$ e $H = 1.0$.

$$\chi_{st} = \left(\frac{\partial m_s}{\partial H_{st}} \right)_{H_{st}=0}, \quad (4.39)$$

e está relacionada a flutuação do parâmetro de ordem divergindo assim em $T = T_N$, segundo o teorema flutuação-dissipação.

Por outro lado, definimos a susceptibilidade total, χ , definida por

$$\chi = \left(\frac{\partial m}{\partial H} \right)_{H_{st}=0}. \quad (4.40)$$

e que está relacionada ao campo externo H e com a magnetização total m do sistema, ao avaliarmos o comportamento de tal magnetização mediante o campo externo H .

Derivando parcialmente as Eqs.(4.23) e (4.24) em relação a H e H_{st} podemos obter χ e χ_{st} , assim

$$\chi = \frac{\Theta}{1 - \Delta}, \quad (4.41)$$

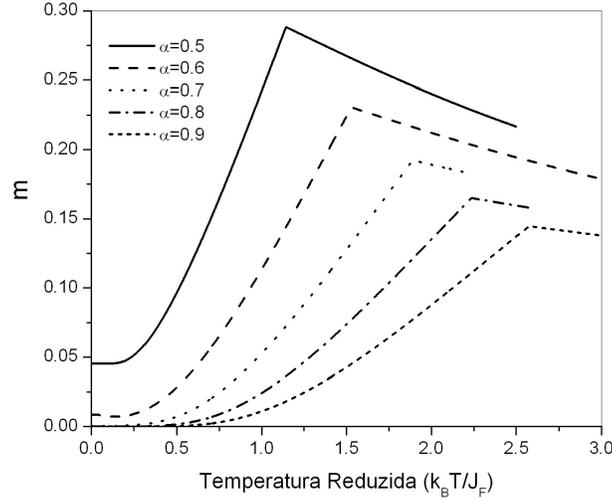


Figura 4.18: Magnetização total do modelo de Ising quase-2d em função da temperatura reduzida para diversos valores do parâmetro de frustração α com $H = 1.0$ e $p = 0.1$.

e

$$\chi_{st} = \frac{\Theta}{1 + \Delta}, \quad (4.42)$$

onde

$$\Theta = \sum_{n=0}^4 \sum_{q=0}^2 [m - m_S]^{n+q} \frac{\partial}{\partial H} [C_{nq}(T, \lambda, H, \alpha, p)]_{H_{st}=0} \quad (4.43)$$

e

$$\Delta = \sum_{n=0}^4 \sum_{q=0}^2 (n + q) [m - m_S]^{n+q-1} C_{nq}(T, \lambda, H, \alpha, p). \quad (4.44)$$

Resolvendo numericamente as Eqs.(4.41) e (4.42), encontramos $\chi(T, \lambda, H, \alpha, p)$ e $\chi_{st}(T, \lambda, H, \alpha, p)$ para diversos valores de $(T, \lambda, H, \alpha, p)$. A dependência da susceptibilidade magnética total é apresentada nas Figs.(4.23) - (4.27) como função da temperatura, variando-se os valores de p, α e H . A descontinuidade que se observa nas curvas, característica de sistemas antiferromagnéticos, sofre influência dos parâmetros p, α e H , e, como conseqüência, teremos uma dependência para $T_N(p, \alpha, H)$. Apesar de não estar explicitado nas curvas (4.24) e (4.25), para $H > H_c$ (depende do α) a susceptibilidade total

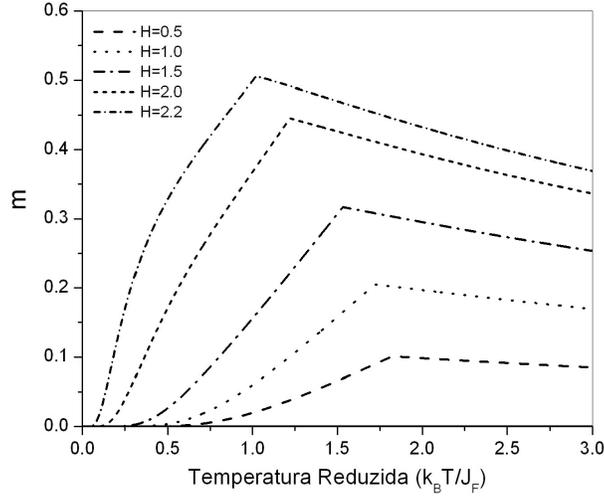


Figura 4.19: Magnetização total do modelo de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do campo externo com $\alpha = 0.6$ e $p = 0.0$.

apresenta um comportamento tipo lei de Curie [$\chi = C/T$]. Evidenciamos a divergência de χ em $T = 0$ quando aumentamos gradualemente o valor do campo nas Figs.(4.24) e (4.25). Nas Figs.(4.23), (4.26) e (4.27), à medida que o parâmetro de frustração α diminui e a concentração dos buracos de oxigênio p aumenta, a temperatura de transição T_N diminui, segundo os resultados do diagrama de fase da Fig.(4.6). Observamos também, que além do deslocamento do ponto de máximo da susceptibilidade com a diminuição do parâmetro α ou o aumento de p , a presença de um comportamento anômalo, com aparecimento de um ponto de mínimo antes da ocorrência da transição de fase (ponto de máximo). Note que nosso modelo, puramente clássico, não deveria ter em seus resultados, a presença de tal comportamento, uma vez que o mesmo é associado à fenômenos quânticos (veja Fig.(4.1)). Neto e de Sousa [9] especulam que para λ pequeno, as flutuações quânticas são predominantes e com o aumento do campo a instabilidade do sistema cresce em direção à desordem. Conclui-se que deve existir um campo em que o comportamento deverá ser de paramagnetismo instável (divergência de χ em $T = 0$) refletindo no aparecimento de

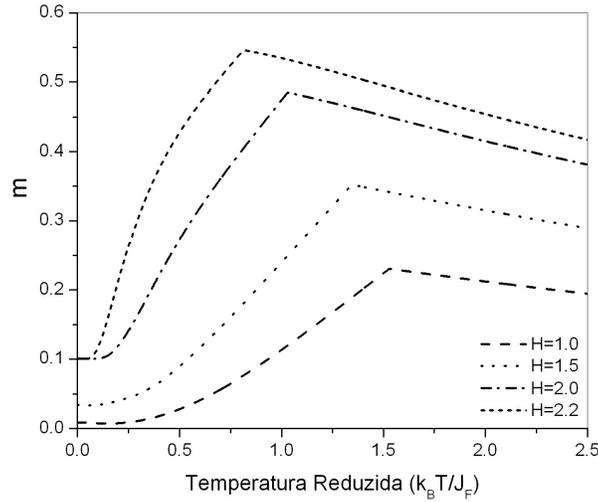


Figura 4.20: Magnetização total do modelo de Ising quase-2d em função da temperatura reduzida para diversos valores do campo externo com $\alpha = 0.6$ e $p = 0.1$.

um mínimo antes de uma transição de fase. Voltando a nosso modelo clássico, verificamos o mesmo comportamento. O que inicialmente parece ser incoerente (um modelo clássico apresentando resultados de origem quântica) pode ser explicado pela introdução, em nosso modelo, da decoração dos átomos de oxigênio na rede. Essa decoração induz um efeito de frustração, que por sua vez deve gerar o comportamento anômalo, uma vez que, só se observa este comportamento quando o valor do parâmetro α é pequeno (maior efeito de frustração).

A susceptibilidade *staggered* é ilustrada nas Figs.(4.28) - (4.32) como função da temperatura e vários valores de p, α e H . Esta susceptibilidade está relacionada com a flutuação do parâmetro de ordem m_s (teorema da flutuação-dissipação) e dessa maneira ela apresentará uma divergência na temperatura crítica com um valor do expoente crítico clássico $\gamma = 1$. Observamos que na Fig.(4.28) a divergência de χ_{st} está se deslocando para a esquerda a medida que α diminui e em $\alpha = 0.5$ e baixas temperaturas apresenta

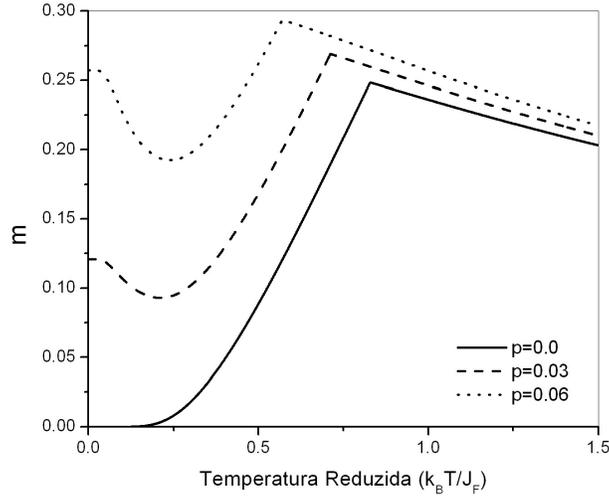


Figura 4.21: Magnetização total do modelo de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores da concentração p com $\alpha = 0.3$ e $H = 0.6$.

um mínimo. Temos também duas temperaturas críticas representando um estado reentrante. Nas Figs.(4.29) e (4.30) a divergência de χ_{st} está se deslocando para a esquerda a medida que o campo aumenta, e para $H > H_c$ teremos um comportamento divergente em $T = 0$ ($T_N = 0$) caracterizado por uma susceptibilidade paramagnética. Na Fig.(4.31) observamos que quando aumentamos o valor de p e em baixas temperaturas χ_{st} apresenta um mínimo antes da divergência. Já na Fig.(4.32) o fenômeno da reentrância aparece pois para $p > 0.1$ existe mais do que uma temperatura crítica.

4.4.3 Energia Interna e Calor específico

Outra propriedade termodinâmica a ser calculada para o modelo descrito pela Eq.(4.2) é a energia interna por partícula do sistema, que para o Hamiltoniano que estamos interessados é dada por

$$u = \langle \mathcal{H}_{eff} \rangle = \frac{1}{2} (\langle \mathcal{H} \rangle_A + \langle \mathcal{H} \rangle_B), \quad (4.45)$$

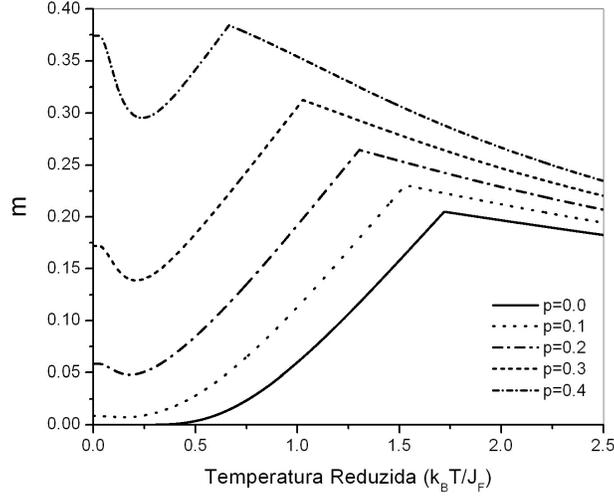


Figura 4.22: Magnetização total do modelo de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores da concentração p com $\alpha = 0.6$ e $H = 1.0$.

onde $\langle \mathcal{H} \rangle_A$ e $\langle \mathcal{H} \rangle_B$ são os valores médios das energias para as subredes A e B , respectivamente com

$$\langle \mathcal{H} \rangle_{A,B} = \left\langle S_1^{(A,B)} (\gamma - H_i) \right\rangle = \left\langle \gamma S_1^{(A,B)} \right\rangle - H_i \left\langle S_1^{(A,B)} \right\rangle, \quad (4.46)$$

sendo

$$\gamma = \sum_{\delta_{xy}}^4 J_{1\delta_{xy}} S_{1+\delta_{xy}}^{(B,A)} + \lambda J_A \sum_{\delta_z}^2 S_{1+\delta_z}^{(B,A)}, \quad (4.47)$$

e utilizando-se da Eq.(4.10) para calcularmos as médias da Eq.(4.46) obtemos

$$\langle \mathcal{H} \rangle_{A,B} = \left\langle \gamma \tanh(-\beta\gamma + \beta H_i) \right\rangle - H_i \left\langle S_1^{(A,B)} \right\rangle. \quad (4.48)$$

Aplicando a técnica do operador diferencial junto com a relação de cinemática do

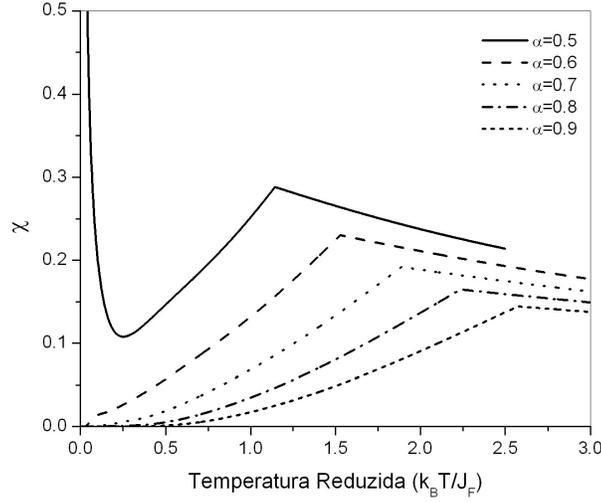


Figura 4.23: Dependência da susceptibilidade total em função da temperatura reduzida para o modelo de Ising quase-2d para vários valores do parâmetro da frustração α com $H = 1.0$ e $p = 0.1$.

spin, encontramos a média da energia interna total por partícula do sistema dada por

$$u = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial (\beta D_x)} \left[\left\langle \prod_{\delta_{xy}}^4 \left[\alpha_x - \left(S_{1+\delta_{xy}}^A + S_{1+\delta_{xy}}^B \right) \beta_x \right] \prod_{\delta_z}^2 \left[\alpha_{\lambda x} - \left(S_{1+\delta_z}^A + S_{1+\delta_z}^B \right) \beta_{\lambda x} \right] \right\rangle \right. \\ \left. \tanh(x + L_i)|_{x=0} \right] - \frac{H_i (m_A + m_B)}{2}, \quad (4.49)$$

onde $\alpha_x = \cosh(K_{1\delta_{xy}} D_x)$, $\beta_x = \sinh(K_{1\delta_{xy}} D_x)$, $\alpha_{\lambda x} = \cosh(\lambda K_A D_x)$ e $\beta_{\lambda x} = \sinh(\lambda K_A D_x)$.

No espírito da teoria de campo efetivo (EFT-1) e tirando a média configuracional a Eq.(4.49) pode ser reescrita como

$$u = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial (\beta D_x)} \left\{ \sum_{n=0}^4 \sum_{q=0}^2 C_{nq}(T, \lambda, H, \alpha, p) [m_A^{n+q} + m_B^{n+q}] \right\} - [p H_{eff} + (1-p) H] m, \quad (4.50)$$

sendo o coeficiente $C_{nq}(T, \lambda, H, \alpha, p)$ dado pela Eq.(4.22). Utilizando as Eqs.(4.16) -(4.22) podemos desenvolver numericamente a Eq.(4.50).

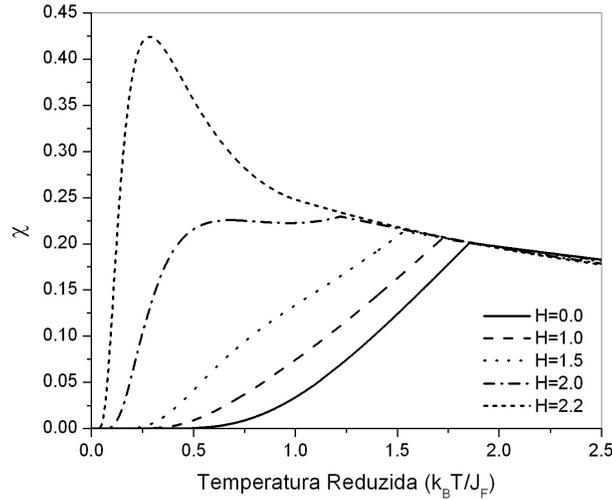


Figura 4.24: Dependência da susceptibilidade total em função da temperatura reduzida para o modelo de Ising quase- $2d$ para vários valores do campo externo com $\alpha = 0.6$ e $p = 0.0$.

Podemos calcular diretamente da Eq.(4.50) uma outra propriedade termodinâmica (calor específico) diferenciando-a numericamente ¹. Todos os coeficientes presentes nas propriedades termodinâmicas desse trabalho foram calculados analiticamente usando a identidade $\exp(aD_x)F(x) = F(x+a)$ com o software MAPLE 9, e são grandes o suficiente para exprimi-los aqui, portanto, omitiremos por achar desnecessários para análise dos resultados.

Nas figuras (4.33) - (4.37) temos o comportamento da energia interna em função da temperatura para diferentes valores das variáveis p , α e H . Para $H < H_c$ ou $p < p_c$ observamos que u decresce em módulo com uma derivada nula em $T = 0$ e apresentando uma descontinuidade (mudança de concavidade) na temperatura de transição do sistema. De maneira geral devemos esperar que para temperaturas próximas de zero, $T \rightarrow 0$, todos os spins devem estar fortemente correlacionados gerando assim uma energia máxima (em

¹Foi utilizado o software Origin 6.0 para encontrar a derivada do calor específico c_H .

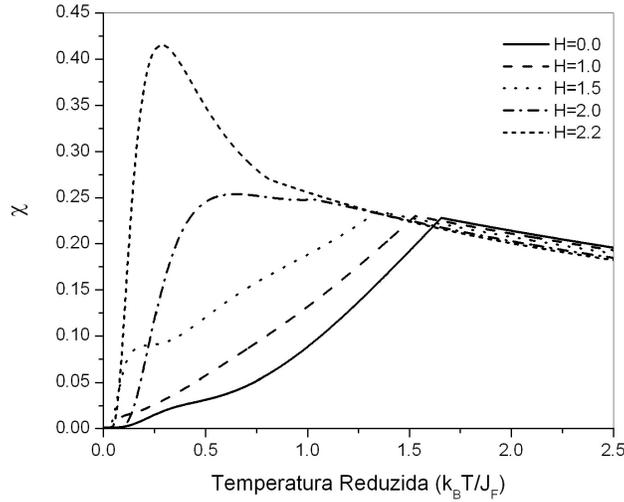


Figura 4.25: Dependência da susceptibilidade total em função da temperatura reduzida para o modelo de Ising quase- $2d$ para vários valores do campo externo com $\alpha = 0.6$ e $p = 0.1$.

módulo) negativa, uma vez que o sistema é antiferromagnético. Para $T \rightarrow \infty$, todas as correlações devem se anular e portanto os spins devem se comportar como sendo livres, resultando em uma energia nula. Quando $H > H_c$ ou $p > p_c$ entramos na fase desordenada e a energia interna é contínua em todo intervalo de temperatura.

