



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

**Estudo Sistemático das Propriedades  
Termodinâmicas e Criticalidade de Filmes Finos e  
Super-Redes Magnéticas**

**João dos Santos Cabral Neto**

Manaus – AM  
2004



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

**Estudo Sistemático das Propriedades  
Termodinâmicas e Criticalidade de Filmes Finos e  
Super-Redes Magnéticas**

**João dos Santos Cabral Neto**

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  
2004

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

C117es

Cabral Neto, João dos Santos.

Estudo sistemático das propriedades termodinâmicas e criticalidade de filmes finos e super-redes magnéticas / João dos Santos Cabral Neto. -- São Carlos : UFSCar, 2005.  
226 p.

Tese (Doutorado) -- Universidade Federal de São Carlos, 2004.

1. Mecânica estatística. 2. Filmes finos. 3. Modelos de Heisenberg. 4. Transição de fase. I. Título.

CDD: 530.13 (20<sup>a</sup>)

**Este trabalho foi realizado com apoio da FAPEAM**

## **In memorium**

Ao meu amado Pai, Alfredo, e amigo fiel nos bons momentos e nas dificuldades. Infelizmente você não está presente neste momento importante, mas está na presença do Nosso Pai.

# Agradecimentos

A muitos deve minha gratidão, mas ao meu Senhor Jesus Cristo a vida.

*Eu sou a videira, vós as varas; quem está em mim, e eu nele, esse dá muito fruto; porque sem mim nada podeis fazer (João 15.5)*

Desculpem-me aqueles que porventura tenha esquecido de mencionar.

Na minha opinião, a Família é a base para uma formação dentro de princípios morais, éticos e cristãos. Meus Pais representam para mim um exemplo de perseverança, pois com muito esforço e dedicação nos deram os maiores legados que considero: A crença em Deus e os princípios moral e ético. Então, deixo aqui o meu eterno agradecimento aos membros de minha Família.

- Aos meus Pais Alfredo Augusto<sup>†</sup> e Maria Auxiliadora
- As minhas irmãs Patrícia e Priscila Cabral
- Ao meu irmão Alfredo Augusto Jr. e sua esposa Léo
- A Sra Raimunda Pinto
- As sobrinhas Carol e Raquel

Ao Prof. Dr. José Ricardo de Sousa pelo trabalho de orientação. Falar da competência do Prof. Dr. José Ricardo de Sousa é algo fácil de fazer, porque também é fácil de ver. Com um pouco de convivência é possível a comprovação do que digo. Contudo, quero agradecer ao amigo José Ricardo que me incentivou em todos os momentos durante a realização deste trabalho, mostrando de forma simples, que é característica dele ser simples, que quem resiste e persiste aprende a desenvolver. Agradeço também a sua esposa Kátia Sousa pelas proveitosas conversas.

Um importante fato ocorrido durante o desenvolvimento deste trabalho foi o grande presente dado por Deus, que é minha esposa Roberta. Assim, ampliei minha Família e aos novos membros agradeço pela compreensão e o apoio. Eles são:

- Minha esposa Roberta Cabral
- Meus sogros Roberto e Marina Marques

- Ao casal Jaqueline e Paulo Florêncio
- A cunhada Patrícia Marques
- Os sobrinhos Gabriel, Máisa, Beatriz e Rebeca

Alguns anos atrás eu conheci algumas pessoas e hoje são grandes companheiras, e que as relacionarei a seguir. Mas antes devo dizer que a partir delas constituí uma relação de amizade que já duram 14 anos. Quando nos reunimos, atividade freqüente, aumentamos sempre de peso, pois não há quem resista ao churrasco feito pelo o cozinheiro chefe da turma. Eu os considero com irmãos.

- O casal Gerson (o cozinheiro chefe) e Darlice Dantas, aos seus filhos João Paulo e Felipe Dantas
- A Ângela Almeida (nossa relações públicas) e Magno Santana<sup>†</sup>
- Ao amigo Márcio Almeida (setor jurídico)
- Ao Casal Vitor (o filósofo) e Kátia Victório (nossa voz)

Durante a realização deste trabalho tive momentos alegres e alguns que precisaram de um pouco de reflexão. A convivência com os estudantes do curso de Pós-Graduação em Física proporcionou laços de profunda amizade. Os momentos divididos nas horas de trabalho e do lazer foram de grande importância no amadurecimento de idéias. Portanto, registro aqui minha gratidão aos amigos:

- José Wilson
- Denílson Borges
- Rita de Cássia
- Wagner Nunes
- Márcio Amazonas
- Marcelos Peres
- Elie Badr
- José Roberto
- Minos Neto
- Ao casal Luiz Henrique e Josefa Pacobayba

Aos professores do Departamento de Física da UFAM.

Ao Departamento de Física da UFSCar.

A Fundação de Apoio a Pesquisa no Estado do Amazonas – FAPEAM.

# Resumo

Neste trabalho estudaremos através da técnica do operador diferencial o efeito de superfície no modelo de Heisenberg quântico anisotrópico de spin 1/2, via teoria de campo efetivo (EFT), num aglomerado de dois spins, para uma rede cúbica simples. Esses sistemas são caracterizados pela existência de superfícies delimitadoras, filmes finos e super-redes, ou apenas o interior do material (*bulk*). Portanto, a interação de troca, entre os primeiros vizinhos, depende da posição dos átomos na rede: com a existência de superfícies temos para átomos nesses planos, interações de troca  $J_s$  e nos planos adjacentes (*bulk*) interação  $J$ . Estudamos as propriedades termodinâmicas do metamagneto quântico para a rede cúbica simples. O limite de estabilidade da fase antiferromagnética é apresentada para o estado fundamental ( $T = 0$ ) e os respectivos diagramas de fases são analisados. Com a escolha de uma interação entreplanos diferente da existente nos planos (interplanos), parâmetro  $\lambda$  (interação  $\lambda J$ ), analisamos a influência da mudança na dimensionalidade [quase - 2d( $\lambda = 10^{-5}$ )  $\rightarrow$  3d( $\lambda = 1.0$ )] do sistema nas propriedades termodinâmicas com o surgimento de uma anomalia na susceptibilidade magnética total. O efeito de superfície nas propriedades termodinâmicas é tratado tomando o sistema por um filme fino de tamanho  $\ell$  ( $n^\circ$  de camadas), com interações de troca F e AF, onde nesse último aplicamos um campo externo. Observamos o comportamento do filme fino em função da temperatura, número de camadas, campo magnético e a razão  $J_s/J$ . Fazendo variar a interação de troca entre os constituintes e as camadas do filme fino, caracterizamos o sistema como uma super-rede magnética. Escolhemos quatro arranjos na construção das super-redes: interações ferromagnética diferentes nos planos e entreplanos, o mesmo para AF, alternando as camadas entre F e AF e um sistema cuja metade das camadas têm interação F e a outra metade AF, onde observamos a influência da mudança da interação de troca nas propriedades termodinâmicas e na criticalidade. Vários fenômenos foram observados, como por exemplo, oscilação nas magnetizações e susceptibilidade por camadas para certos valores da temperatura e parâmetros de acoplamento.

# Abstract

In this work we will study through the differential operator technique the surface effect in anisotropic spin  $\frac{1}{2}$  quantum Heisenberg model, through theory of effective field (EFT), of a two-spins cluster, in case of simple cubic lattice. Those systems are characterized by the existence of the surfaces, thin films and superlattice, or the bulk. Therefore, the exchange interaction, among the nearest-neighboring, depends on the position of the atoms in the lattice: with the existence of surfaces we have for atoms in those plans, exchange interactions  $J_s$  and in the adjacent plans interaction  $J$ . We studied the thermodynamic properties of the quantum metamagnet for the simple cubic lattice. The limit of stability of the phase antiferromagnetic is presented for the ground state ( $T = 0$ ) and the respective diagrams of phases are analyzed. With the choice of the interlayer coupling interaction different from the existent in the plane (interplane), parameter  $\lambda$  (interaction  $\lambda J$ ), we analyzed the influence of the crossover in the dimensionality [ $2d(\lambda = 10^{-5}) \rightarrow 3d(\lambda = 1.0)$ ] of the system in the thermodynamic properties with the appearance of an anomaly in magnetic susceptibility. The surface effect in the thermodynamic properties is treated taking the system on thickness film  $\ell$ , with exchange interactions F and AF, where in that last one we applied an external field. We observed the behavior of the thin film in function of the temperature, number of layers, magnetic field and the ratio  $J_s/J$ . Changing the exchange interaction between the elements and the layers of the thin film, we characterized the system as a magnetic superlattice. We chose four arrangements in the construction of the superlattice: different inter and interlayer ferromagnetic (F) interaction, the same for antiferromagnetic (AF), alternating the layers among F, and alternating superlattice composed of F (with  $\ell_1$  layers) and AF (with  $\ell_2$  layers), where  $\ell = \ell_1 + \ell_2$  is the thickness of the film, where we observed the influence of the change of the exchange interaction in the thermodynamic properties and in the critical properties. Several phenomena were observed, as for instance, oscillation in the magnetizations and susceptibility for layers in certain values of the temperature and coupling parameters.

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>15</b>
1.1	Aspectos Gerais . . . . .	15
1.2	Filmes Finos Magnéticos . . . . .	17
1.3	Estrutura Teórica para a Modelagem dos Filmes Finos: Modelo de Heisenberg . .	20
1.4	Outras Interações . . . . .	22
1.5	Transição de Fase e Fenômenos Críticos . . . . .	28
1.6	Apresentação . . . . .	33
<b>2</b>	<b>Teoria de Campo Efetivo</b>	<b>38</b>
2.1	Considerações Gerais . . . . .	38
2.2	Teoria do Campo Efetivo Correlacionado . . . . .	39
2.2.1	Identidade de Callen-Suzuki . . . . .	43
2.2.2	Técnica do Operador Diferencial . . . . .	45
2.2.3	Análise Crítica das Teorias de Campo Efetivo . . . . .	49
2.2.4	Outras Aproximações . . . . .	50
2.3	Modelo de Ising Antiferromagnético . . . . .	58
2.3.1	Propriedades termodinâmicas . . . . .	58
2.3.2	Discussão dos Resultados . . . . .	62
<b>3</b>	<b>Metamagneto Heisenberg Anisotrópico</b>	<b>73</b>
3.1	Considerações Gerais . . . . .	73
3.2	Modelo e Formalismo . . . . .	78
3.3	Limite de Estabilidade da Fase Antiferromagnética . . . . .	81

3.3.1	Estado fundamental ( $T = 0$ ) . . . . .	82
3.3.2	Diagramas de Fase . . . . .	83
3.4	Propriedades Termodinâmicas . . . . .	84
3.4.1	Magnetização e Susceptibilidade . . . . .	85
3.4.2	Comparação Teoria - Experimento . . . . .	90
3.4.3	Energia Interna e Calor Específico . . . . .	91
<b>4</b>	<b>Termodinâmica e Criticalidade no Modelo de Filme Fino Heisenberg</b>	<b>99</b>
4.1	Considerações Gerais . . . . .	99
4.2	Modelo e Formalismo . . . . .	101
4.3	Filme Fino Ferromagnético . . . . .	106
4.3.1	Susceptibilidade magnética . . . . .	106
4.3.2	Limite de Estabilidade da Fase Ferromagnética . . . . .	108
4.3.3	Energia Interna e Calor Específico . . . . .	112
4.4	Filme Fino Antiferromagnético . . . . .	115
4.4.1	Magnetização e Susceptibilidade . . . . .	116
4.4.2	Limite de Estabilidade da Fase Antiferromagnética . . . . .	118
4.4.3	Energia interna e Calor Específico . . . . .	120
4.5	Resultados e Discussões . . . . .	121
4.5.1	Propriedades Termodinâmicas . . . . .	121
4.5.2	Filme Fino Metamagneto . . . . .	124
4.5.3	Comportamento das Temperaturas Críticas . . . . .	128
4.5.4	Classe de Universalidade em Filmes Ultrafinos . . . . .	132
<b>5</b>	<b>Super-Rede Magnética</b>	<b>142</b>
5.1	Considerações Gerais . . . . .	142
5.2	Formalismo . . . . .	146
5.3	Propriedades Térmica e Magnética de Super-Rede . . . . .	148
5.3.1	Super-rede alternada F ou AF . . . . .	148
5.3.2	Super-rede com de camadas F e AF Alternadas . . . . .	151
5.3.3	Super-Rede com Camadas F e AF . . . . .	155

5.4	Comportamento Crítico da Super-rede . . . . .	158
5.5	Resultados e Discussões . . . . .	160
5.5.1	Super-rede com configurações F e AF . . . . .	161
5.5.2	Super-rede alternada de camadas F e AF . . . . .	165
5.5.3	Super-rede composta F/AF . . . . .	180
5.5.4	Criticalidade da super-rede . . . . .	188
<b>6</b>	<b>Conclusão e Perspectivas Futuras</b>	<b>196</b>
<b>A</b>	<b>Integrais do Modelo <math>O(n)</math><sup>1</sup></b>	<b>201</b>
<b>B</b>	<b>Coeficientes das Propriedades Magnética e Térmica</b>	<b>205</b>
2.1	Magnetização . . . . .	205
2.2	Susceptibilidade . . . . .	207
2.2.1	a) Susceptibilidade total $\chi_t$ . . . . .	209
2.2.2	b) Susceptibilidade <i>staggered</i> $\chi_{st}$ . . . . .	210
2.3	Energia Interna . . . . .	211
2.3.1	(a) Filme Fino F . . . . .	211
2.3.2	(b) Filme Fino AF . . . . .	212
<b>C</b>	<b>Coeficientes para o Filme Fino com Estrutura de Super-rede</b>	<b>215</b>
3.0.3	Super-rede alternada F ou AF . . . . .	215
3.0.4	Super-Rede F/AF . . . . .	220
3.0.5	Super-Rede FF/AFAF . . . . .	223

---

<sup>1</sup>Os cálculos das integrais no espaço de fase têm como alcance o trabalho pioneiro de Stanley [17], onde o modelo  $O(n)$  sem campo externo em uma dimensão foi resolvido exatamente.

# Lista de Figuras

1.1	Ilustração do processo de fabricação de filmes finos através do método de evaporação em alto vácuo. O vapor aquecido expande-se rapidamente, fazendo com que os átomos ou moléculas sejam depositados sobre a superfície do substrato, formando um filme fino. . . . .	18
1.2	Ilustração da técnica <i>sputtering</i> na fabricação de um filme fino. . . . .	19
1.3	Ilustração dos domínios num material magnético na ausência de campo externo. . . . .	20
2.1	Representação esquemática de um sistema com $N$ partículas (sistema = $\Omega \cup \Omega'$ ). . . . .	42
2.2	Representação de um aglomerado de um spin numa rede quadrada ( $z = 4$ ). . . . .	46
2.3	Topologia das redes (a) Kagomé, (b) quadrada, (c) triangular e (d) cúbica simples, para um aglomerado com dois spins. . . . .	55
2.4	Comportamento da magnetização <i>staggered</i> em função da temperatura reduzida para uma rede cúbica simples ( $\mathfrak{z} = 6$ ) no modelo de Ising AF de spin 1/2 obtida por EFT-1 e diferentes valores do campo $H$ . . . . .	62
2.5	Magnetização total do modelo de Ising AF de spin 1/2 em função da temperatura reduzida numa rede cúbica simples ( $\mathfrak{z} = 6$ ) para diversos valores do campo externo indicados acima. . . . .	64
2.6	Diagrama de fase $T_N \times H$ para uma rede cúbica simples no modelo de Ising de spin 1/2 com interação AF. A linha contínua representa o tratamento via MFT e a linha pontilhada via EFT. . . . .	65
2.7	Dependência da susceptibilidade total com a temperatura para uma rede sc no modelo de Ising Antiferromagnético para vários valores do campo externo. . . . .	66

2.8	Dependência da susceptibilidade <i>staggered</i> com a temperatura para uma rede sc no modelo de Ising Antiferromagnético para vários valores do campo externo. . .	67
2.9	Dependência da energia interna por partícula em função da temperatura para o modelo de Ising AF com spin 1/2 numa rede cúbica simples na presença de campo externo. . . . .	67
2.10	Comportamento do calor específico com a temperatura reduzida no modelo de Ising AF com spin 1/2 obtido por derivação numérica da curva da Fig.(2.9). . . .	68
3.1	Comportamento experimental da susceptibilidade magnética em função da temperatura para o composto $La_2CuO_4$ na presença de um campo magnético externo $H = 3.0T$ [25]. . . . .	76
3.2	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 $T_N(H)$ [1]. . . . .	77
3.3	Diagrama de fase do estado fundamental no plano $H-\lambda$ para o modelo de Heisenberg isotrópico ( $\Delta = 0$ ) e Ising ( $\Delta = 1$ ) obtido por EFT-2. . . . .	82
3.4	Diagrama de fase $H-T$ para o metamagneto Heisenberg de spin 1/2 com diferentes valores do parâmetro $\lambda$ . . . . .	84
3.5	Dependência da temperatura crítica do metamagneto Heisenberg de spin 1/2 com o parâmetro $\lambda$ da interação interplanos. . . . .	85
3.6	Dependência da magnetização $m_s$ com a temperatura reduzida para diferentes valores de $H = 0.0(a)$ , $1.0(b)$ e $3.0(c)$ do modelo de Heisenberg isotrópico ( $\Delta = 0$ ). Na linha contínua temos $\lambda = 1.0$ , pontilhada $\lambda = 0.5$ e contínua-pontilhada $\lambda = 10^{-5}$ . . . . .	86
3.7	Dependência da magnetização total $m$ com a temperatura reduzida para diferentes valores $H = 1.0(a)$ e $3.0(b)$ do modelo de Heisenberg isotrópico ( $\Delta = 0$ ). Na linha contínua temos $\lambda = 1,0$ , pontilhada $\lambda = 0,5$ e contínua-pontilhada $\lambda = 10^{-5}$ . . . . .	87
3.8	Comportamento da susceptibilidade total em função da temperatura para o metamagneto Heisenberg quântico de spin 1/2 anisotrópico variando $\lambda$ e $H$ . . . .	90

3.9	Susceptibilidade total do composto antiferromagnético $La_2CuO_4$ em função da temperatura. A linha tracejado representa o resultado teórico obtido nesse trabalho. . . . .	91
3.10	Comportamento da energia interna do metamagneto Heisenberg isotrópico em função da temperatura reduzida para $\lambda = 1$ (rede 3d)(a) e $\lambda = 10^{-5}$ (rede quase-2d)(b) e diversos valores de $H$ indicados na curva. . . . .	94
3.11	Calor específico do metamagneto Heisenberg isotrópico ( $\Delta = 0$ ) obtido por derivação numérica das Figs.[3.10(a) e (b)]. . . . .	95
4.1	Magnetização do filme fino Heisenberg ferromagnético em função da temperatura para vários valores de $\ell$ com parâmetro $J_s/J = 1.0$ (a), para $\ell = 10$ e vários valores de $J_s/J$ (b) e valores de $\ell$ e $J_s/J$ (c). . . . .	122
4.2	Comportamento da magnetização do filme fino Heisenberg antiferromagnético em função da temperatura reduzida para vários valores de $\ell$ com $J_s/J = 1.0$ (a) e vários valores de $J_s/J$ com $\ell = 10$ (b). . . . .	123
4.3	Perfil da magnetização de cada camada de um filme fino Heisenberg ferromagnético. Na ordem decrescente apresentamos as curvas para $\frac{T}{T_c(\ell=10)} = 0.5, 0.7, 0.8, 0.9$ e $0.98$ com o parâmetro $\frac{J_s}{J} = 1.0$ (a), $(\frac{J_s}{J})_{crit.} = 1.349$ (b) e $\frac{J_s}{J} = 2.0$ (c). . . . .	124
4.4	Comportamento da susceptibilidade longitudinal de um filme fino Heisenberg quântico ferromagnético para uma rede cúbica simples de spin $1/2$ para $\ell = 10$ com vários valores do parâmetro $\frac{J_s}{J}$ . . . . .	125
4.5	Susceptibilidade longitudinal de um filme fino Heisenberg quântico antiferromagnético para uma rede cúbica simples de spin $1/2$ para $\ell = 10$ com vários valores do parâmetro $\frac{J_s}{J}$ . . . . .	126
4.6	Energia interna do filme fino com $\ell = 10$ camadas para diferentes valores de $\frac{J_s}{J}$ numa rede cúbica simples descrita pelo modelo de Heisenberg quântico de spin $1/2$ : (a) caso F e (b) caso AF. . . . .	127
4.7	Dependência do calor específico do filme fino Heisenberg isotrópico de spin $1/2$ obtida por derivação numérica dos resultados da energia interna da Fig.(4.6): (a) caso F e (b) caso AF. Apresentamos as curvas para $\ell = 10$ e $\ell = \infty$ . . . . .	128

4.8	Dependência da magnetização em função da temperatura reduzida para o filme fino metamagneto via EFT-2 com $J_s/j = 1.0$ e vários valores de $H$ : (a) magnetização <i>staggered</i> e (b) magnetização da total. . . . .	129
4.9	Dependência da magnetização em função da temperatura reduzida para o filme fino Heisenberg via MFT-2 com $J_s/J = 1.0$ e vários valores de $H$ : (a) magnetização <i>staggered</i> e (b) magnetização da total. . . . .	130
4.10	Diagrama de fase no plano $H - T$ para o filme fino Heisenberg quântico antiferromagnético. . . . .	131
4.11	Susceptibilidade total do filme fino Heisenberg AF em função da temperatura reduzida para vários valores de $H$ com $J_s = J = 1.0$ : (a) via EFT-2 e (b) via MFT-2. . . . .	132
4.12	Dependência da energia interna com a temperatura para vários valores de $H$ de um filme fino Heisenberg AF via EFT-2 (a) e MFT-2(b), onde $J_s = J = 1.0$ . . . . .	133
4.13	Calor específico em função da temperatura reduzida para o filme fino Heisenberg AF com $J_s = J = 1.0$ com vários valores de $H$ , obtido por derivação numérica da Fig.(4-12): (a) EFT-2 e (b) MFT-2. . . . .	134
4.14	Temperatura reduzida $T_c(\ell)$ como função do tamanho do filme $\ell$ para vários valores da razão interação superfície- <i>bulk</i> $\Delta^{F,AF}$ . A linha pontilhada corresponde a temperatura crítica do <i>bulk</i> . (a) Heisenberg quântico, (b) Heisenberg clássico. . . . .	135
4.15	Temperatura crítica reduzida $T_c(\ell)$ como função da razão da interação de troca $J_s/J_b$ para vários valores de $\ell$ . As linhas tracejada e pontilhada correspondem ao sistema com $\ell \rightarrow \infty$ (semi-infinito) e a temperatura do bulk, respectivamente. (a) Heisenberg quântico F, (b) Heisenberg quântico AF, (c) Heisenberg clássico. . . . .	136
4.16	Dependência da temperatura normalizada $T_c(\ell)/T_c(bulk)$ para o modelo de Heisenberg em redes com estrutura SC(001), BCC(111), FCC(001) e FCC(111) com $J_s = J_b = J$ [29]. . . . .	137
4.17	Expoente crítico $\lambda$ utilizando o modelo XY(a) e Heisenberg (b) para quatro tipos de redes em um filme fino com 20 camadas[29]. . . . .	138
5.1	Comportamento experimental da magnetização a campo nulo para o sistema com multicamadas de Gd/Y com função do números de camadas de Y. . . . .	145

5.2	Representação esquemática de uma super-rede de materiais A e B configurados de forma alternada periodicamente em duas dimensões. . . . .	147
5.3	Representação esquemática de uma estrutura de super-rede de materiais A com tamanho $L_a$ e B com tamanho $L_b$ . . . . .	155
5.4	Dependência da magnetização com a temperatura reduzida para uma super-rede Heisenberg alternada ferromagnética. Apresentamos as curvas da magnetização para vários valores das interações de troca $J_{AS}, J_{BS}, J_{AB}, J_A, J_B$ . . . . .	162
5.5	Dependência da magnetização com a temperatura reduzida para uma super-rede Heisenberg alternada antiferromagnética. Apresentamos as curvas da magnetização para vários valores das interações de troca $J_{AS}, J_{BS}, J_{AB}, J_A, J_B$ . . . . .	163
5.6	Perfil da magnetização de cada camada da super-rede Heisenberg ferromagnética. Na ordem descendente apresentamos as curvas para $T/T_c (\ell = 10) = 0.1, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9$ e $0.98$ com $J_{AS} = J_{BS} = J_A = J_B = J_{AB} = 1.0$ . . . . .	163
5.7	Perfil da magnetização de cada camada da super-rede Heisenberg ferromagnética. Na ordem descendente apresentamos as curvas para $T/T_c (\ell = 10) = 0.1, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9$ e $0.98$ com $J_{AS} = J_{BS} = J_B = 0.5J_A, J_{AB} = 2J_A$ e $J_A = 1.0$ . . . . .	164
5.8	Perfil da magnetização de cada camada da super-rede Heisenberg antiferromagnética. Na ordem descendente apresentamos as curvas para $T/T_c (\ell = 10) = 0.1, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9$ e $0.98$ com $J_{AS} = J_{BS} = J_A = J_B = J_{AB} = 1.0$ . . . . .	164
5.9	Perfil da magnetização de cada camada da super-rede Heisenberg antiferromagnética. Na ordem descendente apresentamos as curvas para $T/T_c (\ell = 10) = 0.1, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9$ e $0.98$ com $J_{AS} = J_{BS} = J_B = 0.5J_A, J_{AB} = 2J_A$ e $J_A = 1.0$ . . . . .	166
5.10	Comportamento da susceptibilidade em função da temperatura para uma super-rede Heisenberg ferromagnética alternada com vários valores da interação de troca. . . . .	166
5.11	(a) Perfil da susceptibilidade magnética de cada camada da super-rede Heisenberg ferromagnética. Na ordem descendente apresentamos as curvas para $T/T_c (\ell = 10) = 0.1, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9$ com $J_{AS} = J_{BS} = J_A = J_B = J_{AB} = 1.0$ . (b) Para $T/T_c (\ell = 10) = 0.98$ . . . . .	167

5.12 (a) Perfil da susceptibilidade magnética de cada camada da super-rede Heisenberg ferromagnética. Na ordem descendente apresentamos as curvas para $T/T_c (\ell = 10) = 0.1, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9$ com $J_{AS} = J_{BS} = J_B = 0.5J_A, J_{AB} = 0.5J_A$ e $J_A = 1.0$ . (b) Para $T/T_c (\ell = 10) = 0.98$ . . . . .	167
5.13 Comportamento da susceptibilidade logitudinal magnética em função da temperatura reduzida para uma super-rede Heisneberg antiferromagnética alternada. Apresentamos as curvas da magnetização para vários valores das interações de troca $J_{AS}, J_{BS}, J_{AB}, J_A, J_B$ . . . . .	168
5.14 Perfil da susceptibilidade magnética de cada camada da super-rede Heisenberg antiferromagnética alternada. Na ordem descendente apresentamos as curvas para $T/T_c (\ell = 10) = 0.1, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9$ e $0.98$ com $J_{AS} = J_{BS} = J_A = J_B = J_{AB} = 1.0$ . . . . .	168
5.15 Perfil da susceptibilidade magnética de cada camada da super-rede Heisenberg antiferromagnética alternada. Na ordem descendente apresentamos as curvas para $T/T_c (\ell = 10) = 0.1, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9$ e $0.98$ com $J_{AS} = J_{BS} = J_B = 0.5J_A, J_{AB} = 2J_A$ e $J_A = 1.0$ . . . . .	169
5.16 Energia interna de uma super-rede Heisenberg ferromagnética alternada para vários valores de interação de troca em função da temperatura. . . . .	169
5.17 Energia interna por camada para uma super-rede Heisenberg ferromagnética alternada. Na ordem descendente apresentamos as curvas para $T/T_c (\ell = 10) = 0.1, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9$ e $0.98$ com $J_{AS} = J_{BS} = J_A = J_B = J_{AB} = 1.0$ . . . . .	170
5.18 Energia interna de cada camada da super-rede Heisenberg ferromagnética alternada. Na ordem descendente apresentamos as curvas para $T/T_c (\ell = 10) = 0.1, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9$ e $0.98$ com $J_{AS} = J_{BS} = J_B = 0.5J_A, J_{AB} = 2J_A$ e $J_A = 1.0$ . . . . .	170
5.19 Energia interna de uma super-rede Heisenberg antiferromagnética alternada para vários valores de interação de troca em função da temperatura. . . . .	171
5.20 Energia interna por camada para uma super-rede Heisenberg antiferromagnética alternada. Na ordem descendente apresentamos as curvas para $T/T_c (\ell = 10) = 0.1, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9$ e $0.98$ com $J_{AS} = J_{BS} = J_A = J_B = J_{AB} = 1.0$ . . . . .	171