Nas figuras (4.38) - (4.42) temos o comportamento do calor específico em função da temperatura para diferentes valores das variáveis p , α e H . Como podemos observar todas as curvas da energia interna apresentam derivadas nulas em $T = 0$, significando que o calor específico é nulo de acordo com a terceira lei da termodinâmica. À medida que a temperatura cresce o calor específico aumenta até atingir uma descontinuidade em $T = T_N(\alpha, p, H)$ caracterizando assim a transição de fase do sistema. À medida que a temperatura aumenta $T > T_N$, o calor específico começa a decrescer e no limite de altas temperaturas, $T \gg T_N$, temos um comportamento assintótico proporcional a $\frac{1}{T^2}$ semelhante ao comportamento do calor específico de um sistema de partículas livres. No

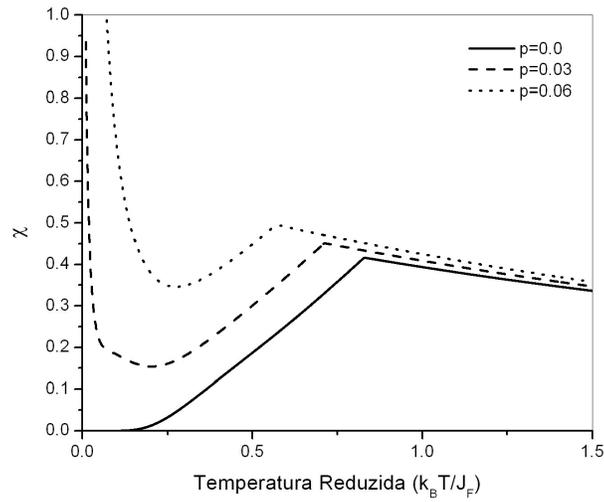


Figura 4.26: Dependência da susceptibilidade total em função da temperatura reduzida para o modelo de Ising quase- $2d$ para vários valores da concentração p com $\alpha = 0.6$ e $H = 1.0$.

caso de altos campos Fig.(4.39) e (4.40) antes de atingir a descontinuidade presenciamos um ponto de máximo.

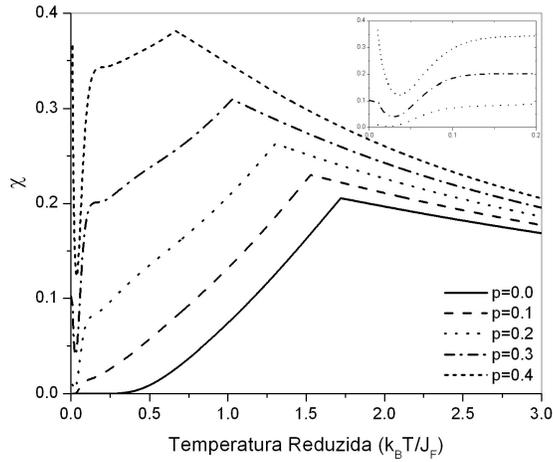


Figura 4.27: Dependência da susceptibilidade total em função da temperatura reduzida para o modelo de Ising quase- $2d$ para vários valores da concentração p com $\alpha = 0.6$ e $H = 1.0$. No detalhe, temos uma ampliação das curvas em ordem crescente das concentrações $p = 0.2, 0.3$ e 0.4 na região de baixas temperaturas.

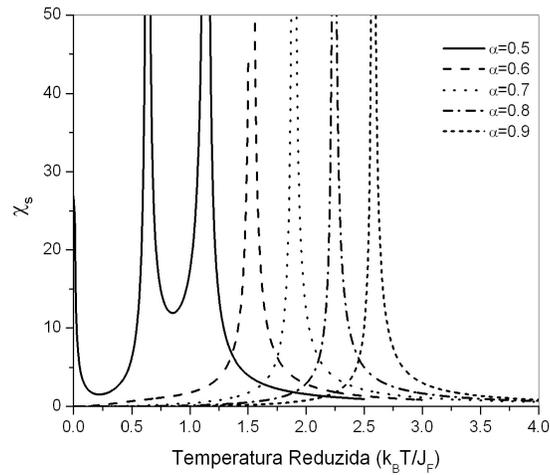


Figura 4.28: Dependência da susceptibilidade *staggered* em função da temperatura reduzida para o modelo de Ising quase- $2d$ para vários valores do parâmetro de frustração α com $H = 1.0$ e $p = 0.1$.

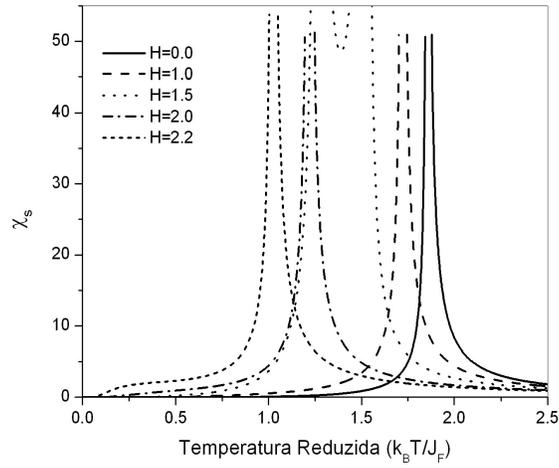


Figura 4.29: Dependência da susceptibilidade *staggered* em função da temperatura reduzida para o modelo de Ising quase- $2d$ para vários valores do campo externo com $\alpha = 0.6$ e $p = 0.0$.

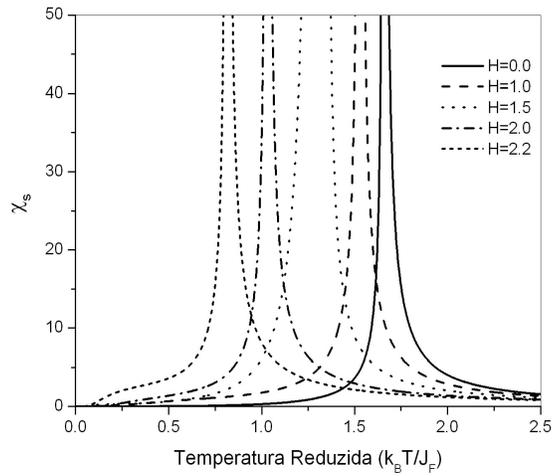


Figura 4.30: Dependência da susceptibilidade *staggered* em função da temperatura reduzida para o modelo de Ising quase- $2d$ para vários valores do campo externo com $\alpha = 0.6$ e $p = 0.1$.

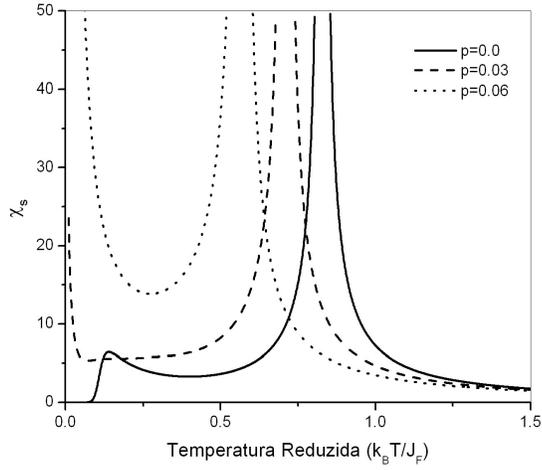


Figura 4.31: Dependência da susceptibilidade *staggered* em função da temperatura reduzida para o modelo de Ising quase-2d para vários valores da concentração p com $\alpha = 0.3$ e $H = 0.6$.

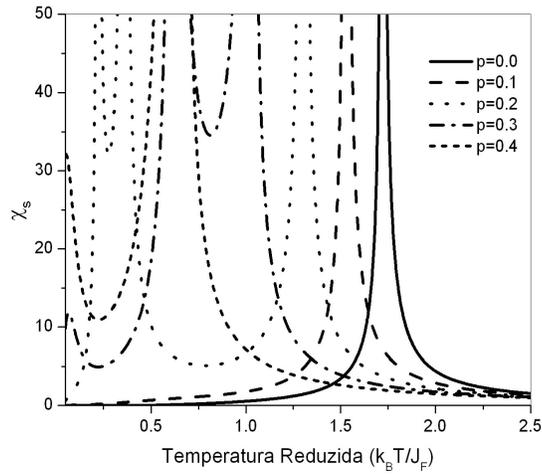


Figura 4.32: Dependência da susceptibilidade *staggered* em função da temperatura reduzida para o modelo de Ising quase-2d para vários valores da concentração p com $\alpha = 0.6$ e $H = 1.0$.

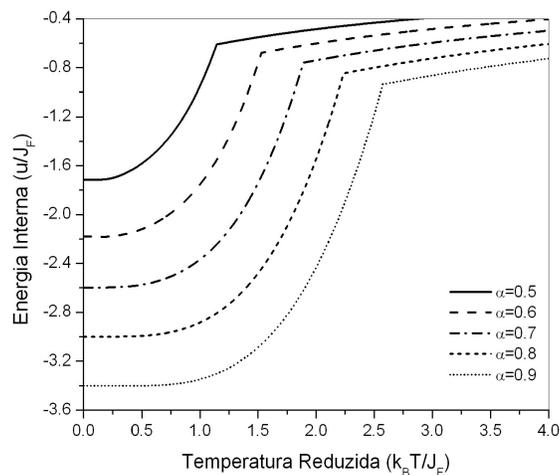


Figura 4.33: Comportamento da energia interna do metamagneto de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do parâmetro da frustração α com $H = 1.0$ e $p = 0.1$.

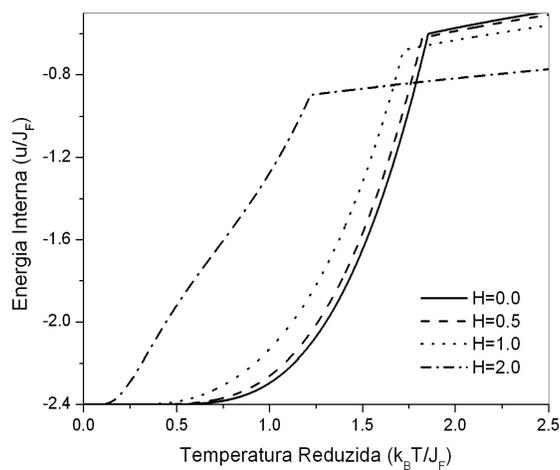


Figura 4.34: Comportamento da energia interna do metamagneto de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do campo externo com $\alpha = 0.6$ e $p = 0.0$.

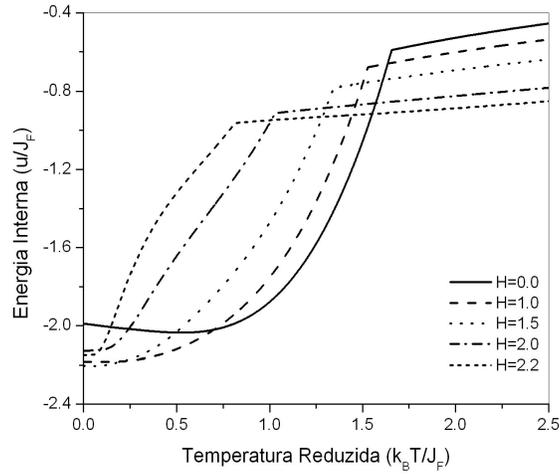


Figura 4.35: Comportamento da energia interna do metamagneto de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do campo externo com $\alpha = 0.6$ e $p = 0.1$.

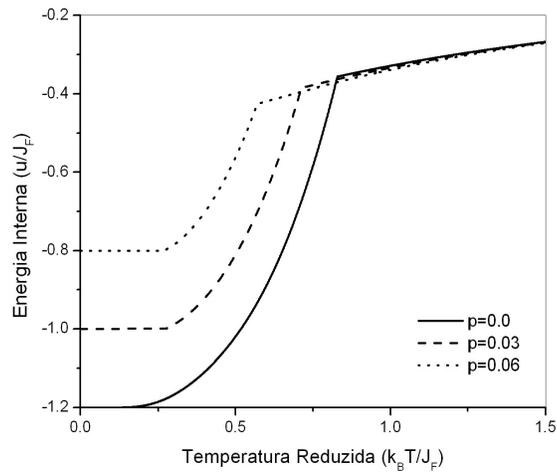


Figura 4.36: Comportamento da energia interna do metamagneto de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores da concentração p com $\alpha = 0.3$ e $H = 0.6$.

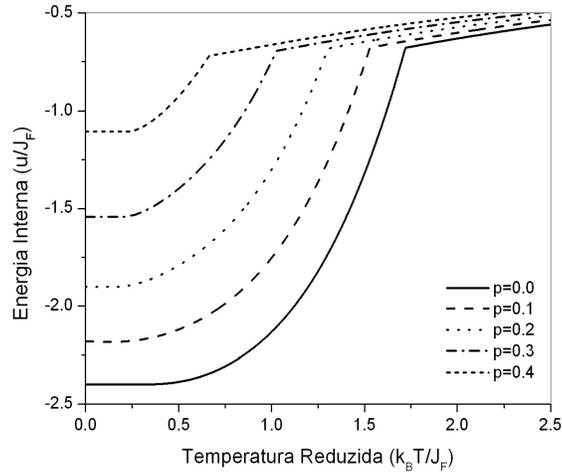


Figura 4.37: Comportamento da energia interna do metamagneto de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores da concentração p com $\alpha = 0.6$ e $H = 1.0$.

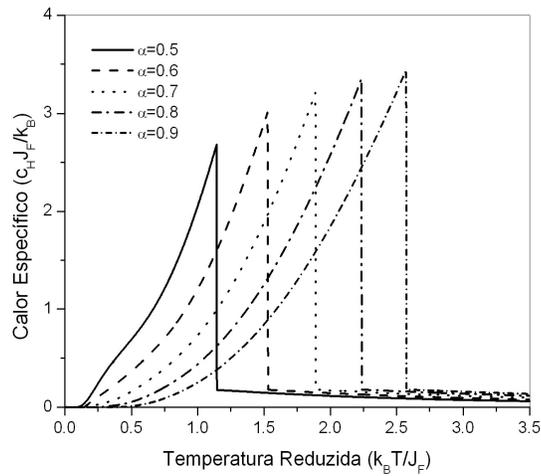


Figura 4.38: Comportamento do calor específico em função da temperatura reduzida no modelo de Ising quase- $2d$ para diferentes valores do parâmetro de frustração α com $H = 1.0$ e $p = 0.1$.

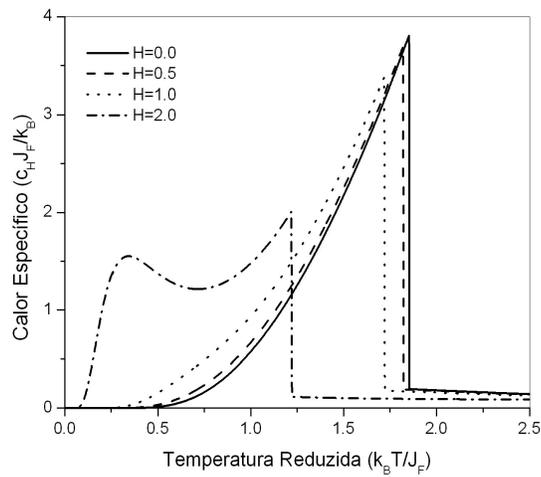


Figura 4.39: Comportamento do calor específico em função da temperatura reduzida no modelo de Ising quase- $2d$ para diferentes valores do campo externo com $\alpha = 0.6$ e $p = 0.0$.

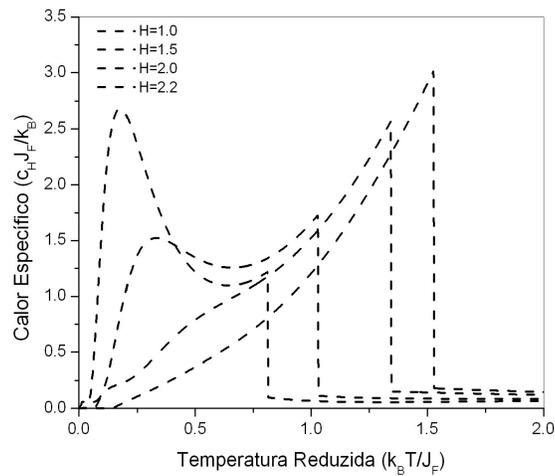


Figura 4.40: Comportamento do calor específico em função da temperatura reduzida no modelo de Ising quase- $2d$ para diferentes valores do campo externo com $\alpha = 0.6$ e $p = 0.1$.

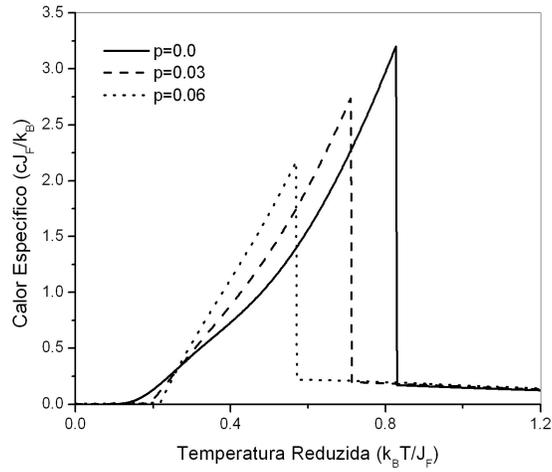


Figura 4.41: Comportamento do calor específico em função da temperatura reduzida no modelo de Ising quase- $2d$ para diferentes valores da concentração p com $\alpha = 0.3$ e $H = 0.6$.

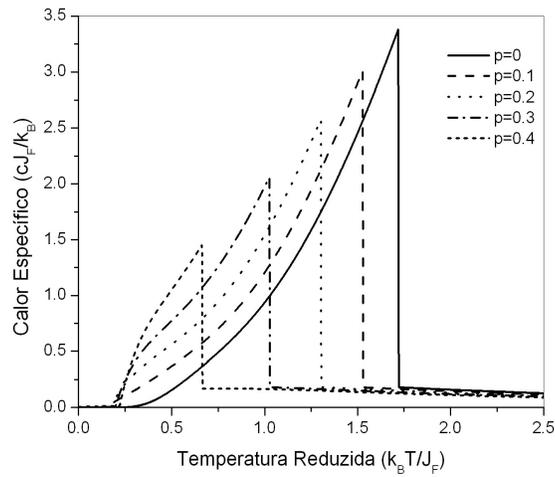


Figura 4.42: Comportamento do calor específico em função da temperatura reduzida no modelo de Ising quase- $2d$ para diferentes valores da concentração p com $\alpha = 0.6$ e $H = 1.0$.

REFERÊNCIAS

- [1] Néel, L., *Ann. Phys.* **17**, 61 (1932).
- [2] Galam, S., Yokoi, C. S. O. e Salinas, S. R., *Phys. Rev. B* **57**, 8370 (1998); Moreira, A. F. S., Figueiredo, W., Henriques, V. B., *Eur. Phys. J. B* **27**, 153 (2002).
- [3] Strylewski, E., Giordano, N., *Adv. Phys.* **26**, 487 (1977); Schmidt, V. A., Friedberg, S. A., *Phys. Rev. B* **1**, 2250 (1970).
- [4] Katsumata, K., Katori, H. A., Shapiro, S. M., Shirane, G., *Phys. Rev. B* **55**, 11466 (1997); Binek, C., Kato, T., Kleemann, W., Petracik, O., Bertrand, D., Bourdarot, F., Burlet, P., Katori, H. A., Kasumata, K., Prokes, K., Welzel, S., *Eur. Phys. J. B* **15**, 35 (2000).
- [5] Selke, W., *Z. Phys. B* **101**, 145 (1996); Pleimling, M., Selke, W., *Phys. Rev. B* **56**, 8855 (1997); Zukovic, M., Idogaki, T., *Phys. Rev. B* **61**, 50 (2000).
- [6] Shirane, G., Endoh, Y., Birgeneau, R. J., Kastner, M. A., Hidaka, Y., Oda, M., Suzuki, M., Murakami, T., *Phys. Rev. Lett.* **59**, 1613 (1987).
- [7] Endoh, Y., et. al., *Phys. Rev. B* **37**, 7443 (1988).
- [8] Cheong, S-W, Fisk, Z., Willis, J. O., Brown, S. E., Thompson, J. D., Remeika, J. P., Cooper, A. s., Aikin, R. M., Schiferl, D., Gruner, G., *Solid State Commun.* **65**, 111 (1988); Cheong, S-W., Thompson, J. D., Fisk, Z., Gruner, G., *Solid State Commun.* **66**, 1019 (1988); Thio, T., Thurston, T. R., Preyer, N. W., Picone, P. J., Kastner, M.

- A., Jensen, H. P., Gaabe, D. R., Chen, C. Y., Birgeneau, R. J., Aharony, A., *Phys. Rev. B* **38**, 905 (1988).
- [9] Collins, R. T., Schlesinger, Z., Shafer, M. W., McGuire, T. R., *Phys. Rev. B* **37**, 5817 (1988).
- [10] Cheong, S-W., Thompson, J. D., Fisk, Z., *Phys. Rev. B* **39**, 4395 (1989).
- [11] Dzyaloshinski, I., *J. Phys. Chem. Solids*. **4**, 241 (1958); Moriya, T., *Phys. Rev.* **120**, 91 (1960).
- [12] Neto, J. C., de Sousa, J. R., (submetido).
- [13] Bednorz, J. G., Müller, K. A., *Z. Phys. B* **64**,189 (1986).
- [14] Emery, V. J., *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2794 (1987); Emery, V. J. e Reiter, G., *Phys. Rev. B* **38**, 4547 (1988); Aharony, A., et al, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1330 (1988).
- [15] Vaknin, D., et al., *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2802 (1987).
- [16] Tranquada, J. M., et al., *Phys. Rev. Lett.* **60**, 156 (1988).
- [17] Guo, Y., Langlois, J. M., Goddard, W. A., *Science* **299**, 896 (1988).
- [18] Vaks, V. G., Larkin, A. I., Ovschinnikov, N., *Sov. Phys. - JETP* **22**,820 (1966).
- [19] Kitatani, H., Miyashita, S., Suzuki, M., *Phys. Lett. A* **108**, 45 (1985).
- [20] Yokota, T., *Phys. Rev. B* **39**, 523 (1989).
- [21] dos Santos, R. J. V., Coutinho, S., *J. Phys. A* **20**, 5667 (1987).
- [22] Dinger, T. R., et al., *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2687 (1987); Worthington, T. K., Gallagler, W. J., Dinger, T. R., *Phys. Rev. Lett.* **59**, 1160 (1987).
- [23] Lyra, M. L., da Silva, C. R., *Phys. Rev. B* **47**, 526 (1993).

- [24] dos Santos, R. J. V., Fittipaldi, I. P., Alstron, P., Stanley, H. E., *Phys. Rev. B* **40**, 4527 (1989).
- [25] de Oliveira, P. M. C., Penna, T. J. P., *Physica A* **163**, 458 (1990).
- [26] Paul, P., Mattis, D. C., *Phys. Rev. B* **44**, 2384 (1991).
- [27] Fittipaldi, I. P., de Sousa, J. R., dos Santos, R. J. V., *J. Magn. Magn. Mater.* **104-107**, 279 (1992).
- [28] de Sousa, J. R., Araújo, I. G., *J. Magn. Magn. Mater.* **219**, 355 (2000).
- [29] Fisher, M. E., *Phys. Rev.* **113**, 969 (1959).
- [30] Syozi, I., *Phase Transition and Critical Phenomena*, editado por Domb, C., Green, M. S., Academic Press, New York, 1972, **Vol. I**.
- [31] Jascur, M., Strecka, J., *J. Magn. Magn. Mater.* **272-276**, 984 (2004)
- [32] Strecka, J. Jascur, M., *J. Magn. Magn. Mater.* **260**, 415 (2003); *Phys. Rev. B* **66**, 174415 (2002).
- [33] Kaneyoshi, T., Shin, S., *Physica A* **278**, 1 (2000); Kaneyoshi, T., Shin, S., Maeno, T., *Physica A* **262**, 441 (1999).
- [34] Honmura, R., Kaneyoshi, T., *J. Phys. C* **12**, 3979 (1979).
- [35] Fisher, M. E., *Phys. Rev.* **114**, 969 (1959)
- [36] Chu, C. W., et al., *Phys. Rev. Lett.* **58**, 405 (1987).
- [37] Tavares, I., Pacobahyba, J. T. M., de Sousa, J. R., *Physica A* (2006) in press.
- [38] Hücker, M., Kataev, V., Pommer, J., Harrab, J., Hosni, A., Pflitsch, C., Gross, R., Büchner, B., *Phys. Rev. B* **59**, R725 (1999).

[39] Korenblit, I. Ya., Aharony, A., Entin-Wohlman, O., *Physica B* **284-288**, 1398 (2000).

[40] Casalta, H., et al., *Physica C* **204**, 331 (1993).

Capítulo 5

Propriedades Termodinâmicas do Modelo de Ising Desordenado com Frustração

5.1 Considerações Gerais

O problema da diluição por sítio em materiais magnéticos representa teoricamente uma simples forma do mais geral problema de percolação. O fenômeno da frustração também é uma outra propriedade importante para explicar o aparecimento de novas fases em compostos diluídos magnéticos sintetizados em laboratórios, em particular a fase vidro de spin tem sido atualmente muito explorado na literatura. Este fenômeno da frustração é causado pelo conflito de duas tendências magnéticas opostas: ferromagnética e antiferromagnética. Desde as descobertas dos compostos supercondutores de altas temperaturas formados por planos de CuO_2 , como, por exemplo, os compostos $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ (2-1-4) e $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ (1-2-3), o efeito da dopagem é investigado nas propriedades magnéticas desses compostos. Os compostos supercondutores de altas temperaturas formados por planos de CuO_2 apresentam em comum um ordenamento antiferromagnético, que para pequena dopagem a temperatura de Néel $T_N(x)$ é reduzida

drasticamente a zero quando uma concentração crítica x_c é atingida, onde $x_c \simeq 2\%$ [1] e 3.5% [2, 3] para os compostos $2 - 1 - 4$ e $1 - 2 - 3$, respectivamente. Para $x > x_c$, a fase isolante (AF) é destruída, surgindo uma fase supercondutora de alta temperatura, que é caracterizada pela existência de uma corrente supercondutora formada por pares de Cooper no plano de CuO_2 cuja interação entre os elétrons é de origem elétrica (*exchange*) [4]. Do ponto de vista teórico, um modelo utilizado para descrever o diagrama de fase (fase isolante AF) desses compostos supercondutores, consiste de um Hamiltoniano de Heisenberg com interação de *exchange* J_A no plano xy (simula o plano de CuO_2) e λJ_A ao longo do eixo z (simula a interação entre planos de CuO_2), onde $\lambda \simeq 10^{-5}$. Por outro lado, o efeito da substituição do átomo magnético Cu pelo íon não-magnético Zn (efeito da diluição) desempenha um papel marcante no valor da concentração crítica x_c , que aumenta com o crescimento da concentração z do íon não magnético Zn . Por exemplo, para $z = 15\%$ a concentração crítica x_c para o composto $2 - 1 - 4$ é aproximadamente 3% , um pouco maior que o caso puro $x_c(z = 0) = 2\%$. A fase AF persiste até a concentração de percolação $z_c \simeq 25\%$ [5]. Outro resultado extremamente interessante que foi observado é a presença de um ponto de máximo na temperatura de Néel $T_N(x, z)$ em função de z para concentração de buracos (frustração) $x \simeq 0,017$.

O elemento Zn é um único dopante, com quase o mesmo raio iônico do Cu (0.75 e 0.73 \AA , respectivamente) [6] e a mesma valência iônica ($+2$). Contudo, como Zn tem a camada d^{10} preenchida, ele é não magnético. Portanto, se espera que a substituição pelo Zn no sítio do Cu remova um spin (cria uma vacância) da rede antiferromagnética bidimensional com pequeno efeito nas propriedades magnéticas do material. É de interesse investigar que o efeito da dopagem do Zn no estado antiferromagnético do isolante La_2CuO_{4-y} , especialmente com respeito as argumentações de Aharomy e colaboradores de que flutuações antiferromagnéticas sobrevivem dentro do estado metálico e poderia dar informações a respeito dos supercondutores de altas temperaturas.

O efeito da substituição no La_2CuO_4 por íons não magnéticos para Cu^{2+} foi estudado por Chakraborty e colaboradores [7], Cheong e colaboradores [8], Xiao e colaboradores

[9], Ting e colaboradores [10], Keimer e colaboradores [1, 11], Uchinokura e colaboradores [12], Hücker e colaboradores [5, 13] entre outros. A presentamos a seguir alguns resultados desses trabalhos para o comportamento da susceptibilidade magnética com a influência da temperatura e da substituição do átomo do Cu por íons não magnéticos. Para concentração maior do que um certo limiar- y_c ("concentração de percolação"), $y_c \simeq 1\%$, não observamos mais o pico na transição de fase, presente apenas para o sistema puro ($y = 0$) [9], conforme mostra a figura (5.1). Na figura (5.2), mostramos os resultados da susceptibilidade para o composto diluído $La_2Cu_{1-x}Zn_xO_4$ na presença de um campo externo, pequeno o suficiente para não alterar a concentração crítica [7].

Na ausência do íon diamagnético Zn (i.e., $z = 0$), a temperatura de Néel $T_N(x)$ do composto antiferromagnético $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ decresce a medida que a concentração de buracos cresce (x), e deve-se principalmente ao crescimento do conflito de interações (frustração) presente no plano de CuO_2 , onde foi investigado do ponto de vista qualitativo no capítulo 4. Por outro lado, a presença da diluição (i.e., $z \neq 0$) no composto $2 - 1 - 4$, ou seja, o composto $La_{2-x}Sr_xCu_{1-z}Zn_zO_4$, modifica drasticamente o comportamento crítico $T_N(x, z)$, apresentando, por exemplo, um ponto de máximo para $x \simeq 1.7\%$ na curva crítica T_N versus z [5, 13].

Na figura (5.3) apresentamos os resultados da susceptibilidade em função da temperatura para este composto diluído com $x = 1.7\%$ e diversos valores de concentrações z (presença do íon diamagnético Zn). Observamos claramente nesta figura (5.3), que a medida que z cresce ($z \leq 5\%$), surpreendentemente a temperatura de Néel T_N aumenta, como indicado pelo deslocamento para a direita do ponto de máximo da susceptibilidade, e, finalmente, para $z \geq 5\%$ temos decréscimo gradual de $T_N(z)$ com o aumento da concentração z e se anulando em $z = z_c \simeq 25\%$ (concentração de percolação). Este comportamento reentrante para a temperatura de Néel (i.e., existência de duas concentrações z para uma mesma temperatura) foi investigado teoricamente no capítulo 2 através de um modelo de Heisenberg, onde os efeitos de frustração e diluição foram colocados fenomenologicamente e com isto foi possível explicar o ponto de máximo da curva

crítica $T_N(x, z)$ prevista experimentalmente por Hücker e colaboradores [13], e mostrado na figura (5.3). Motivado pela ausência de modelos microscópicos (não fenomenológicos) que descreva corretamente o ponto de máximo da curva crítica $T_N(x, z)$ do composto diluído $La_{2-x}Sr_xCu_{1-z}Zn_zO_4$, neste capítulo vamos analisar qualitativamente as propriedades deste composto.

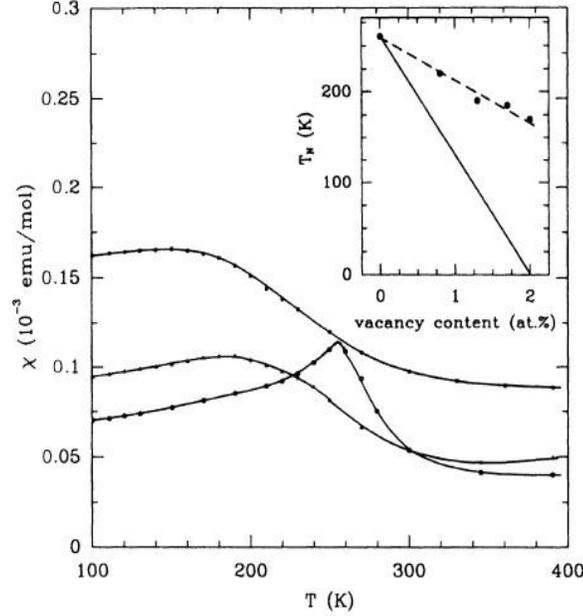


Figura 5.1: Susceptibilidade Magnética χ versus temperatura para $La_2Cu_{1-y}Zn_yO_4$ com concentrações $y = 0, 0.013$ e 0.02 na ordem crescente no gráfico. Detalhe: Dependência da temperatura de Néel T_N para amostras de vacâncias móveis (Sr) (linha sólida) e amostras de vacâncias estáticas (Zn) (linha pontilhada) [9].

Para descrever qualitativamente as propriedades magnéticas destes compostos supercondutores diluídos, usamos como protótipo o modelo de Ising aleatoriamente decorado diluído. Aplicamos a teoria de campo efetivo em aglomerado com um sítio, baseada na técnica do operador diferencial desenvolvida nos capítulos 3 e 4 e obtemos as propriedades termodinâmicas (magnetização de subrede, susceptibilidade, energia interna e calor específico) como uma função da temperatura para diversos parâmetros $\alpha = J_A/J_F$, campo magnético H , diluição z e concentração p . Obtemos, também, os diagramas de

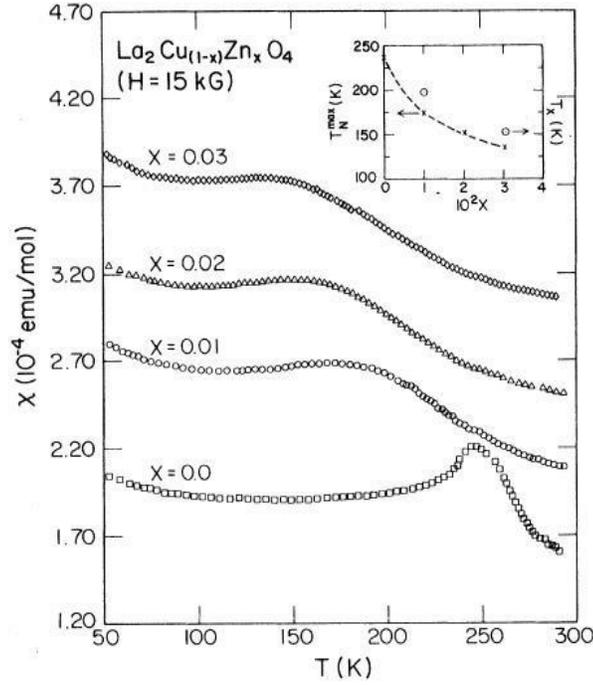


Figura 5.2: Susceptibilidade magnética *versus* temperatura para $La_2Cu_{1-x}Zn_xO_{4-y}$. Os dados para cada curva são deslocados por 0.5×10^{-4} emu/mol. O detalhe mostra T_N^{\max} (máximo em χ) e T_x (T no qual χ diverge para baixos e altos campos) [7].

fase no planos $T - H$, $T - p$ e $T - z$.

5.2 Modelo e Formalismo

Para investigarmos o efeito da diluição e frustração no modelo de Ising aleatoriamente decorado, tomamos por simplicidade de cálculos um modelo de Ising antiferromagnético de spin- $\frac{1}{2}$ na presença de um campo magnético externo. O modelo consiste de planos (ver Fig.(4.3) do capítulo 4) em que os spins dos vértices interagem antiferromagneticamente (J_A) com seus primeiros vizinhos e ferromagneticamente (J_F) com o spin decorador localizado na ligação entre eles. Além disso, em nosso modelo alguns sítios magnéticos (átomos de Cu) são substituídos por sítios não magnéticos (átomos de Zn ou

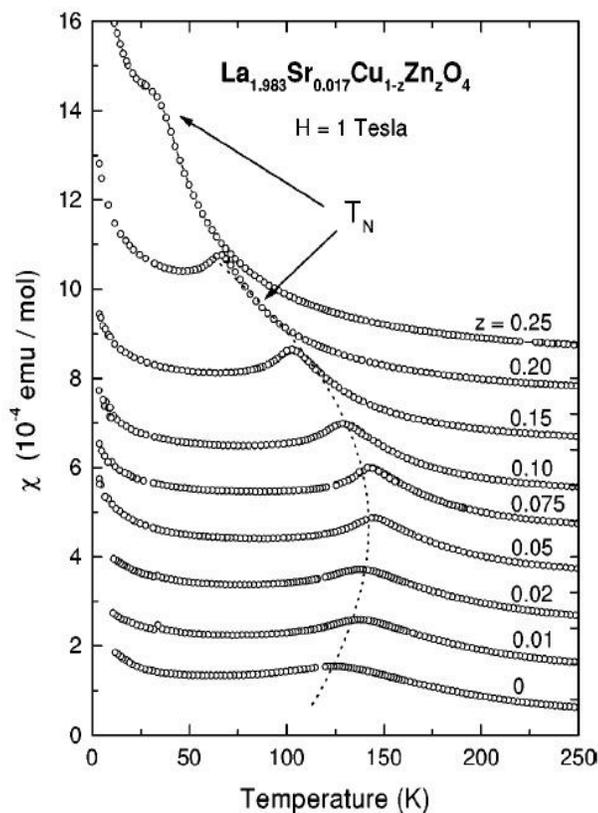


Figura 5.3: Susceptibilidade magnética estática ($H = 1$ Tesla) *versus* temperatura para o composto $La_{1.983}Sr_{0.017}Cu_{1-z}Zn_zO_4$ para diferentes dopagens de Zn [5].

Mn), assim sendo precisamos levar em consideração este efeito, supondo que alguns sítios não têm spin associado a ele; chamaremos estes sítios de *ausentes* (vacâncias). Assim, todos os spins primeiros vizinhos do sítio ausente terão um spin a menos para interagir. A conectividade da rede será então diminuída, haverá menos spins interagindo entre si e, portanto, deve-se esperar que seja mais fácil desordenar o sistema (veja figura (5.4)).