5.21	Energia interna de cada camada da super-rede Heisenberg antiferromagnética alternada. Na ordem descendente apresentamos as curvas para $T/T_c$ ( $\ell = 10$ ) = 0.1, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9 e 0.98 com $J_{AS} = J_{BS} = J_B = 0.5J_A$ , $J_{AB} = 2J_A$ e $J_A = 1.0$ . . . . .	172
5.22	Calor específico de uma super-rede Heisenberg ferromagnética alternada para vários valores de interação de troca em função da temperatura. . . . .	172
5.23	Calor específico de uma super-rede Heisenberg antiferromagnética alternada para vários valores de interação de troca em função da temperatura. . . . .	174
5.24	Dependência da magnetização com a temperatura reduzida para uma super-rede Heisenberg F e AF numa rede cúbica simples para alguns valores da interação de troca $J_{SF}$ e $J_{AF}$ . . . . .	174
5.25	Comportamento da magnetização por camada para a super-rede Heisenberg alternada de camadas F e AF numa rede cúbica simples com interações de troca $J_{SF} = J_{SAF} = J_F = J_{AF} = 1.0$ . . . . .	175
5.26	Comportamento da magnetização por camada para a super-rede Heisenberg alternada F e AF numa rede cúbica simples com interações de troca $J_{SF} = J_F = 0.5$ e $J_{SAF} = J_{AF} = 1.0$ . . . . .	175
5.27	Comportamento da magnetização por camada para a super-rede Heisenberg alternada de camadas F e AF numa rede cúbica simples com interações de troca $J_{SF} = J_F = 1.0$ e $J_{SAF} = J_{AF} = 0.5$ . . . . .	176
5.28	Susceptibilidade magnética de uma super-rede Heisenberg composta de materiais F e AF em camadas alternadas numa rede cúbica simples para diferentes interações de troca. . . . .	176
5.29	Valores da susceptibilidade magnética por camada para uma super-rede composta de materiais F e AF no modelo de Heisenberg isotrópico para a configuração 1: $J_{SF} = J_{SAF} = J_F = J_{AF} = 1.0$ . . . . .	177
5.30	Susceptibilidade magnética por camada para uma super-rede Heisenberg composta de materiais F e AF numa rede cúbica simples para a configuração 1: $J_{SF} = J_F = 0.5$ e $J_{SAF} = J_{AF} = 1.0$ . . . . .	177

5.31	Susceptibilidade magnética por camada para uma super-rede Heisenberg composta de materiais F e AF numa rede cúbica simples para a configuração 1: $J_{SF} = J_F = 1.0$ e $J_{SAF} = J_{AF} = 0.5$ . . . . .	178
5.32	Energia interna da super-rede Heisenberg composta de camadas alternadas F e AF numa rede cúbica simples em função da temperatura reduzida para diferentes interações de troca. . . . .	178
5.33	Energia interna por camada para uma super-rede Heisenberg AF numa rede cúbica. Na ordem descendente apresentamos as curvas para $J_{SF} = J_F = J_{SAF} = J_{AF} = 1.0$ . . . . .	179
5.34	Calor específico da composição de super-rede Heisenberg F e AF em função da temperatura reduzida para diferentes valores da interação de troca numa rede cúbica simples. . . . .	179
5.35	Magnetização da super-rede Heisenberg com camadas F superposta em camadas AF em função da temperatura reduzida numa rede cúbica simples. As curvas são apresentadas para vários valores da interação de troca F e AF. . . . .	181
5.36	Perfil da magnetização por camada para uma super-rede Heisenberg composta de $\ell_1$ camadas F e $\ell_2$ camadas AF com $J_F = J_{AF} = 1.0$ , numa rede cúbica simples. As curva são apresentadas para $T/T_{F?AF}(\ell = 10) = 0.1, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9$ e $0.98$ . . . . .	181
5.37	Perfil da magnetização por camada para uma super-rede Heisenberg composta de $\ell_1$ camadas F e $\ell_2$ camadas AF com $J_F = 0.5$ e $J_{AF} = 1.0$ , numa rede cúbica simples. As curva são apresentadas para $T/T_{F?AF}(\ell = 10) = 0.1, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9$ e $0.98$ . . . . .	182
5.38	Perfil da magnetização por camada para uma super-rede Heisenberg composta de $\ell_1$ camadas F e $\ell_2$ camadas AF com $J_F = 1.0$ e $J_{AF} = 0.5$ , numa rede cúbica simples. As curva são apresentadas para $T/T_{F?AF}(\ell = 10) = 0.1, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9$ e $0.98$ . . . . .	182
5.39	Perfil da susceptibilidade magnética em função da temperatura para um super-rede Heisenberg composta de camadas F e camadas AF para vários valores da interação de troca numa rede cúbica simples. . . . .	183

5.40	Susceptibilidade magnética da super-rede Heisenberg composta F e AF por camada como $J_{SF} = J_{SAF} = J_F = J_{AF} = 1.0$ . (a) valores da susceptibilidade para $T/T_{F,AF}(\ell = 10) = 0.1, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9$ , em ordem decrescente. (b) Para $T/T_{F,AF}(\ell = 10) = 0.98$ . . . . .	183
5.41	Susceptibilidade magnética da super-rede Heisenberg composta F e AF por camada como $J_{SF} = J_F = 0.5$ e $J_{SAF} = J_{AF} = 1.0$ , numa rede cúbica simples. . . .	184
5.42	Susceptibilidade magnética da super-rede Heisenberg composta F e AF por camada como $J_{SF} = J_F = 1.0$ e $J_{SAF} = J_{AF} = 0.5$ . (a) valores da susceptibilidade para $T/T_{F,AF}(\ell = 10) = 0.1, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9$ , em ordem decrescente. (b) Para $T/T_{F,AF}(\ell = 10) = 0.98$ . . . . .	184
5.43	Energia interna da super-rede Heisenberg composta de camadas F e AF, numa rede cúbica simples, em função da temperatura reduzida para diferentes interações de troca. . . . .	185
5.44	Energia interna por camada para uma super-rede Heisenberg composta F e AF numa rede cúbica simples. Na ordem descendente apresentamos as curvas para $J_{SF} = J_F = J_{SAF} = J_{AF} = 1.0$ . . . . .	186
5.45	Energia interna por camada para uma super-rede Heisenberg composta F numa rede cúbica simples. Na ordem descendente apresentamos as curvas para $J_{SF} = J_F = 0.5$ e $J_{SAF} = J_{AF} = 1.0$ . . . . .	186
5.46	Energia interna por camada para uma super-rede Heisenberg composta F e AF numa rede cúbica simples. Na ordem descendente apresentamos as curvas para $J_{SF} = J_F = 1.0$ e $J_{SAF} = J_{AF} = 0.5$ . . . . .	187
5.47	Calor específico da super-rede Heisenberg composta F e AF em função da temperatura reduzida para diferentes valores da interação de troca numa rede cúbica simples. . . . .	187
5.48	Dependência da temperatura crítica $T_c/J$ para a super-rede Heisenberg alternada F numa rede cúbica simples com $J_B = J_A$ e $J_{AB} = J$ (linha tracejada), $J_B = 0.5J$ e $J_{AB} = 2J$ (linha contínua) e $J_B = 0.5J$ e $J_{AB} = 0.5J$ (linha pontilhada). Fizemos $J = 1.0$ . . . . .	189

5.49	Dependência da temperatura crítica $T_c/J$ para a super-rede alternada AF no de Heisenberg quântico de spin 1/2 isotrópico com $J_B = J_A$ e $J_{AB} = J$ (linha tracejada), $J_B = 0.5J$ e $J_{AB} = 2J$ (linha contínua) e $J_B = 0.5J$ e $J_{AB} = 0.5J$ (linha pontilhada). . . . .	189
5.50	Dependência da temperatura crítica $T_c/J_A$ da super-rede magnética alternada F com modificação das interações de troca nas superfícies de um parâmetro $c$ , para $J_B = 0.5J_A$ , $J_{AB} = 0.5J_A$ e $J_B = 0.5J_A$ , $J_{AB} = 0.25J_A$ e $J_A = 1.0$ . . . . .	190
5.51	Dependência da temperatura crítica $T_c/J_A$ da super-rede magnética alternada AF com modificação das interações de troca nas superfícies de um parâmetro $c$ , para $J_B = 0.5J_A$ , $J_{AB} = 0.5J_A$ e $J_B = 0.5J_A$ , $J_{AB} = 0.25J_A$ e $J_A = 1.0$ . . . . .	190
5.52	Dependência da temperatura crítica $T_c/J$ para a super-rede composta F e AF no de Heisenberg quântico de spin 1/2 isotrópico com $J_{SF} = J_{SAF} = J_F = J_{AF} = 1.0$ (linha contínua), $J_{SF} = J_F = 0.5$ e $J_{SAF} = J_{AF} = 1.0$ (linha tracejada) e $J_{SF} = J_F = 1.0$ e $J_{SAF} = J_{AF} = 0.5$ (linha pontilhada). . . . .	191
5.53	Dependência da temperatura crítica $T_c/J_A$ da super-rede Heisenberg magnética alternada com modificação das interações de troca nas superfícies de um parâmetro $c$ , para $J_{SF} = cJ_{SAF}$ , $J_F = cJ_{AF}$ e $J_{SAF} = cJ_{SF}$ , $J_{AF} = cJ_F$ . . . . .	192

# Lista de Tabelas

1.1	Classificação dos materiais magnéticos por fases de acordo com a susceptibilidade	16
2.1	Valores da temperatura crítica $T_c$ para o modelo de Ising-1/2 em diversas topologias de rede. . . . .	57
5.1	Temperatura crítica para um super-rede constituída de materiais F e AF na forma pura, alternada e composta para o modelo de Heisenberg isotrópico . . . .	188

# Capítulo 1

## Introdução

### 1.1 Aspectos Gerais

Os fenômenos magnéticos são amplamente utilizados no desenvolvimento de novas tecnologias, desde sistemas de geração e distribuição de energia, a sistema de conversão eletromecânica, eletrônicos e de telecomunicações, transdutores, sensoriamento, prospecção geológica, informática, automação industrial até a medicina e a engenharia biomédica.

Essas novas tecnologias são possíveis com o conhecimento destes fenômenos magnéticos e com a descoberta de novos materiais magnéticos. Para a descrição teórica de tais fenômenos são necessários um rigoroso conhecimento da mecânica quântica aliada à mecânica estatística. Numa abordagem macroscópica, esses fenômenos podem ser estudados através de conceitos da física clássica.

A presença dos materiais (ou compostos) magnéticos em nossas vidas é observada desde o ímã que colocamos na geladeira até a memória (HD- *hard disk*) do computador, ou mesmo as fitas cassete que utilizamos para armazenamento de informações (música, por exemplo).

As propriedades dos materiais magnéticos dependem de fatores intrínsecos, do processo de fabricação e também de sua dimensionalidade, isto é, da forma como estes se apresentam: como o sólido de três dimensões macroscópicas, ou se, por exemplo, têm a forma de um filme fino (bidimensional). Nos casos em que os materiais não são volumosos, uma ou mais das suas dimensões podem ter ordem de grandeza nanométrica.

Os efeitos da baixa dimensionalidade sobre as propriedades magnéticas surgem quando as

Tabela 1.1: Classificação dos materiais magnéticos por fases de acordo com a susceptibilidade

<b>Fase</b>	$\chi/\mu_o$ (SI)	<b>Substância</b>
Ferromagnética	$10^2 - 10^7$	<i>Ni, Fe, Co, NiFe, NdFeB</i>
Ferrimagnética	$10^1 - 10^4$	<i>Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> e ferrites</i>
Antiferromagnética	$10^{-1} - 10^{-2}$	<i>MnO, NiO, FeCO<sub>3</sub></i>
Paramagnética	$10^{-6} - 10^{-3}$	<i>Al, Cr, Mn, Pt, Ta, Ti, W</i>
Diamagnética	$-10^{-6} - (-10^{-3})$	<i>Al, Au, C, H, Cu, Si, Zn</i>
Supercondutora	-1	<i>YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>x</sub></i>

dimensões menores dos materiais se aproximam do comprimento do parâmetro da rede, ou até, das dimensões atômicas.

Podemos classificar os materiais, segundo o critério da dimensionalidade, em

- i) granulares  $\Rightarrow$  quase zero-dimensionais;
- ii) nanofios  $\Rightarrow$  unidimensionais;
- iii) filmes finos  $\Rightarrow$  bidimensionais ou quase bidimensionais;
- iv) volumosos ou massivos  $\Rightarrow$  tridimensionais.

O uso de materiais magnéticos é datado desde 600 anos antes de Cristo. Há evidências históricas do uso, por antigos chineses, de pedras de magnetita moldadas em uma forma ornamental de colher. Quando colocadas sobre superfícies planas podiam ser usadas para indicar uma direção, ou seja, as primeiras bússolas.

Os materiais magnéticos podem ser classificados pela forma como respondem a um campo magnético aplicado, de acordo com sua susceptibilidade  $\chi = M/H$  ( $H$  é o campo externo e  $M$  a magnetização), criando várias fases: ferromagnética e ferrimagnética ( $\chi \gg 1$ ), diamagnética ( $\chi < 1$ ), paramagnética ( $\chi > 0$ ) e antiferromagnética ( $\chi$  pequeno) e materiais supercondutores. Na tabela (1.1) são mostrados valores típicos de  $\chi/\mu_o$  ( $\mu_o$  é a permeabilidade magnética) para cada fase do material magnético e substâncias correspondentes.

O estudo dos fenômenos magnéticos cria interface entre a Física e outras ciências, por exemplo a medicina. Medir os campos magnéticos produzidos por organismos vivos pode ser útil no entendimento de sistemas biofísicos, diagnóstico e terapia de humanos. Tais campos têm origem nas correntes que são produzidas pela atividade de despolarização das células (cérebro, coração,

nervos), de substâncias paramagnéticas (fígado), ferromagnética (pulmão) e marcadores magnéticos presentes no corpo. Os tecidos biológicos, em sua maioria, têm uma susceptibilidade magnética muito próxima à da água, ou seja, são compostos por moléculas diamagnéticas. Só alguns poucos órgãos como o fígado, o baço e o coração apresentam propriedades paramagnéticas por causa da presença de composto de ferritina em seus tecidos[1].

Apresentamos nesta seção alguns aspectos que criam interesse no estudo de sistemas magnéticos, desde produção de equipamentos constituídos de substâncias magnéticas a diagnósticos em seres humanos. Queremos assim, mostrar o alcance do conhecimento desses sistemas à luz da Física no que concerne a sua aplicabilidade.

## 1.2 Filmes Finos Magnéticos

A necessidade de reter um número cada vez maior de informação em componentes que ocupam o mínimo de espaço físico, tem permitido o desenvolvimento de técnicas com precisão e controle sem precedentes na fabricação de tais componentes. Esses materiais empregados na eletrônica são muitas vezes fabricados na forma de filmes finos, isto é, camadas com espessura que podem variar de alguns ângstroms a dezenas de microns ( $1\mu m = 10^{-6}m$ ). Em alguns casos, atingem escalas nanométricas (bilionésimo de metro), escala de átomos e moléculas. Essas estruturas são formadas através da organização de átomos e moléculas depositados, a partir de uma técnica, num substrato. Os filmes são feitos de materiais do tipo isolantes, metais, semicondutores ou supercondutores, dependendo da aplicação a qual será submetido o material. Além de serem usados em sistemas de armazenamento de informações, por exemplo, cobertura magnética em disco de gravação, os filmes finos podem ainda compor outros sistemas, tais como: camadas anti-refletoras em dispositivos opto-eletrônicos, contatos metálicos em dispositivos semicondutores, sensores poliméricos para detecção do amadurecimento de frutas[2], etc. Estes filmes podem ser construídos por diversos métodos, mas todos eles têm como princípio a deposição gradual de átomos ou moléculas do constituinte desejado numa superfície de um dado substrato. Os métodos mais usados são: a deposição em alto vácuo, por evaporação térmica ou bombardeio por feixe de elétrons, e a deposição por pulverização (*sputtering*).

No método da evaporação em alto vácuo, as substâncias que contêm os elementos do ma-

terial desejado são aquecidas até evaporar no interior de uma câmara de vácuo. O material é depositado em uma superfície a uma baixa taxa de deposição, geralmente menor do que uma camada de átomos por segundo, formando um filme fino. O controle no processo de deposição pode resultar em filmes finos cristalinos ou amorfos. Na Fig.(1.1) apresentamos uma ilustração do método de vaporização em alto vácuo.

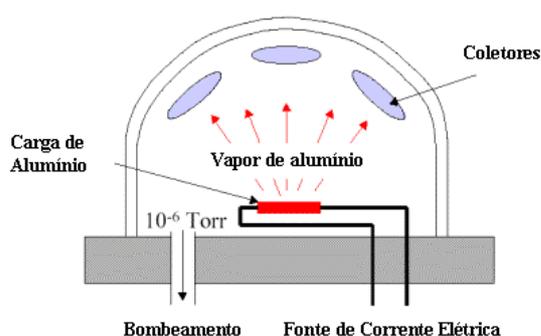


Figura 1.1: Ilustração do processo de fabricação de filmes finos através do método de evaporação em alto vácuo. O vapor aquecido expande-se rapidamente, fazendo com que os átomos ou moléculas sejam depositados sobre a superfície do substrato, formando um filme fino.

No método *sputtering* há um mecanismo de ejeção de material de uma superfície alvo pelo bombardeamento de partículas com alta energia. O material ejetado se deposita sobre o substrato e seu suporte, colocados em oposição à superfície bombardeada. Esta técnica permite a deposição de uma grande variedade de materiais, incluindo alumínio, ligas de alumínio, platina, ouro, titânio, tungstênio, ligas de tungstênio, molibidênio, silício, óxido de silício e silicetos. Esse método apresenta uma série de vantagens comparado ou da evaporação, onde citamos algumas: a) Permite uma deposição uniforme; b) Controle preciso da espessura dos filmes e c) Deposição de multi-camadas com a utilização de alvos múltiplos.

No esquema apresentado na Fig.(1.2) as partículas de alta energia que bombardeiam o alvo, íons de argônio, formam um gás a altíssimas temperaturas (na verdade não se trata de um gás, mas sim de um estado da matéria, denominado plasma). A técnica arranca átomos de um material que se quer depositar sobre um substrato. Esse processo é realizado em câmara de ultra vácuo. A ionização dos átomos de argônio no plasma se processa pelas colisões com elétrons. Para se aumentar a eficiência desta ionização, pode-se confinar os elétrons perto da superfície

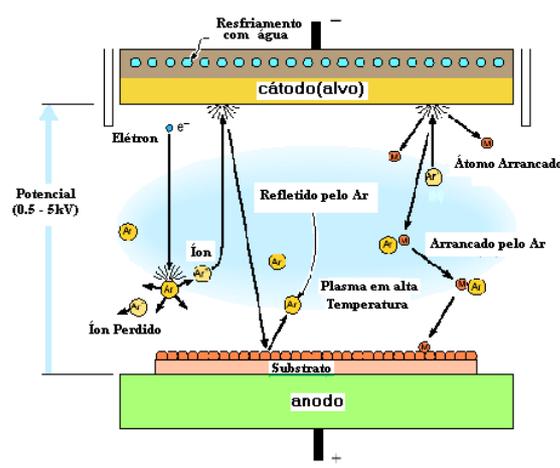


Figura 1.2: Ilustração da técnica *sputtering* na fabricação de um filme fino.

do alvo por meio de um campo magnético. Neste caso, a técnica é denominada *Magnetron Sputtering*.

O desenvolvimento dos filmes finos foi um importante passo na direção da capacitação científico-tecnológica e para o desenvolvimento de dispositivos e estruturas inovadoras, que de acordo com a espessura da estrutura formada tem a classificação dada por: filme ultrafino ( $< 5\mu m$ ), filme fino ( $> 5\mu m$ ), filme ( $10 - 100\mu m$ ), folha ( $0.1 - 1mm$ ) e lâmina ( $> 1mm$ ).

Atualmente sabe-se que, localmente, em pequenas regiões chamadas domínios, os materiais ferromagnéticos apresentam magnetização finita mesmo sem campo externo. Ela é chamada de magnetização espontânea e resulta de uma forte interação entre os momentos vizinhos que tende a mantê-los alinhados. Materiais magnéticos de tamanho normal na maioria das vezes não apresentam magnetização espontânea. Isto ocorre porque dentro de cada domínio os momentos apontam na mesma direção, mas de um domínio para outro os alinhamentos têm direções diferentes, o que produz um não magnetismo espontâneo em escala macroscópica. Na Fig.(1.3) ilustramos os domínios em um dado material magnético. Quando o campo externo é nulo, formam-se domínios, resultando em magnetização total nula.

Com a redução do tamanho desses materiais a divisão em domínios deixa de ser conveniente do ponto de vista energético, e então surge a magnetização espontânea. O tamanho crítico para que um sistema alcance esse estado é em geral muito pequeno, da ordem de algumas dezenas

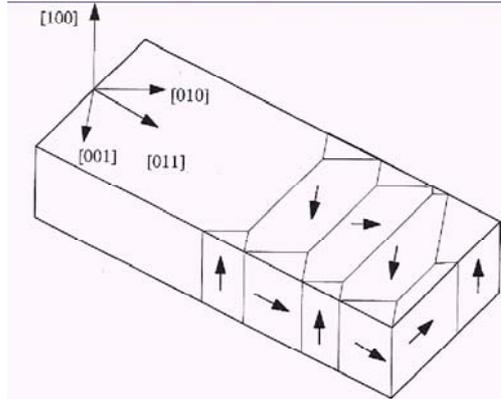


Figura 1.3: Ilustração dos domínios num material magnético na ausência de campo externo.

de nanômetros. Quando isso ocorre, o sistema é conhecido como monodomínio.

### 1.3 Estrutura Teórica para a Modelagem dos Filmes Finos: Modelo de Heisenberg

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

Para explicar o fenômeno do magnetismo, do ponto de vista microscópico, Heisenberg[3] propôs que o forte alinhamento dos spins num ferromagnetismo decorria de seus vizinhos mais próximos. Essa energia de troca, também proposta independentemente por Frenkel[4] e Dorfman[5], 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 dos férmions sejam

antisimétricas. Fisicamente, o estado singleto corresponde ao estado dos spins antiparalelos ( $\uparrow\downarrow$ ), função de onda de spin antisimétrica, e o tripleto paralelos ( $\uparrow\uparrow$ ), função de onda de spin simétrica. Com o desenvolvimento da teoria de perturbação em primeira ordem e tomando a diferença de energia entre estes estados, encontramos o valor da energia de troca, denominada por  $J$  onde:  $J > 0$  o estado de menor energia é o tripleto, portanto prevalece a orientação dos spins paralelos (Ferromagnético) e  $J < 0$  o estado de menor energia é o singleto, prevalecendo a orientação antiparalela (Antiferromagnético). 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 este overlap decresce exponencialmente com a distância ( $r$ ). Desta 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 a auto-função de onda, e redefinindo o ponto zero das energias encontramos

$$\mathcal{H} = -J\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j. \quad (1.1)$$

Para um sistema de  $N$  partículas (elétrons) interagentes podemos escrever o Hamiltoniano (1.1), nesse caso, através de uma combinação de pares de ligações distintas, em um cristal, envolvendo acoplamento spin-spin descrito por

$$\mathcal{H} = - \sum_{ij} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (1.2)$$

onde o somatório é feito sobre todos os pares ( $i$  e  $j$ ) da rede e  $\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$  indica o operador de spins no sítio  $i$ . A Eq.(1.2) é conhecida como modelo de Heisenberg isotrópico pois as três direções no espaço apresentam a mesma probabilidade de orientação ( $\langle S_i^x \rangle = \langle S_i^y \rangle = \langle S_i^z \rangle$ ). O sistema descrito pelo Hamiltoniano (1.2) dá origem ao fenômeno do magnetismo (ferromagnetismo, antiferromagnetismo e ferrimagnetismo).

## 1.4 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. Esta transformação implica que o Hamiltoniano deve conter apenas termos pares de operadores  $S_i^\nu$ , onde a forma aproximada 1.2 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

$$\hat{\mathcal{H}}_1 = - \sum_{(i,j)} J'_{ij} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)^2, \quad (1.3)$$

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

$$\hat{\mathcal{H}}_{DM} = - \sum_{(i,j)} \mathbf{D}_{ij} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j), \quad (1.4)$$

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

$$\mathcal{H}_4 = - \sum_{ijkl} \tilde{J}_{ijkl} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) (\mathbf{S}_l \cdot \mathbf{S}_k), \quad (1.5)$$

etc...

A inclusão da interação DM, Eq.(1.4), no Hamiltoniano de Heisenberg ferromagnético tem induzido uma transição de fase de primeira ordem (presença de calor latente) com a presença de um ponto tricrítico (separa uma linha de 2ª ordem de outra de 1ª ordem) no diagrama de fase no plano  $(T, D)$ . Por outro lado, analisando esta inclusão no Hamiltoniano de Heisenberg antiferromagnético não é observada transição de 1ª ordem[6].

O tipo de estrutura cristalmagnética 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. O fato de que a distribuição de spins ordenados é sempre orientada numa dada direção (eixo fácil da magnetização), definida com respeito ao eixo cristalino, devemos assim ter algum outro tipo de interação que torne o sistema (Hamiltoniano) anisotrópico. Fisicamente, as interações magnéticas (dipolar, quadrupolar, etc) são responsáveis pela existência da anisotropia magnetocristalina, que se manifesta com a dependência da energia do cristal nas orientações dos momentos magnéticos dos átomos com relação ao eixo cristalino. Podemos dizer que num cristal existem campos magnéticos efetivos internos que tendem a orientar os momentos magnéticos em uma dada direção privilegiada. Este campo pode alterar algumas vezes as orientações mútuas dos momentos magnéticos dos átomos, desta forma distorcendo assim a estrutura magnetocristalina (transição de fase estrutural).

Um primeiro exemplo de anisotropia, é a interação dipolar que é representada pelo seguinte Hamiltoniano

$$\hat{\mathcal{H}}_{dipolar} = -4\mu_B^2 \sum_{(ij)} \left\{ \frac{\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - 3(\hat{r}_{ij} \cdot \mathbf{S}_i)(\hat{r}_{ij} \cdot \mathbf{S}_j)}{r_{ij}^3} \right\}, \quad (1.6)$$

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  $\mu_B$  o magneton de Bohr.

É importante mencionar que tanto no Hamiltoniano de Heisenberg, Eq.(1.2), como no dipolar, Eq.(1.6), as interações spin-spin são uma 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. O fenômeno do forte magnetismo é restrito apenas a compostos sólidos, não tendo sido observado nos estados líquido ou gasoso. A energia dipolar também pode ser interpretada qualitativamente em função do campo molecular, porém nesse caso a intensidade do campo é muito pequena, da ordem de  $10^{-1} Oe$ , não podendo explicar o forte magnetismo.

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. Esta interação, denominada spin-órbita, é a responsável pela estrutura hiperfina no espectro atômico, e é descrita pelo seguinte Hamiltoniano

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{L},\mathbf{S}} = \sum_i \xi(\mathbf{r}_i) \mathbf{L}_i \cdot \mathbf{S}_i, \quad (1.7)$$

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 operadores de momento angular e spin, respectivamente no sítio  $i$ .