O modelo para simular os resultados acima é descrito pelo seguinte Hamiltoniano

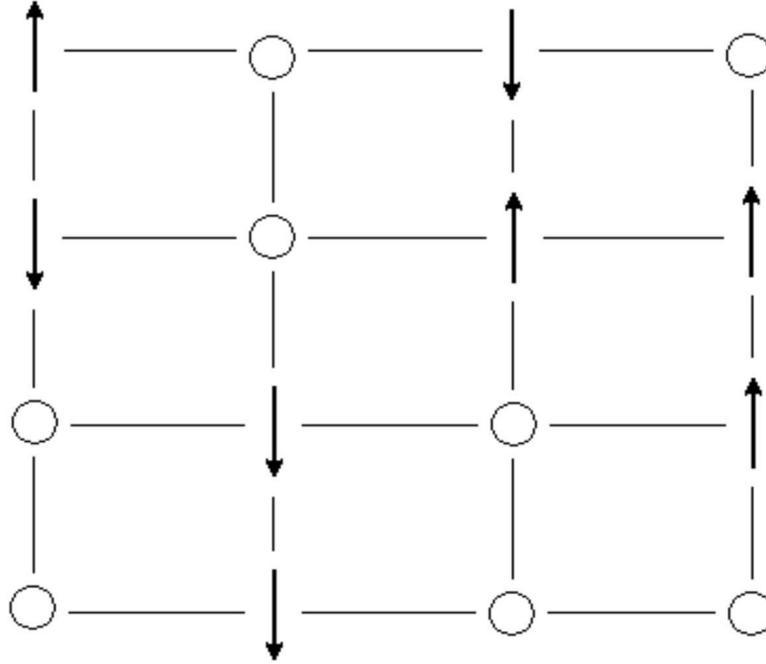


Figura 5.4: Configuração de uma rede quadrada com sítios magnéticos (as setas, representando spins) e não magnéticos (círculos vazios) representando o plano de CuO_2 com diluição (Zn).

$$\mathcal{H} = J_A \sum_{\langle i,j \rangle \in x,y} \varepsilon_i \varepsilon_j S_i^A S_j^B + \lambda J_A \sum_{\langle i,j \rangle \in z} \varepsilon_i \varepsilon_j S_i^A S_j^B - \sum_{\langle i,j,k \rangle \in x,y} J_{ij}^F \sigma_i (\varepsilon_j S_j^A + \varepsilon_k S_k^B) - \quad (5.1)$$

$$H \sum_{i \in x,y} \varepsilon_i (\sigma_i + S_i^A + S_i^B),$$

onde J_A é a interação de troca antiferromagnética no plano formado entre os spins dos vértices das duas subredes, A e B , interpenetrantes (simulando a interação $Cu - Cu$), λ é o parâmetro de anisotropia (ao qual utilizamos $\lambda = 10^{-5}$ para representar um sistema quase-bidimensional), J_{ij}^F é a interação aleatória de troca ferromagnética entre o spin decorador e o spin nodal (simulando a interação $Cu - O$). S_i^ν ($\nu = A, B$) é o spin- $\frac{1}{2}$ nodal da subrede ν no sítio i , σ_i é o spin- $\frac{1}{2}$ decorador que interage ferromagneticamente

com dois spins nodais de subredes vizinhas, H é campo magnético externo e ϵ_i é uma variável de sítio que tem o valor 1 ou 0, caso o sítio seja magnético (presente) ou não magnético (ausente), respectivamente. Na Eq.(5.1), $\langle i, j \rangle \in xy$ representa o somatório sobre os quatro spins primeiros vizinhos pertencentes ao plano (simulando o plano de CuO_2) e $\langle i, j \rangle \in z$ é o somatório sobre os dois spins primeiros vizinhos interplanos.

Em nosso modelo, os sítios são ocupados por átomos magnéticos com probabilidade z e átomos não magnéticos com probabilidade $1 - z$. Vamos supor que o tempo de relaxação dos graus de liberdade de spin é muito menor do que o tempo de relaxação das impurezas na rede. Assim, estas serão consideradas fixas, definindo o que se chama de desordem *quenched* e, portanto, propomos a seguinte distribuição de probabilidade bimodal:

$$\mathcal{P}(\epsilon_i) = z\delta(\epsilon_i - 1) + (1 - z)\delta(\epsilon_i). \quad (5.2)$$

Usando a transformação de decoração-iteração de Fisher [14] no plano xy , obtemos um Hamiltoniano efetivo dado por

$$\mathcal{H}_{eff} = \sum_{\langle i, j \rangle \in xy} J_{ij} \epsilon_i \epsilon_j S_i^A S_j^B + \lambda J_A \sum_{\langle i, j \rangle \in z} \epsilon_i \epsilon_j S_i^A S_j^B - \sum_{i \in xy} H_i \epsilon_i (S_i^A + S_i^B). \quad (5.3)$$

Podemos então obter a constante de acoplamento efetiva e o campo modificado entre os spins S_i e S_j , efetuando o traço parcial sobre o spin decorador σ_i obtendo

$$L_{eff} = L + \frac{1}{4} \ln \left[\frac{\cosh(L + 2K_F)}{\cosh(L - 2K_F)} \right], \quad (5.4)$$

e

$$K_{eff} = \alpha K_F - \frac{1}{4} \ln \left[\frac{\cosh(L + 2K_F) \cosh(L - 2K_F)}{\cosh^2 L} \right], \quad (5.5)$$

onde $L_{eff} = \beta H_{eff}$, $K_{eff} = \beta J_{eff}$, $K_F = \beta J_F$, $K_A = \beta J_A$ e $\alpha = \frac{J_A}{J_F}$ é o parâmetro de frustração, assim como foi feito no capítulo 4, sendo que agora introduzimos uma

diluição por sítio. No plano xy , as interações entre os spins Ising nodais são descritas pela distribuição de probabilidades (*quenched*) do tipo

$$\mathcal{P}(J_{ij}) = p\delta(J_{ij} - J_{eff}) + (1 - p)\delta(J_{ij} - J_A) \quad (5.6)$$

e

$$\mathcal{P}(H_i) = p\delta(H_i - H_{eff}) + (1 - p)\delta(H_i - H), \quad (5.7)$$

onde os operadores σ_i , S_i^ν são restritos aos valores ± 1 . Notemos que a concentração p de ligações decoradoras é um número que varia entre 0 e 1, enquanto a concentração real de dopagem de Ba ou Sr , no composto puro La_2CuO_4 , é um número entre 0 e 2. Entre elas, existe uma correspondência um-a-um definida pela densidade de buracos e p , que é $x = 2p$.

Para desenvolvermos o formalismo, consideramos um exemplo simples em aglomerado de um spin na subrede ν , e o Hamiltoniano (5.3) para este aglomerado numa rede cúbica simples (veja figura (4.5) do capítulo 4) é dado por

$$\mathcal{H}_1^\nu = S_1^\nu \varepsilon_1 \left[\sum_{\delta_{xy}}^4 \varepsilon_{1\delta_{xy}} J_{1\delta_{xy}} S_{1+\delta_{xy}}^\mu + \lambda J_A \sum_{\delta_z}^2 \varepsilon_{1\delta_z} S_{1+\delta_z}^\mu - H_i \right], \quad (5.8)$$

onde $\nu = A(B)$ e $\mu = B(A)$.

Como primeira propriedade deste modelo calculamos a magnetização por spin da subrede A ou B , ou seja, $m_\nu = \langle \langle \varepsilon_1 S_1^\nu \rangle \rangle_c$ é obtida por

$$m_\nu = \langle \langle \varepsilon_1 S_1^\nu \rangle \rangle_c = \left\langle \left\langle \frac{Tr_1 [\varepsilon_1 S_1^\nu \exp(-\beta \mathcal{H}_1^\nu)]}{Tr_1 [\exp(-\beta \mathcal{H}_1^\nu)]} \right\rangle \right\rangle_c, \quad (5.9)$$

onde $\langle \dots \rangle_c$ corresponde a média configuracional, que surge nas distribuições de probabilidades dadas pelas Eqs.(5.2), (5.6) e (5.7) pertinente ao modelo de Ising descrito pelo Hamiltoniano (5.3).

Em termos da função de partição $Z = Tr \{ e^{-\beta \mathcal{H}_1^\nu} \}$, a Eq.(5.9) será reescrita por

$$m_\nu = \left\langle \left\langle \frac{\partial \ln \mathcal{Z}_1^\nu}{\partial (a^\nu + \varepsilon_1 L_i)} \right\rangle \right\rangle_c, \quad (5.10)$$

onde $a^\nu = -\sum_{\delta_{xy}}^4 \varepsilon_1 \varepsilon_{1\delta_{xy}} K_{1\delta_{xy}} S_{1+\delta_{xy}}^\mu - \lambda K_A \sum_{\delta_z}^2 \varepsilon_1 \varepsilon_{1\delta_z} S_{1+\delta_z}^\mu$, $K_{1\delta_{xy}} = \beta J_{1\delta_{xy}}$, $K_A = \beta J_A$ e $L_i = \beta H_i$. Substituindo a Eq.(5.8) na Eq.(5.10) e desenvolvendo os cálculos, encontramos

$$m_\nu = \langle \langle \varepsilon_1 \tanh (a^\nu + \varepsilon_1 L_i) \rangle \rangle_c. \quad (5.11)$$

Usando a técnica do operador diferencial (apresentada em detalhes no capítulo 3 desta tese) para um aglomerado de um spin, e a identidade de Van der Waerden para um sistema de spins com dois estados, na teoria de campo efetivo, aproximação de ordem zero, a Eq.(5.11) pode ser reescrita como segue

$$m_\nu \simeq z \left\langle \left(\alpha_x - \langle S_{1+\delta_{xy}}^\mu \rangle \beta_x \right)^4 \left(\alpha_{\lambda x} - \langle S_{1+\delta_z}^\mu \rangle \beta_{\lambda x} \right)^2 g(x) \Big|_{x=0} \right\rangle_c, \quad (5.12)$$

onde $\alpha_x = \cosh (\varepsilon_1 \varepsilon_{1\delta_{xy}} K_{1\delta_{xy}} D_x)$, $\beta_x = \sinh (\varepsilon_1 \varepsilon_{1\delta_{xy}} K_{1\delta_{xy}} D_x)$, $\alpha_{\lambda x} = \cosh (\varepsilon_1 \varepsilon_{1\delta_z} \lambda K_A D_x)$, $\beta_{\lambda x} = \sinh (\varepsilon_1 \varepsilon_{1\delta_z} \lambda K_A D_x)$, com $g(x)$ correspondendo a seguinte função

$$g(x) = \langle \tanh (x + L_i) \rangle_c. \quad (5.13)$$

A Eq.(5.12) é aproximada, pois no desenvolvimento dos cálculos aplicamos a idéia do operador diferencial introduzido por Honmura e Kaneyoshi [15], encontramos correlações de multi-spins e caso queiramos tratar estas correlações exatamente necessitamos resolver um conjunto infinito de equações acopladas. Desta forma, o formalismo reflete o problema de muitos corpos, inerente a todos os métodos e seu desenvolvimento depende da proposição de alguma espécie de aproximação. Neste capítulo usamos EFT, tomando a aproximação de ordem zero, e assim desacoplamos as equações, isto é, $\langle \langle \varepsilon_i S_i^\nu \cdot \varepsilon_j S_j^\nu \cdot \varepsilon_p S_p^\nu \dots \rangle \rangle_c \simeq \langle \langle \varepsilon_i S_i^\nu \rangle \rangle_c \cdot \langle \langle \varepsilon_j S_j^\nu \rangle \rangle_c \cdot \langle \langle \varepsilon_p S_p^\nu \rangle \rangle_c \dots$, com $i \neq j \neq p \dots$ e adotamos

$m_\nu = \langle \langle \varepsilon_1 S_1^\nu \rangle \rangle_c$. Assim, tomando as médias configuracionais na Eq.(5.12), ficaremos

$$m_\nu \simeq z \left(\bar{X}_A - \overline{\langle S_{1+\delta_{xy}}^\mu \rangle Y_A} \right)^4 \left(\bar{X}_{\lambda A} - \overline{\langle S_{1+\delta_z}^\mu \rangle Y_{\lambda A}} \right)^2 g(x)|_{x=0}, \quad (5.14)$$

sendo

$$\bar{X}_{\lambda A} = \langle \alpha_{\lambda x} \rangle_c = \int \mathcal{P}(K_{1\delta_z}) \cosh(\varepsilon_{1\delta_z} \lambda K_A D_x) dK_{1\delta_z} = 1 - z + z \cosh(\lambda K_A D_x), \quad (5.15)$$

$$\overline{\langle S_{1+\delta_z}^\mu \rangle Y_{\lambda A}} = \langle \langle S_{1+\delta_z}^\mu \rangle \beta_{\lambda x} \rangle_c = \langle \varepsilon_{1\delta_z} \langle S_{1+\delta_z}^\mu \rangle \sinh(\lambda K_A D_x) \rangle_c = m_\mu \sinh(\lambda K_A D_x), \quad (5.16)$$

$$\begin{aligned} \bar{X}_A &= \langle \alpha_x \rangle_c = \int \mathcal{P}(K_{1\delta_{xy}}) \cosh(\varepsilon_{1\delta_{xy}} K_{1\delta_{xy}} D_x) dK_{1\delta_{xy}} = \\ &= 1 - z + pz \cosh(K_{eff} D_x) + z(1-p) \cosh(\alpha K_F D_x), \end{aligned} \quad (5.17)$$

$$\begin{aligned} \overline{\langle S_{1+\delta_{xy}}^\mu \rangle Y_A} &= \langle \langle S_{1+\delta_{xy}}^\mu \rangle \beta_x \rangle_c \\ &= \langle \varepsilon_{1\delta_{xy}} \langle S_{1+\delta_{xy}}^\mu \rangle \sinh(K_{1\delta_{xy}} D_x) \rangle_c = \\ &= m_\mu \int \mathcal{P}(K_{1\delta_{xy}}) \sinh(K_{1\delta_{xy}} D_x) dK_{1\delta_{xy}} = \\ &= m_\mu [p \sinh(K_{eff} D_x) + (1-p) \sinh(\alpha K_F D_x)] \end{aligned} \quad (5.18)$$

$$\begin{aligned} g(x) &= \int \mathcal{P}(L_i) \tanh(x + L_i) dL_i = \\ &= p \tanh(x + L_{eff}) + (1-p) \tanh(x + L), \end{aligned} \quad (5.19)$$

onde $\langle \varepsilon_1 \rangle_c = z$, $(\varepsilon_i)^n = \varepsilon_i$, $(\varepsilon_i \varepsilon_j)^n = \varepsilon_i \varepsilon_j$ e devemos lembrar que a presença do campo magnético faz com que a função $g(x)$ não tenha mais uma paridade bem definida. Assim sendo, expandindo a Eq.(5.14) em potências de m_A e m_B teremos termos pares e ímpares, ou seja,

$$m_\nu = z \sum_{n=0}^4 \sum_{q=0}^2 C_{nq}(T, \lambda, H, \alpha, p, z) m_\mu^{n+q}, \quad (5.20)$$

com

$$C_{nq}(T, \lambda, H, \alpha, p, z) = (-1)^{n+q} \binom{4}{n} \binom{2}{q} X_A^{4-n} X_{\lambda A}^{2-q} Y_A^n Y_{\lambda A}^q g(x) \Big|_{x=0}, \quad (5.21)$$

onde os coeficientes $C_{nq}(T, \lambda, H, \alpha, p, z)$ são obtidos analiticamente através da relação $e^{(aD_x)}F(x) = F(x+a)$, porém omitiremos por serem demasiadamente grandes.

5.3 Limite de estabilidade da fase Antiferromagnética

Obtemos a linha crítica da transição de fase de segunda ordem, fronteira entre a fase antiferromagnética (AF) ($m_s \neq 0$) na região de baixos campos e a fase paramagnética (P) ($m_s = 0$) em altos campos, fazendo $m_s \rightarrow 0$ com a aproximação da temperatura do sistema de seu valor crítico, onde tomamos apenas os termos lineares de m_s na Eq.(5.20) quando fazemos a substituição $m_A = m + m_s$ e $m_B = m - m_s$. Este processo gera um conjunto de duas equações acopladas que resolvidas simultaneamente obtem-se os diagramas de fase, obtidos por

$$A_o(T, \lambda, H, \alpha, m_o, p, z) = m_o, \quad (5.22)$$

e

$$A_1(T, \lambda, H, \alpha, m_o, p, z) = 1, \quad (5.23)$$

com

$$A_o(T, \lambda, H, \alpha, m_o, p, z) = z \sum_{n=0}^4 \sum_{q=0}^2 m_o^{n+q} C_{nq}(T, \lambda, H, \alpha, p, z), \quad (5.24)$$

e

$$A_1(T, \lambda, H, \alpha, m_o, p, z) = z \sum_{n=0}^4 \sum_{q=0}^2 (-1)^{(n+q)} m_o^{n+q-1} C_{nq}(T, \lambda, H, \alpha, p, z), \quad (5.25)$$

onde m_o é o valor da magnetização total na temperatura crítica ($m_s = 0$). Resolvendo numericamente as Eqs.(5.22) e (5.23) construímos todos os diagramas de fases.

Os diagramas de fases do metamagneto de Ising quase- $2d$ no plano $H - T$ são apresentados nas Figs.(5.5) e (5.6) para diferentes valores de α , p e z com o parâmetro de anisotropia $\lambda = 10^{-5}$. Devemos salientar que o limite puro ($z = 1$) foi tratado no capítulo 4, agora desejamos investigar o efeito da diluição tanto nos diagramas de fases como nas propriedades magnéticas. Obtemos linhas críticas de transição de segunda ordem que dividem a fase antiferromagnética com campo induzido, cujo parâmetro de ordem $m_s \neq 0$, da fase paramagnética, onde $m_s = 0$. Verificamos que à medida que o campo vai aumentando a temperatura crítica vai decrescendo monotonicamente, anulando-se no campo crítico $H_c(p, \alpha, z)$ (depende dos valores de α, p, z). Da Fig.(5.5) observamos que $H_c(p, \alpha, z)$ aumenta com o parâmetro de frustração α assim como $T_N(p, \alpha, z)$, e isto, indica a mudança na criticalidade do sistema com o parâmetro α . Em baixas temperaturas, o campo aumenta com o aumento da temperatura para o parâmetro de frustração $\alpha > 0.6$, indicando uma reentrância. Observa-se na Fig.(5.6) que T_N diminui à medida que a concentração de buracos p aumenta e o valor da diluição z diminui (na notação desta tese $z < 1$ significa que o sistema está diluído, ou seja, maior número de vacâncias). Temos também que H_c diminui à medida que diluímos o sistema.

Na Fig.(5.7) apresentamos o comportamento de T_N versus p para diversos valores do campo H e o número de vacâncias z , fixando o parâmetro de frustração com $\alpha = 0.4$, onde observa-se um decréscimo de T_N à medida que aumentamos a concentração de buracos p , se anulando numa concentração crítica p_c , como esperado fisicamente. Quando o campo externo é nulo, o fenômeno da reentrância é observado tanto para o sistema puro como o diluído, sendo sua origem relacionada com as flutuações térmicas na

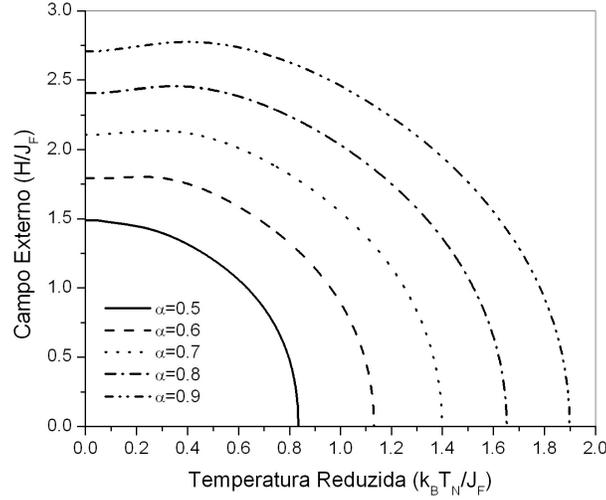


Figura 5.5: Diagrama de fase no plano (H, T) para o metamagneto de Ising quase- $2d$ aleatoriamente decorado e diluído com diferentes valores do parâmetro da frustração α e a concentração $p = 0.1$ e o valor da diluição $z = 0.8$.

frustração e nas funções de correlações spin-spin. Por outro lado, o efeito da substituição do átomo magnético Cu pelo íon não-magnético Zn (efeito da diluição) desempenha um papel marcante no valor da concentração crítica p_c , que deveria aumentar com o crescimento da concentração z do íon não magnético. No entanto, observa-se o oposto. Tal comportamento, a princípio não esperado, pode ser explicado pela inversão na forma em que consideramos nosso caso "puro". Em primeiro lugar considerávamos como sendo pura a situação em que $z = 0$ (ver o capítulo 2). Já neste capítulo, devido ao método escolhido, se torna mais conveniente a escolha do estado puro como sendo àquele em que $z = 1$. Merece atenção ainda que, para $\alpha = 0.4$, observa-se que a concentração crítica p_c aumenta com a diminuição de z , ou seja, com a diluição da concentração, diferente de outros valores de α para $H = 0$. Verifica-se também que, a concentração crítica p_c aumenta com o aumento do campo externo tanto para o caso puro como o diluído.

Na Fig.(5.8) apresentamos a dependência da temperatura crítica reduzida $T_N/T_N(0)$

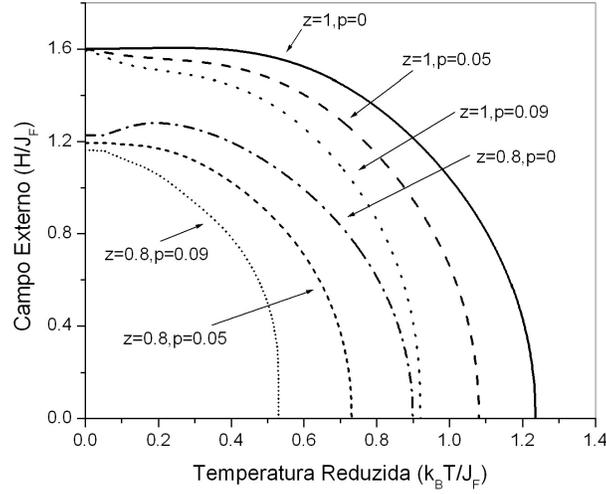


Figura 5.6: Diagrama de fase no plano (H, T) para o metamagneto de Ising quase- $2d$ aleatoriamente decorado e diluído com diferentes valores da concentração p e da diluição z e com o valor da frustração $\alpha = 0.4$.

versus p para diversos valores do parâmetro de frustração α , campo externo $H = 1.0$ e com número de vacâncias $z = 0.8$. Também observamos um decréscimo de T_N à medida que aumentamos a concentração dos íons de oxigênio p , novamente se anulando à uma concentração crítica p_c . Para o estado fundamental, da mesma forma que no estado puro, obtemos uma complexa seqüência não uniforme de convergência para uma determinada concentração crítica, como mostra a figura (5.8). O estado reentrante também aparece para alguns valores do parâmetro de frustração.

Na Fig.(5.10) apresentamos T_N em função de z para o valor da frustração $\alpha = 0.4$ e diferentes valores da concentração dos buracos e do campo externo. O comportamento da temperatura crítica T_N , em função da concentração z de átomos magnéticos, é de grande interesse no estudo de sistemas diluídos. O efeito da temperatura é desordenar estruturas ordenadas, de modo que a temperatura crítica se reduz à medida que o sistema é diluído. Das Figs. (5.9) e (5.10) observamos que a concentração crítica z_c aumenta

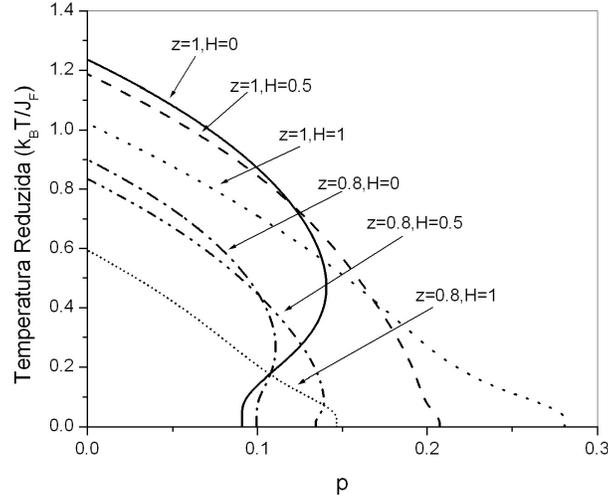


Figura 5.7: Dependência da temperatura crítica do metamagneto Ising quase- $2d$ aleatoriamente decorado e diluído com o parâmetro p para $\alpha = 0.4$ e variando o campo externo e número de vacâncias.

(menor número de vacâncias) com o aumento da concentração dos buracos e o campo externo. Ainda, neste regime ($\alpha = 0.4$) o modelo apresenta várias concentrações críticas em $T = 0$, além de exibirem fases reentrantes. Observa-se, destas figuras, que em $p = 0$ e $H = 0$ o valor da concentração crítica é aproximadamente $z_c(\alpha) = 0.428$ independente do valor do parâmetro de frustração. Para um determinado valor de concentração dos íons de oxigênio em $H = 0$ desejaríamos observar a presença de um ponto de máximo na temperatura de Néel $T_N(x, z)$ em função de z , assim como foi observado no capítulo 2 usando um modelo de Heisenberg fenomenológico de acordo com os resultados experimentais [5]. Essa discrepância na teoria-experimento pode resultar de várias fontes: O sistema é quase-bidimensional com simetria Heisenberg; o parâmetro de frustração α deve apresentar uma dependência com a concentração p , isto é, $\alpha = f(p)$; o efeito do tamanho finito do aglomerado; a diluição pode ser afetada pela energia de troca, J , com o vizinho mais próximo no plano, mais fortemente que a interação interplanar ou de anisotropia. Estes fatores não puderam ser analisados neste trabalho, mas ficou bastante claro que a

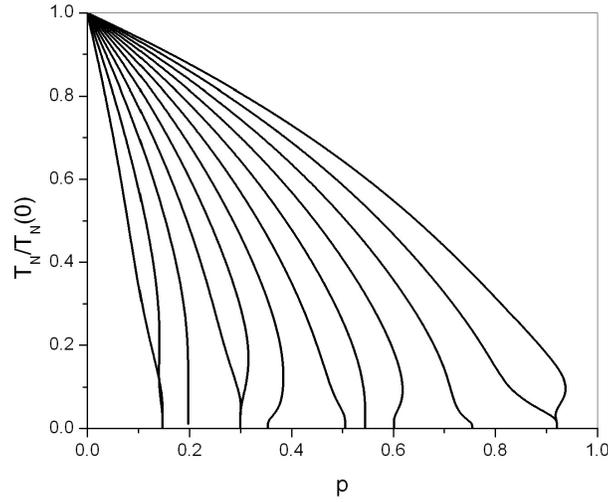


Figura 5.8: Diagrama de fase no plano (T, p) para o modelo de Ising quase- $2d$ aleatoriamente decorado e diluído com $H = 1.0$ e $z = 0.8$ e diferentes valores do parâmetro de frustração α indicado nas curvas crítica em ordem crescente $\alpha = 0.4, 0.45, 0.5, 0.55, 0.6, 0.65, 0.7, 0.75, 0.8, 0.85, 0.9$ e 0.95 .

simetria Ising para descrever a termodinâmica destes compostos não é apropriada, apesar de alguns resultados qualitativos serem reproduzidos, como reentrância influenciada pela diluição, campo, etc.

Finalmente, as figuras (5.11) e (5.12) mostram a dependência da temperatura crítica reduzida em função da concentração z de átomos magnéticos, variando o parâmetro de frustração e mantendo fixo p e H . Para uma determinada concentração de átomos magnéticos, haverá uma distribuição aleatória de ligações ferromagnéticas e antiferromagnéticas, cuja competição, dependendo do valor de α , pode dar origem a ocorrência de fases reentrantes em $T = 0$, conforme mostra as figuras.

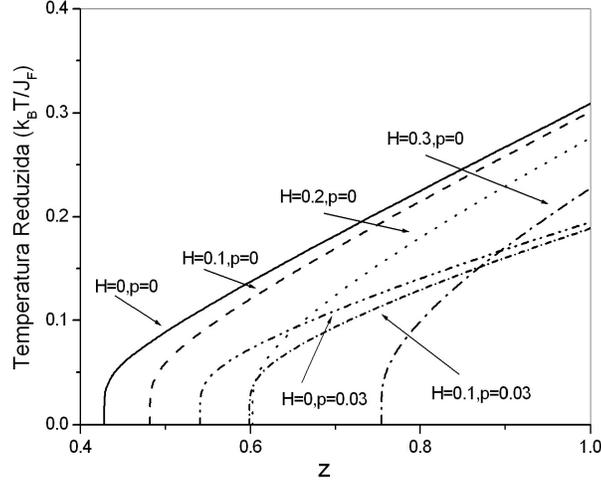


Figura 5.9: Diagrama de fase no plano (T, z) para o modelo de Ising quase- $2d$ aleatoriamente decorado e diluído com o parâmetro de frustração $\alpha = 0.1$ e diferentes valores do campo externo e o valor da concentração dos buracos de oxigênio.

5.3.1 Na ausência de campo externo

Usando a condição de contorno para a fase antiferromagnética, onde $m_A = -m_B$ e expandindo a Eq.(5.20) para uma rede quase bidimensional obtemos

$$m_A = A_1 m_A + A_3 m_A^3 + A_5 m_A^5, \quad (5.26)$$

com

$$A_1(T, \lambda, \alpha, p, z) = z (2X_{\lambda A} Y_{\lambda A} X_A^4 + 4X_A^3 Y_A X_{\lambda A}^2) \tanh(x) |_{x=0}, \quad (5.27)$$

$$A_3(T, \lambda, \alpha, p, z) = z (4Y_{\lambda A}^2 Y_A X_A^3 + 4X_{\lambda A}^2 X_A Y_A^3 + 12X_{\lambda A} Y_{\lambda A} X_A^2 Y_A^2) \tanh(x) |_{x=0} \quad (5.28)$$

e

$$A_5(T, \lambda, \alpha, p, z) = z (4Y_{\lambda A}^2 Y_A^3 X_A + 2X_{\lambda A} Y_{\lambda A} Y_A^4) \tanh(x) |_{x=0}. \quad (5.29)$$

Na região crítica, região de altas temperaturas, a magnetização de subrede tende a

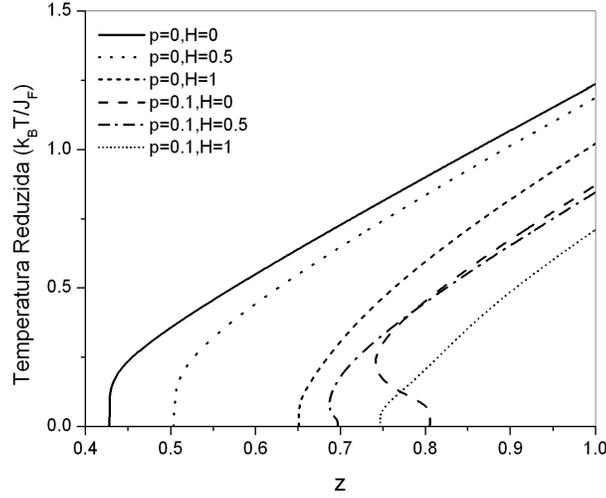


Figura 5.10: Diagrama de fase no plano (T, z) para o modelo de Ising quase- $2d$ aleatoriamente decorado e diluído com o parâmetro de frustração $\alpha = 0.4$ e diferentes valores do campo externo e o valor da concentração dos buracos de oxigênio.

zero ($m_A \rightarrow 0$), o que nos dá

$$A_1(T, \lambda, \alpha, p, z) = 1. \quad (5.30)$$

Resolvendo numericamente a Eq.(5.30) no limite $T_N = 0$, obtemos novamente para o caso diluído ($z = 0.8$) uma seqüência convergente, não uniforme de valores de $p_c(\alpha)$, como mostra a figura (5.13). Comparando a figura (4.10) com a figura (5.13) observamos que, o processo de diluição aumenta o desordenamento da fase antiferromagnética, ou seja, $p_c(z = 0.8) < p_c(z = 1.0)$ para qualquer valor do parâmetro α . Observa-se ainda que, o crescimento de α aumenta a fase ordenada. Entretanto, esse efeito é observado somente até uma concentração crítica limiar p_c , em torno de 28%.

Para ilustrarmos melhor o efeito da frustração, apresentamos a figura (5.14) que mostra o comportamento crítico da temperatura reduzida $\frac{K_B T_N}{J_F}$ versus o parâmetro de frustração α para diferentes valores da concentração p , e particularizamos $z = 0.8$. Observamos que T_N decresce monotonicamente e assim α cresce e tende a zero para deter-

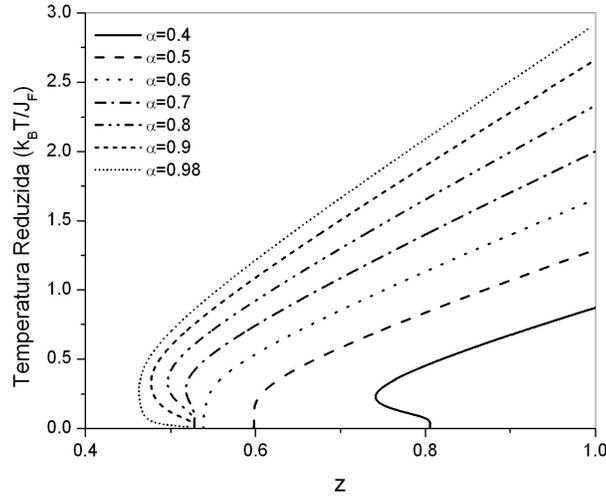


Figura 5.11: Diagrama de fase no plano (T, p) para o modelo de Ising quase- $2d$ aleatoriamente decorado e diluído com $H = 0.0$ e $p = 0.1$ e diferentes valores do parâmetro de frustração α indicado nas curvas crítica em ordem decrescente $\alpha = 0.98, 0.9, 0.8, 0.7, 0.6, 0.5, 0.4$.

minados valores de α . Dependendo da concentração p temos presença de reentrância.

5.4 Propriedades Termodinâmicas

5.4.1 Magnetização Total e Alternada (*Staggered*)

A partir da Eq.(5.20) para λ, H, α, p e z fixos, obtemos as dependências de $m(T)$ e $m_s(T)$ em função da temperatura. Nas figuras (5.15) - (5.18) apresentamos os resultados numéricos da magnetização alternada (*staggered*) m_s em função da temperatura para diferentes valores das variáveis p, α, z e H . Em $T = 0$, o alinhamento dos momentos magnéticos é completo e a magnetização assume o máximo valor possível. À medida que T cresce surgem os efeitos da agitação térmica, e m_s decresce continuamente exibindo uma transição de segunda ordem na temperatura crítica e anulando-se a partir desta com

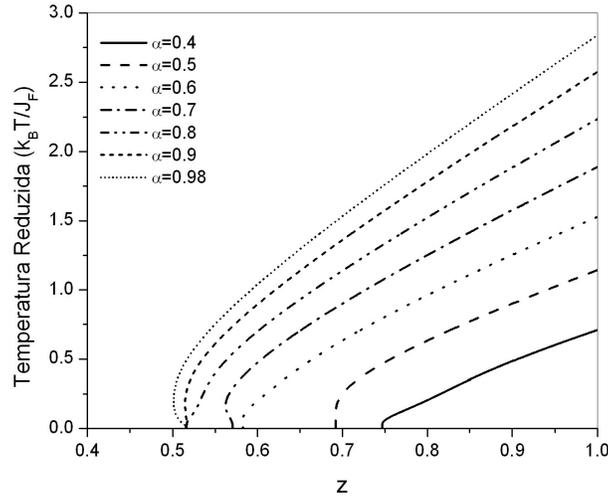


Figura 5.12: Diagrama de fase no plano (T, z) para o modelo de Ising quase- $2d$ aleatoriamente decorado e diluído com $H = 1.0$ e $p = 0.1$ e diferentes valores do parâmetro de frustração α .

expoente $\beta = 1/2$. Vemos também que, à medida que aumentamos a concentração dos buracos de oxigênio p , diluímos o sistema ou diminuimos o parâmetro de frustração α , no limite de $T = 0$, a magnetização $m_s(T = 0) < 1.0$ e a temperatura crítica diminui, o que é fisicamente esperado, pois uma vez que o número de íons de oxigênio aumenta e o fato de alguns sítios não ter spin associado a ele, o sistema passa a ter menos interação e a ser mais ferromagnético, enfraquecendo desta forma, a ordem antiferromagnética e assim, diminuindo sua temperatura crítica e o valor da magnetização. Confrontando-se as duas curvas da magnetização (Fig.(4.13) do capítulo 4 com a Fig.(5.15)) verifica-se que, a temperatura crítica se reduz mais rapidamente no sistema diluído, do que no sistema puro, quando variamos o parâmetro de frustração α . Na Fig.(5.18) quando a concentração p aumenta, a magnetização em $T = 0$ decresce, e, para certos valores de p observamos um aumento de $m_s(T)$ com a presença de um ponto de máximo. Quando a concentração do spin decorador (aumento do efeito da frustração) é maior que um

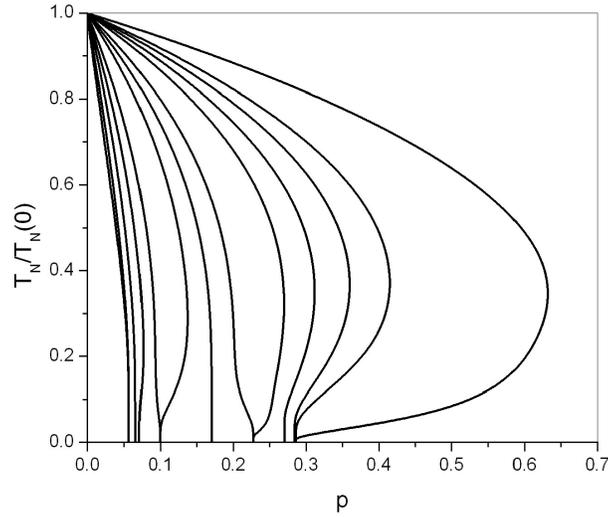


Figura 5.13: Diagrama de fase no plano (T, p) para o modelo de Ising quase- $2d$ aleatoriamente decorado e diluído com $H = 1.0$ e $z = 0.8$ e diferentes valores do parâmetro de frustração α indicado nas curvas crítica em ordem crescente $\alpha = 0.4, 0.45, 0.5, 0.55, 0.6, 0.65, 0.7, 0.75, 0.8, 0.85, 0.9, 0.95$.

certo valor crítico, o estado fundamental é desordenado e o comportamento reentrante aparece com a presença de duas temperaturas críticas. Para valores de concentrações $p > p_c$, a fase antiferromagnética é completamente destruída (ausência do parâmetro de ordem, i.e., $m_s(T) = 0$ para qualquer valor de T). Neste gráfico (5.18) não observamos o fenômeno da reentrância quando diluímos o sistema. Deve ainda ser notado que abaixo de uma certa concentração crítica z_c , que depende do parâmetro p e do campo H , o sistema não apresenta ordem de longo alcance.