Utilizando teoria de perturbação de 2ª ordem para a energia de interação spin-órbita, a Eq.(1.7) poderá ser reescrita na forma

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{L},\mathbf{S}} = \sum_{i,(\alpha,\beta)} \Lambda_{\alpha\beta}^i S_i^\alpha S_i^\beta, \quad (1.8)$$

sendo

$$\Lambda_{\alpha\beta}^i = 2\xi^2 \sum_{l \neq p} \frac{\langle p | L_i^\alpha | l \rangle \langle l | L_i^\beta | p \rangle}{E_p^o - E_l^o}, \quad (1.9)$$

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

O Hamiltoniano (1.8) pode ser reduzido, levando em consideração propriedades de simetria, a um importante caso particular que leva em conta apenas termos diagonais do tensor  $\Lambda_{\alpha\beta}^i = D_i \delta_{\alpha z} \delta_{\beta z} - E_i [\delta_{\alpha x} \delta_{\beta x} - \delta_{\alpha y} \delta_{\beta y}]$ , resultando assim na anisotropia ortorrômbica dada por

$$\hat{\mathcal{H}}_{ion} = - \sum_i D_i (S_i^z)^2 + \sum_i E_i [(S_i^x)^2 - (S_i^y)^2], \quad (1.10)$$

onde para  $E_i = 0$  a Eq.(1.10) reduz-se ao caso da anisotropia uniaxial. Observe que o Hamiltoniano (1.10) representa a “interação” do sítio  $i$  com ele mesmo (auto-interação), que é uma consequência da interação spin-órbita, conhecida na literatura como anisotropia de íon-único. A Eq.(1.10) só é relevante para sistemas com spin  $S > 1/2$ , pois o caso particular de spin  $S = 1/2$  temos que  $(S_i^\nu)^2 = 1/4$  para qualquer componente  $\nu = x, y, z$  e consequentemente a Eq.(1.10) se reduzirá a uma constante que pode ser desprezada nos cálculos das grandezas termodinâmicas.

Vamos interpretar fisicamente a inclusão da anisotropia uniaxial, Eq.(1.10) com  $E_i = 0$ , no Hamiltoniano de Heisenberg, Eq.(1.2), ou seja, teremos o seguinte Hamiltoniano resultante

$$\mathcal{H} = - \sum_{(i,j)} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \sum_i D_i (S_i^z)^2, \quad (1.11)$$

onde na Eq.(1.11) para o limite  $D_i = 0$  (isotrópico), as três direções espaciais  $(x, y, z)$  são energeticamente equivalentes, portanto do ponto de vista da mecânica estatística as probabilidades de encontrar os spins nas três direções são iguais, resultando assim  $\langle S_i^x \rangle = \langle S_i^y \rangle = \langle S_i^z \rangle$  e  $\langle S_i^x S_j^x \rangle = \langle S_i^y S_j^y \rangle = \langle S_i^z S_j^z \rangle$ . A presença do segundo termo na Eq.(1.11) quebra essa isotropia. Se  $D_i > 0$ , interpretamos que a direção axial (eixo  $z$ ) é probabilisticamente mais favorecida com  $\langle S_i^z \rangle > \langle S_i^x \rangle = \langle S_i^y \rangle$  e  $\langle S_i^z S_j^z \rangle > \langle S_i^x S_j^x \rangle = \langle S_i^y S_j^y \rangle$ . Em se tratando de transições de fase, por exemplo ferromagnética-paramagnética, a temperatura crítica  $T_c(D)$  cresce à medida que aumentamos o valor da anisotropia  $D_i = D > 0$ , pois a magnetização axial  $M_z \equiv \langle S_i^z \rangle$  fica agora mais forte por causa do termo de íon-único  $D$  que favorece ainda mais a direção axial. Dizemos que para  $D > 0$  o sistema tem a classe de universalidade do modelo de Ising (expoentes críticos Ising e não temperatura crítica). No limite  $D \rightarrow \infty$ , apenas os estados  $-S$  e  $S$  do operador  $S_i^z$  são energeticamente favorecidos e teremos assim um sistema com dois estados apenas interagindo axialmente, que corresponde fisicamente ao modelo de Ising de spin 1/2. Do ponto de vista teórico, todos os compostos magnéticos isolantes são descritos pelo Hamiltoniano de Heisenberg, porém devido ao forte acoplamento spin-órbita, que microscopicamente é mapeado pela anisotropia de íon-único, Eq.(1.10), podemos para o caso  $E_i = 0$  e  $D_i = D > 0$  aproximar o sistema axial por um modelo de Ising com uma única componente nas direções dos spins.

Por outro lado, quando  $D_i < 0$  na Eq.(1.11) a direção axial fica agora “enfraquecida” energeticamente, o que resulta em  $\langle S_i^z \rangle < \langle S_i^x \rangle = \langle S_i^y \rangle$  e  $\langle S_i^z S_j^z \rangle < \langle S_i^x S_j^x \rangle = \langle S_i^y S_j^y \rangle$ . Neste caso, a temperatura crítica na qual  $M_z$  tende a zero diminui gradualmente à medida que  $D < 0$  diminui. Ao contrário do caso  $D > 0$ , onde os spins preferem se orientar axialmente, no caso  $D < 0$  os spins tendem ao plano XY, e podemos associar este regime à classe de universalidade do modelo XY. Diante dessa análise qualitativa, temos que as temperaturas críticas para os modelos Ising (I), XY e Heisenberg (H) satisfazem a desigualdade:  $T_c(I) > T_c(XY) > T_c(H)$ .

A fim de reproduzir teoricamente os três limites dos modelos Ising, XY e Heisenberg isotrópico, é comum escrever um Hamiltoniano efetivo de spins na forma generalizada

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \left( \eta_x S_i^x S_j^x + \eta_y S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z \right), \quad (1.12)$$

onde  $\eta_\nu \in [0, 1]$  é o parâmetro de anisotropia da componente  $\nu = x, y$  da interação dos spins. O Hamiltoniano (1.12) é conhecido na literatura como o modelo de Heisenberg anisotrópico e reduz-se a casos particulares dos modelos Ising ( $\eta_x = \eta_y = 0$ ), XY ( $\eta_x = 0$  e  $\eta_y = 1$ ) e Heisenberg isotrópico ( $\eta_x = \eta_y = 1$ ).

O estado fundamental ( $T = 0$ ) e algumas excitações elementares do Hamiltoniano (1.12) numa rede unidimensional para spin  $S = 1/2$  foi resolvido exatamente por Bethe[7], em 1931, e Hulthén[8], em 1938, no limite isotrópico ( $\eta^x = \eta^y = 1$ ). A generalização do método de Bethe e Hulthén para incluir a anisotropia  $\eta^x = \eta^y = \eta$  foi feita anos mais tarde por Walker[9], cuja energia do estado fundamental por partícula é dada por

$$E_0(\eta) \simeq \frac{J}{2} \left\{ \frac{1}{2} - \tanh(a) \left[ 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{4}{\exp(2\eta a) + 1} \right] \right\}, \quad (1.13)$$

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

Outro resultado exato para o modelo de Heisenberg numa rede  $d(= 1, 2)$ -dimensional é o teorema de Mermin e Wagner[10], que afirma que este 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

$$|M(T, H)| \leq \begin{cases} \left[ \frac{\pi^2 \beta^2 W}{t g^{-1} \sqrt{\frac{\pi^2 W S(S+1)}{|M(T, H)|}}} \right]^{\frac{1}{3}} S(S+1) |H|^{\frac{1}{3}}, & d = 1 \\ \left\{ \frac{4\pi \beta W}{\log \left[ 1 + \frac{\pi^2 W S(S+1)}{|H| |M(T, H)|} \right]} \right\}^{\frac{1}{2}} S(S+1), & d = 2 \end{cases} \quad (1.14)$$

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 (1.14) 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. Recentemente, esse teorema foi generalizado por Bruno[11] 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 potencialidade de uma dada aproximação, haja vista não podermos resolver de forma exata o Hamiltoniano (1.12) para  $d \geq 2$ , e portanto o caminho escolhido é o uso de teorias de campo efetivo tratadas no próximo capítulo deste trabalho. Geralmente, essas teorias não reproduzem o teorema de Mermin e Wagner, por isto é adequada apenas para descrever a termodinâmica e criticalidade (diagrama de fase) de modelos com alta dimensionalidade ( $d = 3$ ), que para o caso da aproximação de campo médio esta é exata para dimensão crítica superior ou igual a 4.

### Modelo XY Anisotrópico

Este modelo XY foi introduzido por Matsubara e Matsuda[12] e tem solução exata em uma dimensão [13]. Em duas dimensões não possui magnetização espontânea (limite isotrópico), mas existe uma fase com ordem topológica no qual temos uma transição de fase conhecida como Kosterlitz e Thouless [14]. 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[15] e para explicar as configurações de vórtices na superfluidez no filme fino  $H_e^4$ [16].

$$\mathcal{H} = - \sum_{ij} \left( J_{ij}^x S_i^x S_j^x + J_{ij}^y S_i^y S_j^y \right). \quad (1.15)$$

### Modelo de Ising

A redução do Hamiltoniano geral dado pela Eq.(2.2) 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 Ising em três dimensões, mas resultados rigorosos de expansão em séries e simulação de Monte Carlo podem ser considerados soluções quase exatas. Este modelo de Ising, que é descrito pelo seguinte Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = - \sum_{ij} J_{ij} S_i^z S_j^z, \quad (1.16)$$

descreve muito bem sistemas magnéticos com anisotropia uniaxial do tipo  $D_y\text{AlO}_3, D_y\text{PO}_4, \text{FeCl}_2, \text{FeBr}_2, \text{Rb}_2\text{CoF}_4$  e, também é útil para estudar transições gás - líquido para fluidos de uma componente e para ligas binárias.

## 1.5 Transição de Fase e Fenômenos Críticos

A origem da teoria moderna de transições de fase e fenômenos críticos é da década de 60, quando os conceitos básicos de classe de universalidade e escala de funções termodinâmicas foram introduzidas, além dos princípios do procedimento do cálculo associado ao grupo de renormalização. O pioneirismo no aspecto de universalidade em transições de fase foi de Kadanoff e colaboradores[17], em 1967.

A transição de fase de um sistema é caracterizada por singularidades nas suas funções termodinâmicas: no caso de sistemas magnéticos a energia livre e derivadas correspondentes, associadas a magnetização e susceptibilidade. O parâmetro de ordem é a quantidade que é não-nula na fase em que o sistema encontra-se ordenado, e nulo na fase desordenada. Os parâmetros externos relevantes em que ocorrem as transições de fase de sistemas magnéticos são a temperatura  $T$  e o campo magnético uniforme  $H$ . Portanto, para  $T < T_c$  o sistema está ordenado e próximo de  $T_c$  o sistema começa a se desordenar e logo acima de  $T_c$  o sistema encontra-se desordenado. No sistema ferromagnético a magnetização é o parâmetro de ordem (enquanto no sistema antiferromagnético o parâmetro de ordem é a magnetização de uma dada subrede ou diferença entre elas).

Podemos classificar a ordem de um transição pela ordem da derivada da energia livre que apresenta descontinuidade: uma transição de 1ª ordem é caracterizada pela descontinuidade da magnetização (calor latente), e uma transição de 2ª ordem a magnetização vai a zero continuamente quando  $T \rightarrow T_c$ , onde a aproximação é a esquerda de  $T_c$  ( $T \rightarrow T_c^-$ ), mas a susceptibilidade diverge. Nesta análise consideramos o sistema à campo nulo. Para a transição de 1ª ordem tem-se a coexistência de duas fases distintas (ordenada e desordenada) no ponto em que o sistema sofre transição. Este caso é semelhante ao fenômeno de vaporização da água à temperatura de

$100^{\circ}C$  ( $p = 1atm$ ), coexistindo as fases gasosas e líquida [no ponto do sistema chamado **ponto crítico** identificado pelas coordenadas  $(p_c, \rho_c, T_c)$ ]. Numa transição de  $2^a$  ordem a fase ordenada, de forma contínua, se transforma na fase desordenada (fase de alta temperatura quando  $T \rightarrow T_c^-$ ), e o contrário quando  $T \rightarrow T_c^+$ .

Podemos estudar esse comportamento das transições de fases de um dado sistema através de um diagrama de fase que delimita a região de existência de cada fase, em função da variação dos parâmetros externos, ou através de uma função de estado. A função de estado deve refletir a variação de um parâmetro externo. Quando esta função de estado assume valores diferentes nas diferentes fases e se anula na fase mais desordenada, então esta é denominada parâmetro de ordem.

Para sistemas magnéticos, a fase ordenada ocorre quando os momentos magnéticos de uma dada configuração microscópica estão alinhados gerando uma correlação entre os vários graus de liberdade do sistema. Quando é proporcionado a variação de temperatura, há uma competição entre a agitação térmica, que produz desordem no sistema, e o acoplamento dos momentos magnéticos, que é responsável pela ordem do sistema.

Além da magnetização, outras grandezas termodinâmicas apresentam singularidades no ponto crítico. O ponto crítico é o ponto onde o parâmetro de ordem se anula para uma nova fase (lembre-se do exemplo dado anteriormente no caso da água). A medida que esse ponto começa a ser alcançado, o sistema simplesmente começa a ajustar-se sobre uma escala microscópica. Estes ajustes aparecem em forma de flutuações (no caso da água a densidade, no caso de sistema magnético a magnetização por exemplo) os quais tornam-se muito grandes nas proximidades do ponto crítico. Pode ocorrer contudo que o parâmetro de ordem tenda a zero de forma descontínua, não havendo mais ordem de longo alcance. Todavia, de outra forma, poderá haver não só ordem de curto alcance mas também uma coexistência dinâmica de várias fases. A junção dessas fases no diagrama de fase é dada por um ponto denominado **multicrítico**. Relacionamos a seguir alguns pontos multicríticos:

▷ Ponto Tricrítico - separa no diagrama de fase uma linha de transição em  $1^a$  ordem de uma linha de  $2^a$  ordem, detectado experimentalmente em misturas de  $H_e^3 - H_e^4$ , materiais metamagnetos ( $F_eCl_2$  e  $N_iNO_3 \cdot 2H_2O$ ) que se caracterizam por alta anisotropia, em modelos teóricos de Blume[18] e Capel[19], magneto diluído (*annealed*), Ising com campo aleatório[20],

Heisenberg com interação Dzyaloshinski-Moriya[21], metamagneto diluído[22].

▷ Ponto Bicrítico - une uma linha de 1ª ordem a uma de 2ª ordem onde temos as fases antiferromagnética ( $\uparrow\downarrow$ ) ordenada, spin flop ( $\nearrow\searrow$ ) e paramagnética ( $\uparrow\uparrow$ ) desordenada, detectado no diagrama de fase no plano  $(T, H)$  em cristais antiferromagnéticos com baixa anisotropia.

▷ Ponto Tetracrítico - este ponto une duas linhas de 2ª ordem, detectado quando inclui-se anisotropia cúbica no Hamiltoniano de Heisenberg e experimentalmente no composto  $CoBr_2 \cdot 6H_2O$  parcialmente deuterado.

▷ Ponto Lifshitz - separa duas linhas de 2ª ordem com junção a uma linha de 1ª ordem, associados as fases oscilatória (FAN), ferromagnética (ordenada) e paramagnética (desordenada), detectado experimentalmente em cristais de  $MnP$ [23] e teoricamente no modelo de Ising com interações entre primeiros vizinhos ferromagnéticos (F) e segundos antiferromagnéticos (AF) na direção do eixo  $\vec{\sigma z}$ , e entre os planos F.

Por outro lado, dependendo dos parâmetros envolvidos no Hamiltoniano o sistema pode vir a apresentar outro ponto multicrítico diferente dos citados[24].

As singularidades apresentadas por grandezas termodinâmicas também são caracterizadas por leis de potências com expoentes bem definidos. Para sistemas magnéticos os expoentes críticos mais importantes são:  $\beta$  da magnetização a campo nulo,  $\delta$  da magnetização em  $T_c$ ,  $\gamma$  da susceptibilidade e  $\alpha$  do calor específico, definidos por:

$$\begin{cases} M(t, H = 0) \sim |t|^\beta \\ M(t = 0, H) \sim H^{\frac{1}{\delta}} \end{cases} ; \quad (1.17)$$

$$\chi \sim |t|^{-\gamma} \quad (1.18)$$

e

$$c \sim |t|^{-\alpha}, \quad (1.19)$$

onde  $t = \frac{T-T_c}{T_c}$ .

Próximo a uma transição de 2ª ordem, o comprimento de correlação  $\xi(T)$ , que define o alcance das correlações entre flutuações, diverge obedecendo a seguinte relação:

$$\xi(T) \sim |t|^{-\nu}, \quad (1.20)$$

onde  $\nu$  também é um expoente crítico. Em transição de fase de 1ª ordem o comprimento de correlação é finito.

Outro expoente crítico associado ao fenômeno da transição de fase é o  $\eta$ . Este expoente é conhecido por dimensão anômala, e é relacionado a função de correlação conectada, em  $T = T_c$ , dada por

$$G(r) = \frac{\exp\left(-\frac{r}{\xi(T)}\right)}{r^{d-2+\eta}} (r \rightarrow \infty), \quad (1.21)$$

onde  $r$  é a distância de um par correlacionado e  $d$  a dimensionalidade do sistema.

Baseados em argumentos de estabilidade dos potenciais termodinâmicos, na década de 60 vários autores obtiveram relações de desigualdade entre os expoentes críticos, tais como<sup>1</sup>:

$$\alpha' + 2\beta + \gamma' \geq 2 \text{ (Rushbrooke, 1963)} \quad (1.22)$$

$$\alpha' + \beta(1 + \delta) \geq 2 \text{ (Griffiths, 1965)} \quad (1.23)$$

$$\nu' d \geq 2 - \alpha' \text{ (Josephson, 1967)} \quad (1.24)$$

$$(2 - \eta) \nu \geq \gamma' \text{ (Fisher, 1969)} \quad (1.25)$$

A solução exata do modelo de Ising 2d sem campo externo, em 1944, representa o início da época moderna do estudo de transição de fase e fenômenos críticos. Com conhecimento prévio desta solução exata, em 1965 Widom[25] e Domb e Hunter[37] observaram que quando os parâmetros que caracterizavam distâncias ao ponto crítico  $\left(t = 1 - \frac{T}{T_c} \text{ e } h\right)$  variam, as funções termodinâmicas preservam a dependência funcional, mudando apenas em escala. Assim, o comportamento crítico de um sistema é ditado pela parte singular das funções termodinâmicas, a qual pode ser descrita, convenientemente, apenas em termos dos parâmetros que traduzem as distâncias ao ponto crítico. Widom, Domb e Hunter assumiram que a parte singular da energia

---

<sup>1</sup>Ver Stanley, Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena, cap. 4 (1971).

livre é uma função homogênea<sup>2</sup> generalizada, ou seja

$$G_{\text{sing}}(\lambda^a t, \lambda^b h) = \lambda G_{\text{sing}}(t, h) \quad (1.26)$$

onde os dois parâmetros  $(a, b)$  definem o grau de homogeneidade de  $G_{\text{sing}}$ , fazendo com que a Eq.(1.26) valha para qualquer valor de  $\lambda^3$ .

A hipótese moderna de escala para energia livre, Eq.(1.26), é mais fraca subestimando as interações em relação a hipótese de Landau que propõe apenas certas formas gerais para os potenciais termodinâmicos, e não produzem valores para expoentes críticos. Embora não permita uma abordagem microscópica dos fenômenos críticos, a hipótese de escala aponta um caminho para generalizar a equação de Curie-Wiess. Todos os expoentes críticos são obtidos em função de  $(a, b)$ , de modo que apenas dois dos expoentes críticos são independentes e o conhecimento deles nos leva a obter todos os outros. Usando a Eq.(1.26), obtem-se, com uso das definições das grandezas termodinâmicas, igualdades, e não desigualdades como as Eqs.(1.22), (1.23), (1.24) e (1.25), entre os expoentes críticos; e além do mais identidade entre os expoentes acima e abaixo da transição  $(\alpha' = \alpha, \gamma' = \gamma, \nu' = \nu)$ . A seguir estão as igualdades entre os expoentes críticos conhecidos na literatura para sistemas com transição de fase de segunda ordem

---

<sup>2</sup>Uma função homogênea  $f(r)$  [ $f(\lambda r) = g(\lambda) f(r)$ ] tem a propriedade de que se nós sabemos o seu valor no ponto  $r = r_o$  e a forma funcional de  $g(\lambda)$ , então conhecemos a função em outro ponto escrevendo  $r = \lambda r_o$ . Isto é, a função  $f(r)$  refere-se ao seu valor em  $r_o$  por uma mudança de escala.

<sup>3</sup>A extensão da hipótese de escala para tratar sistema com transição de fase de primeira ordem ou melhor, perto da tricriticalidade (ponto que separa uma linha crítica de primeira de uma de segunda ordem), é necessário a utilização de um parâmetro externo competitivo, que faz com que o sistema apresente instabilidade. Seja  $g$  este parâmetro externo, então a energia livre ficará

$$G_{\text{sing}}(\lambda^a t, \lambda^b h, \lambda^c g) = \lambda G_{\text{sing}}(t, h, g),$$

que nas vizinhanças do ponto *tricrítico* obedece a seguinte relação de escala

$$G(t, h, g) = t^{2-\alpha} F\left(\frac{h}{t^\Delta}, \frac{g}{t^\phi}\right)$$

onde os expoentes  $\alpha$ ,  $\Delta$  e  $\phi$  caracterizam o comportamento tricrítico. Para campo nulo  $h = 0$ , a função  $F(0, \frac{g}{t^\phi})$  deve ter singularidade pelo menos em dois valores  $\frac{g}{t^\phi}$ , correspondentes às linhas de 1ª e 2ª ordem. Assim as duas linhas devem ser descritas assintoticamente pela expressão

$$g \simeq t^\phi$$

sendo  $\phi$  o expoente de *crossover* que deve ser maior que 1 a fim de que haja tangenciamento do ponto tricrítico. Observa-se que para a obtenção dos expoentes tricríticos são necessários três expoentes independentes.

$$\alpha = 2 - \nu d, \quad (1.27)$$

$$\gamma = \beta (\delta - 1) = \nu (2 - \eta), \quad (1.28)$$

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2, \quad (1.29)$$

$$\delta = \frac{d + 2 - \eta}{d - 2 + \eta}, \quad (1.30)$$

onde  $d$  é dimensão espacial.

A partir da hipótese de escala, Eq.(1.26), também é possível obter equação de estado magnética em função de variáveis apropriadas (campo magnético e magnetização escalados) que independem da substância, descrevendo um comportamento universal para magnetos, como a lei dos estados correspondentes para os fluidos. Este comportamento universal é comprovado teoricamente por simulação numérica e experimental. Por exemplo, a partir da Eq.(1.26) pode-se mostrar que a magnetização apresenta a seguinte lei de escala

$$M \left( \frac{h}{t^\Delta} \right) = \frac{m(t, h)}{t^\beta}, \quad (1.31)$$

sendo  $\Delta = \beta\delta$ . A Eq.(1.31) representa uma universalidade de curvas, isto é, traçando um gráfico  $\frac{m(t, h)}{t^\beta}$  versus  $\frac{h}{t^\Delta}$  teremos duas curvas universais, uma para  $T < T_c$  e outra para  $T > T_c$  que é independente do material.

## 1.6 Apresentação

O desenvolvimento de tecnologias para a fabricação de materiais a partir de um substrato básico, filme fino, contribui para o entendimento do comportamento dessas estruturas na medida que o controle na formação das camadas permitiu o conhecimento do tipo de interação atômica presente. No caso de sistemas semi-infinitos, os efeitos magnéticos, onde a contribuição dos efeitos de superfície são relevantes, tem sido estudado na literatura tanto do ponto de vista experimental quanto teórico[27, 23].

O comportamento magnético de filmes finos pode ser simulado por modelos teóricos capazes

de prever novos e interessantes fenômenos. Esses modelos foram desenvolvidos apresentando condições de contorno adequadas para simular o efeito da superfície no regime da criticalidade. A criticalidade destes sistemas apresenta certas dificuldades operacionais pelo fato de que, além do efeito geométrico da perda de vizinhos, as interações microscópicas próximas a superfície podem assumir valores bem diferentes daquelas no interior do volume (*bulk*). Esta diferenciação tem como consequência o ordenamento da superfície a uma temperatura diferente do que a do volume, ou ainda, exibir um fenômeno de ordenamento de natureza diferente daquela do *bulk*, tal como uma transição de fase antiferromagnética (AF) na superfície de um material ferromagnético. Sabe-se teoricamente que considerando um modelo tri-dimensional semi-infinito com o *bulk* interagindo com acoplamento  $J$  e a superfície com  $J_s$ , vários tipos de transições de fase estarão presentes no diagrama de fase.

No capítulo 2, desenvolveremos a teoria de campo efetivo, aliada à técnica do operador diferencial, desenvolvida por Honmura e Kaneyoshi, aplicada num sistema simples como o modelo de Ising-1/2 para uma rede cúbica simples ( $\mathfrak{z} = 6$ ) na presença de um campo externo, onde são apresentadas alguns tipos de aproximação. Neste momento estudaremos a termodinâmica e a criticalidade de sistemas com interações F e AF.

No capítulo 3, com o uso da teoria EFT, investigamos a influência da interação entre planos (ou interplanos) no metamagneto Heisenberg anisotrópico quântico de spin 1/2, numa rede cúbica simples. Os valores para as interações de troca são escolhidos com  $J_{ij} = J$  para sítios pertencentes ao mesmo plano e  $J_{ij} = \lambda J$  se pertencerem a plano adjacentes. Determinaremos o limite de estabilidade da fase antiferromagnética, apresentando os diagramas de fase para esse sistema, em função do campo externo  $H$  e do parâmetro de interação entre planos  $\lambda$ . As propriedades termodinâmicas são calculadas observando a influência dos parâmetros  $H$  e  $\lambda$ , onde o resultado teórico é comparado ao resultado experimental para o comportamento anômalo da susceptibilidade magnética do composto antiferromagnético  $La_{2-x}CuO_4$ .

No capítulo 4, estudamos as propriedades termodinâmicas de um filme fino no modelo de Heisenberg de spin 1/2 com interações de troca F e AF numa rede cúbica simples. No tratamento teórico consideramos a estrutura dos filmes finos como uma rede cristalina infinita no plano XY e delimitada por duas superfícies na direção axial. Determinamos o limite de estabilidade das fases F e AF em função da razão  $J_s/J$  ( $J_s \equiv$  interação de troca para sítios na superfície e  $J \equiv$

interação no *bulk*) e o tamanho  $\ell$  do filme.

No capítulo 5, aplicamos a teoria EFT no estudo de filmes finos com estrutura de super-redes no modelo de Heisenberg anisotrópico de spin  $1/2$  na ausência de campo externo. Observamos o comportamento das propriedades térmica e magnética e a criticalidade em função das interações de troca interplanos e intraplanos diferentes. Os arranjos considerados para as super-redes foram de filmes finos compostos por camadas F com diferentes tipos de interações de troca, assim como para o filme fino AF, de camadas alternadas F e AF, e por fim de um composto com metade das camadas F e a outra AF.

Finalmente no capítulo 6 apresentamos nossas conclusões e considerações finais.

# REFERÊNCIAS

- [1] CARNEIRO, A. A. O., FERREIRA, A., MORAES, E. R., ARAÚJO, D. B., ROSA, M., BAFFA, O., *Rev. Bras. Ens. Fís.* **22**, no. 3, 324(2000).
- [2] RIUL, A. JR., CAPPARELLI, L. H., *XXV Encontro de Nacional de Física da Matéria Condensada*, 2002.
- [3] HEISENBERG, W. K., *J. Phys.* **49**, 619 (1928).
- [4] FRENKEL, Y., *Z. Phys.* **49**, 31 (1928).
- [5] DORFMAN, Y., *Nature (London)* **119**, 353 (1928).
- [6] DE SOUSA, J. R., GIL, J. X., *Phys. Stat. Solid. B* 213, R5 (1999).
- [7] BETHE, H., *Z. Phys.* **71**, 205 (1931).
- [8] HULTHÉN, *Arkiv. Nat. Astron. Fys.* **26A**, 11 (1938).
- [9] WALKER, *Phys. Rev.* **116**, 1089 (1959).
- [10] MERMIM, N. D., WAGNER, H., *Phys. Rev. Lett.* **22**, 1133 (1966).
- [11] BRUNO, P., *Phys. Rev. Lett.* **87**, 1372031 (2001).
- [12] MATSUBARA, T., MATSUDA, H., *Progr. Theor. Phys.* **16**, 416 (1956).
- [13] LIEB, E. H., *Phys. Rev. Lett.* **18**, 1046 (1967); *Phys. Rev. Lett.* **19**, 108 (1967).
- [14] 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).