Nas figuras (5.19) - (5.22) temos o comportamento da magnetização total m para vários valores de p , α , z e H . No caso da magnetização total temos que na temperatura de transição do sistema, m sofre uma descontinuidade. O aumento do número de vacâncias z , juntamente com o aumento do campo externo e o número da concentração dos buracos de oxigênio faz crescer a magnetização total m , enquanto a magnetização m_s diminui.

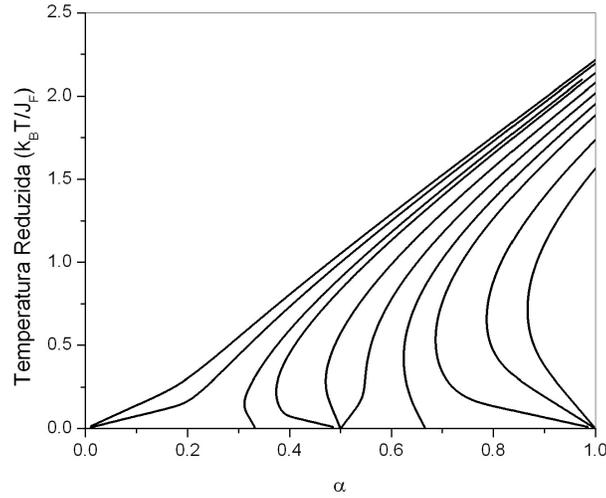


Figura 5.14: Diagrama de fase no plano (T, α) para o modelo de Ising quase- $2d$ aleatoriamente decorado e diluído com $H = 0.0$ e $z = 0.8$ e diferentes valores da concentração dos íons de oxigênio p indicado nas curvas crítica em ordem crescente $p = 0.03, 0.05, 0.08, 0.1, 0.15, 0.2, 0.25, 0.3, 0.4, 0.5$.

A influência do campo se traduz no ordenamento dos spins: quando H aumenta mais spins são flipados na sua direção e a magnetização total aumenta. À medida que o campo cresce, T_N decresce. O comportamento reentrante apresentado na Fig.(5.18), com $H = 2.0$, $z = 1$ e $\alpha = 0.7$, é também refletido na magnetização total, pois próximos a uma região de reentrância a mesma apresenta um mínimo (veja Fig.(5.22)).

5.4.2 Susceptibilidade Magnética

Outra função igualmente importante no entendimento de sistemas magnéticos é a susceptibilidade. Essa grandeza determina a resposta do sistema a uma perturbação externa provocada por um campo magnético aplicado, apresentando descontinuidade na temperatura crítica. Neste caso é importante introduzirmos o chamado campo *staggered* H_{st} conjugado ao parâmetro de ordem m_s . A adição do campo H_{st} age diretamente

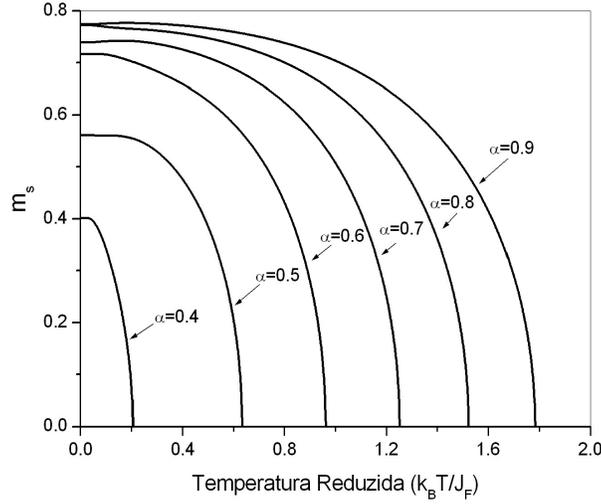


Figura 5.15: Magnetização alternada do modelo de Ising quase-2d em função da temperatura reduzida para diversos valores do parâmetro de frustração α com $H = 1.0$, $p = 0.1$ e $z = 0.8$.

na magnetização de subrede com as seguintes considerações: sobre sítios pertencentes a subrede A (spin *up*), o termo do campo externo no Hamiltoniano (5.3) será dado

$$\mathcal{H}_A = -H_A \sum_{i \in A} S_i^A, \quad (5.31)$$

e nos sítios pertencentes a subrede B (spin *down*), o termo do campo fica

$$\mathcal{H}_B = -H_B \sum_{i \in B} S_i^B, \quad (5.32)$$

onde $H_A = H + H_{st}$ e $H_B = H - H_{st}$ são os campos atuantes nas subredes A e B , respectivamente. Portanto, a grandeza física importante no estudo da transição do sistema AF - P (fase paramagnética), que diverge na temperatura crítica é a susceptibilidade *staggered* definida por

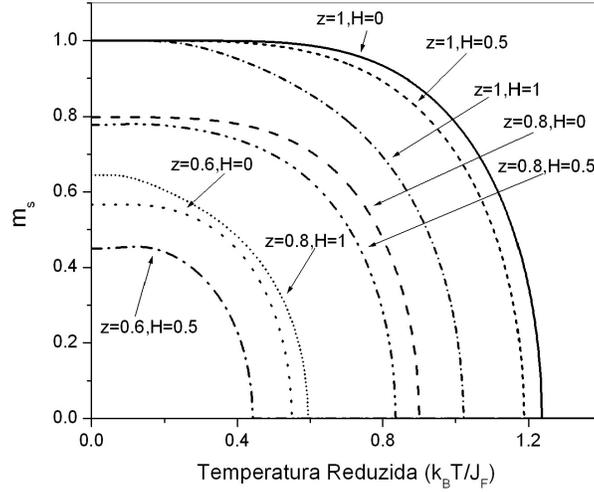


Figura 5.16: Magnetização alternada do modelo de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do campo externo e da diluição com $\alpha = 0.4$ e $p = 0.0$.

$$\chi_{st} = \left(\frac{\partial m_s}{\partial H_{st}} \right)_{H_{st}=0}. \quad (5.33)$$

Por outro lado, definimos a susceptibilidade total, ou direta, χ que está relacionada ao campo externo H e com a magnetização total m do sistema, avaliando o comportamento de m mediante ao campo externo H , teremos

$$\chi = \left(\frac{\partial m}{\partial H} \right)_{H_{st}=0}. \quad (5.34)$$

Vale a pena mencionar que, experimentalmente apenas a susceptibilidade total é calculada, a *staggered*, χ_{st} , é uma grandeza puramente teórica para fins de análise da transição de fase.

Assim, derivando parcialmente a Eq.(5.20) em relação aos campos H e H_{st} , fazendo

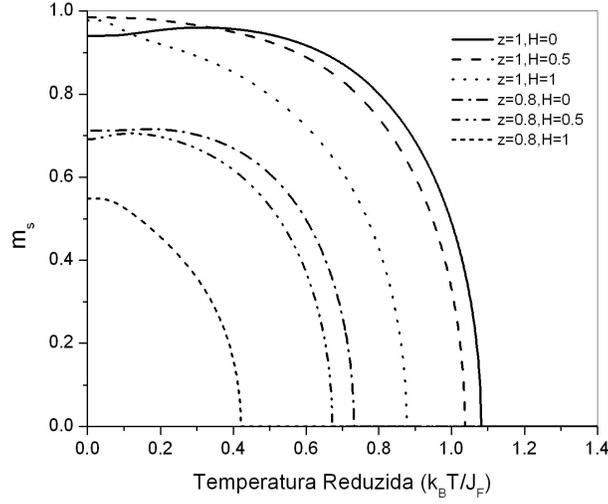


Figura 5.17: Magnetização alternada do modelo de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do campo externo e da diluição com $\alpha = 0.4$ e $p = 0.05$.

$H_{st} = 0$, encontramos a susceptibilidade total e *staggered* dadas por

$$\chi = \frac{\Theta}{1 - \Delta}, \quad (5.35)$$

e

$$\chi_{st} = \frac{\Theta}{1 + \Delta}, \quad (5.36)$$

sendo

$$\Theta = z \sum_{n=0}^4 \sum_{q=0}^2 [m - m_S]^{n+q} \frac{\partial}{\partial H} [C_{nq}(T, \lambda, H, \alpha, p, z)]_{H_{st}=0} \quad (5.37)$$

e

$$\Delta = z \sum_{n=0}^4 \sum_{q=0}^2 (n + q) [m - m_S]^{n+q-1} C_{nq}(T, \lambda, H, \alpha, p, z). \quad (5.38)$$

Resolvendo numericamente as Eqs.(5.35) e (5.36), encontramos $\chi(T, \lambda, H, \alpha, p, z)$ e $\chi_{st}(T, \lambda, H, \alpha, p, z)$ para diversos valores de $(T, \lambda, H, \alpha, p, z)$. A dependência da suscep-

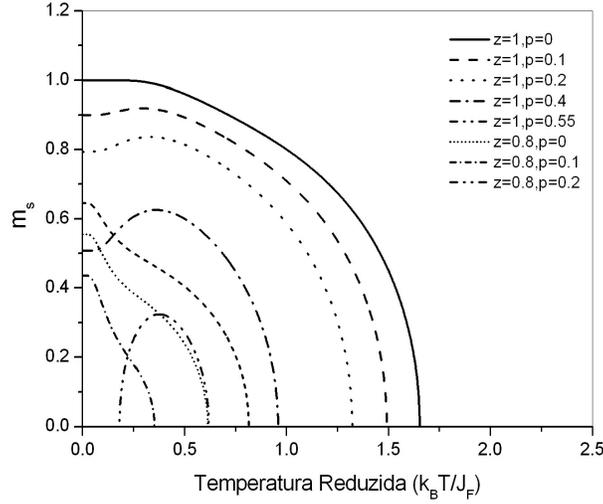


Figura 5.18: Magnetização alternada do modelo de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores da concentração dos buracos de oxigênio e da diluição com $\alpha = 0.7$ e $H = 2.0$.

tibilidade magnética total é apresentada nas Figs.(5.23) - (5.27) como função da temperatura, variando-se os valores de p , α , z e H . Neste caso a transição de fase é caracterizada pelo ponto de máximo em $T = T_N$. Observamos que, com o aumento do campo H , aumento do número de vacâncias z e o número de íons de buracos de oxigênio p , o ponto de máximo desloca-se de forma gradual em direção a $T = 0$ e também com a adição das impurezas, existe um aumento gradual em χ em baixas temperaturas, como observado experimentalmente [5],[7]-[10],[13]. Para altos valores do campo, juntamente com a diluição do sistema e maior número de íons de oxigênio, observamos um comportamento anômalo em baixas temperaturas semelhante ao caso puro (ver figuras (4.23), (4.26) e (4.27) do capítulo 4).

As Figs.(5.28) - (5.31) mostram o resultado da susceptibilidade *staggered* como função da temperatura e vários valores de p , α , z e H , onde agora a transição de fase é caracterizada pela divergência de χ_{st} , que fisicamente é entendido por causa do teorema de

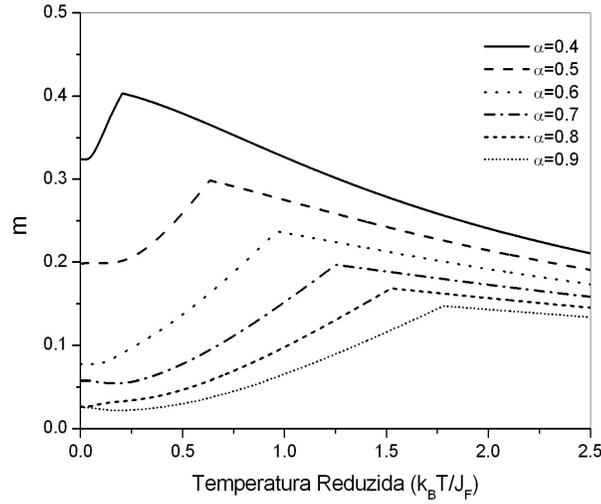


Figura 5.19: Magnetização total do modelo de Ising quase-2d em função da temperatura reduzida para diversos valores do parâmetro de frustração α com $H = 1.0$, $z = 0.8$ e $p = 0.1$.

flutuação e dissipação em que χ_{st} está associado a flutuação do parâmetro de ordem m_s . Observamos que na Fig.(5.28) a divergência de χ_{st} está se deslocando para a esquerda a medida que α diminui e em $\alpha = 0.5$ e baixas temperaturas apresenta um mínimo. A susceptibilidade do sistema apresenta duas divergências, uma em $T = 0$, e a outra na temperatura de transição representando um estado reentrante. Nas Figs.(5.29) e (5.30) a divergência de χ_{st} está se deslocando para a esquerda com o aumento do campo e da diluição, e também a susceptibilidade apresenta mais de uma divergência, que depende do campo, diluição e concentração dos íons de oxigênio, caracterizando o comportamento reentrante do sistema.

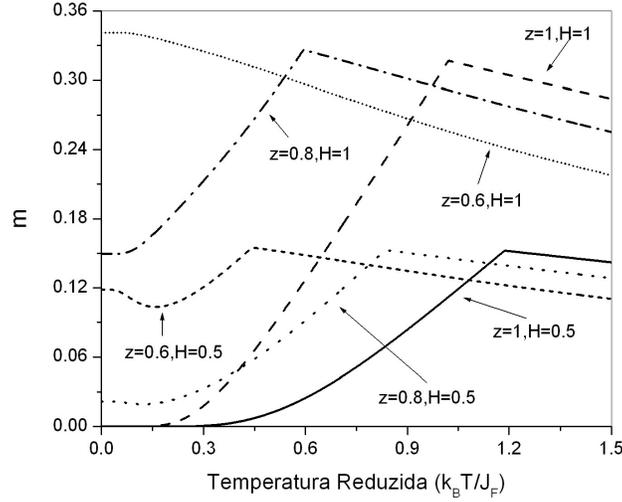


Figura 5.20: Magnetização total do modelo de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do campo externo e da diluição com $\alpha = 0.4$ e $p = 0.0$.

5.4.3 Energia Interna e Calor específico

A energia interna por partícula pode ser calculada tomando a média do Hamiltoniano (5.3) dada por

$$u = \langle \mathcal{H}_{eff} \rangle = \frac{1}{2} (\langle \mathcal{H} \rangle_A + \langle \mathcal{H} \rangle_B), \quad (5.39)$$

onde $\langle \mathcal{H} \rangle_A$ e $\langle \mathcal{H} \rangle_B$ são os valores médios das energias para as subredes A e B , respectivamente com

$$\langle \mathcal{H} \rangle_{A,B} = \left\langle \varepsilon_1 S_1^{(A,B)} (\gamma - H_i) \right\rangle = \left\langle \varepsilon_1 \gamma S_1^{(A,B)} \right\rangle - H_i \left\langle \varepsilon_1 S_1^{(A,B)} \right\rangle, \quad (5.40)$$

sendo

$$\gamma = \sum_{\delta_{xy}}^4 \varepsilon_{1\delta_{xy}} J_{1\delta_{xy}} S_{1+\delta_{xy}}^{(B,A)} + \lambda J_A \sum_{\delta_z}^2 \varepsilon_{1\delta_z} S_{1+\delta_z}^{(B,A)}, \quad (5.41)$$

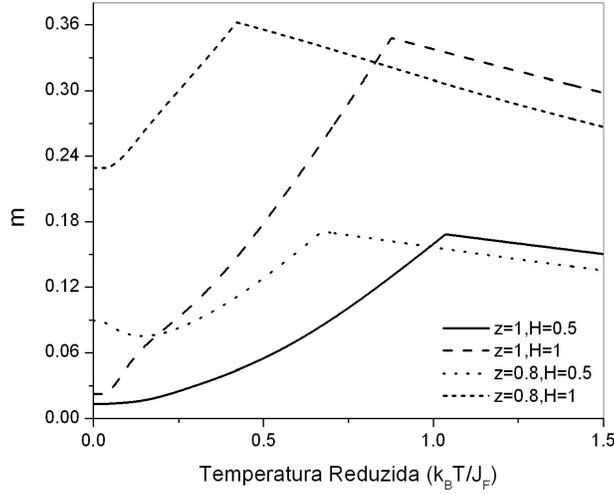


Figura 5.21: Magnetização total do modelo de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do campo externo e da diluição com $\alpha = 0.4$ e $p = 0.05$.

e utilizando-se da Eq.(5.10) para calcularmos as médias da Eq.(5.40) obtemos

$$\langle \mathcal{H} \rangle_{A,B} = \langle \varepsilon_1 \gamma \tanh(-\beta \varepsilon_1 \gamma + \beta \varepsilon_1 H_i) \rangle - H_i \langle \varepsilon_1 S_1^{(A,B)} \rangle. \quad (5.42)$$

Utilizando a técnica do operador diferencial junto com a relação de cinemática do spin, encontramos a média da energia interna total por partícula do sistema dada por

$$u = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial (\beta D_x)} \left[\left\langle \varepsilon_1 \prod_{\delta_{xy}}^4 \left[\alpha_x - \left(S_{1+\delta_{xy}}^A + S_{1+\delta_{xy}}^B \right) \beta_x \right] \prod_{\delta_z}^2 \left[\alpha_{\lambda x} - \left(S_{1+\delta_z}^A + S_{1+\delta_z}^B \right) \beta_{\lambda x} \right] \right\rangle \right] \tanh(x + \varepsilon_1 L_i) \Big|_{x=0} - \frac{H_i (m_A + m_B)}{2}, \quad (5.43)$$

onde $\alpha_x = \cosh(\varepsilon_1 \varepsilon_{1\delta_{xy}} K_{1\delta_{xy}} D_x)$, $\beta_x = \sinh(\varepsilon_1 \varepsilon_{1\delta_{xy}} K_{1\delta_{xy}} D_x)$, $\alpha_{\lambda x} = \cosh(\varepsilon_1 \varepsilon_{1\delta_z} \lambda K_A D_x)$, $\beta_{\lambda x} = \sinh(\varepsilon_1 \varepsilon_{1\delta_z} \lambda K_A D_x)$.