- [15] DE JONGH, L. J., MIEDEMA, A. R., *Adv. Phys.* **23**, 1 (1974).
- [16] BERKER, A. N., NELSON, D. R., *Phys. Rev. B* **19**, 2488 (1979).
- [17] KADANOFF, L. P., et al, *Rev. Mod. Phys.* **39**, 395 (1967).
- [18] BLUME, M., *Phys. Rev.* **141**, 517 (1966).
- [19] CAPEL, H. W., *Physica* **32**, 966 (1966).
- [20] GALAM, S., YOKOI, C. S. O., SALINAS, S. R., *Phys. Rev. B* **57**, 8370 (1998).
- [21] DE SOUSA, J. R., LACERDA, F., FITTIPALDI, I. P., *Physica A* **258**, 221 (1998).
- [22] RONEHR, E. E., FIGUEIREDO, W., *Phys. Lett. A* **244**, 165 (1998).
- [23] BECERRA, C. C., SHAPIRA, Y., OLIVEIRA JR., N. F., CHANG, T. S., *Phys. Rev. Lett.* **44**, 1692 (1980).
- [24] CABRAL NETO, J., DE SOUSA, J. R., *Physica A* **319**, 319 (2003).
- [25] WIDOM, B., *J. Chem. Phys.* **43**, 3892 (1965); *J. Chem. Phys.* **43**, 3898 (1965).
- [26] DOMB, C., HUNTER, D. L., *Proc. Phys. Soc.* **86**, 1147 (1965).
- [27] BINDER, K., LANDAU, D. P., *Physica A* **163**, 17 (1990).
- [28] KANEYOSHI, T., *Phys. Cond. Matter* **3**, 4497 (1991); *Rev. Solid State Science* **2**, 39 (1989); *Phys. Stat. Sol. B* **165**, 549 (1991); *J. Mag. Mat.* **98**, 185 (1991); *Introduction to Surface Magnetism*, Boca Rotan, FL: CRC Press, 1991.

## Capítulo 2

# Teoria de Campo Efetivo

### 2.1 Considerações Gerais

O estudo das propriedades termodinâmica, como também a criticalidade, de modelos magnéticos é de grande interesse, em função dos materiais magnéticos contribuírem para o desenvolvimento de novas tecnologias. O tratamento teórico dado a esses modelos, à luz da mecânica estatística, é calcular a função de partição  $Z = \text{Tr} \left[ e^{-\beta \mathcal{H}} \right]$ , onde  $\text{Tr}$  representa o funcional traço,  $\beta = \frac{1}{k_B T}$  ( $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $T$  a temperatura absoluta) e  $\mathcal{H}$  o hamiltoniano que descreve o sistema físico que se deseja estudar. O modelo quântico é definido quando as relações de comutação estão presentes nas variáveis do hamiltoniano  $\mathcal{H}$ , que é o obstáculo no tratamento teórico, além da interação de muitos corpos. Neste caso  $\mathcal{H}$  é um operador que pode ser representado por uma matriz de ordem  $n$ . Através de uma transformação de similaridade que diagonalize a matriz  $\mathcal{H}$  (isto é,  $\tilde{\mathcal{H}} = U \mathcal{H} U^{-1}$ , onde  $U$  é a matriz unitária formada pelos autovetores de  $\mathcal{H}$  e  $\tilde{\mathcal{H}}$  a matriz diagonalizada formada pelos autovalores de  $\mathcal{H}$ ), a função de partição será escrita como

$$Z = \sum_{i=1}^n e^{-\beta \lambda_i}, \quad (2.1)$$

onde  $\{\lambda_i\}$  são os autovalores da matriz  $\mathcal{H}$ .

Em função do somatório realizado na função  $Z$  ser infinito, poucos modelos apresentam solução exata (por exemplo o modelo de Ising 2d sem campo), daí a importância do desenvolvimento de técnicas aproximativas para se obter a termodinâmica dos mais variados modelos.

Na mecânica estatística clássica, a função de partição é escrita através de uma integral no espaço de fase. Para um modelo (por exemplo, o modelo de Heisenberg) ser considerado clássico, suas variáveis de spins serão vetores com comprimentos fixos orientados em todas as direções de spins, ou seja, não há regra de comutação para os spins. Desta forma, a função de partição obtida é através da integral

$$Z = \int d\Omega e^{-\beta\mathcal{H}(\{S_i\})}, \quad (2.2)$$

onde  $d\Omega = d\mathbf{S}_1 d\mathbf{S}_2 \dots d\mathbf{S}_N$  e  $\mathbf{S}_i = (S_i^1, S_i^2, \dots, S_i^n)$  é um vetor de spin com  $n$  componentes. O modelo matemático generalizado que descreve o sistema clássico é o modelo  $O(n)$  ou  $n$ -vetorial, onde  $n = 1, 2, 3$  e  $\infty$  corresponde aos limites Ising, XY, Heisenberg e esférico, respectivamente. A partir do conhecimento da função de partição podemos obter todas as propriedades térmicas e magnéticas (de equilíbrio) do modelo a ser considerado, uma vez que ela nos permite conhecer a energia livre associada dada por

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z. \quad (2.3)$$

Estudar as propriedades térmica e magnética de um filme fino ou de uma super-rede magnética, a partir de modelos quântico e clássico, é no mínimo interessante, pois a existência de superfícies no material e interações microscópicas de diferentes valores tornam esse estudo mais real.

Vamos a seguir tratar formalmente a teoria de campo efetivo (EFT) em aglomerado finito usando a técnica do operador diferencial para sistemas de spins descritos por um dado Hamiltoniano  $\mathcal{H}$ . Aplicaremos esse formalismo no estudo das propriedades térmica e magnética de um filme fino e super-rede com interações do tipo ferromagnética (F) e antiferromagnética (AF).

## 2.2 Teoria do Campo Efetivo Correlacionado

A principal característica de uma substância ferromagnética é apresentar uma magnetização espontânea e  $\chi = \frac{M}{H} \gg 1$  (susceptibilidade magnética) abaixo da temperatura de Curie ( $T_c$ ). Com aumento da temperatura o sistema sofre mudança na sua magnetização espontânea

e susceptibilidade, indo a zero para  $T \geq T_c$ . O parâmetro, então, que mede a ordem do sistema (ordem de longo alcance) é o valor médio da magnetização por spin  $m = \langle S_i^z \rangle$  (onde  $m = \frac{M}{N}$ ,  $M$  é a magnetização do sistema e  $N$  o número de partículas). Para uma substância com interação antiferromagnética ( $\chi \sim 10^{-1}$ ), o parâmetro de ordem agora será a magnetização média de uma dada subrede (spin *up*  $\uparrow$  ou *down*  $\downarrow$ ), ou a diferença entre as respectivas magnetizações.

Contrário ao sistema ferromagnético, a presença de campo externo nos modelos antiferromagnéticos induz transição de fase e surgimento de diversos pontos multicríticos. A função resposta à presença do campo magnético externo, conhecida como susceptibilidade magnética, no composto ferromagnético apresenta uma singularidade na temperatura de Curie ( $T_c$ ) quando o campo é nulo, enquanto no composto antiferromagnético este é um ponto de *máximo* (descontinuidade) na temperatura de Néel  $T_N(H)$ , mesmo na presença de campo. O campo magnético no ferromagneto destrói a transição de fase, e conseqüentemente nenhuma singularidade nem descontinuidade são observadas nas suas propriedades termodinâmicas. No composto antiferromagnético, a presença de campo externo baixo (menor do que um certo valor crítico  $H_c$ ) não destrói a ordem antiferromagnética (AF), mas à medida em que  $H$  cresce o valor de  $T_N(H)$  decresce, e dependendo da simetria do Hamiltoniano esta temperatura crítica pode terminar no ponto multicrítico (existência de mais de uma fase magnética ou linha crítica, como por exemplo, ponto tricrítico, bicrítico, etc) (ver Ref.[1] para detalhes).

Dado um Hamiltoniano de spins interagentes, a mecânica estatística tem como objetivo o cálculo da função de partição  $Z = Tr \left\{ e^{-\beta \mathcal{H}} \right\}$ . Na obtenção de  $Z$  para um sistema de  $N$  partículas, o funcional traço  $Tr$  na função de partição representa matematicamente uma soma sobre  $(2S + 1)^N$  configurações de spins. No caso de spin  $\frac{1}{2}$ , por exemplo, o número de configurações será  $2^N$ . Com a intenção de eliminarmos flutuações estatísticas ( $\sim N^{-\frac{1}{2}}$ ), a mecânica estatística de equilíbrio analisa o sistema no limite termodinâmico ( $N \rightarrow \infty$ ). Lembramos que, para um sistema de partículas interagentes apresentar uma transição de fase é necessário estarmos no limite termodinâmico<sup>1</sup>. Com um número infinito de configurações torna-se difícil o cálculo da função de partição  $Z$ . Poucos modelos estatísticos apresentam solução exata, por exemplo o Ising(1d) com campo, n- vetorial (1d) sem campo e Ising(2d) sem campo, motivo este que

---

<sup>1</sup>O teorema de Yang-Lee([2],[3]) tem dito que a condição para existência de transição de fase é no limite termodinâmico. Essa condição é necessária, mas não suficiente. Sistemas unidimensionais com interações de curto alcance não apresentam ordem de longo alcance ( $T_c = 0$ ).

levou ao desenvolvimento de técnicas aproximativas na intenção de contornar tal impossibilidade. Simulação de Monte Carlo (simulação computacional) e expansão em série constituem os mais precisos métodos para tratar modelos estatísticos, geralmente aplicados com bastante facilidade em modelos clássicos. Por causa das dificuldades desses métodos nas aplicações em modelos quântico, por exemplo, originaram-se outras propostas tendo como parâmetro de avaliação (por comparação) resultados de modelos solúveis. Um desses métodos propostos é a teoria de campo efetivo (EFT) aliada à técnica do operador diferencial que apresenta resultados qualitativamente satisfatórios, que foi proposta por Honmura e Kaneyoshi[4], na época apresentada para o modelo de Ising. Esta técnica do operador diferencial tem sido aplicada desde então a uma variedade de modelos magnéticos, onde basicamente aglomerado (*cluster*) de um spin foi utilizado. Basicamente, até a década de noventa somente sistemas Ising eram tratados, mas com a generalização para aglomerados maiores (dois spins) o modelo de Heisenberg de spin  $\frac{1}{2}$  ferromagnético ([5]-[7]) foi tratado com relativo sucesso para redes tridimensionais, pois o tratamento em redes bidimensionais não apresenta resultados satisfatórios, principalmente pelo fato que no limite do modelo de Heisenberg isotrópico obtém-se  $T_c \neq 0$  em contradição ao teorema de Mermin-Wagner ( $T_c = 0$ )[8].

A técnica do operador diferencial foi aplicada em diversos modelos de spins, tais como Ising com campo aleatório [9], campo transversal [10], filme fino Ising [11], vidro de spin Ising [12], BEG [13], Ising desordenado [14], Blume-Capel [15], Potts [16], metamagneto Ising com campo transversal [17], e mais recentemente esta tem sido estendida para tratar a dinâmica de Glauber [18], metamagneto de Heisenberg [19], Heisenberg quântico antiferromagnético [20]. Neste trabalho, desenvolveremos esta técnica para tratar de filmes finos [21] e super-redes Heisenberg ferro e antiferromagnéticas, onde as propriedades termodinâmicas e diagramas de fases serão calculados.

Da mecânica estatística do equilíbrio, temos que o valor médio de uma grandeza  $A$  no *ensemble canônico* é obtido por

$$\langle A \rangle = \frac{\text{Tr} [A e^{-\beta\mathcal{H}}]}{\text{Tr} [e^{-\beta\mathcal{H}}]}, \quad (2.4)$$

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

Sendo  $\mathcal{H}$  um Hamiltoniano de um sistema qualquer com  $N$  partículas interagentes, então é

sempre possível separar o sistema em duas partes: uma representando um aglomerado  $\Omega$  finito com  $n < N$  spins que descreve as interações dentro do aglomerado e com sua vizinhança, e a parte restante  $\Omega'$  não possuindo spins do aglomerado  $\Omega$  [ver Fig.(2.1)].

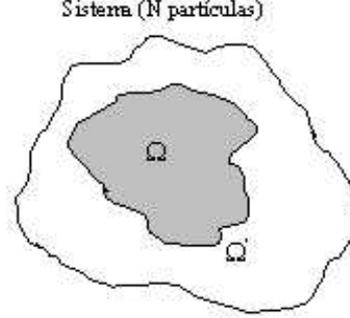


Figura 2.1: Representação esquemática de um sistema com N partículas (sistema =  $\Omega \cup \Omega'$ ).

Desta forma  $\mathcal{H}$  ( $\Sigma = \Omega \cup \Omega'$ ) poderá ser decomposto na forma

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_\Omega + \mathcal{H}_{\Omega'} \quad (2.5)$$

Seja  $O(\Omega)$  uma função de variáveis dentro do aglomerado  $\Omega$ . Caso  $\mathcal{H}_\Omega$  e  $\mathcal{H}_{\Omega'}$  comutem, isto é,  $[\mathcal{H}_\Omega, \mathcal{H}_{\Omega'}] = 0$ , o traço na Eq.(2.4) pode ser efetuado em dois passos: primeiro o traço sobre o aglomerado finito  $\text{Tr}_\Omega$  e em seguida sobre os spins da vizinhança não pertencente ao aglomerado  $\Omega$ , que é denotado por  $\text{Tr}'$ . O valor médio da grandeza  $O(\Omega)$  será dado, segundo a definição da Eq.(2.4), por

$$\langle O(\Omega) \rangle = \frac{\text{Tr}' \text{Tr}_\Omega \left\{ O(\Omega) e^{-\beta(\mathcal{H}_\Omega + \mathcal{H}_{\Omega'})} \right\}}{\text{Tr}' \text{Tr}_\Omega \left\{ e^{-\beta(\mathcal{H}_\Omega + \mathcal{H}_{\Omega'})} \right\}}. \quad (2.6)$$

Sendo  $[\mathcal{H}_\Omega, \mathcal{H}_{\Omega'}] = 0$  (sistema clássico) a expressão acima ficará reescrita na forma

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

Multiplicando a Eq.(2.7) 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 com as propriedades de separação do traço e do Hamiltoniano, ficaremos com

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

Comparando a Eq.(2.8) com a Eq.(2.4) temos que o valor médio de  $O(\Omega)$  fica reduzido ao cálculo parcial no aglomerado finito, ou seja,

$$\langle O(\Omega) \rangle = \left\langle \frac{\text{Tr} \left\{ O(\Omega) e^{-\beta \mathcal{H}_\Omega} \right\}}{\text{Tr} \left\{ e^{-\beta \mathcal{H}_\Omega} \right\}} \right\rangle. \quad (2.9)$$

A Eq.(2.9) é exata para sistemas clássicos, significa que em lugar de calcularmos a média térmica para uma sistema infinito, podemos reescrevê-la sobre uma média de um sistema finito (aglomerado  $\Omega$ ) com o traço parcial  $\text{Tr}_\Omega$  interno. Para o caso em que  $[\mathcal{H}_\Omega, \mathcal{H}_{\Omega'}] \neq 0$ , temos os modelos descritos por Hamiltonianos quânticos, portanto a Eq.(2.9) não é verdadeira. Para modelos quânticos, Sá Barreto e Fittipaldi[22] têm aplicado a Eq.(2.9) de forma aproximada no modelo de Ising com campo transverso. Assim, a média é calculada de forma aproximada, ficando

$$\langle O(\Omega) \rangle \simeq \left\langle \frac{\text{Tr} \left\{ O(\Omega) e^{-\beta \mathcal{H}_\Omega} \right\}}{\text{Tr} \left\{ e^{-\beta \mathcal{H}_\Omega} \right\}} \right\rangle. \quad (2.10)$$

### 2.2.1 Identidade de Callen-Suzuki

Para ilustra o uso da Eq.(2.9) vamos estudar por simplicidade, o Hamiltoniano de Ising com dois estados (spin-1/2) descrito por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad (2.11)$$

onde  $J$  ( $J > 0$  e  $J < 0$  correspondem os sistemas ferromagnético e antiferromagnético, respectivamente) é o parâmetro de interação de troca,  $\langle i, j \rangle$  denota a soma sobre os primeiros vizinhos numa rede de Bravais e  $\sigma_i = \pm 1$  é a variável de spin-1/2. Vamos considerar um aglomerado

com apenas um spin, então o Hamiltoniano (2.11) ficará

$$\mathcal{H}_1 = -J\sigma_1 \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}}, \quad (2.12)$$

onde  $\vec{\delta}$  denota o vetor primeiros vizinhos. Substituindo (2.12) em (2.9) obtemos a expressão para a magnetização  $m = \langle \sigma_1 \rangle$  dada por

$$m = \left\langle \tanh \left( K \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}} \right) \right\rangle, \quad (2.13)$$

onde  $K = \beta J$ .

Para se obter funções de correlação, a identidade de Callen[23] (spin-1/2) e Suzuki[24] (spin- $S \geq 1/2$ ) é facilmente generalizada obtendo

$$\langle \sigma_1 \{g\} \rangle = \left\langle \{g\} \tanh \left( K \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}} \right) \right\rangle, \quad (2.14)$$

onde  $\{g\}$  significa qualquer operador de spin não pertencente ao aglomerado, aqui no aglomerado com um spin ( $\sigma_1$ ) temos sítios diferentes de  $\sigma_1$ , por exemplo,  $\{g\} = \sigma_3 \sigma_4$ . Callen tem mostrado que o resultado (2.14) é equivalente a outra forma exata, derivada por Doman e ter Haar[25], obtida através do formalismo da função de Green dependente de dois tempos e temperatura. A identidade de Calle-Suzuki, Eq.(2.14), foi primeiramente usada para se obter funções de correlações e temperatura crítica do modelo de Ising 2d em expansão em série de altas temperaturas[26].

Diversos autores, tais como Matsudaira[27], Frank e Mitran[28], Tanaka e Uryû[29], Zhang e colaboradores[30] têm usado a identidade (2.14) para obter as propriedades críticas do modelo de Ising-1/2. Nesta seção, abordaremos a metodologia da técnica do operador diferencial, desenvolvida no final da década de setenta por Honmura e Kaneyoshi[4], facilitando assim o manuseio das variáveis de spins. Vamos nos limitar, por enquanto, a analisar a Eq.(2.13).

## 2.2.2 Técnica do Operador Diferencial

Definindo o operador diferencial  $D_x = \frac{d}{dx}$ , então uma propriedade importante que pode-se mostrar facilmente é a seguinte:

$$\exp(\alpha D_x)F(x) = F(x + \alpha), \quad (2.15)$$

onde  $F(x)$  é uma função analítica que admite ser escrita através de uma série de Taylor. Assim sendo, definindo  $F(x) = \tanh(x)$ , a Eq.(2.13) poderá ser reescrita na forma

$$m = \langle \sigma_1 \rangle = \left\langle \exp\left[\left(K \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}}\right) D_x\right] F(x) \Big|_{x=0} \right\rangle, \quad (2.16)$$

ou expandindo o somatório  $\sum_{\vec{\delta}}$  ficaremos

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^{\mathfrak{z}} \exp\left[\left(K \sigma_{1+\vec{\delta}}\right) D_x\right] F(x) \Big|_{x=0} \right\rangle, \quad (2.17)$$

onde  $\mathfrak{z}$  é o número de coordenação da rede.

Para o caso de  $\sigma_i = \pm 1$ , temos a identidade de van der Waerdan<sup>2</sup>  $\exp(A\sigma_i) = \cosh(A) + \sigma_i \sinh(A)$  e podemos reescrever a Eq.(2.17) na forma

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^{\mathfrak{z}} \left( \alpha_x + \sigma_{1+\vec{\delta}} \beta_x \right) F(x) \Big|_{x=0} \right\rangle, \quad (2.18)$$

onde  $\alpha_x = \cosh(KD_x)$  e  $\beta_x = \sinh(KD_x)$ . A Eq.(2.18) é exata, mas de difícil manipulação matemática, pois envolve no segundo membro funções de correlação de muitos spins, gerando assim, com auxílio da Eq.(2.14), um conjunto infinito de equações acopladas de funções de correlação. Para o caso particular de uma rede unidimensional ( $\mathfrak{z} = 2$ ), Sá Barreto e Fittipaldi[32] mostraram que não é necessário a aplicação de nenhum desacoplamento, pois consegue-se um número finito de equações (duas) envolvendo funções de correlação entre spins. Uma denotação para este acoplamento de funções de correlação é conhecida como equações de Dobrushim-Lanford-Ruelle[33], e também muito usada em teoria de campo[34].

O cálculo da magnetização (por spin)  $m$ , a partir da Eq.(2.18), só é possível com uso de

---

<sup>2</sup>Uma generalização da identidade de van der Waerdan tem sido discutido por Balcerzak[31] para spin S-geral.

algum desacoplamento nas funções de correlação. Para ilustrar o desacoplamento da Eq.(2.18), consideremos uma rede quadrada ( $z = 4$ ) e  $\{\sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \sigma_5\}$  como sendo os spins externos, primeiros vizinhos, ao spin central  $\sigma_1$  do aglomerado [ver Fig.(2.2)], portanto ficaremos com

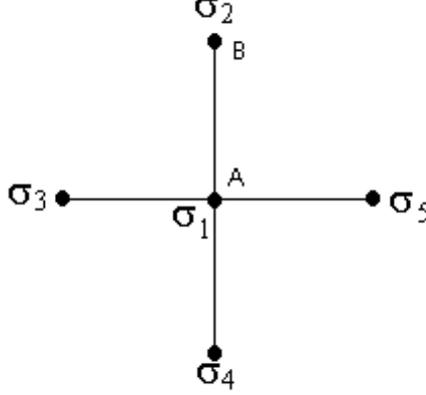


Figura 2.2: Representação de um aglomerado de um spin numa rede quadrada ( $z = 4$ ).

$$m = \frac{A_1(K)}{4} \sum_{l=2}^5 \langle \sigma_l \rangle + \frac{A_3(K)}{4} \sum_{\substack{l,p,q=2 \\ l \neq p \neq q}}^5 \langle \sigma_l \sigma_p \sigma_q \rangle, \quad (2.19)$$

onde  $A_1(K) = 4\alpha_x^3 \beta_x F(x)|_{x=0} = \frac{F(4K)+2F(2K)}{2}$  e  $A_3(K) = 4\alpha_x \beta_x^3 F(x)|_{x=0} = \frac{F(4K)-2F(2K)}{2}$ . Temos usado na dedução da Eq.(2.19) a propriedade  $\hat{\varphi}_{par}(x)F(x)|_{x=0} = 0$ , sendo  $\hat{\varphi}_{par}(-x) = \hat{\varphi}_{par}(x)$  um operador par, por isto a presença de apenas operadores com número ímpar de spins. Por outro lado, a grande dificuldade de se obter de forma exata a magnetização  $m$  por este método é a presença da função de correlação de três spins no segundo membro da Eq.(2.19), e para contornar esta dificuldade é inevitável o uso de algum desacoplamento.

Seguindo a idéia da aproximação RPA (*random phase approximation*) no formalismo da função de Green, isto é, desprezando flutuações dos spins, o primeiro desacoplamento que foi proposto é aproximar as funções de correlações por

$$\langle \sigma_l \sigma_p \dots \sigma_n \rangle \simeq \langle \sigma_l \rangle \langle \sigma_p \rangle \dots \langle \sigma_n \rangle, \quad (2.20)$$

onde  $l \neq p \neq \dots \neq n$ . Usando a aproximação (2.20) na Eq.(2.19) e a simetria translacional

$\langle \sigma_i \rangle = m \forall i$ , obtemos

$$m = \sqrt{\frac{1 - A_1(K)}{A_3(K)}}. \quad (2.21)$$

O resultado aproximado (2.21) representa a teoria de campo efetivo em aglomerado com um spin, denotado aqui por EFT-1 (*effective field theory*), e tem como consequência direta valores clássicos para os expoentes críticos nos diversos modelos analisados. Em particular, da Eq.(2.21) temos o expoente  $\beta = 1/2$  e temperatura crítica (obtida auto-consistentemente por  $A_1(K_c) = 1$ ) para o modelo de Ising-1/2 numa rede quadrada  $T_c \equiv K_c^{-1} = 3.09$  ( $T_c = 2.269$  é o resultado exato). Outras redes podem ser tratadas analogamente, o que equivale na EFT-1 aproximar a Eq.(2.18) por

$$m = (\alpha_x + m\beta_x)^{\mathfrak{z}} F(x)|_{x=0}, \quad (2.22)$$

usando a propriedade  $\widehat{\varphi}_{par}(x)F(x)|_{x=0} = 0$  ficaremos

$$m = \sum_{p=0}^{\mathfrak{z}} A_{2p+1}^{\mathfrak{z}}(K)m^{2p+1}, \quad (2.23)$$

sendo

$$A_{2p+1}^{\mathfrak{z}}(K) = \frac{\mathfrak{z}! \theta_p(x)}{(\mathfrak{z} - 1 - 2p)!(2p + 1)!} \alpha_x^{\mathfrak{z}-1-2p} \beta_x^{2p+1} F(x)|_{x=0}, \quad (2.24)$$

onde  $\theta_p(x) = 1$  e  $0$  quando  $x \leq 0$  e  $x > 0$ , respectivamente e  $x = \mathfrak{z} - 1 - 2p$ . Da mesma forma, próximo da região crítica ( $T \simeq T_c, m \simeq 0$ ) obtemos a partir da Eq.(2.23) o expoente clássico  $\beta = 1/2$  e  $T_c$  é calculado resolvendo autoconsistentemente a seguinte expressão

$$A_1^{\mathfrak{z}}(K) = 1. \quad (2.25)$$

Resolvendo numericamente a Eq.(2.25), obtemos a temperatura crítica  $T_c \equiv K_c^{-1}$  para diversas estruturas de redes ( $\mathfrak{z}$ ), que para a rede unidimensional ( $\mathfrak{z} = 2$ ) encontramos a solução exata  $T_c = 0$ . A medida que o número de coordenação aumenta, a temperatura  $T_c(\mathfrak{z})$  cresce monotonicamente, por exemplo,  $T_c(\mathfrak{z} = 4) = 3.090$  e  $T_c(\mathfrak{z} = 6) = 5.073$ , e no limite  $\mathfrak{z} \rightarrow \infty$  obtemos

o resultado de campo médio  $\frac{T_c}{\mathfrak{z}} = 1$ . Fisicamente, é esperado este crescimento no valor de  $T_c$  com aumento de  $\mathfrak{z}$ , 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 infinita ( $\mathfrak{z} \rightarrow \infty$ ) teremos um dado sítio da rede cristalina interagindo, em média com a mesma energia, com infinitos sítios, que equivale ao modelo de Ising com 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), pode ser obtida deste presente formalismo aproximando a média do produtório de exponenciais na Eq.(2.17) por produtos de médias dos argumentos das exponenciais, ou seja,

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^{\mathfrak{z}} \exp(K\sigma_{1+\vec{\delta}} D_x) \right\rangle F(x) |_{x=0} \simeq \prod_{\vec{\delta}}^{\mathfrak{z}} \exp(\langle K\sigma_{1+\vec{\delta}} D_x \rangle) F(x) |_{x=0} \quad (2.26)$$

agrupando, ficaremos

$$m = \exp(\mathfrak{z}mK D_x) F(x) |_{x=0} = \tanh(\mathfrak{z}mK), \text{ (MFT-1)} \quad (2.27)$$

enquanto a teoria de campo efetivo (EFT-1) aproxima por médias das exponenciais, isto é,

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^{\mathfrak{z}} \exp(K\sigma_{1+\vec{\delta}} D_x) \right\rangle F(x) |_{x=0} \simeq \prod_{\vec{\delta}}^{\mathfrak{z}} \langle \exp(K\sigma_{1+\vec{\delta}} D_x) \rangle F(x) |_{x=0}, \quad (2.28)$$

agrupando e usando a identidade de van der Waerdan obtemos a Eq.(2.22) e expandindo encontramos a Eq.(2.23). Na teoria de campo efetivo (EFT-1) obtemos o resultado correto  $T_c = 0$  para  $\mathfrak{z} = 2$ , porém em MFA-1, Eq.(2.27), encontra o resultado espúrio  $T_c = \mathfrak{z} = 2$ . Matematicamente falando, o que difere MFA de EFT está no tratamento exato das auto-correlações nesta última aproximação, ou seja, a relação de cinemática de spin é tratada exatamente ( $\sigma_1^2 = 1$ ), resultando assim na identidade de van der Waerdan, enquanto que MFA trata estas auto-correlações de forma aproximada, isto é,  $\langle \sigma_1^2 \rangle \simeq \langle \sigma_1 \rangle^2$ , o que induz erroneamente a um valor não nulo de  $T_c$  para  $\mathfrak{z} = 2$ .

### 2.2.3 Análise Crítica das Teorias de Campo Efetivo

Por MFA se tratar de um formalismo com interação de alcance infinito, o problema de percolação, que pode ser entendido como a presença de ligações aleatórias no modelo de spins, não pode ser tratado adequadamente através desta técnica. Contudo, resolvendo corretamente as auto-correlações através da EFT, reproduzimos qualitativamente diagramas de fases em sistemas desordenados e conseqüentemente a percolação é analisada[35]. Por outro lado, apesar de EFT-1 apresentar bons resultados qualitativos para as propriedades termodinâmicas e críticas de modelo com simetria Ising (por exemplo, Ising desordenado, Ising com campo transversal, Blume-Capel, Blume-Emery-Griffiths-BEG, etc), esta encontra algumas dificuldades inerentes a sua versão mais simples em aglomerado com um spin.

A aproximação EFT-1 (também MFA-1) não consegue, por exemplo, encontrar diferentes valores para  $T_c$  em redes com o mesmo número de coordenação ( $\mathfrak{z}$ ) e topologias distintas, isto é, uma rede Kagomé ( $\mathfrak{z} = 4$ ) e quadrada ( $\mathfrak{z} = 4$ ) tem erroneamente  $T_c = 3.090$  iguais, assim como uma rede triangular ( $\mathfrak{z} = 6$ ) tem o mesmo valor de  $T_c = 5.073$  da rede cúbica simples ( $\mathfrak{z} = 6$ ). Resultados exatos em duas dimensões[36] encontram  $T_c(\text{Kagomé}) = 2.143$  [ $T_c(\text{quadrada}) = 2.269$ ] e  $T_c(\text{triangular}) = 3.641$  [ $T_c(\text{cúbica simples}) = 4.511$ ]. Do ponto de vista quantitativo, esta aproximação (EFT-1) apresenta, ainda, resultados não muito bons em relação aos obtidos exatamente ou por simulação de Monte Carlo[37], apesar de ser superior a MFA-1.

Na tentativa de obter bons resultados qualitativos para  $T_c$  no modelo de Ising-1/2 numa rede quadrada, em comparação com a solução exata  $T_c = 2.269$ , Suzuki e Katori[38] realizaram um estudo sistemático do aumento dos aglomerados no esquema MFA. Sugeriram que o limite do tamanho do aglomerado ( $N$ ) infinito a temperatura crítica converge para a solução exata de Onsager. Veremos a seguir MFA em aglomerado com dois spins (MFA-2), também conhecido na literatura como aproximação de Oguchi[39], onde o Hamiltoniano de Ising (2.11) é escrito na forma aproximada por

$$\mathcal{H}_2 = -J\sigma_1\sigma_2 - J(\mathfrak{z} - 1)m(\sigma_1 + \sigma_2), \quad (2.29)$$

sendo o último termo a soma das médias realizadas aos redores dos spins  $\sigma_1$  e  $\sigma_2$  pertencentes

ao aglomerado, excluindo o par da interação (por isto o termo  $J(\mathfrak{z} - 1)m$ ), e  $m = \left\langle \frac{\sigma_1 + \sigma_2}{2} \right\rangle$  é a magnetização por spins, que na aproximação MFA-2 será obtida a partir do Hamiltoniano (2.29), e é dada por

$$m \frac{\sinh[2K(\mathfrak{z} - 1)m]}{\cosh[2K(\mathfrak{z} - 1)m] + \exp(-2K)}. \quad (2.30)$$

No limite de  $m \rightarrow 0$  na Eq.(2.30), obtemos a temperatura crítica pela expressão

$$\frac{2(\mathfrak{z} - 1)}{T_c} = 1 + \exp\left(\frac{-2}{T_c}\right), \quad (2.31)$$

que resolvendo autoconsistentemente para  $\mathfrak{z} = 4$  (rede quadrada) encontramos  $T_c = 3.893$ , distante, ainda, do resultado exato  $T_c = 2.269$ . Aumentando ainda mais o aglomerado, mas mantendo a simetria da rede quadrada, Suzuki e Katori obtiveram  $T_c = 3.125; 2.915; 2.748; 2.679; 2.631$  e  $2.575$  para  $N = 9, 21, 45, 69, 99$  e  $148$  spins, respectivamente, mostrando uma certa convergência para o resultado exato  $T_c = 2.269$ , com o grande empecilho do aumento do tempo computacional. Todo este esforço para se obter bons resultados de  $T_c$ , não elimina a imperfeição das teorias de campo efetivo, que têm em comum uma expressão autoconsistente  $m = \Psi(m, T)$ , nos valores clássicos ( $\beta = 1/2, \gamma = 1, \dots$ ) para os expoentes críticos. Uma alternativa para encontrar valores não clássico de expoentes críticos, mas mantendo a idéia de MFA, foi apresentada por Mansuo Suzuki[40] quando propôs o formalismo CAM (*Cohrent Anomaly Method*).

## 2.2.4 Outras Aproximações

A primeira tentativa de melhorar o valor de  $T_c$  na técnica do operador diferencial foi apresentada por Kaneyoshi e colaboradores[41], onde utilizaram um desacoplamento nas funções de correlações que levam em consideração as flutuações dos spins pertencentes ao aglomerado, ou seja, aproximamos os spins circundantes ao aglomerado (um spin) da seguinte forma

$$\sigma_p \simeq \langle \sigma_p \rangle + \lambda(\sigma_1 - \langle \sigma_1 \rangle), \quad (2.32)$$

onde  $\lambda$  representa o campo de reação de Onsager[42] que mede a correlação de curto-alcance dos spins  $\sigma_p$  externo ao aglomerado com o spin  $\sigma_1$  pertencente ao aglomerado. Aplicando a

aproximação (2.32) na Eq.(2.19) obtemos

$$m = A(\lambda)m + B(\lambda)m^3, \quad (2.33)$$

sendo

$$A(\lambda) = 4A_1(K) + 12A_3(K)\lambda^2 - 8A_3(K)\lambda^3 \quad (2.34)$$

$$B(\lambda) = 4A_3(K)(1 - 3\lambda^2 + 2\lambda^3), \quad (2.35)$$

que no limite  $m \rightarrow 0$  na Eq.(2.33) encontramos a temperatura crítica  $T_c$  por

$$A(\lambda_c) = 4A_1(K_c) + 12A_3(K_c)\lambda_c^2 - 8A_3(K_c)\lambda_c^3 = 1. \quad (2.36)$$

Da Eq.(2.36) temos que para determinar  $T_c \equiv K_c^{-1}$  precisamos conhecer o parâmetro  $\lambda_c$ , assim sendo necessitamos de outra equação independente que envolva  $T_c$  e  $\lambda_c$ , desta forma resolvemos simultaneamente as duas equações e encontramos os valores de  $T_c$  e  $\lambda_c$ .

Escolhendo  $\{g\} = \sigma_2$  na Eq.(2.14) e desenvolvendo o formalismo do operador diferencial, obtemos

$$\begin{aligned} \langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle &= A_1(K) \langle \sigma_2 (\sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4 + \sigma_5) \rangle + \\ &A_3(K) \langle \sigma_2 (\sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 + \sigma_2 \sigma_3 \sigma_5 + \sigma_2 \sigma_4 \sigma_5 + \sigma_3 \sigma_4 \sigma_5) \rangle, \end{aligned} \quad (2.37)$$

usando a identidade  $\sigma_p^2 = 1$ , ficaremos

$$\begin{aligned} \langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle &= A_1(K) + A_1(K) (\langle \sigma_2 \sigma_3 \rangle + \langle \sigma_2 \sigma_4 \rangle + \langle \sigma_2 \sigma_5 \rangle) + \\ &A_3(K) (\langle \sigma_3 \sigma_4 \rangle + \langle \sigma_3 \sigma_5 \rangle + \langle \sigma_4 \sigma_5 \rangle) + A_3(K) \langle \sigma_3 \sigma_4 \sigma_5 \rangle. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Usando a aproximação (2.32) na Eq.(2.38), obtemos

$$\begin{aligned}
m^2 + \lambda(1 - m^2) &= A_1(K) + 3[A_1(K) + A_3(K)]m^2 + A_3(K)m^4 + \\
&3[A_1(K) + A_3(K) + 2A_3(K)m^2](1 - m^2)\lambda^2 - \\
&8A_3(K)m^2(1 - m^2)\lambda^3 + A_3(K)(1 + 3m^2)(1 - m^2)\lambda^4. \quad (2.39)
\end{aligned}$$

Portanto, a magnetização e o parâmetro  $\lambda$  são obtidos resolvendo simultaneamente as Eqs.(2.33) e (2.39). Como estamos interessados na criticalidade, então fazemos  $m \rightarrow 0$  na Eq.(2.39) e teremos

$$\lambda_c = A_1(K_c) + 3[A_1(K_c) + A_3(K_c)]\lambda_c^2 + A_3(K_c)\lambda_c^4. \quad (2.40)$$

Das Eqs.(2.36) e (2.40) é possível mostrar que  $T_c = 2/\ln 2$  (equivalente a aproximação de Bethe-Peierls) e  $\lambda_c = 1/3$ . Generalizando para qualquer número de coordenação ( $\mathfrak{z}$ ) obtemos

$$\begin{cases} T_c = \frac{2}{\ln\left(\frac{\mathfrak{z}}{\mathfrak{z}-2}\right)} \\ \lambda_c = \frac{1}{\mathfrak{z}-1} \end{cases}. \quad (2.41)$$

Taggart e Fittipaldi[43] propuseram uma alternativa para se obter funções de correlações, e denominaram de aproximação do triplo médio. Escolhendo  $\{g\} = \coth K \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}}$  na Eq.(2.14) obtemos

$$\left\langle \sigma_1 \coth K \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}} \right\rangle = 1. \quad (2.42)$$

Aplicando o mesmo procedimento do operador diferencial quando encontramos a expressão (2.17) para a magnetização, a Eq.(2.42) ficará

$$1 = \left\langle \sigma_1 \prod_{\vec{\delta}}^{\mathfrak{z}} \left( \alpha_x + \sigma_{1+\vec{\delta}} \beta_x \right) \right\rangle \tilde{F}(x) |_{x=0}, \quad (2.43)$$

sendo  $\tilde{F}(x) = \coth(x)$ . Desenvolvendo a Eq.(2.43) para uma rede quadrada ( $\mathfrak{z} = 4$ ) e usando a propriedade de simetria translacional (i. e.,  $\langle \sigma_1 \sigma_p \rangle = \langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle \forall p = 2, 3, 4$  e  $5$  e  $\langle \sigma_1 \sigma_p \sigma_l \sigma_q \rangle = \langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 \rangle \forall p \neq l \neq q \neq 1$ ) a Eq.(2.43) ficará reescrita na forma

$$1 = \tilde{A}(K) \langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle + \tilde{B}(K) \langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 \rangle, \quad (2.44)$$

sendo

$$\tilde{A}(K) = \frac{1}{2} \left[ \tilde{F}(4K) + 2\tilde{F}(2K) \right] \quad (2.45)$$

e

$$\tilde{B}(K) = \frac{1}{2} \left[ \tilde{F}(4K) - 2\tilde{F}(2K) \right]. \quad (2.46)$$

Calculando  $m = \langle \sigma_p \rangle$  ( $p \neq 1, 2, 3, 4, 5$ ) tomando como base a Eq.(2.44) encontramos

$$m = \tilde{A}(K) \langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_p \rangle + \tilde{B}(K) \langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 \sigma_p \rangle. \quad (2.47)$$

Usando a propriedade da simetria translacional na Eq.(2.19), obtemos

$$m = A_1(K)m + A_3(K) \langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_p \rangle. \quad (2.48)$$

Na aproximação do triplo médio, Taggart e Fittipaldi supuseram que em  $T = T_c$  (criticalidade) a função de correlação  $\langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 \sigma_p \rangle$  tende a zero mais rapidamente do que a função de correlação de três pontos  $\langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_p \rangle$ , portanto usando as Eqs.(2.47) e (2.48) obtemos a temperatura crítica através da seguinte expressão

$$A_3(K_c) = \tilde{A}(K_c) [1 - A_1(K_c)], \quad (2.49)$$

que resolvendo numericamente encontramos  $T_c = 2.680$ .

Taggart[44] também desenvolveu um outro tipo de aproximação, no qual fez uso de desacoplamento nas Eqs.(2.44) e (2.47) usando a Eq.(2.32), obtendo assim para a rede quadrada ( $\mathfrak{z} = 4$ )  $T_c = 2.490$ , muito próximo da solução exata  $T_c = 2.269$ . Do ponto de vista fenomenológico, cada metodologia tem suas características próprias. Isso faz com que os obstáculos de cada uma sejam intrinsecamente relacionados a ela, as quais atingidas se revelam de difícil transposição. Nesse propósito, interpretamos como um método promissor, todo aquele que su-

porta um esquema de aplicação sistemática. Se além disso, o método pode ser aplicado a uma certa variedade de problemas, então estes métodos de aproximação sucessivas devem ser usados. Nessa linha de abordagem algum progresso foi conseguido desde o trabalhos de Kaneyoshi e colaboradores, em 1981, com a idéia do campo de reação de Onsager até o desenvolvimento da aproximação do triplo médio, por Taggart e Fittipaldi, em 1982.

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 (2.12). Seguindo o espírito da aproximação de Oguchi, Eq.(2.29), vamos usar um aglomerado com dois spins e desenvolver a técnica do operador diferencial, assim sendo o Hamiltoniano para este aglomerado ficará

$$\mathcal{H}_2 = -J\sigma_1\sigma_2 - a_1\sigma_1 - a_2\sigma_2, \quad (2.50)$$

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

Escolhendo  $O(\Omega) = \frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2)$  e usando o Hamiltoniano (2.50) na Eq.(2.9) obtemos a magnetização por spins  $m = \langle \frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2) \rangle$ , que é dada por

$$m = \left\langle \frac{\sinh \beta (a_1 + a_2)}{\cosh \beta (a_1 + a_2) + \exp(-2K) \cosh \beta (a_1 - a_2)} \right\rangle. \quad (2.51)$$

A Eq.(2.51) foi obtida independentemente por Siqueira[45] e por Bobak e Jascur[46]. Para desenvolvermos a Eq.(2.51) vamos definir dois operadores diferenciais  $D_x = \frac{d}{dx}$  e  $D_y = \frac{d}{dy}$ , com isto é possível generalizar a identidade dada para uma variável, Eq(2.15), ou seja

$$\exp(aD_x + bD_y)G(x, y) = G(x + a, y + b), \quad (2.52)$$

onde  $G(x, y)$  é uma função analítica. Usando a identidade (2.52), reescrevemos a Eq.(2.51) na forma

$$m = \left\langle \exp(KD_x \sum_{\vec{\delta}_1} \sigma_{1+\vec{\delta}_1} + KD_y \sum_{\vec{\delta}_2} \sigma_{2+\vec{\delta}_2}) \right\rangle G(x, y) |_{x,y=0}, \quad (2.53)$$

sendo

$$G(x, y) = \frac{\sinh(x + y)}{\cosh(x + y) + \exp(-2K) \cosh(x - y)}. \quad (2.54)$$

Uma análise mais cuidadosa na Eq.(2.53) evidencia logo a presença de dois tipos de vizinhos, expressos através dos somatórios  $\sum_{\vec{\delta}_1}$  e  $\sum_{\vec{\delta}_2}$ . Dependendo da topologia da rede, os spins  $\sigma_1$  e  $\sigma_2$  podem admitir vizinhos comuns (i.e., spins comuns circundantes aos sítios  $\sigma_1$  e  $\sigma_2$ ), então a Eq.(2.53) ficará reescrita na forma

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}_1}^{\mathfrak{z}-1-\mathfrak{z}'} \exp(KD_x \sigma_{1+\vec{\delta}_1}) \prod_{\vec{\delta}_2}^{\mathfrak{z}-1-\mathfrak{z}'} \exp(KD_y \sigma_{2+\vec{\delta}_2}) \prod_{\vec{\delta}}^{\mathfrak{z}'} \exp[K(D_x + D_y) \sigma_{\vec{\delta}}] \right\rangle G(x, y) |_{x,y=0}, \quad (2.55)$$

onde  $\mathfrak{z}'$  é o número de primeiros vizinhos comuns aos spins  $\sigma_1$  e  $\sigma_2$  do aglomerado. Claramente, a forma explícita de vizinhos, comuns ou não, aos sítios 1 e 2 no aglomerado com dois spins assegura a distinção da topologia da rede. Para ilustrar a topologia da rede no aglomerado com dois spins, na Fig.2.1 apresentamos as redes Kagomé ( $\mathfrak{z} = 4, \mathfrak{z}' = 1$ ), quadrada ( $\mathfrak{z} = 4, \mathfrak{z}' = 0$ ), triangular ( $\mathfrak{z} = 6, \mathfrak{z}' = 2$ ) e cúbica simples ( $\mathfrak{z} = 6, \mathfrak{z}' = 0$ ).

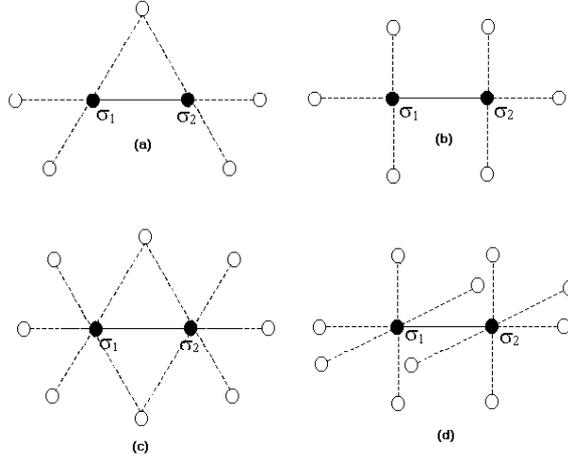


Figura 2.3: Topologia das redes (a) Kagomé, (b) quadrada, (c) triangular e (d) cúbica simples, para um aglomerado com dois spins.

Aplicando a identidade de van der Waerdan na Eq.(2.55), ficaremos

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}_1}^{\mathfrak{z}-1-\mathfrak{z}'} (\alpha_x + \sigma_{1+\vec{\delta}_1} \beta_x) \prod_{\vec{\delta}_2}^{\mathfrak{z}-1-\mathfrak{z}'} (\alpha_y + \sigma_{2+\vec{\delta}_2} \beta_y) \prod_{\vec{\delta}}^{\mathfrak{z}'} (\alpha_{x+y} + \sigma_{\vec{\delta}} \beta_{x+y}) \right\rangle G(x, y) |_{x,y=0}, \quad (2.56)$$

onde  $\alpha_\nu = \cosh(KD_\nu)$ ,  $\beta_\nu = \sinh(KD_\nu)$  ( $\nu = x, y$ ),  $\alpha_{x+y} = \cosh[K(D_x + D_y)]$  e  $\beta_{x+y} = \sinh[K(D_x + D_y)]$ . A Eq.(2.56) é exata, porém de difícil manipulação matemática por envolver, assim como ocorreu para aglomerado com um spin, funções de correlações de vários spins, gerando desta maneira um conjunto infinito de equações acopladas. Desacoplando as funções de correlações da Eq.(2.56) segundo a aproximação (2.20), ficaremos

$$m = (\alpha_x + m\beta_x)^{\mathfrak{z}-1-\mathfrak{z}'} (\alpha_y + m\beta_y)^{\mathfrak{z}-1-\mathfrak{z}'} (\alpha_{x+y} + m\beta_{x+y})^{\mathfrak{z}'} G(x, y) |_{x,y=0}. \quad (2.57)$$

Sendo a função  $G(x, y)$  ímpar [i.e.,  $G(-x, -y) = -G(x, y)$ ], Eq.(2.54), então qualquer operador par  $\hat{\varphi}_{par}(D_x, D_y)$  aplicado em  $G(x, y)$  é zero no limite de  $x = y = 0$ , isto é,  $\hat{\varphi}_{par}G(x, y) |_{x,y=0} = 0$ . Portanto, expandindo a Eq.(2.57) só teremos potências ímpares da magnetização  $m$ , que fisicamente é esperado, isto porque esta equação de estado é invariante pela mudança de  $m$  por  $-m$  (não existe direção axial privilegiada).

Nesta nova teoria de campo efetivo em aglomerado com dois spins (EFT-2), a temperatura crítica será obtida da Eq.(2.57) com o limite  $m \rightarrow 0$ , encontrando

$$A_1^{\mathfrak{z}, \mathfrak{z}'}(K_c) = 1 \quad (2.58)$$

sendo

$$A_1^{\mathfrak{z}, \mathfrak{z}'}(K) = \left[ 2(\mathfrak{z} - 1 - \mathfrak{z}') \alpha_x^{\mathfrak{z}-\mathfrak{z}'-2} \alpha_y^{\mathfrak{z}-\mathfrak{z}'-1} \beta_x + \mathfrak{z}' \alpha_x^{\mathfrak{z}-\mathfrak{z}'-1} \alpha_y^{\mathfrak{z}-\mathfrak{z}'-1} \alpha_{x+y}^{\mathfrak{z}'-1} \beta_{x+y} \right] G(x, y) |_{x,y=0}. \quad (2.59)$$

Resolvendo numericamente a Eq.(2.58) encontramos os valores de  $T_c \equiv K_c^{-1}$  do modelo de Ising-1/2 para várias topologias de rede ( $\mathfrak{z}, \mathfrak{z}'$ ). Os valores de  $T_c$  obtidos através das aproximações EFT-1 e EFT-2 para as redes quadrada, Kagomé, triangular e cúbica simples estão apresentados na Tabela(2.1) e são comparados com os resultados exatos para os casos de redes 2d e simulação

Tabela 2.1: Valores da temperatura crítica  $T_c$  para o modelo de Ising-1/2 em diversas topologias de rede.

Redes	$\mathfrak{z}$	$\mathfrak{z}'$	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

de Monte Carlo para o caso da rede 3d. Observa-se uma pequena melhora dos resultados com o crescimento do aglomerado em comparação com os resultados rigorosos. 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 ( $\beta = 1/2, \gamma = 1, \alpha = 0, \nu = 1/2, \eta = 0, \delta = 3$ ).

Na tentativa de se obter resultados quantitativos comparáveis aos valores rigorosos usando a técnica do operador, podemos aplicá-la numa perspectiva de *finite size scaling*, mas a principal dificuldade inerente ao método está associado aos critérios de escolha dos aglomerados com mais de dois spins, de forma a garantir a convergência do método. Como regra, procura-se escolher a geometria dos aglomerados de modo a refletir a simetria da rede em questão, o que de alguma forma, introduz certo grau de arbitrariedade na escolha. Visando exemplificar um teste de convergência, aplicamos esta técnica no aglomerado com  $N = 4$  spins distribuídos nos vértices de um quadrado. Escolhendo  $O(\Omega) = \frac{1}{4}(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4)$  na Eq.(2.9), e caracterizando o parâmetro de ordem por  $m = \langle O(\Omega) \rangle$ , obtemos, fazendo os mesmos procedimentos anteriores para os casos de aglomerado de um e dois spins, para a rede quadrada  $T_c = 2.904$ , mostrando uma certa convergência (lenta) em direção ao resultado exato  $T_c = 2.269$ . Esta melhoria no valor de  $T_c$  no esquema de *finite size scaling* tem como consequência direta o aumento do tempo computacional. Uma outra alternativa de aproximação na técnica do operador, consiste no uso do desacoplamento (2.32) na Eq.(2.56). Resultados preliminares obtidos por de Sousa na rede quadrada usando esta metodologia, tem mostrado uma considerável melhora de  $T_c$ , cujo valor encontrado foi  $T_c = 2.794$ .

## 2.3 Modelo de Ising Antiferromagnético

Nesta seção faremos uma simples aplicação da teoria de campo efetivo em aglomerado com um spin (EFT-1) no modelo de Ising-1/2 antiferromagnético, que é descrito pelo seguinte Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i, \quad (2.60)$$

onde  $H$  é o campo magnético externo. Devemos mencionar, que este modelo foi preliminarmente tratado na literatura[47] usando EFT-1, porém as propriedades termodinâmicas para vários valores do campo será aqui tratada pela primeira vez. Como processo metodológico, dividiremos o sistema em duas subredes A e B, inter-penetrantes, a fim de aplicarmos EFT-1 nos casos em que as interações entre os sítios sejam do tipo F ( $J > 0$ ) e AF ( $J < 0$ ). Desta forma devemos considerar a contribuição Zeeman do campo externo para o caso F dado por

$$\mathcal{H}_{Zeeman}^F = -H \sum_{(i \in A)} \sigma_{iA} - H \sum_{(i \in B)} \sigma_{iB} \quad (2.61)$$

e o caso AF

$$\mathcal{H}_{Zeeman}^{AF} = -(H + H_{st}) \sum_{(i \in A)} \sigma_{iA} - (H - H_{st}) \sum_{(i \in B)} \sigma_{iB} \quad (2.62)$$

onde  $H_{st}$  é o campo externo apontando na direção  $z$  denominado de campo *staggered*. Portanto, o Hamiltoniano para um aglomerado finito com um spin para a subrede A será dado por

$$\mathcal{H}_1^A = - \left( J \sum_{\substack{\vec{\delta} \\ \vec{\delta}}} \sigma_{1+\vec{\delta},B} + H \right) \sigma_{1,A}, \quad (2.63)$$

onde desconsideramos, por enquanto, o campo magnético  $H_{st}$  (tomamos o valor nulo).

### 2.3.1 Propriedades termodinâmicas

Seguindo o mesmo procedimento anterior, i.e., usando a técnica do operador diferencial e a identidade de van der Waerden, obtemos a magnetização da subrede A  $m_A = \langle \sigma_{1A} \rangle$  por

$$m_A = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^{\delta} \left[ \cosh(KD_x) + \sigma_{1+\vec{\delta},B} \sinh(KD_x) \right] \right\rangle \tanh(x + \beta H) |_{x=0} . \quad (2.64)$$

Aplicando EFT-1, a Eq.(2.64) poderá ser expandida na forma

$$m_A = \sum_{p=0}^{\delta} \binom{\delta}{p} \alpha_x^{\delta-p} \beta_x^p m_B^p \tanh(x + \beta H) |_{x=0} \quad (2.65)$$

Por analogia podemos escrever a expressão para a magnetização da subrede B, ficando

$$m_B = \sum_{p=0}^{\delta} \binom{\delta}{p} \alpha_x^{\delta-p} \beta_x^p m_A^p \tanh(x + \beta H) |_{x=0} \quad (2.66)$$

A magnetização total do sistema por partícula é definida por  $m = \frac{(m_A+m_B)}{2}$ , que para um sistema ferromagnético temos  $m_A = m_B = m$ , ou seja, as magnetizações das subredes são equivalentes, isto porque ambas estão apontadas nas mesmas direções.