Usando a teoria de campo efetivo (EFT-1) e tirando a média configuracional, a energia

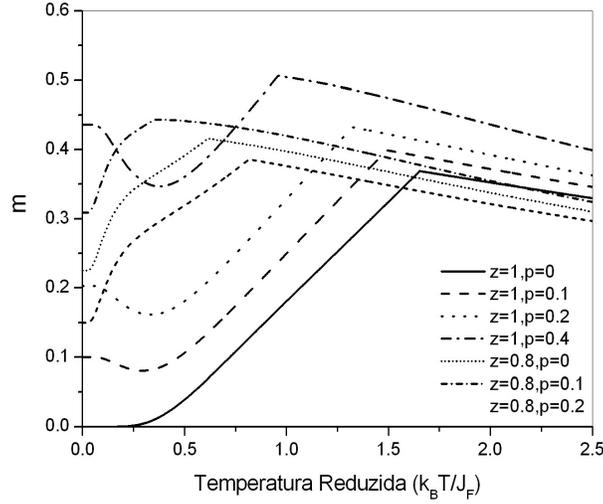


Figura 5.22: Magnetização total do modelo de Ising quase-2d em função da temperatura reduzida para diversos valores da concentração dos buracos de oxigênio e da diluição com $\alpha = 0.7$ e $H = 2.0$.

interna por partícula finalmente ficará na forma

$$u = -\frac{1}{2}z \frac{\partial}{\partial (\beta D_x)} \left\{ \sum_{n=0}^4 \sum_{q=0}^2 C_{nq}(T, \lambda, H, \alpha, p, z) [m_A^{n+q} + m_B^{n+q}] \right\} - [pH_{eff} + (1-p)H] m, \quad (5.44)$$

sendo o coeficiente $C_{nq}(T, \lambda, H, \alpha, p, z)$ dado pela Eq.(5.21). Utilizando as Eqs.(5.15)-(5.21) podemos desenvolver numericamente a equação (5.44).

O calor específico do sistema é obtido diretamente da Eq.(5.44) diferenciando-a numericamente. Todos os coeficientes presentes nas propriedades termodinâmicas desse trabalho são obtidos analiticamente através da relação $\exp(aD_x)F(x) = F(x+a)$ com o software MAPLE 9, porém omitiremos em escrevê-los por serem demasiadamente grandes.

Nas figuras (5.32) - (5.35) temos o comportamento da energia interna em função da temperatura para diferentes valores das variáveis p , α , z e H . Em $T = 0$, $p = 0$ e $z = 1$

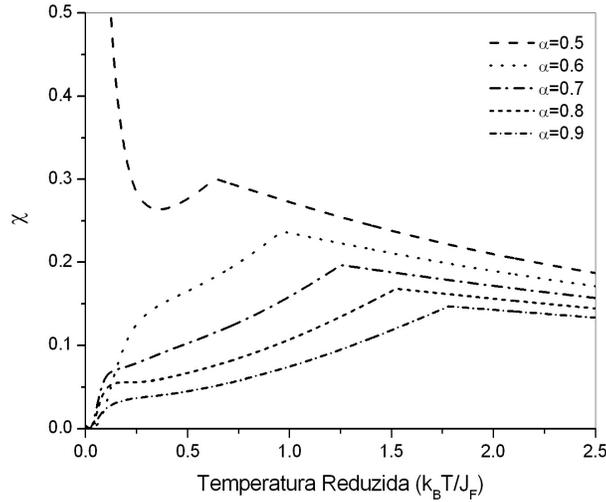


Figura 5.23: Dependência da susceptibilidade total com a temperatura para o modelo de Ising quase-2d para vários valores do parâmetro da frustração α com $H = 1.0$, $z = 0.8$ e $p = 0.1$.

todos os spins estão alinhados correspondendo a uma energia máxima (em módulo) negativa. Com o crescimento da temperatura, os efeitos da agitação térmica tornam-se relevantes e a energia decresce apresentando para concentração acima da concentração crítica z_c (depende de α, p, H) uma descontinuidade (mudança de concavidade) na temperatura de transição do sistema. Acima desta temperatura cessa a ordem de longo alcance e, portanto, os spins devem se comportar como sendo livres, resultando numa energia nula. Observe que a energia interna por partícula não apresenta tal descontinuidade para uma concentração de átomos magnéticos inferior à concentração crítica z_c .

O calor específico do modelo de Ising quase-2d aleatoriamente decorado e diluído, obtido na presente aproximação, está apresentado nas figuras (5.36) - (5.39) em função da temperatura e dos parâmetros α, p e z . Em temperaturas próximas ao zero absoluto o calor específico é praticamente nulo pois, neste regime de baixas temperaturas a ener-

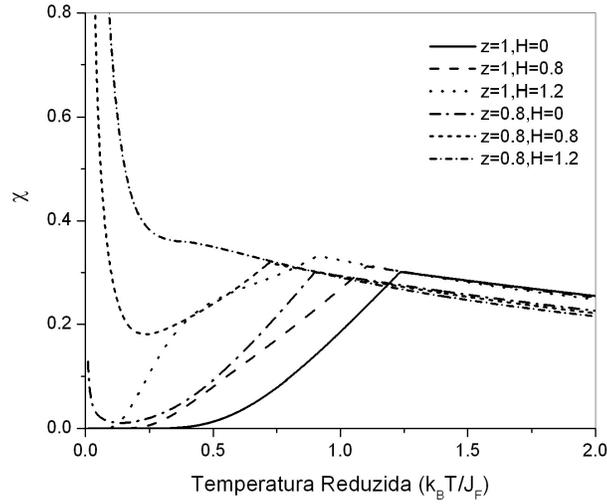


Figura 5.24: Dependência da susceptibilidade total com a temperatura para o modelo de Ising quase-2d para vários valores do parâmetro da diluição z e campo H com $\alpha = 0.4$ e $p = 0.0$.

gia interna do sistema é fracamente afetada pela agitação térmica. Para temperaturas crescentes, o calor específico aumenta atingindo um valor máximo na temperatura de transição do sistema. Neste ponto ele sofre uma descontinuidade para um valor pequeno, não nulo, e apresenta para altas temperaturas um comportamento $1/T^2$. Para uma concentração de átomos magnéticos inferior a concentração crítica z_c (depende de α, p, H) esta singularidade desaparece.

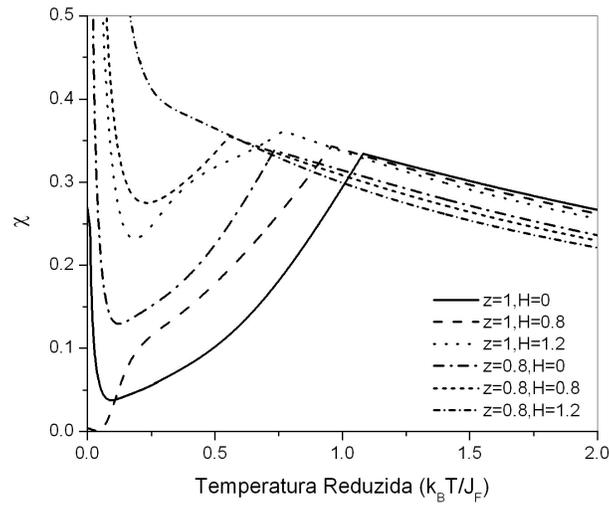


Figura 5.25: Dependência da susceptibilidade total com a temperatura para o modelo de Ising quase- $2d$ para vários valores do parâmetro da diluição z e campo H com $\alpha = 0.4$ e $p = 0.05$.

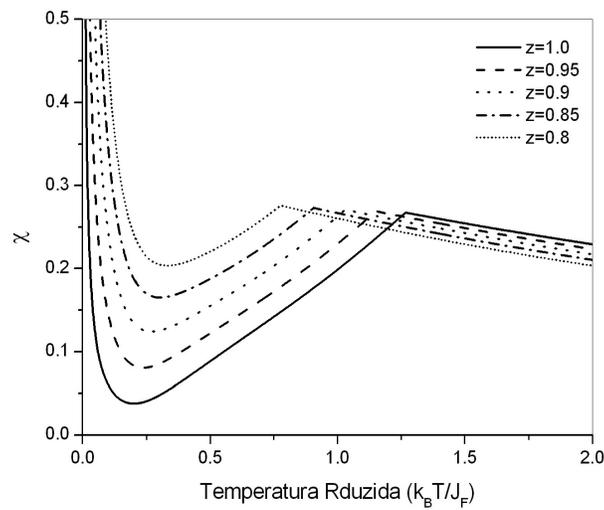


Figura 5.26: Dependência da susceptibilidade total com a temperatura para o modelo de Ising quase- $2d$ para vários valores do parâmetro da diluição z com $\alpha = 0.5$, $H = 1.0$ e $p = 0.05$.

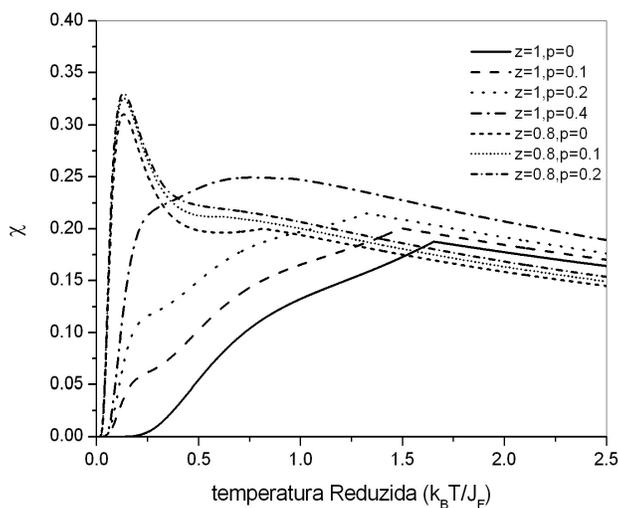


Figura 5.27: Dependência da susceptibilidade total com a temperatura para o modelo de Ising quase- $2d$ para vários valores do parâmetro da diluição z e concentração p com $\alpha = 0.7$ e $H = 2.0$.

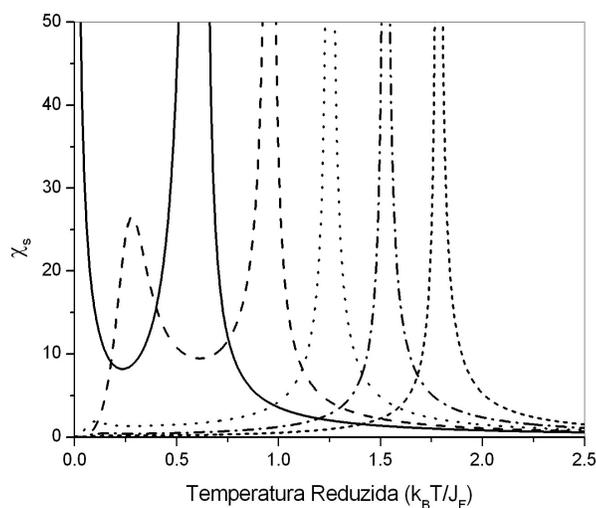


Figura 5.28: Dependência da susceptibilidade alternada com a temperatura para o modelo de Ising quase- $2d$ e diferentes valores do parâmetro de frustração α indicado nas curvas em ordem crescente $\alpha = 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9$ com $H = 1.0$, $z = 0.8$ e $p = 0.1$.

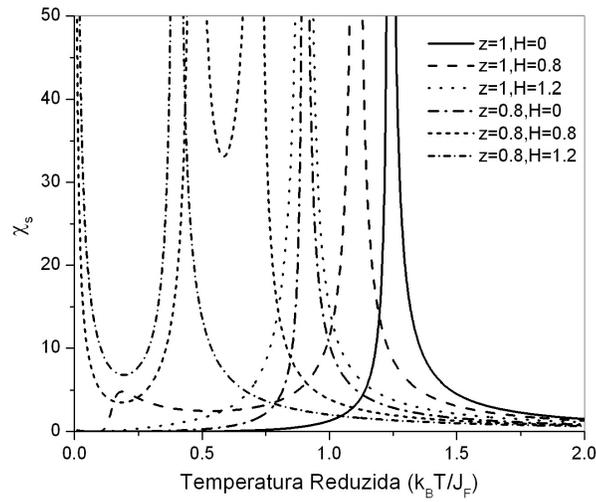


Figura 5.29: Dependência da susceptibilidade alternada com a temperatura para o modelo de Ising quase- $2d$ para vários valores do parâmetro da diluição z e campo H com $\alpha = 0.4$ e $p = 0.0$.

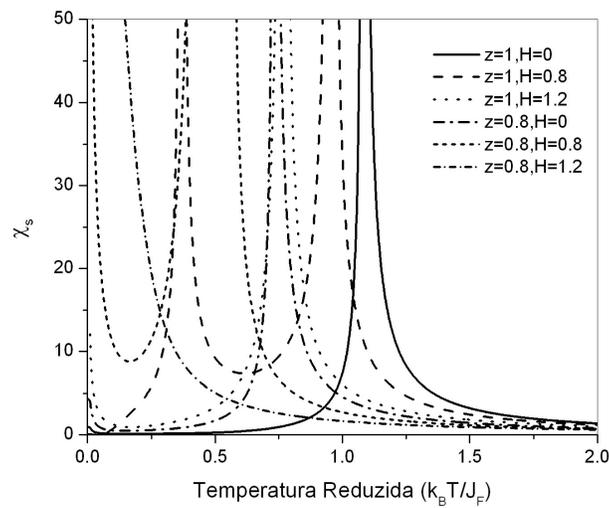


Figura 5.30: Dependência da susceptibilidade alternada com a temperatura para o modelo de Ising quase- $2d$ para vários valores do parâmetro da diluição z e campo H com $\alpha = 0.4$ e $p = 0.05$.

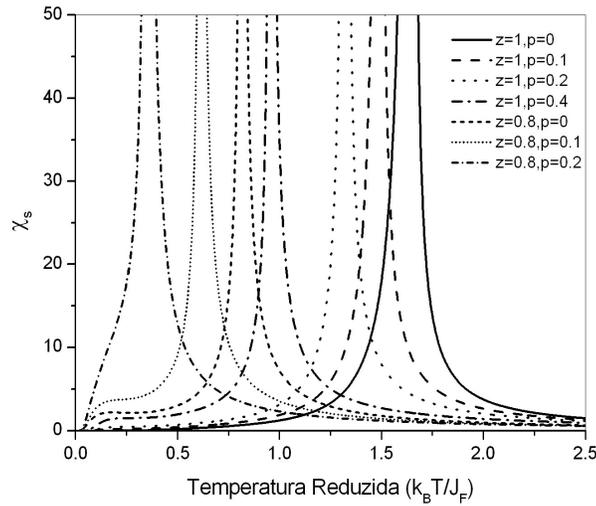


Figura 5.31: Dependência da susceptibilidade alternada com a temperatura para o modelo de Ising quase- $2d$ para vários valores do parâmetro da diluição z e concentração p com $\alpha = 0.7$ e $H = 2.0$.

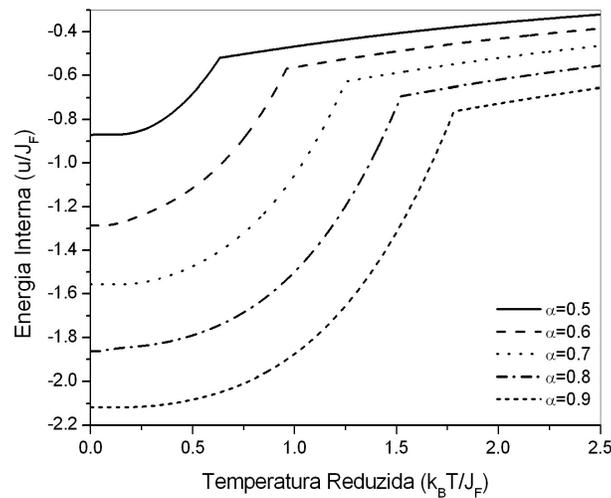


Figura 5.32: Comportamento da energia interna do metamagneto de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do parâmetro da frustração α com $H = 1.0$, $p = 0.1$ e $z = 0.8$.

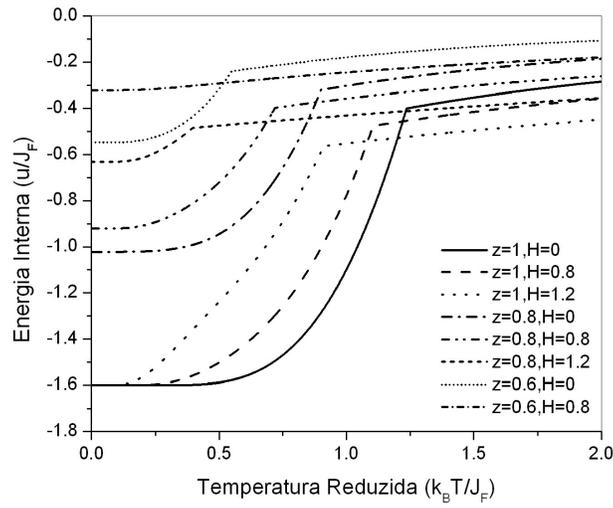


Figura 5.33: Comportamento da energia interna do metamagneto de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do campo externo e da diluição com $\alpha = 0.4$ e $p = 0.0$.

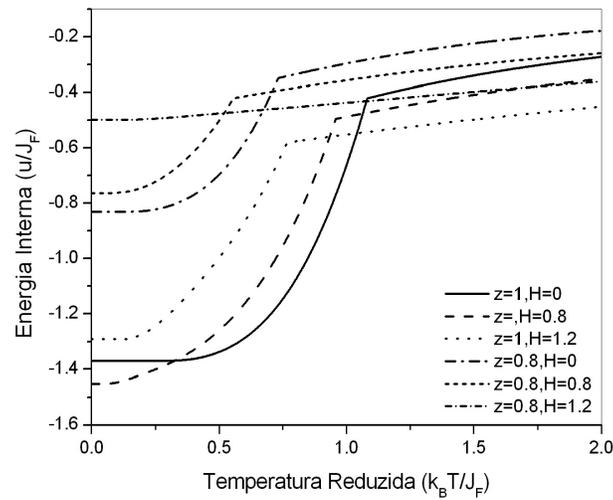


Figura 5.34: Comportamento da energia interna do metamagneto de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do campo externo e da diluição com $\alpha = 0.4$ e $p = 0.05$.

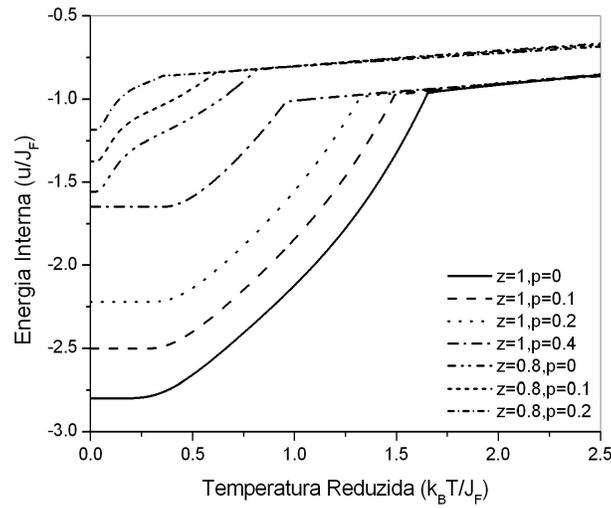


Figura 5.35: Comportamento da energia interna do metamagneto de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores da diluição e da concentração dos íons de oxigênio com $\alpha = 0.7$ e $H = 2.0$.