Por outro lado, considerando o caso em que a interação entre as subredes seja do tipo AF, ou seja, fazendo a troca de  $K \rightarrow -K$  e usando a definição dada pela Eq.(2.62), que corresponde a troca de  $\beta H \rightarrow \beta H + \beta H_{st}$  para a subrede A e  $\beta H \rightarrow \beta H - \beta H_{st}$  no caso da subrede B, teremos as magnetizações de subredes dadas por

$$m_A = \sum_{p=0}^{\delta} \binom{\delta}{p} \alpha_x^{\delta-p} \beta_x^p m_B^p \tanh(-x + \beta H + \beta H_{st}) |_{x=0} \quad (2.67)$$

e

$$m_B = \sum_{p=0}^{\delta} \binom{\delta}{p} \alpha_x^{\delta-p} \beta_x^p m_A^p \tanh(-x + \beta H - \beta H_{st}) |_{x=0} . \quad (2.68)$$

O parâmetro de ordem para o sistema AF é definido através de uma nova variável: a magnetização *staggered*,  $m_s = \frac{(m_A-m_B)}{2}$ .

As Eqs.(2.65) e (2.66), para o caso F, e Eqs.(2.67) (2.68), para o caso AF, permitem determinar a susceptibilidade magnética, por partícula, a campo nulo, outra propriedade magnética do sistema, definida por

$$\chi = \left( \frac{\partial m}{\partial H} \right). \quad (2.69)$$

Desta forma, a susceptibilidade longitudinal do sistema pode ser escrita para o caso F como

$$\chi_F = \frac{\left( \frac{1}{k_B T} \right) \left[ \sum_{p=0}^{\dot{\lambda}} \binom{\dot{\lambda}}{p} \alpha_x^{\dot{\lambda}-p} \beta_x^p m^p \operatorname{sech}^2(x + \beta H) \Big|_{x=0} \right]}{1 - \sum_{p=0}^{\dot{\lambda}} \binom{\dot{\lambda}}{p} p \alpha_x^{\dot{\lambda}-p} \beta_x^p m^{p-1} \tanh(x + \beta H) \Big|_{x=0}} \quad (2.70)$$

sendo  $k_B$  a constante de Boltzmann,  $T$  a temperatura absoluta e  $H$  o campo externo.

No caso do sistema AF devemos definir duas susceptibilidades a *staggered*  $\chi_{st}$

$$\chi_{st} = \left( \frac{\partial m_s}{\partial H_{st}} \right)_{h_{st}=0}, \quad (2.71)$$

e a susceptibilidade total  $\chi$ , conjugada a magnetização total do sistema  $m$  é dada pela Eq(2.69) tomando  $H_{st} = 0$ . Assim, aplicando tais definições encontramos

$$\chi_{st} = \frac{\left( \frac{1}{2k_B T} \right) \left[ \sum_{p=0}^{\dot{\lambda}} \binom{\dot{\lambda}}{p} \alpha_x^{\dot{\lambda}-p} \beta_x^p [(m + m_s) + (m - m_s)]^p \operatorname{sech}^2(x + \beta H) \Big|_{x=0} \right]}{1 - \frac{1}{2} \sum_{p=0}^{\dot{\lambda}} \binom{\dot{\lambda}}{p} p \alpha_x^{\dot{\lambda}-p} \beta_x^p [(m + m_s) - (m - m_s)]^{p-1} \tanh(x + \beta H) \Big|_{x=0}} \quad (2.72)$$

e

$$\chi_{AF} = \frac{\left( \frac{1}{2k_B T} \right) \left[ \sum_{p=0}^{\dot{\lambda}} \binom{\dot{\lambda}}{p} \alpha_x^{\dot{\lambda}-p} \beta_x^p [(m + m_s)^p + (m - m_s)^p] \operatorname{sech}^2(x + \beta H) \Big|_{x=0} \right]}{1 - \frac{1}{2} \sum_{p=0}^{\dot{\lambda}} \binom{\dot{\lambda}}{p} p \alpha_x^{\dot{\lambda}-p} \beta_x^p [(m + m_s)^{p-1} + (m - m_s)^{p-1}] \tanh(x + \beta H) \Big|_{x=0}}. \quad (2.73)$$

Na idéia de tratarmos o sistema dividido em subredes, vamos agora calcular a energia interna do sistema considerando que a média da energia interna  $\langle \mathcal{H}_1 \rangle$ , seja  $\langle \mathcal{H}_1 \rangle = \frac{\langle \mathcal{H}_1 \rangle_A + \langle \mathcal{H}_1 \rangle_B}{2}$ , sendo  $\langle \mathcal{H}_1 \rangle_A$  e  $\langle \mathcal{H}_1 \rangle_B$  os valores médios das energias de cada subrede, A e B, respectivamente. Assim, para o caso em que a interação é do tipo F teremos

$$\langle \mathcal{H}_1 \rangle_{A,B} = - \left\langle \left( J \sum_{\vec{\delta}}^{\hat{\mathfrak{z}}} \sigma_{1+\vec{\delta},(B,A)} + H \right) \sigma_{1,(A,B)} \right\rangle. \quad (2.74)$$

ficando a Eq.(2.74) reescrita na forma

$$\langle \mathcal{H} \rangle_{A,B} = - \left\langle J \sum_{\vec{\delta}}^{\hat{\mathfrak{z}}} \sigma_{1+\vec{\delta},(B,A)} \tanh(K \sum_{\vec{\delta}}^{\hat{\mathfrak{z}}} \sigma_{1+\vec{\delta},(B,A)} + \beta H) \right\rangle - H \langle \sigma_{1,(A,B)} \rangle, \quad (2.75)$$

Aplicando a técnica do operador diferencial junto a relação de cinemática do spin, encontramos a média da energia interna total por partícula do sistema dada por

$$u = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial (\beta \hat{D}_x)} \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^{\hat{\mathfrak{z}}} \left[ \cosh(K D_x) + \left( \sigma_{1+\vec{\delta},A}^z + \sigma_{1+\vec{\delta},B}^z \right) \sinh(K D_x) \right] \right\rangle \tanh(x + \beta H) |_{x=0} - \frac{H(m_A + m_B)}{2}. \quad (2.76)$$

No espírito da teoria de campo efetivo (EFT-1), a Eq.(2.76) aplicada nessa condição fica para o caso F

$$u_F = -\frac{\partial}{\partial (\beta \hat{D}_x)} \left[ \sum_{p=0}^{\hat{\mathfrak{z}}} \binom{\hat{\mathfrak{z}}}{p} \alpha_x^{\hat{\mathfrak{z}}-p} \beta_x^p m^p \tanh(x + \beta H) |_{x=0} \right] - Hm \quad (2.77)$$

e no caso de um sistema AF teremos

$$u_{AF} = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial (\beta \hat{D}_x)} \left[ \sum_{p=0}^{\hat{\mathfrak{z}}} \binom{\hat{\mathfrak{z}}}{p} \alpha_x^{\hat{\mathfrak{z}}-p} \beta_x^p [(m + m_s) + (m - m_s)]^p \tanh(-x + \beta H) |_{x=0} \right] - Hm. \quad (2.78)$$

O calor específico do sistema é obtido diretamente da Eq.(2.77), caso F, e Eq.(2.78), AF, através da relação

$$c = \left( \frac{\partial u}{\partial T} \right). \quad (2.79)$$

Portanto, desenvolvido esse processo podemos calcular todas as propriedades magnéticas para o modelo de Ising-1/2 F e AF na presença de um campo externo usando EFT-1.

### 2.3.2 Discussão dos Resultados

Vamos, então, apresentar os resultados para o comportamento das propriedades magnética e térmica para o sistema AF na presença de um campo externo (conhecido também como um sistema metamagneto), como forma de exemplificação da técnica aqui tratada. Neste caso estamos considerando que o sistema seja constituído por uma rede cúbica simples ( $\mathfrak{z} = 6$ ) na ausência de superfícies delimitadoras. Resolvendo numericamente as Eqs.(2.67) e (2.68), encontramos  $m_s(T, H)$  e  $m(T, H)$  para diversos valores de temperatura e campo magnético externo

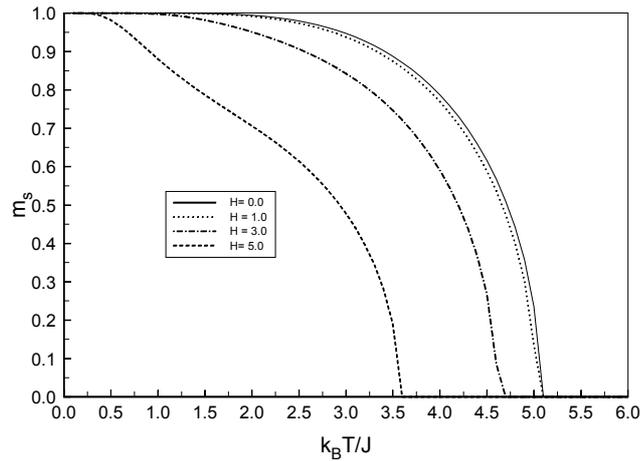


Figura 2.4: Comportamento da magnetização *staggered* em função da temperatura reduzida para uma rede cúbica simples ( $\mathfrak{z} = 6$ ) no modelo de Ising AF de spin 1/2 obtida por EFT-1 e diferentes valores do campo  $H$ .

Na Figura 2.4 temos a dependência da magnetização *staggered* em função da temperatura, parâmetro de ordem do sistema AF, para vários valores de  $H$ . Sendo a transição de fase de 2ª ordem, observamos claramente o decréscimo do parâmetro de ordem a medida que a

temperatura aumenta se anulando continuamente em  $T = T_N(H)$ . A influência do campo externo no sistema é de desordenar o sistema em temperaturas  $T_N(H > 0) < T_N(H = 0)$ , ou seja,  $T_N$  diminui com o aumento de  $H$ .

Na Fig.2.5 temos o comportamento da magnetização  $m = \frac{1}{2}(m_A + m_B)$  em função da temperatura para uma rede cúbica simples ( $\mathfrak{z} = 6$ ) e diversos valores do campo externo  $H$ . Obtemos a dependência de  $m(T, H)$  resolvendo simultaneamente as Eqs.(2.67) e (2.68) com  $H_{st} = 0$  e  $\mathfrak{z} = 6$ . Observamos que na ausência de campo externo ( $H = 0$ ) a magnetização é nula, isto porque as magnetizações das subredes apresentam valores opostos ( $m_A = -m_B$ ) para qualquer temperatura. Por outro lado, a presença do campo externo ( $H > 0$ ) neste modelo AF faz com que  $|m_A| > |m_B|$ , por causa da indução da magnetização na direção axial (direção de  $m_A$ ). Em baixas temperaturas [ $T < T_N(H)$ ], temos um crescimento da magnetização em consequência da existência de uma ordem AF ( $m_s \neq 0$ ) no sistema, e em altas temperaturas [ $T > T_N(H)$ ] 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 os vários valores do campo  $H < H_c = \mathfrak{z}J = 6J$  ( $\mathfrak{z} = 6$ ) a magnetização  $m(T, H)$  apresenta uma descontinuidade em  $T = T_N(H)$  caracterizando desta forma a transição de fase (2ª ordem, calor latente nulo) 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,  $m(T, H)$  decresce com o aumento da temperatura.

Na Fig.2.6 temos o limite de estabilidade, dado por uma linha contínua, entre as fases antiferromagnética (AF) e paramagnética (P) no plano  $T-H$  para a rede cúbica simples ( $\mathfrak{z} = 6$ ) usando as teorias de campo efetivo EFT e MFT para aglomerado de um spin (EFT-1 e MFT-1). Obtivemos  $T_N(H)$  fazendo o limite de  $m_s \rightarrow 0$ . Na região de baixos campos notamos uma concordância qualitativa com resultados mais precisos encontrados na literatura[17]. Próximo da região de altos campos, observamos uma anomalia nos resultados encontrados em ambas as teorias de campo efetivo (EFT-1 e MFT-1), ou seja, temos a presença de uma reentrância no diagrama de fase. Este comportamento reentrante obtido através de EFT-1 e MFT-1 no modelo de Ising-1/2 AF numa rede cúbica simples, não tem sido previsto por métodos mais rigorosos, como por exemplo, simulação de Monte Carlo. Recentemente este aspecto foi discutido por

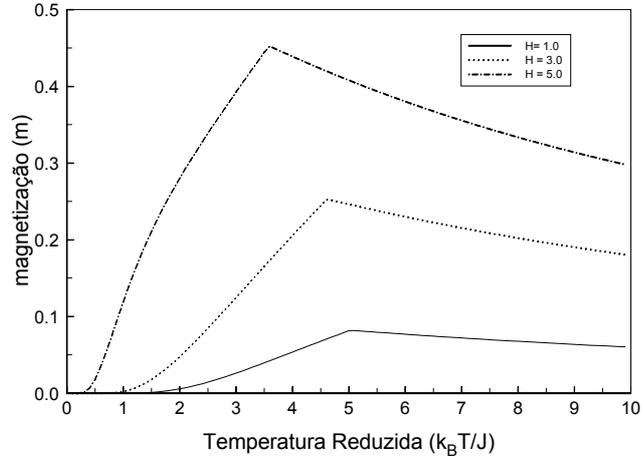


Figura 2.5: Magnetização total do modelo de Ising AF de spin 1/2 em função da temperatura reduzida numa rede cúbica simples ( $z = 6$ ) para diversos valores do campo externo indicados acima.

Neto e de Sousa[17] usando grupo de renormalização, onde este comportamento reentrante em torno do campo crítico  $H_c = 6J$  foi eliminado.

A dependência da susceptibilidade magnética longitudinal é apresentada na Fig.2.7 para vários valores de campo externo. Na temperatura crítica temos um valor máximo (descontinuidade) na susceptibilidade indicando uma transição de fase, separando a fase ordenada (AF) para  $T < T_N$  da fase desordenada (P) quando  $T > T_N$ . Como já havíamos discutido, a influência do campo externo no sistema provoca transição de fase em temperaturas menores. Este comportamento é similar ao da magnetização total, Fig.(2.5), que experimentalmente é a que se mede no laboratório. Apesar de não está explicitado na Fig.(2.8), para  $H > H_c$  a susceptibilidade total apresenta um comportamento tipo lei de Curie [ $\chi = C/T$ ]. Evidenciamos a divergência de  $\chi$  em  $T = 0$  quando aumentamos gradualmente o valor do campo na Fig.(2.8).

A susceptibilidade *staggered* é ilustrada na Fig.2.8 com função da temperatura e vários valores do campo externo. Esta susceptibilidade está relacionada com a flutuação do parâmetro de ordem  $m_s$  (teorema flutuação-dissipação) e desta maneira, assim como no caso do sistema F,

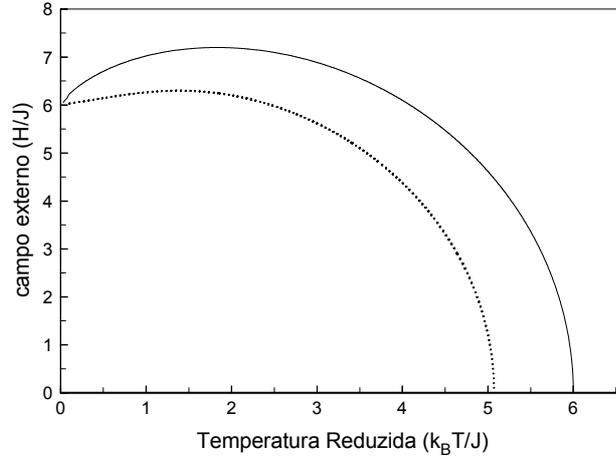


Figura 2.6: Diagrama de fase  $T_N \times H$  para uma rede cúbica simples no modelo de Ising de spin 1/2 com interação AF. A linha contínua representa o tratamento via MFT e a linha pontilhada via EFT.

ela apresentará uma divergência na temperatura crítica  $T = T_N(H)$  com um valor do expoente crítico clássico  $\gamma = 1$ . Observamos que a divergência de  $\chi_{st}$  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.

A Fig.(2.9) mostra o comportamento da energia interna em função da temperatura para a rede cúbica simples com interação AF. Com o incremento da temperatura, os efeitos da agitação térmica tornam-se relevantes e a energia decresce (em módulo) apresentando uma descontinuidade na temperatura de transição do sistema. Para temperaturas próximas de zero,  $T \rightarrow 0$ , todos os spins estão alinhados antiparalelamente ( $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$ ) de maneira que a energia é igual ao número de ligações do aglomerado vezes  $-J$  e, portanto,  $\frac{u}{J} = -6$ . Para  $T \rightarrow \infty$  todas as correlações entre os spins devem se anular e portanto eles se comportarão como spins livres, resultando  $\frac{u}{J} = 0$ .

O calor específico é obtido por derivação direta dos resultados da Fig.(2.9), e está apresentado na Fig.(2.10). Da Fig.(2.9) temos que todas as curvas apresentam derivadas nulas em

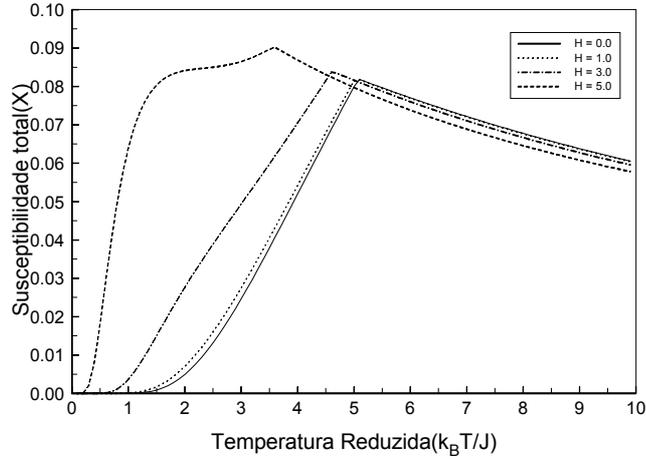


Figura 2.7: Dependência da susceptibilidade total com a temperatura para uma rede sc no modelo de Ising Antiferromagnético para vários valores do campo externo.

$T = 0$ , 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 monoticamente e em  $T = T_N(H)$  temos a presença de uma descontinuidade 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 comportamento da energia interna [Fig.(2.9)] fica bastante claro o tipo de transição de fase, onde em  $T = T_N(H)$  temos apenas uma descontinuidade com ausência de calor latente  $Q_L \equiv \Delta u$ , caracterizando assim uma transição de fase de 2ª ordem ou contínua.

Apesar de termos estudado neste capítulo aplicação da técnica do operador diferencial no modelo de Ising (clássico), esta tem sido desenvolvida em diversos sistemas quânticos com as mais variedades e tipos de interações. Nos próximos capítulos deste trabalho será dedicado a aplicação deste técnica de campo efetivo a modelos quânticos, em particular limitaremos ao caso do Hamiltoniano de Heisenberg de spin 1/2.

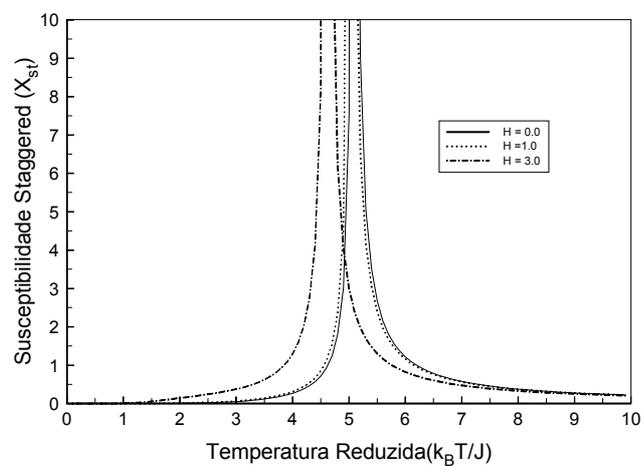


Figura 2.8: Dependência da susceptibilidade *staggered* com a temperatura para uma rede sc no modelo de Ising Antiferromagnético para vários valores do campo externo.

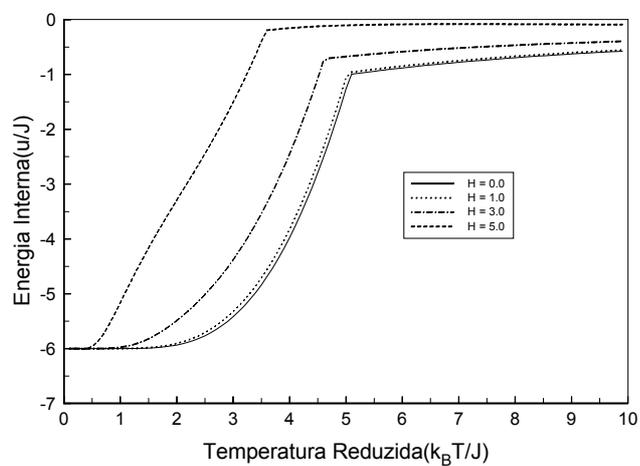


Figura 2.9: Dependência da energia interna por partícula em função da temperatura para o modelo de Ising AF com spin 1/2 numa rede cúbica simples na presença de campo externo.

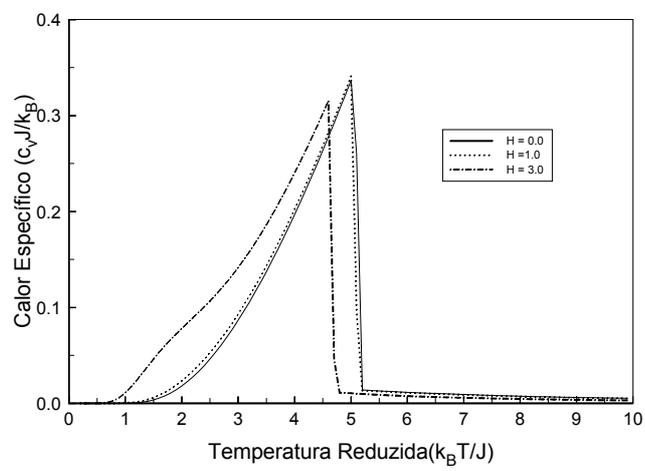


Figura 2.10: Comportamento do calor específico com a temperatura reduzida no modelo de Ising AF com spin 1/2 obtido por derivação numérica da curva da Fig.(2.9).

# REFERÊNCIAS

- [1] MOREIRA, A. S. F., FIGUEIREDO, W., HENRIQUES, V. B., *Eur. Phys. J. B* **27**, 153 (2002).
- [2] HUANG, K., *Statistical Mechanics*, ed. Jonh Wiley & Sons, New York, 1963.
- [3] YANG, C. N., LEE, T. D., *Phys. Rev.* **87**, 404 (1952).
- [4] HONMURA, R., KANEYOSHI, E T., *J. Phys.* **C12**, 3970 (1979).
- [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] MERMIN, N. D., WAGNER, H., *Phys. Rev. Lett.* **22**, 1133 (1966).
- [9] ver LIANG, YA-QIU, WEI, GUO-ZHU, ZHANG, QI, XIN, ZI-HUA, *Physica A* **267**, 275 (2003) e referências citadas.
- [10] ver KANEYOSHI, T., *Physica A* **328**, 174 (2003) e referências citadas.
- [11] KANEYOSHI, T., *Physica A* **332**, 367 (2004).
- [12] 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).
- [13] SIQUEIRA, A. F., FITTIPALDI, I. P., *Phys. Rev. B* **27**, 5784 (1983).
- [14] SARMENTO, E. F., TSALLIS, C., *Phys. Rev. B* **27**, 5784 (1983).

- [15] SIQUEIRA, A. F., FITTIPALDI, I. P., *Phys. St. Sol. B* **119**, 31 (1983).
- [16] HONMURA, R., et al., *Phys. Rev. B* **29**, 2761 (1984).
- [17] NETO, M. A., DE SOUSA, J. R., *Phys. Lett. A* **330**, 322 (2004); *Phys. Rev. B* (2004) in press. Ver também dissertação de mestrado do Minos Neto, *Modelo de Ising Antiferromagnético com Campo Transverso: Criticalidade e Termodinâmica*, UFAM (2004).
- [18] DE SOUSA, J. R., MOTA, K., STILCK, J., submetido para *Physica A* (2004).
- [19] 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).
- [20] 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).
- [21] CABRAL NETO, J., DE SOUSA, J. R., PLASCAK, J. A., *Phys. Rev. B* **66**, 064417 (2002).
- [22] SÁ BARRETO, F. C., FITTIPALDI, I. P., *Physica A* **129**, 360 (1985).
- [23] CALLEN, H. B., *Phys. Lett.* **4**, 161 (1963).
- [24] SUZUKI, N., *Phys. Lett.* **19**, 267 (1965).
- [25] DOMAN, B. G. S., HAAR, D. ter, *Phys. Lett.* **2**, 15 (1962).
- [26] TAHIR-KHELI, R. A., *Phys. Rev.* **188**, 1142 (1969); TAGGART, G. B., TAHIR-KHELI, R. A., *Physica* **68**, 93 (1973).
- [27] MATSUDAIRA, N., *J. Phys. Jpn. Soc.* **35**, 1493 (1973).
- [28] FRANK, B., MITRAN, O., *J. Phys. C* **10**, 2641 (1977); *ibid* **11**, 2087 (1978).
- [29] TANAKA, Y., URYŪ, N., *Phys. Rev. B* **21**, 1994 (1980).

- [30] ZHANG, H. I., RAJAGOPAL, A. K., *J. Phys. C* **12**, L277 (1979); ZHANG, H. I., MIN, B. I., *J. Phys. C* **14**, 1769 (1981); MIN, B. I., ZHANG, H. I., *J. Phys. C* **14**, 1779 (1981); ZHANG, H. I., KIM, D., *J. Phys. B* **21**, 4173 (1980).
- [31] BALCERZAK, T., *J. Mag. Mag. Mat.* **246**, 213 (2002).
- [32] SÁ BARRETO, F. C., FITTIPALDI, I. P., *Rev. Bras. Fís.* **11**, 745 (1981).
- [33] DOBRUSHIM, R. L., *Theor. Prob. Appl.* **13**, 197 (1969); LANFORD, O. E., RUELLE, D., *Commun. Math. Phys.* **13**, 194 (1969).
- [34] PARISI, G., *Statistical Field Theory*, Addison-Wesley, 1988.
- [35] ver Dissertação de mestrado de Antônio dos Anjos, *Diagramas de Fase e Propriedades Térmicas e Magnéticas Desordenadas com Correlação Sítio-Ligação*, DF-UFPE, 1989.
- [36] BAXTER, R. J., *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*, Academic Press, 1982.
- [37] LANDAU, D. P., BINDER, K., *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge University Press, 2000.
- [38] SUZUKI, M., KATORI, M., *J. Phys. Soc. Jpn.* **55**, 1 (1986).
- [39] SMART, J. S., *Effective Field Theories of Magnetism*, Saunders, Philadelphia, 1966.
- [40] SUZUKI, M., *Coherent Anomaly Method, Mean Field, Fluctuations and Systematics*, World Scientific, 1995.
- [41] KANEYOSHI, T., FITTIPALDI, I. P., HONMURA, R., MANABE, T., *Phys. Rev. B* **24**, 481 (1981).
- [42] ONSAGER, L., *J. Am. Chem. Soc.* **58**, 1486 (1936); ver também BROUT, R., THOMAS, H., *Physics* **3**, 317 (1967) para um boa revisão do campo de reação de Onsager.
- [43] TAGGART, G. B., FITTIPALDI, I. P., *Phys. Rev. B* **95**, 7026 (1982).
- [44] TAGGART, G. B., *Physica A* **113**, 535 (1982).
- [45] SIQUEIRA, A. F., *Tese de Doutorado*, DF-UFPE, 1986.