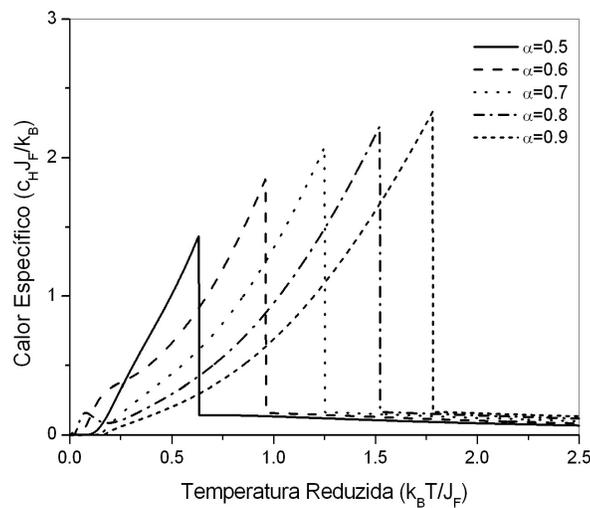


Figura 5.36: Comportamento do calor específico do metamagneto de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do parâmetro da frustração α com $H = 1.0$, $p = 0.1$ e $z = 0.8$.

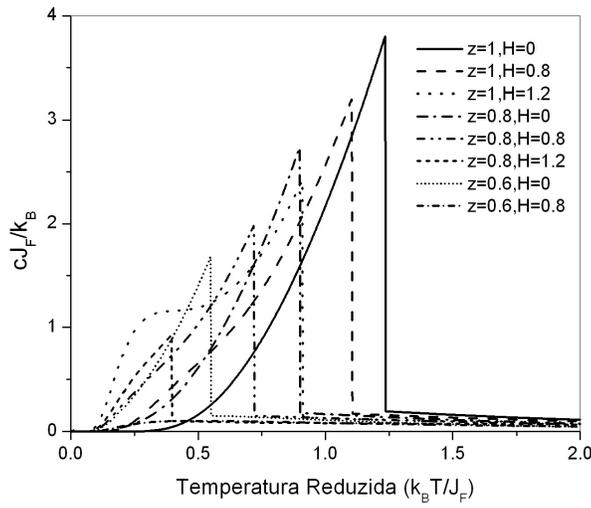


Figura 5.37: Comportamento do calor específico do metamagneto de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do campo externo e da diluição com $\alpha = 0.4$ e $p = 0.0$.

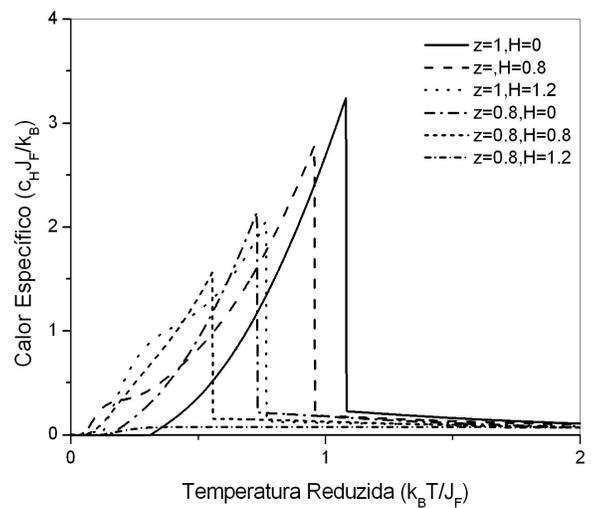


Figura 5.38: Comportamento do calor específico do metamagneto de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores do campo externo e da diluição com $\alpha = 0.4$ e $p = 0.05$.

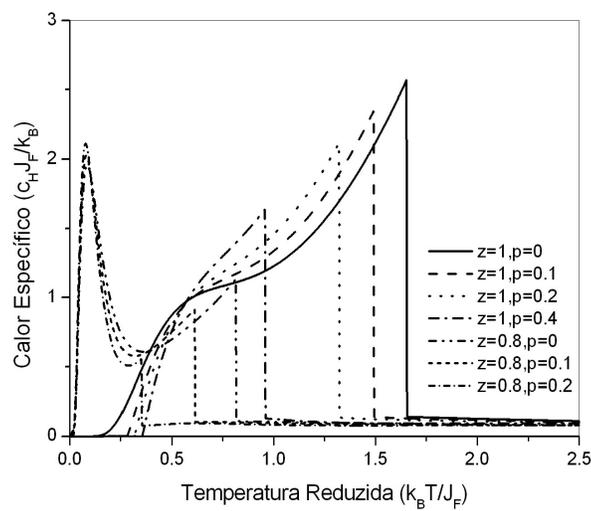


Figura 5.39: Comportamento do calor específico do metamagneto de Ising quase- $2d$ em função da temperatura reduzida para diversos valores da diluição e da concentração dos íons de oxigênio com $\alpha = 0.7$ e $H = 2.0$.

REFERÊNCIAS

- [1] Keimer, B., Belk, N., Birgeneau, R. J., Cassanho, A., Chen, C. Y., Greven, M., Kastner, M. A., Aharony, A., Endoh, Y., Erwin, R. W., Shirane, G., *Phys. Rev. B* **46**, 14034 (1992).
- [2] Casalta, H., Alloul, H., Marucco, J-F., *Physica C* **204**, 331 (1993).
- [3] Niedermayer, Ch., Bernhard, C., Blasius, T., Golnik, A., Moodenbaugh, A., Budnick, J. I., *Phys. Rev. Lett.* **80**, 3843 (1998).
- [4] Yvon, K., François, M., *Z. Phys. B* **76**, 413 (1989); Dinger, T. R., et al., *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2687 (1987).
- [5] Hücker, M., Kataev, V., Pommer, J., Harrab, J., Hosni, A., Pflitsch, C., Gross, R., Büchner, B., *Phys. Rev. B* **59**, R725 (1999).
- [6] Wells, A. F., *Structural Inorganic Chemistry* (Clarendon, Oxford, 1975), p. 259.
- [7] Chakraborty, A., Epstein, A. J., Jarrell, M., McCarron, E. M., *Phys. Rev. B* **40**, 5296 (1989).
- [8] Cheong, S-W., Cooper, A. S., Rupp, L. W., Batlogg, Jr. B., Thompson, J. D. Fisk, Z., *Phys. Rev. B* **44**, 9739 (1991).
- [9] Xiao, G., Cieplak, M. Z., Chien, C. L., *Phys. Rev. B* **42**, 240 (1990).
- [10] Ting, S. T., Pernambuco-Wise, P., Crow, J. E., Manousakis, E., *Phys. Rev. B* **46**, 11772 (1992).

- [11] Keimer, B., Aharony, A., Auerbach, A., Birgeneau, R. J., Cassanho, A., Endoh, Y., Erwin, R. W., Kastner, M. A., Shirane, G., *Phys. Rev. B* **45**, 7430 (1992).
- [12] Uchinokura, K., Ino, T., Terasaki, I., Tsukada, I., *Physica B* **205**, 234 (1995).
- [13] Hücker, M., Büchner, B., *Phys. Rev. B* **65**, 214408 (2002).
- [14] Fisher, M. E., *Phys. Rev.* **113**, 969 (1959).
- [15] Honmura, R., Kaneyoshi, T., *J. Phys. C* **12**, 3979 (1979).

Capítulo 6

Conclusão e Perspectivas Futuras

Neste trabalho estudamos a criticalidade e termodinâmica de modelos de spins (Ising e Heisenberg) antiferromagnético frustrados. Usamos os formalismos da função de Green dependente de dois tempos e da temperatura na aproximação de fases aleatórias (RPA) e a técnica do operador diferencial via teoria de campo efetivo.

No capítulo 2, estudamos as propriedades magnéticas do modelo de Heisenberg antiferromagnético anisotrópico com $S = \frac{1}{2}$. Foi estudado pelo formalismo da função de Green, onde os efeitos da frustração e diluição foram colocados fenomenologicamente no Hamiltoniano. Generalizamos a aproximação de duas subredes para o desenvolvimento dado ao tratamento de antiferromagnetos por Hewson e ter Haar. Como resultado, obtemos uma expressão para a magnetização $m(T)$ da subrede e uma para a temperatura de Néel $T_N(x, z)$. Verificamos que suas propriedades magnéticas variam como função da dopagem. O papel do acoplamento entre as camadas nesses compostos tem sido mostrado crucial para a indução de uma ordem antiferromagnética em temperatura finita para $T < T_N$. Foi mostrado que o acoplamento entre os planos CuO_2 em supercondutores de alta temperaturas, por menor que seja, é reponsável pelo entendimento das propriedades magnéticas desses compostos. Nesse trabalho verificamos que para pequena dopagem no composto $La_{2-x}Sr_xCu_{1-z}Zn_zO_4$, a temperatura de Néel $T_N(x)$ é reduzida drasticamente a zero quando uma concentração crítica x_c é atingida. No modelo fenomenológico

proposto, quando atingimos $x = x_c$ o sistema torna-se bidimensional, que segundo o teorema de Mermin e Wagner o modelo com simetria $SU(3)$ não apresenta ordem de longo alcance (i.e., $T_N = 0$). Por outro lado, o efeito da substituição do átomo magnético Cu pelo íon não-magnético Zn influencia no valor da concentração crítica x_c segundo indica as medidas experimentais para este composto diluído, que aumenta com o crescimento da concentração z do íon não magnético Zn . Por exemplo, para $z = 0.15$ a concentração crítica x_c para o composto $2 - 1 - 4$ é aproximadamente 0.026, um pouco maior que o caso puro $x_c(z = 0) = 0.019$. No nosso modelo, a diluição foi introduzida segundo aproximação de campo médio. Como resultado do nossos cálculos conseguimos reproduzir o ponto de máximo na temperatura de Néel $T_N(x, z)$ em função de z para concentração de buracos (frustração) $x \simeq 0.018$ ligeiramente superior ao valor experimental $x \simeq 1.7\%$. Esses resultados também são observados ao se estudar o comportamento da magnetização em função da temperatura.

Estendemos os estudos do formalismo da F. G. para analisar o limite de estabilidade da fase antiferromagnética do modelo de Heisenberg com interação de longo alcance alternada (modelo frustrado) numa rede unidimensional, e verificamos que esse modelo produz desordem orientacional em todas as temperaturas finitas para $d = 1$ e $p > 1$, ou seja, temos ausência de ordem AF em temperatura finita contrário ao caso ferromagnético que existe ordem para $1 < p < 2$. Uma possível explicação para esta ausência da ordem AF, pode ser atribuída a presença de frustração que tem como principal objetivo desestabilizar a ordem magnética de um dado sistema.

No capítulo 3, a técnica do operador diferencial e diversos tipos de aproximações foram desenvolvidas e aplicadas no modelo de Ising- $\frac{1}{2}$. Discutimos, também, a aplicabilidade desta técnica em modelos quânticos, e verificamos que as simplicidades dos métodos aproximativos reproduzem qualitativamente os resultados físicos de interesse, como, por exemplo, relação entre T_N e T_c para o modelo de Heisenberg quântico de spin-1/2.

No capítulo 4, a técnica do operador diferencial foi desenvolvida na versão de aglomerado com um spin no modelo de Ising - $\frac{1}{2}$ antiferromagnético aleatoriamente decorado.

Este modelo resgata qualitativamente algumas propriedades magnéticas dos compostos supercondutores de altas temperaturas formados por planos de CuO_2 . O formalismo aplicado neste estudo teórico, encontra relações exatas para as funções termodinâmicas, porém com o empecilho de envolver sistemas (infinitos) de equações acopladas, onde funções de correlação de diversas ordens estão presentes. Para se obter resultados quantitativos através desta técnica, faz-se uso de algum desacoplamento nas funções de correlação (aproximações discutidas no capítulo 3), tipo o utilizado no formalismo da função de Green dependente do tempo e temperatura (RPA). Em particular, usamos o desacoplamento de Zernike, onde aproximamos as funções de correlação por produtos dos operadores em diferentes sítios, (RPA - *Random Phase Approximation*) e tratamos de forma exata as auto-correlações (cinemática de spin- $\frac{1}{2}$: $\sigma_i^2 = 1$). Esta aproximação é capaz de reproduzir o resultado exato para a temperatura crítica em uma dimensão, i.e., $T_c = 0$, o que não é verdade na aproximação de campo médio usual (ou aproximação de interação de longo alcance). Estes métodos aproximativos de teorias de campo efetivo têm em comum os mesmos expoentes críticos universais obtidos na aproximação de campo médio (i.e., $\beta = 1/2, \gamma = 1, \alpha = 0(\text{disc}), \delta = 3, \nu = 1/2, \eta = 0$).

As propriedades termodinâmicas (magnetização, susceptibilidade, energia interna e calor específico) e diagramas de fase foram obtidos nesta aproximação. A influência da temperatura e do campo externo é produzir desordem no sistema, onde, por exemplo, temos $T_N(H > 0) < T_N(H = 0)$. Por outro lado, a presença do campo H induz magnetização na direção axial produzindo, em baixas temperaturas, um crescimento da magnetização total $m(T, H, p, \alpha)$, devido a existência do ordenamento AF. Na região de altas temperaturas, onde o ordenamento AF é destruído, a magnetização $m(T, H, p, \alpha)$ decresce com o aumento da temperatura. Entre as regiões de baixa e alta temperaturas a magnetização $m(T, H, p, \alpha)$ apresenta um pico em $T = T_N(H, p, \alpha)$, caracterizando a transição de fase (2ª ordem) deste sistema. Para certos valores de p e de H , observamos um comportamento reentrante nos diagrama de fases e nas propriedades termodinâmicas que é caracterizado por apresentar duas temperaturas de transições, e que fisicamente

está relacionado com as flutuações térmicas na frustração e nas funções de correlações spin-spin. Discutimos a variação da concentração crítica p_c , onde a temperatura de Néel tende a zero, para vários valores do parâmetro de frustração $\alpha = \frac{J_A}{J_F}$. Para certos valores deste parâmetro, observamos um comportamento reentrante em baixas temperaturas. Obtemos, também, o diagrama de fase T_N versus α para alguns valores da concentração p e o fenômeno da reentrância é observado. Outra grandeza física importante, que é a susceptibilidade magnética, foi analisada em função de T, H, p e α . A susceptibilidade magnética total apresenta uma descontinuidade, em $T = T_N(H, p, \alpha)$, indicando a transição de fase, onde sofre um deslocamento gradual por conta do campo H , da concentração de buracos p e o parâmetro de frustração α . Quando o parâmetro de frustração é pequeno ou o número de buracos é grande em baixas temperaturas, observamos a presença de um comportamento anômalo, para determinados valores do campo externo, na susceptibilidade total, com o aparecimento de um ponto de mínimo antes de um ponto de máximo (ocorrência de transição de fase). As flutuações quânticas são predominantes com λ (interação de troca interplanar) pequeno e o aumento do campo H torna o sistema mais instável em direção a desordem. Este fenômeno não é observado no modelo de Ising com $p = 0$, sendo, portanto, uma manifestação quântica do sistema. O que inicialmente parece ser incoerente (um modelo clássico apresentando resultados de origem quântica) pode ser explicado pela introdução, em nosso modelo, da decoração dos átomos de oxigênio na rede. Essa decoração induz um efeito de frustração, que por sua vez deve gerar o comportamento anômalo, uma vez que, só se observa este comportamento quando o valor do parâmetro α é pequeno (maior efeito de frustração). Essa anomalia é observada em resultados experimentais para o composto AF La_2CuO_4 .

A transição de fase também é observada na susceptibilidade *staggered* com uma divergência em $T = T_N(H, p, \alpha)$. A energia interna em função da temperatura foi calculada e vimos que próximo de $T = 0$ todos os spins estão alinhados de forma antiparalela ($\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$). Isto é devido ao fato de todos os spins do aglomerado estarem correlacionados de maneira que a energia total seja máxima. Através de derivação direta obtemos o calor específico,

onde à medida que a temperatura cresce o calor específico aumenta monotonicamente, e em $T = T_N(H, p, \alpha)$ sofre uma descontinuidade indicando assim a transição de fase.

No capítulo 5, estendemos os estudos feitos no capítulo 4 para tratarmos do problema da diluição por sítio em materiais magnéticos, onde a termodinâmica e criticalidade foram analisadas em função da diluição do sistema. O efeito da substituição do átomo magnético Cu pelo íon não-magnético Zn (efeito da diluição) desempenha um papel marcante no valor da concentração crítica p_c , que aumenta com o crescimento da concentração z do íon não magnético Zn. Observamos a presença de reentrância, onde duas temperaturas de transição foram observadas para certos intervalos do parâmetro p . Por outro lado, a presença do ponto de máximo no diagrama de fase no plano (T, z) , previsto experimentalmente para o composto diluído $La_{2-x}Sr_xCu_{1-z}Zn_zO_4$, não foi observado pelo presente modelo. Devemos salientar que o tratamento teórico rigoroso para este composto tem que ter como ponto de partida o modelo de Heisenberg, porém, não o fizemos nesta tese por envolver cálculos analíticos muito mais complexo e certamente o tempo para a realização do trabalho ultrapassaria o estabelecido. Baseado nos resultados do capítulo 2, onde um modelo de Heisenberg fenomenológico foi usado, esperamos que o desenvolvimento da técnica do operador diferencial no modelo de Heisenberg antiferromagnético aleatoriamente decorado diluído seja capaz de reproduzir, pelo menos qualitativamente, os resultados experimentais para este composto.

Como perspectivas futuras de trabalhos, estaremos interessados nos seguintes tópicos:

1) Estudar a transição de fase induzida por campo externo e as propriedades termodinâmicas do composto diluído $La_{2-x}Sr_xCu_{1-z}Zn_zO_4$ usando o formalismo da função de Green dependente de dois tempos e da temperatura;

2) Estudar o diagrama de fase e as propriedades termodinâmicas do modelo de Heisenberg antiferromagnético frustrado e diluído usando a técnica do operador diferencial no intuito de obtermos o ponto de máximo no diagrama de fase no plano (T, z) , previsto experimentalmente para o composto diluído $La_{2-x}Sr_xCu_{1-z}Zn_zO_4$;

3) Utilizando transformações do tipo decoração-iteração estudar o modelo de Heisen-

berg antiferromagnético frustrado e diluído, onde suas propriedades termodinâmicas e diagramas de fase devem ser analisados usando a técnica do operador diferencial numa abordagem de *finite size scaling*;

4) Investigar o efeito da frustração e diluição na transição de fase quântica ($T = 0$), como, por exemplo, o modelo de Heisenberg na rede quadrada com interação de primeiro e segundo vizinhos (conhecido como modelo $J_1 - J_2$). Cálculos preliminares têm sido realizados, para o caso puro usando teoria de campo efetivo correlacionado, por Viana (tese de doutorado, UFSCar-2006);

5) Aplicar simulação de Monte Carlo para investigar, no caso do modelo de Ising aleatoriamente decorado, a existência das diversas concentrações críticas obtidas neste trabalho usando EFT-1, e certificarmos, também, da veracidade dos nossos resultados preliminares desta tese (reentrância, mínimos nas grandezas termodinâmicas, etc).