- [46] BOBAK, A., JASCUR, M., *Phys. Stat. Sol. B* **135**, K9 (1986).
- [47] ZUKOVIK, M., BOBAK, A., IDOGAKI, T., *J. Mag. Magn. Mater.* **188**, 52 (1998); *ibid* **192**, 363 (1999).

## Capítulo 3

# Metamagneto Heisenberg Anisotrópico

### 3.1 Considerações Gerais

A grande motivação de se estudar o modelo de Heisenberg quântico de spin-1/2 AF está no fato de ser um importante modelo na descrição de supercondutores em altas temperaturas, por exemplo, o composto  $La_{2-x}Ba_xCuO_4$ , que na fase isolante é descrito por um antiferromagneto Heisenberg quase bidimensional. 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  $CuO_2$  [1, 2]. 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.

No capítulo anterior desenvolvemos a técnica do operador diferencial para descrever a termodinâmica e diagrama de fase do modelo de Ising-1/2 AF numa rede cúbica simples. Utilizamos aglomerado com um spin e aplicamos a aproximação de Zernike (tipo RPA) para desacoplar as funções de correlações, denotado por EFT-1. Vimos que na região de altos campos ( $H \simeq H_c = \mathfrak{z}J$ ), resultados espúrios aparecem (reentrância) em desacordo com simulação de Monte Carlo [3] que não prevê o comportamento reentrante. Um tratamento desta técnica em aglomerado com dois spins (EFT-2) foi recentemente discutido na literatura [4], onde o compor-

tamento da curva crítica  $T_N(H)$  na rede cúbica simples é bastante similar (quantitativamente e qualitativamente) ao obtido por EFT-1 com presença, ainda, de reentrância ao redor do campo crítico  $H \simeq 6J$ . Foi mostrado neste trabalho, que este resultado espúrio é uma consequência da teoria de campo efetivo, pois aplicando a idéia do grupo de renormalização na aproximação de campo efetivo (EFRG)[5] esta reentrância é eliminada.

A investigação sistemática do antiferromagnetismo surgiu com o trabalho fenomenológico de Néel em 1932[6] 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[7].

Do ponto de vista experimental, exemplos canônicos de metamagnetos Ising são os compostos  $FeCl_2$  e  $FeBr_2$ , onde as medidas das propriedades termodinâmicas indicam a presença de um ponto tricrítico no composto  $FeCl_2$ [8], enquanto espalhamento de neutrons tem indicado a presença de um ponto bicrítico no diagrama de fase  $T$  versus  $H$  no composto  $FeBr_2$ [9]. 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[10] mostram que para  $\alpha > \alpha' (\alpha = \frac{J'}{J})$  observa-se a decomposição para o ponto bicrítico no diagrama de fase  $T$  versus  $H$ . Resultados de simulação neste modelo não prevê tal decomposição[11].

Por outro lado, transição de fase quântica induzida por campo externo tem sido muito explorado na literatura[12]. Cálculos recentes na cadeia de Heisenberg em  $T = 0$  tem mostrado vários tipos de comportamentos não usuais nos processos da magnetização, tais como a forma quadrática associada ao GAP das excitações[13], as estruturas de *Plateaux*[14] e singularidade tipo cusp[15]. Foi mostrado por Langari[16], usando grupo de renormalização via matriz densidade (DMRG), que para este modelo existe uma transição de fase contínua antiferromagnética (AF) para uma fase desordenada (Paramagnética - P) no ponto crítico  $H = H_c = 1.883J$ , que difere do valor clássico  $H = H_c = \mathfrak{z}J = 2J$  observando numa cadeia Ising. Usando teoria de campo efetivo em aglomerado com dois spins (EFT-2), Bublitz e de Sousa[17] estudaram o modelo de Heisenberg numa rede cúbica simples ( $\mathfrak{z} = 6$ ) e encontraram o valor do campo

crítico  $H_c = 6.224J$  diferindo mais uma vez do ponto crítico clássico  $H_c = 3J = 6J$ . Um outro exemplo deste tipo de transição de fase quântica, em baixa dimensionalidade (fortes flutuações), é o modelo de Ising AF na presença de um campo transverso ( $\Omega$ ) e longitudinal ( $H$ ). Usando DMRG numa cadeia em  $T = 0$ , o diagrama de fase no plano  $H - \Omega$  foi discutido[18] e mostrado que o campo crítico  $\Omega_c(H = 0) = J$  é diferente do obtido através da aproximação do campo médio (MFA)  $\Omega_c = 2J$ . Foi indicado, ainda, que o diagrama de fase  $H$  versus  $\Omega$  obtido por MFA apresenta um comportamento espúrio ao redor de  $H_c = H(\Omega = 0) = 2J$ , que está associado à presença de reentrância (dois valores de  $\Omega$  para um certo valor de  $H > 2J$ ) não observado através do método rigoroso DMRG. Recentemente, Neto e de Sousa[19] têm analisado este modelo quântico em duas dimensões, usando EFT-1, e verificaram a ausência do comportamento reentrante no diagrama  $H$  versus  $\Omega$  prevista pelo método MFA. Transição de fase quântica em modelos desordenados (vidro de spin) também foi explorada[20], onde a presença de ponto tricrítico (PTC), no diagrama de fase  $H$  versus  $\Omega$  ( $T = 0$ ) depende do tipo de distribuição de probabilidade para o campo aleatório (bimodal ou gaussiana), ou seja, observamos PTC para o caso de distribuição bimodal com presença de transição de fase de  $1^a$  e  $2^a$  ordem.

O diagrama de fase no plano  $T - H$  para o modelo de Heisenberg quântico de spin-1/2 numa rede 3d AF foi preliminarmente discutido nas regiões de altos (baixos) e baixos (altos) campos (temperaturas) usando ondas de spins[21] e expansão em série[22], respectivamente e somente recentemente foi analisada a curva crítica  $T_N(H)$  em todo intervalo do campo magnético ( $0 \leq H \leq H_c$ ) usando EFT-2[17]. Em duas dimensões este modelo quântico isotrópico não apresenta ordem magnética em  $T > 0$ , porém, devemos esperar em  $T = 0$  uma transição de fase quântica em  $H = H_c$  que difere do valor clássico  $H = H_c = 3J$ . Segundo o teorema de Mermin e Wagner[23], a presença de anisotropia induz ordem de longo-alcance com a temperatura crítica apresentando um comportamento assintótico inversamente proporcional ao logaritmo do parâmetro de anisotropia para pequenos valores de anisotropia[24]. Seja  $\Delta$  um parâmetro de anisotropia, de tal modo que  $\Delta = 0$  e  $\Delta = 1$  correspondem aos limites Heisenberg isotrópico e Ising, respectivamente, na interação de troca, então numa rede 2d e para  $\Delta \rightarrow 0$  a temperatura crítica apresenta o seguinte comportamento:  $T_c \simeq \frac{A}{\ln(\frac{1}{\Delta})}$ , e com isto para  $\Delta \simeq 10^{-3}$  temos um valor finito de  $T_c$  da ordem decimal (i.e.,  $T_c \simeq 0.1$ ).

Um exemplo de metamagneto quântico é o composto antiferromagnético  $La_2CuO_4$ [1, 2],

que teoricamente é descrito por um modelo de Heisenberg AF de spin-1/2 com uma interação entre planos de  $CuO_4$   $\lambda J$  ( $\lambda \simeq 10^{-4}$ ), sendo  $J$  é a interação de troca entre os íons de cobre ( $Cu^{+2}$ ) no plano  $XY$  ( $CuO_2$ ). O comportamento da susceptibilidade obtido através da técnica de espalhamento de neutrons[25], apresenta para altos campos magnéticos um comportamento anômalo, caracterizada por um ponto de mínimo e depois um ponto de máximo na temperatura de transição  $T_N(H)$ . Na Fig.(3.1) apresentamos os resultados experimentais da susceptibilidade em função da temperatura para o composto  $La_2CuO_4$  na presença de um campo externo  $H = 3.0T$ [25], verificando assim o comportamento anômalo. Na ausência de campo externo (ou pequenos valores do campo  $H$ ) esta anomalia na susceptibilidade não é verificada. Analisando o comportamento da susceptibilidade em função da temperatura para vários campos  $H$ , a curva crítica  $T_N(H)$  para o composto  $La_2CuO_4$  é obtida, e na Fig.(3.2) apresentamos estes resultados experimentais.

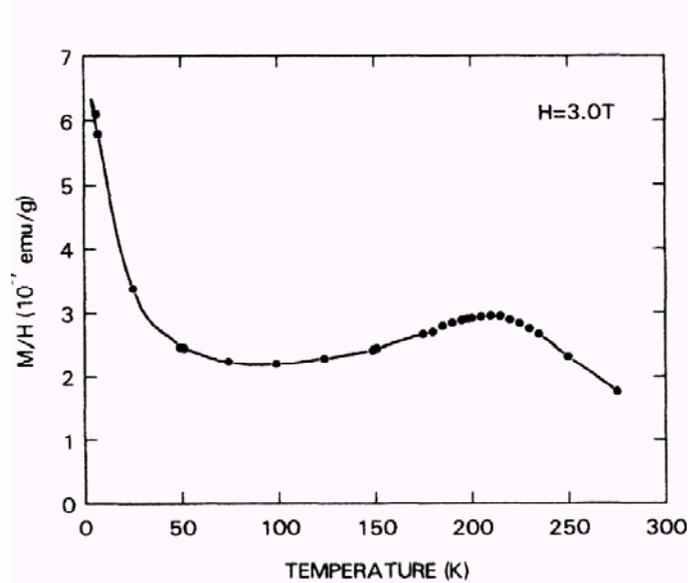


Figura 3.1: Comportamento experimental da susceptibilidade magnética em função da temperatura para o composto  $La_2CuO_4$  na presença de um campo magnético externo  $H = 3.0T$ [25].

Na Fig.(3.2) mostramos, também, o comportamento da magnetização 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). A notação WFM na Fig.(3.2) significa

## Capítulo 3

# Metamagneto Heisenberg Anisotrópico

### 3.1 Considerações Gerais

A grande motivação de se estudar o modelo de Heisenberg quântico de spin-1/2 AF está no fato de ser um importante modelo na descrição de supercondutores em altas temperaturas, por exemplo, o composto  $La_{2-x}Ba_xCuO_4$ , que na fase isolante é descrito por um antiferromagneto Heisenberg quase bidimensional. 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  $CuO_2$  [1, 2]. 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.

No capítulo anterior desenvolvemos a técnica do operador diferencial para descrever a termodinâmica e diagrama de fase do modelo de Ising-1/2 AF numa rede cúbica simples. Utilizamos aglomerado com um spin e aplicamos a aproximação de Zernike (tipo RPA) para desacoplar as funções de correlações, denotado por EFT-1. Vimos que na região de altos campos ( $H \simeq H_c = \mathfrak{z}J$ ), resultados espúrios aparecem (reentrância) em desacordo com simulação de Monte Carlo [3] que não prevê o comportamento reentrante. Um tratamento desta técnica em aglomerado com dois spins (EFT-2) foi recentemente discutido na literatura [4], onde o compor-

tamento da curva crítica  $T_N(H)$  na rede cúbica simples é bastante similar (quantitativamente e qualitativamente) ao obtido por EFT-1 com presença, ainda, de reentrância ao redor do campo crítico  $H \simeq 6J$ . Foi mostrado neste trabalho, que este resultado espúrio é uma consequência da teoria de campo efetivo, pois aplicando a idéia do grupo de renormalização na aproximação de campo efetivo (EFRG)[5] esta reentrância é eliminada.

A investigação sistemática do antiferromagnetismo surgiu com o trabalho fenomenológico de Néel em 1932[6] 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[7].

Do ponto de vista experimental, exemplos canônicos de metamagnetos Ising são os compostos  $FeCl_2$  e  $FeBr_2$ , onde as medidas das propriedades termodinâmicas indicam a presença de um ponto tricrítico no composto  $FeCl_2$ [8], enquanto espalhamento de neutrons tem indicado a presença de um ponto bicrítico no diagrama de fase  $T$  versus  $H$  no composto  $FeBr_2$ [9]. 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[10] mostram que para  $\alpha > \alpha' (\alpha = \frac{J'}{J})$  observa-se a decomposição para o ponto bicrítico no diagrama de fase  $T$  versus  $H$ . Resultados de simulação neste modelo não prevê tal decomposição[11].

Por outro lado, transição de fase quântica induzida por campo externo tem sido muito explorado na literatura[12]. Cálculos recentes na cadeia de Heisenberg em  $T = 0$  tem mostrado vários tipos de comportamentos não usuais nos processos da magnetização, tais como a forma quadrática associada ao GAP das excitações[13], as estruturas de *Plateaux*[14] e singularidade tipo cusp[15]. Foi mostrado por Langari[16], usando grupo de renormalização via matriz densidade (DMRG), que para este modelo existe uma transição de fase contínua antiferromagnética (AF) para uma fase desordenada (Paramagnética - P) no ponto crítico  $H = H_c = 1.883J$ , que difere do valor clássico  $H = H_c = \mathfrak{z}J = 2J$  observando numa cadeia Ising. Usando teoria de campo efetivo em aglomerado com dois spins (EFT-2), Bublitz e de Sousa[17] estudaram o modelo de Heisenberg numa rede cúbica simples ( $\mathfrak{z} = 6$ ) e encontraram o valor do campo

crítico  $H_c = 6.224J$  diferindo mais uma vez do ponto crítico clássico  $H_c = 3J = 6J$ . Um outro exemplo deste tipo de transição de fase quântica, em baixa dimensionalidade (fortes flutuações), é o modelo de Ising AF na presença de um campo transverso ( $\Omega$ ) e longitudinal ( $H$ ). Usando DMRG numa cadeia em  $T = 0$ , o diagrama de fase no plano  $H - \Omega$  foi discutido[18] e mostrado que o campo crítico  $\Omega_c(H = 0) = J$  é diferente do obtido através da aproximação do campo médio (MFA)  $\Omega_c = 2J$ . Foi indicado, ainda, que o diagrama de fase  $H$  versus  $\Omega$  obtido por MFA apresenta um comportamento espúrio ao redor de  $H_c = H(\Omega = 0) = 2J$ , que está associado à presença de reentrância (dois valores de  $\Omega$  para um certo valor de  $H > 2J$ ) não observado através do método rigoroso DMRG. Recentemente, Neto e de Sousa[19] têm analisado este modelo quântico em duas dimensões, usando EFT-1, e verificaram a ausência do comportamento reentrante no diagrama  $H$  versus  $\Omega$  prevista pelo método MFA. Transição de fase quântica em modelos desordenados (vidro de spin) também foi explorada[20], onde a presença de ponto tricrítico (PTC), no diagrama de fase  $H$  versus  $\Omega$  ( $T = 0$ ) depende do tipo de distribuição de probabilidade para o campo aleatório (bimodal ou gaussiana), ou seja, observamos PTC para o caso de distribuição bimodal com presença de transição de fase de  $1^a$  e  $2^a$  ordem.

O diagrama de fase no plano  $T - H$  para o modelo de Heisenberg quântico de spin-1/2 numa rede 3d AF foi preliminarmente discutido nas regiões de altos (baixos) e baixos (altos) campos (temperaturas) usando ondas de spins[21] e expansão em série[22], respectivamente e somente recentemente foi analisada a curva crítica  $T_N(H)$  em todo intervalo do campo magnético ( $0 \leq H \leq H_c$ ) usando EFT-2[17]. Em duas dimensões este modelo quântico isotrópico não apresenta ordem magnética em  $T > 0$ , porém, devemos esperar em  $T = 0$  uma transição de fase quântica em  $H = H_c$  que difere do valor clássico  $H = H_c = 3J$ . Segundo o teorema de Mermin e Wagner[23], a presença de anisotropia induz ordem de longo-alcance com a temperatura crítica apresentando um comportamento assintótico inversamente proporcional ao logaritmo do parâmetro de anisotropia para pequenos valores de anisotropia[24]. Seja  $\Delta$  um parâmetro de anisotropia, de tal modo que  $\Delta = 0$  e  $\Delta = 1$  correspondem aos limites Heisenberg isotrópico e Ising, respectivamente, na interação de troca, então numa rede 2d e para  $\Delta \rightarrow 0$  a temperatura crítica apresenta o seguinte comportamento:  $T_c \simeq \frac{A}{\ln(\frac{1}{\Delta})}$ , e com isto para  $\Delta \simeq 10^{-3}$  temos um valor finito de  $T_c$  da ordem decimal (i.e.,  $T_c \simeq 0.1$ ).

Um exemplo de metamagneto quântico é o composto antiferromagnético  $La_2CuO_4$ [1, 2],

que teoricamente é descrito por um modelo de Heisenberg AF de spin-1/2 com uma interação entre planos de  $CuO_4$   $\lambda J$  ( $\lambda \simeq 10^{-4}$ ), sendo  $J$  é a interação de troca entre os íons de cobre ( $Cu^{+2}$ ) no plano  $XY$  ( $CuO_2$ ). O comportamento da susceptibilidade obtido através da técnica de espalhamento de neutrons[25], apresenta para altos campos magnéticos um comportamento anômalo, caracterizada por um ponto de mínimo e depois um ponto de máximo na temperatura de transição  $T_N(H)$ . Na Fig.(3.1) apresentamos os resultados experimentais da susceptibilidade em função da temperatura para o composto  $La_2CuO_4$  na presença de um campo externo  $H = 3.0T$ [25], verificando assim o comportamento anômalo. Na ausência de campo externo (ou pequenos valores do campo  $H$ ) esta anomalia na susceptibilidade não é verificada. Analisando o comportamento da susceptibilidade em função da temperatura para vários campos  $H$ , a curva crítica  $T_N(H)$  para o composto  $La_2CuO_4$  é obtida, e na Fig.(3.2) apresentamos estes resultados experimentais.

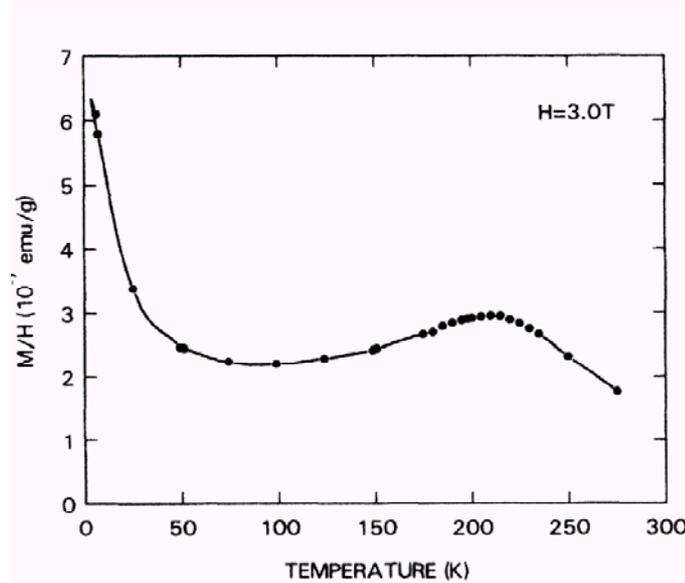


Figura 3.1: Comportamento experimental da susceptibilidade magnética em função da temperatura para o composto  $La_2CuO_4$  na presença de um campo magnético externo  $H = 3.0T$ [25].

Na Fig.(3.2) mostramos, também, o comportamento da magnetização 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). A notação WFM na Fig.(3.2) significa

um pequeno ferromagnetismo (*weak ferromagnetism*) no sistema, caracterizado pela presença de uma anisotropia anti-simétrica conhecida como interação de Dzyaloshinski e Moriya (DM)<sup>1</sup>, que é pequena o suficiente para ser desconsiderada nos cálculos teóricos a seguir ( $\frac{D}{J} \simeq 10^{-5}$ ).

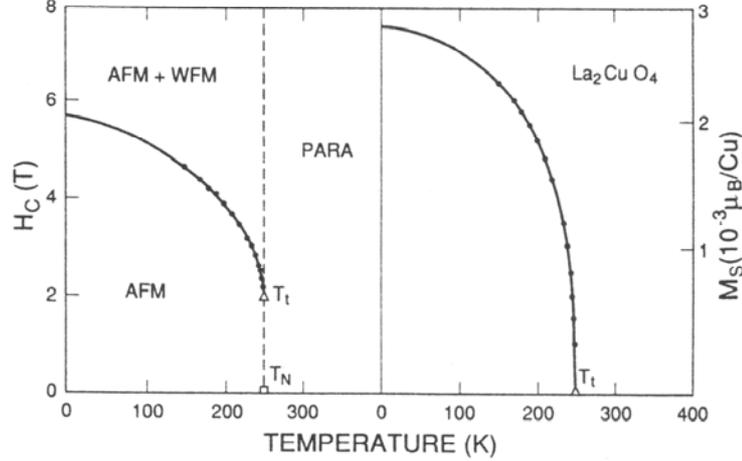


Figura 3.2: Diagrama de fase no plano  $T - H$  para o composto  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ . Lado direito temos o comportamento da magnetização em função da temperatura obtida ao longo da linha crítica  $T_N(H)$ [1].

Não existem cálculos teóricos, usando como ponto de partida o modelo de Heisenberg-1/2 AF quase-2d, capaz de reproduzir, pelo menos qualitativamente, os resultados experimentais das Figs.(3.1) e (3.2). Portanto, este capítulo terá como principal motivação o estudo do comportamento anômalo da suscetibilidade em função da temperatura para altos campos [Fig.(3.1)] e a descrição do diagrama de fase no plano  $H - T$  [Fig.(3.2)]. Baseado nos resultados preliminares de Bublitz e de Sousa[17], usando EFT-2 no modelo de Heisenberg-1/2 AF numa rede cúbica simples ( $\mathfrak{z} = 6$ ), onde a curva crítica  $T_N(H)$  foi obtida em todo intervalo do campo, sendo qualitativamente semelhante ao da Fig.(3.2), a seguir estenderemos os cálculos para incluir anisotropia de troca ( $\Delta$ ) e interação interplano ( $\lambda$ ).

<sup>1</sup>A interação DM é responsável pelo pequeno ferromagnetismo nos compostos AF, que fisicamente estão relacionados ao deslocamento de um pequeno ângulo  $\theta$  das componentes dos spins ao longo do eixo fácil da magnetização, e que foi discutida no capítulo 1 desta tese.

## 3.2 Modelo e Formalismo

Para investigarmos a influência da interação entre planos (ou interplanos) no modelo quântico de Heisenberg anisotrópico, tomaremos um sistema antiferromagnético de spin 1/2 na presença de um campo magnético externo, chamada aqui de metamagneto anisotrópico quântico. O Hamiltoniano desse sistema é descrito por

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \left[ (1 - \Delta) \left( S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y \right) + S_i^z S_j^z \right] - H \sum_i S_i^z, \quad (3.1)$$

onde  $S_i^\nu$  ( $\nu = x, y, z$ ) são as componentes  $\nu$  do operador de spin 1/2 no sítio  $i$ ,  $\langle i, j \rangle$  denota a soma sobre todos os pares de primeiros vizinhos,  $H$  é o campo magnético longitudinal e  $\Delta \in [0, 1]$  é o parâmetro de anisotropia. Os valores para as interações de troca  $J_{ij}$  são escolhidos como: se  $i$  e  $j$  são sítios pertencentes ao mesmo plano, então  $J_{ij} = J$ ; se pertencerem a planos diferentes (interplanos)  $J_{ij} = \lambda J$ . Para o caso em que  $\Delta = 0$  teremos o modelo de Heisenberg isotrópico e  $\Delta = 1$  corresponderá a simetria Ising.  $\lambda = 0$  corresponde ao modelo em duas dimensões, que segundo o teorema de Mermin e Wagner no limite isotrópico ( $\Delta = 0$ ) o sistema não tem ordem magnética em  $T > 0$  (i.e.,  $T_c = 0$ ). A natureza quântica nesse sistema é relevante em baixas temperaturas. Idéias de universalidade, relacionadas as transições de fase, conduzem ao fato de que o comportamento crítico deve ser afetado por efeitos quânticos quando tomamos o sistema em baixas temperaturas.

Objetivando estudar as propriedades termodinâmicas e a criticalidade do metamagneto anisotrópico quântico usando a técnica do operador diferencial via EFT-2, escreveremos o Hamiltoniano (3.1), para um aglomerado de dois spins, numa rede cúbica simples, na aproximação axial, como

$$\mathcal{H}_2 = J[(1 - \Delta)(S_1^{xA} S_2^{xB} + S_1^{yA} S_2^{yB}) + S_1^{zA} S_2^{zB}] + a_1^B S_1^{zA} + a_2^A S_2^{zB}, \quad (3.2)$$

onde  $a_i^\nu = J \left( \sum_{\vec{\delta}} S_{i+\vec{\delta}}^{z\nu} + \lambda \sum_{\vec{\delta}\lambda} S_{i+\vec{\delta}\lambda}^{z\nu} \right) - H$ , com  $i = 1(\nu = B), 2(\nu = A)$ .

O valor médio da magnetização por spin da subrede A,  $m_A = \langle S_1^{zA} \rangle$  é escrita como

$$m_A = \left\langle \frac{\text{Tr}\{S_{1,A}^z e^{-\beta\mathcal{H}_2}\}}{\text{Tr}\{e^{-\beta\mathcal{H}_2}\}} \right\rangle. \quad (3.3)$$

Em termos da função de partição  $Z_2 = \text{Tr}\{e^{-\beta\mathcal{H}_2}\}$ , a Eq.(3.3) será dada por

$$m_A = \left\langle \frac{\partial \ln Z_2}{\partial x_A} \right\rangle, \quad (3.4)$$

onde  $x_A = K\left(\sum_{\delta}^3 S_{i+\delta}^{zB} + \lambda \sum_{\delta\lambda}^2 S_{i+\delta\lambda}^{zB}\right) - \beta H$ , sendo  $K = \beta J$ .

Por tratarmos de um sistema quântico, o Hamiltoniano (3.2) é um operador que representamos por uma matriz de ordem  $n$ . Com a diagonalização da matriz  $\mathcal{H}_2$ , a função de partição fica

$$Z_2 = \sum_{i=1}^n e^{-\beta\theta_i}, \quad (3.5)$$

onde  $\{\theta_i\}$  são os autovalores da matriz  $\mathcal{H}_2$  quando escrevemos o Hamiltoniano (3.2) na base de dois spins. Portanto, diagonalizando a matriz  $[-\beta\mathcal{H}_2]$ , encontramos seus autovalores. Substituindo os valores  $\{\theta_i\}$  na função de partição Eq.(3.5) e reescrevendo-a, obtemos

$$Z_2 = 2e^{-K} \cosh(A + B) + 2e^K \cosh(W), \quad (3.6)$$

sendo  $W = \sqrt{(A - B)^2 + 4K^2(1 - \Delta)^2}$ , onde  $A = K\left(\sum_{\delta}^3 S_{2+\delta}^{zA} + \lambda \sum_{\delta\lambda}^2 S_{2+\delta\lambda}^{zA}\right) - \beta H$  e  $B = K\left(\sum_{\delta}^3 S_{1+\delta}^{zB} + \lambda \sum_{\delta\lambda}^2 S_{1+\delta\lambda}^{zB}\right) - \beta H$ .

Substituindo a Eq.(3.6) na Eq.(3.4) e desenvolvendo os cálculos encontramos

$$m_A = \left\langle \frac{-\sinh(A + B) + \exp(2K)(A - B)\frac{\sinh(W)}{W}}{\cosh(A + B) + \exp(2K)\cosh(W)} \right\rangle. \quad (3.7)$$

Aplicando a técnica do operador diferencial para um aglomerado de dois spins que consiste na identidade

$$\exp(aD_x + bD_y)f(x, y)|_{x,y=0} = f(a, b), \quad (3.8)$$

associada à identidade de van der Waerden,  $\exp(A\sigma_i) = \cosh(A) + \sigma_i \sinh(A)$ , na teoria de campo efetivo, em aproximação de ordem zero, para uma rede cúbica simples, a magnetização da subrede A é dada por

$$m_A = (\alpha_x + m_B \beta_x)^3 (\alpha_{\lambda x} + m_B \beta_{\lambda x})^2 (\alpha_y + m_A \beta_y)^3 (\alpha_{\lambda y} + m_A \beta_{\lambda y})^2 f(x, y) |_{x,y=0}, \quad (3.9)$$

onde  $\alpha_\nu = \cosh(KD_\nu)$ ,  $\beta_\nu = \sinh(KD_\nu)$ ,  $\alpha_{\lambda\nu} = \cosh(\lambda KD_\nu)$ ,  $\beta_{\lambda\nu} = \sinh(\lambda KD_\nu)$ , com  $f(x, y)$  correspondendo a seguinte função

$$f(x, y) = \frac{-\sinh(x + y - 2\beta H) + \exp(2K)(x - y) \frac{\sinh[W(x, y)]}{W(x, y)}}{\cosh(x + y - 2\beta H) + \exp(2K) \cosh[W(x, y)]}, \quad (3.10)$$

sendo  $W(x, y) = \sqrt{(x - y)^2 + 4K^2(1 - \Delta)^2}$ .

A Eq(3.9) é aproximada, pois no desenvolvimento dos cálculos, quando aplicamos a idéia do operador diferencial introduzido por Honmura e Kaneyoshi[26], encontramos correlações de multi-spins e caso queiramos tratar estas correlação 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 trabalho usamos EFT, tomando aproximação de ordem zero, e assim desacoplamos as equações, isto é,  $\langle S_i^1 S_j^1 \dots S_l^1 \rangle \simeq \langle S_i^1 \rangle \langle S_j^1 \rangle \dots \langle S_l^1 \rangle$  com  $i \neq j \neq \dots \neq l$ .

Portanto, a Eq.(3.9) descreve a dependência da magnetização da subrede A com a temperatura, o campo externo e os parâmetro  $\lambda$  e  $\Delta$ . A partir dela podemos estudar a criticalidade do sistema. De forma análoga podemos encontrar a magnetização da subrede B. Assim, os valores médios das magnetizações por spin das subredes A e B são dadas por

$$\begin{aligned} m_{A,B} &= (\alpha_x + m_{B,A} \beta_x)^3 (\alpha_{\lambda x} + m_{B,A} \beta_{\lambda x})^2 (\alpha_y + m_{A,B} \beta_y)^3 \\ &\quad (\alpha_{\lambda y} + m_{A,B} \beta_{\lambda y})^2 f_{1,2}(x, y) |_{x,y=0} \\ &= \sum_{p=0}^3 \sum_{q=0}^2 \sum_{k=0}^3 \sum_{r=0}^2 a_{pqkr}(T, \Delta, \lambda, H) m_B^{p+q} m_A^{k+r}, \end{aligned} \quad (3.11)$$

com

$$a_{pqkr}(T, \Delta, \lambda, H) = \binom{3}{p} \binom{2}{q} \binom{3}{k} \binom{2}{r} \alpha_x^{3-p} \alpha_y^{3-k} \alpha_{\lambda x}^{2-q} \alpha_{\lambda y}^{2-r} \beta_x^p \beta_{\lambda x}^q \beta_y^k \beta_{\lambda y}^r f_{1,2}(x, y)|_{x,y=0}, \quad (3.12)$$

$$f_n(x, y) = \frac{-\sinh(x+y-2\beta H) + (-1)^{n+1}(x-y)\exp(2K)\frac{\sinh[W(x,y)]}{W(x,y)}}{\cosh(x+y-2\beta H) + \exp(2K)\cosh[W(x,y)]}, \quad (3.13)$$

onde os coeficientes  $\{a_{pqkr}(T, \Delta, \lambda, H)\}$  são obtidos analiticamente através da relação  $\exp(aD_x + bD_y)f_{1,2}(x, y) = f_{1,2}(x+a, y+b)$ , porém vamos omití-los por serem demasiadamente grandes.

### 3.3 Limite de Estabilidade da Fase Antiferromagnética

Introduzindo as variáveis  $m = \frac{1}{2}(m_A + m_B)$ , definida como magnetização uniforme ou total, e  $m_s = \frac{1}{2}(m_A - m_B)$ , definida por magnetização *staggered*, da Eq.(3.11) obtemos, de forma auto-consistente, as magnetizações  $m$  e  $m_s$  em função da temperatura e dos parâmetros de anisotropia  $(\Delta, \lambda)$ . Entretanto, estamos interessados em estudar a criticalidade desse sistema. Neste caso, a magnetização *staggered*,  $m_s$  (parâmetro de ordem do sistema) tende a zero com a aproximação da temperatura crítica, permitindo considerar apenas os termos lineares de  $m_s$  na Eq.(3.11). Este processo gera um conjunto de duas equações acopladas que resolvidas simultaneamente obtém-se os diagramas de fase, obtidos por

$$A_o(T, H, m_o, \Delta, \lambda) = m_o \quad (3.14)$$

e

$$A_1(T, H, m_o, \Delta, \lambda) = 1, \quad (3.15)$$

com

$$A_o(T, H, m_o, \Delta, \lambda) = \sum_{p=0}^3 \sum_{q=0}^2 \sum_{k=0}^3 \sum_{r=0}^2 a_{pqkr}(T, \Delta, \lambda, H) m_o^{p+q+k+r} \quad (3.16)$$

e

$$A_1(T, H, m_o, \Delta, \lambda) = \sum_{p=0}^3 \sum_{q=0}^2 \sum_{k=0}^3 \sum_{r=0}^2 (p + q - k - r) a_{pqkr}(T, \Delta, \lambda, H) m_o^{p+q+k+r-1}, \quad (3.17)$$

onde  $m_o$  é o valor da magnetização total na temperatura crítica ( $m_s = 0$ ). No caso particular do limite  $\Delta = 0$  e  $\lambda = 1$  temos o modelo de Heisenberg isotrópico 3d, cujo resultado foi analisado por Bublitz e de Sousa[17], onde obteve-se campo crítico  $H_c(0, 1) = 6.224J$  que difere do valor clássico  $H_c = 6J$ . A seguir iremos estudar o diagrama de fase para vários valores de  $\lambda, \Delta$  e  $H$ .

### 3.3.1 Estado fundamental ( $T = 0$ )

Para o caso geral, as Eqs.(3.14) e (3.15) são resolvidas numericamente obtendo a temperatura de Néel  $T_N(\Delta, \lambda)$  em função do campo magnético e dos parâmetros  $(\Delta, \lambda)$ . Analisando o sistema no estado fundamental, ou seja,  $T = 0$ , obtemos a dependência do campo crítico  $H_c(\Delta, \lambda)$ . Na Fig.(3.3) apresentamos  $H_c(\Delta, \lambda)$  *versus*  $\lambda$  para os modelos Ising ( $\Delta = 1$ ) e Heisenberg isotrópico ( $\Delta = 0$ ).

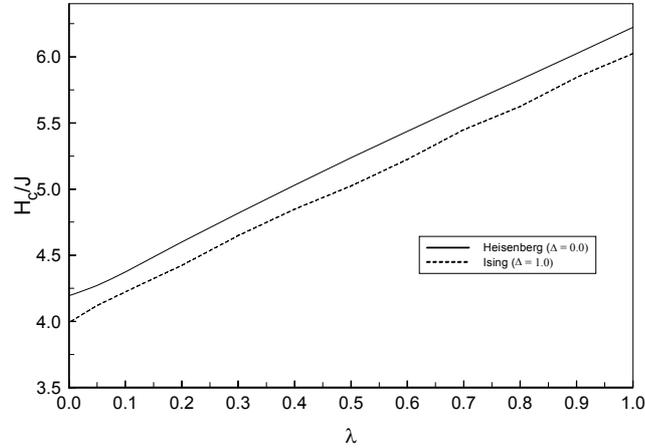


Figura 3.3: Diagrama de fase do estado fundamental no plano  $H-\lambda$  para o modelo de Heisenberg isotrópico ( $\Delta = 0$ ) e Ising ( $\Delta = 1$ ) obtido por EFT-2.

Analisando os resultados numéricos da Fig.(3.3) para  $\lambda \in [0, 1]$ , observamos que  $H_c(\Delta, \lambda)$  depende linearmente do parâmetro  $\lambda$  na forma[27]

$$H_c(\Delta, \lambda) \simeq H_c(\Delta, 0) + \lambda H'_c(\Delta, 0), \quad (3.18)$$

onde  $H_c(\Delta, 0)$  varia entre  $H_c(1, 0)/J = 4.000$  (limite Ising 2d) e  $H_c(0, 0)/J = 4.224$  (limite Heisenberg isotrópico 2d) seguindo a relação:  $H_c(\Delta, 0)/J = 4.224 - 0.224\Delta$ , com  $H'_c(\Delta, 0)/J \simeq 2.0$  para todos os valores de  $\Delta \in [0, 1]$ . Portanto, as flutuações quânticas modificam o valor do campo crítico  $H_c(\Delta, \lambda)$  em relação ao valor clássico (modelo de Ising anisotrópico)  $H_c(1, \lambda)/J = (4 + 2\lambda)$ . Flutuações quânticas no metamagneto de Heisenberg tem sido analisada numa cadeia ( $d = 1$ )[16], onde o campo crítico difere do valor clássico  $H_c = \mathfrak{z}J$ . Nesta seção estudaremos uma rede cúbica anisotrópica, e apresentamos o diagrama de fase pela primeira vez na literatura[27] e não dispomos de resultados teóricos para comparações. Do ponto de vista qualitativo, o efeito quântico é medido pelo valor de  $\Delta \neq 1$  que modifica a criticalidade em relação ao resultado clássico ( $\Delta = 1$ ).

### 3.3.2 Diagramas de Fase

Resolvendo numericamente as Eqs.(3.14) e (3.15) construímos os diagramas de fases ( $T_N, H$ ), para diferentes valores de  $\lambda$ , e ( $T_N, \lambda$ ) para vários valores de  $H$ , fixando uma anisotropia  $\Delta$ . Como estamos interessados nos efeitos quânticos, fixamos  $\Delta = 0$ .

Na Fig.(3.4) mostramos o diagrama de fase do metamagneto Heisenberg quântico isotrópico ( $\Delta = 0$ ) no plano  $H - T$  para  $\lambda = 1, 0; 0, 5$  e  $10^{-5}$ . Obtemos linhas críticas de transição de segunda ordem que divide a fase antiferromagnética com campo induzido (AF), com parâmetro de ordem  $m_s \neq 0$ , da fase paramagnética (P) onde  $m_s = 0$ . Nossos resultados mostram que  $H_c(0, \lambda) = 6, 224; 5, 236$  e  $4, 224$ , e  $T_N(0, \lambda) = 4, 947; 4, 010$  e  $2, 832$ , para os respectivos valores de  $\lambda = 1, 0; 0, 5$  e  $10^{-5}$ , indicando a mudança na criticalidade do sistema com o parâmetro  $\lambda$  da interação de troca interplanos. Ou seja, a medida em que diminuímos a interação interplano  $\lambda$ , diminuímos também o campo crítico e a temperatura crítica de transição AF e P.

Na Fig.(3.5) apresentamos o comportamento de  $T_N$  versus  $\lambda$  para diversos valores de campo  $H$ , onde observamos um crescimento de  $T_N$  a medida que aumentamos o parâmetro  $\lambda$ , como esperado fisicamente [i.e.,  $T_c(3d) > T_c(2d)$ ]. É importante lembrar que a teoria de campo efetivo,

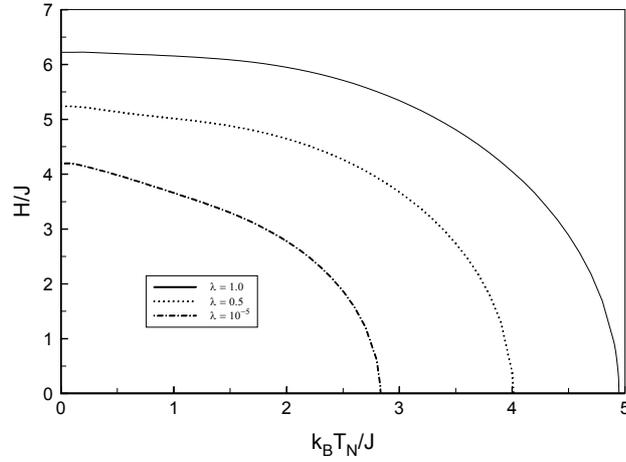


Figura 3.4: Diagrama de fase  $H - T$  para o metamagneto Heisenberg de spin  $1/2$  com diferentes valores do parâmetro  $\lambda$ .

no modelo de Heisenberg isotrópico 2d ( $\lambda = 0$ ), não é capaz, na forma que descrevemos, de satisfazer o teorema de Mermin-Wagner[23], no qual neste limite temos  $T_N = 0$ , porém produz resultados qualitativos. Uma alternativa de reproduzir corretamente o teorema de Mermin e Wagner é usar o desacoplamento do campo de reação de Onsager, que para o caso do modelo de Ising os resultados para  $T_c$  é equivalente a aproximação de Bethe-Peierls.

### 3.4 Propriedades Termodinâmicas

No capítulo 2, diversas propriedades termodinâmicas (magnetização total e de subrede, susceptibilidade total e de subrede, energia interna e calor específico) no metamagneto Ising- $1/2$  foram obtidas via EFT-1. Nesta seção estenderemos os cálculos para o metamagneto Heisenberg- $1/2$  anisotrópico via EFT-2.

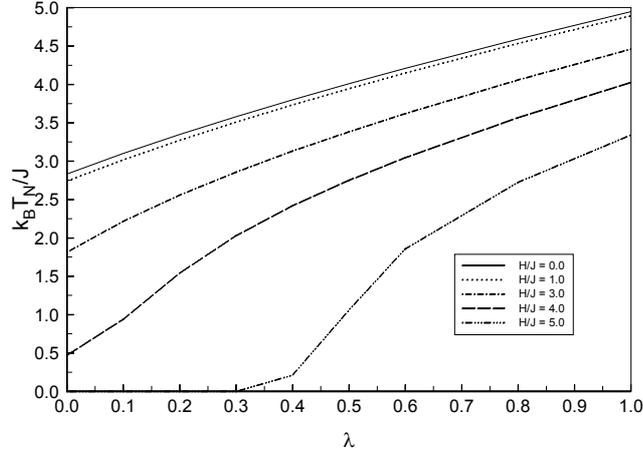


Figura 3.5: Dependência da temperatura crítica do metamagneto Heisenberg de spin 1/2 com o parâmetro  $\lambda$  da interação interplanos.

### 3.4.1 Magnetização e Susceptibilidade

Resolvendo numericamente a Eq.(3.11), isto é, o sistema de equações acopladas  $F_1(m_A, m_B) = 0$  e  $F_2(m_A, m_B) = 0$  para  $T, H, \lambda$  e  $\Delta$  fixos, obtemos as dependências de  $m(T)$  e  $m_s(T)$  (parâmetro de ordem) em função da temperatura. Na Fig.(3.6) mostramos a magnetização *staggered*  $m_s$  em função da temperatura para diferentes valores das variáveis  $H$  e  $\lambda$ . A influência do parâmetro  $\lambda$  está relacionada com a mudança da dimensionalidade, isto é, no limite de  $\lambda$  pequeno esperamos um comportamento  $2d$  do sistema. A medida que  $T$  cresce  $m_s$  decresce se anulando em  $T_N(H, \lambda)$  com um expoente  $\beta = 1/2$ . Temos escolhido  $H/J = 0$  [Fig.(3.6a)], 1.0 [Fig.(3.6b)] e 3.0 [Fig.(3.6c)], e  $\lambda = 10^{-5}$  (quase-2d), 0.5 e 1.0 (3d) para as três curvas respectivas. No limite  $T = 0$ , a magnetização  $m_s(T = 0) < 1.0$  de acordo com resultados rigorosos a campo nulo de teoria de ondas de spins, que deve-se ao efeito das flutuações quânticas no sistema AF por não conhecermos o estado fundamental. O caso de  $H = 0$  e  $\lambda = 1$  (3d) foi analisado preliminarmente na Ref.[28]. Para  $\lambda$  fixado, observamos que o parâmetro de ordem  $m_s$  em  $T = 0$  (também para  $T \neq 0$ ) diminui a medida que o campo aumenta, se anulando no campo crítico  $H_c(\lambda)$  que está explicitado na Fig.(3.3) para  $\Delta = 0$ .

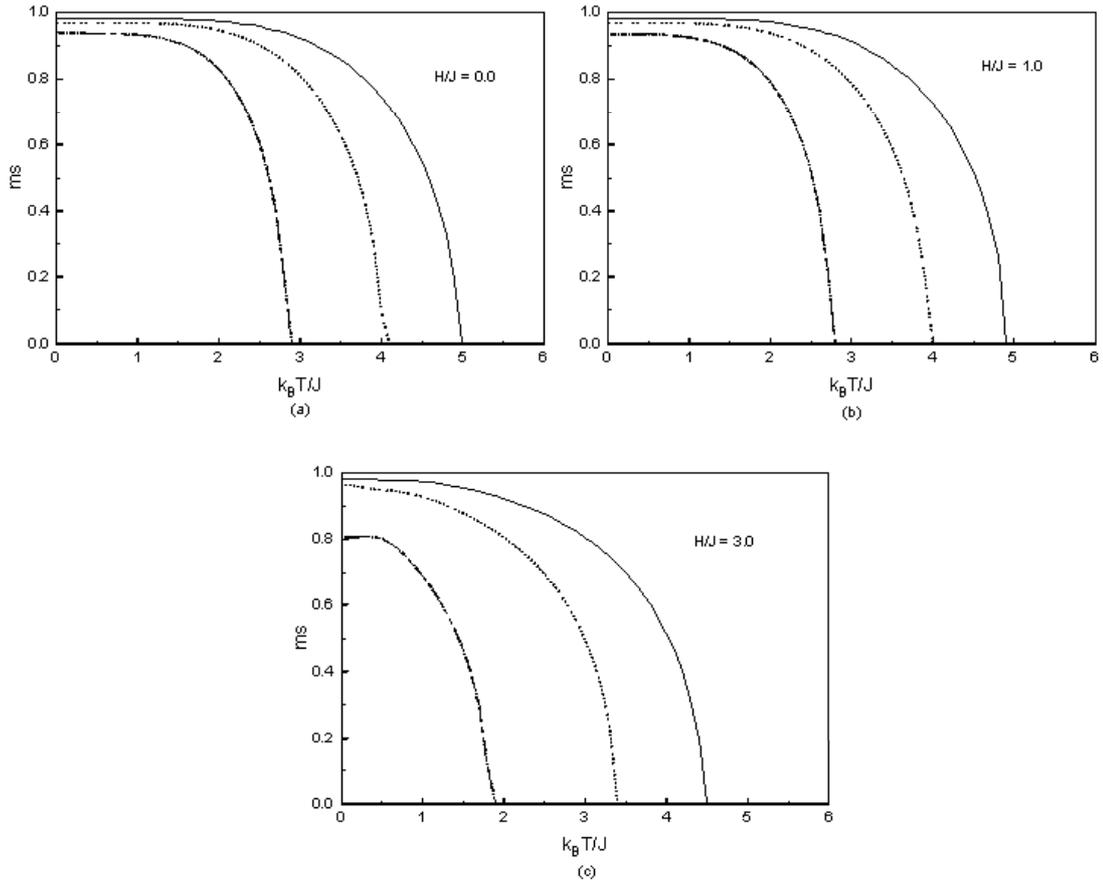


Figura 3.6: Dependência da magnetização  $m_s$  com a temperatura reduzida para diferentes valores de  $H = 0.0(a)$ ,  $1.0(b)$  e  $3.0(c)$  do modelo de Heisenberg isotrópico ( $\Delta = 0$ ). Na linha contínua temos  $\lambda = 1.0$ , pontilhada  $\lambda = 0.5$  e contínua-pontilhada  $\lambda = 10^{-5}$ .

Na Fig.(3.7) temos o comportamento da magnetização total  $m$  para vários valores das variáveis  $H$  e  $\lambda$ , onde o ponto de máximo indica a temperatura de transição do sistema. Escolhemos mais uma vez  $H/J = 1.0$  [Fig.(3.7a)] e  $3.0$  [Fig.(3.7b)], com  $\lambda = 10^{-5}$  (quase-2d),  $0.5$  e  $1.0$  (3d) para as três curvas respectivas. A medida que o campo  $H$  aumenta, mais spins da subrede B ( $\downarrow$ ) são flipados para cima, crescendo a magnetização  $m_A$  e conseqüentemente teremos um aumento da magnetização total  $m = \frac{(m_A + m_B)}{2} \simeq \chi_o H$  (pequeno  $H$ ), onde  $\chi_o$  é a susceptibilidade a campo nulo o que apresenta um comportamento similar a  $m(T)$ . A temperatura nula ( $T = 0$ ), temos que  $m$  cresce linearmente com  $H$  (região de baixos campos) e para  $H > H_c(\lambda, \Delta)$  [ver Fig.(3.3)] a magnetização sofre uma saturação, correspondendo a um valor finito  $m_o(\lambda, \Delta)$  na

fase paramagnética.

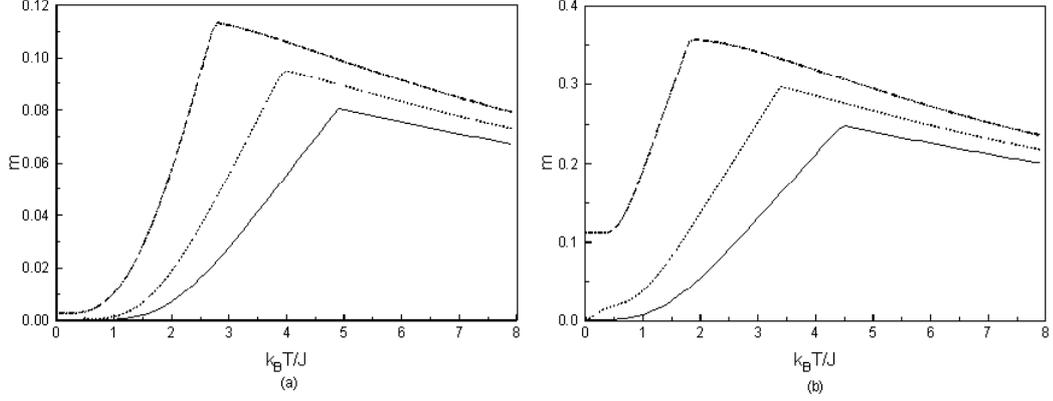


Figura 3.7: Dependência da magnetização total  $m$  com a temperatura reduzida para diferentes valores  $H = 1.0(a)$  e  $3.0(b)$  do modelo de Heisenberg isotrópico ( $\Delta = 0$ ). Na linha contínua temos  $\lambda = 1, 0$ , pontilhada  $\lambda = 0, 5$  e contínua-pontilhada  $\lambda = 10^{-5}$ .

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 uma descontinuidade na temperatura crítica. Neste caso é importante introduzirmos o chamado campo *staggered*  $H_{st}$  conjugado ao parâmetro de ordem  $m_s$  (magnetização *staggered*) [29]. 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 inserido no Hamiltoniano (3.1) será dado por

$$\mathcal{H}_A = -H_A \sum_{i \in A} S_{iA}^z, \quad (3.19)$$

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

$$\mathcal{H}_B = -H_B \sum_{i \in B} S_{iB}^z, \quad (3.20)$$

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 obtido a partir da definição

$$\chi_{st} = \left( \frac{\partial m_s}{\partial H_{st}} \right)_{H_{st}=0}, \quad (3.21)$$

e está relacionada a flutuação do parâmetro de ordem divergindo em  $T = T_N$ .

Por outro lado, definimos a susceptibilidade total  $\chi$ , que está relacionada ao campo externo  $H$  e com a magnetização total  $m$  do sistema, avaliando o comportamento de  $m$  mediante ao campo externo  $H$ , definido por

$$\chi_t = \left( \frac{\partial m}{\partial H} \right)_{H_{st}=0}. \quad (3.22)$$

Derivando parcialmente a Eq.(3.11) em relação a  $H$  e  $H_{st}$  ficamos com a seguinte equação para a susceptibilidade (total e *staggered*)

$$\chi_\theta = \frac{\sum_{p=0}^3 \sum_{q=0}^2 \sum_{k=0}^3 \sum_{r=0}^2 a'_{pqkr}(T, \Delta, \lambda, H) (m - m_s)^{p+q} (m + m_s)^{k+r}}{1 \pm \sum_{p=0}^3 \sum_{q=0}^2 \sum_{k=0}^3 \sum_{r=0}^2 a_{pqkr}(T, \Delta, \lambda, H) (p+q) (m - m_s)^{p+q-1} (m + m_s)^{k+r}}, \quad (3.23)$$

onde tomamos a soma no denominador quando estamos calculando  $\chi_t$  e caso contrário  $\chi_{st}$  sendo

$$a'_{pqkr}(T, \Delta, \lambda, H) = \binom{3}{p} \binom{2}{q} \binom{3}{k} \binom{2}{r} \alpha_x^{3-p} \alpha_y^{3-k} \alpha_{\lambda x}^{2-q} \alpha_{\lambda y}^{2-r} \beta_x^p \beta_{\lambda x}^q \beta_y^k \beta_{\lambda y}^r g_\theta(x, y) |_{x,y=0}, \quad (3.24)$$

com  $\theta = H$  no cálculo de  $\chi_t$  e  $\theta = H_{st}$  para  $\chi_{st}$ , onde

$$g_H(x, y) \equiv \frac{\partial f_H(x, y)}{\partial H} \Big|_{H_{st}=0} = \frac{2\beta \cosh(x+y-2\beta H)}{Z(x, y)} + \frac{2\beta \sinh(x+y-2\beta H) \{-\sinh(x+y-2\beta H) + (x-y) \exp(2K) \sinh[W(x, y)]\}}{[Z(x, y)]^2} \quad (3.25)$$

e

$$g_{st}(x, y) \equiv \left. \frac{\partial f_{H_{st}}(x, y)}{\partial H_{st}} \right|_{H_{st}=0} = \frac{2\beta \exp(2K) \sinh [W(x, y)]}{W(x, y) Z(x, y)} + \frac{2\beta \exp(2K)(x-y)^2}{W(x, y) Z(x, y)} \left\{ \frac{\cosh [W(x, y)]}{[W(x, y)]} - \frac{\sinh [W(x, y)]}{[W(x, y)]^2} - \frac{\exp(2K) \sinh^2 [W(x, y)]}{W(x, y) Z(x, y)} \right\}, \quad (3.26)$$

onde  $Z(x, y) = \cosh(x+y-2\beta H) + \exp(2K) \cosh [W(x, y)]$  e  $W(x, y) = \sqrt{(x-y)^2 + 4K^2(1-\Delta)^2}$ .

A susceptibilidade total é mostrada na Fig.(3.8) para o modelo de Heisenberg isotrópico ( $\Delta = 0$ ) como função da temperatura variando o parâmetro  $\lambda$  e o campo externo  $H$ . A descontinuidade que se observa na curva, característica de sistemas antiferromagnéticos, sofre influência dos parâmetros  $\lambda$  e  $H$ , conseqüentemente teremos uma dependência para  $T_N(\lambda, H)$ . Fixamos  $\lambda = 1$  (rede 3d) e  $\lambda = 10^{-5}$  (rede quase-2d) e diversos valores do campo magnético indicados nas curvas. A medida que  $H$  cresce, a temperatura de transição  $T_N(H)$  diminui, segundo os resultados do diagrama de fase da Fig.(3.4). No caso da rede 3d ( $\lambda = 1$ ), apenas observamos um deslocamento gradual do ponto de máximo (descontinuidade) em direção a  $T = 0$ , onde para  $H > H_c = 6.224J$  o sistema estará desordenado e apresenta um comportamento paramagnético para a susceptibilidade ( $\chi_o = \frac{C}{T}$ ). Por outro lado, o limite quase-2d ( $\lambda = 10^{-5}$ ), além do deslocamento do ponto de máximo da susceptibilidade com o aumento do campo  $H$ , observamos 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). Para  $\lambda$  pequeno, as flutuações quânticas são mais predominantes (baixa dimensionalidade) e com o aumento do campo torna o sistema mais instável em direção a desordem. Portanto, deve existir um dado valor de campo (menor do que o campo crítico  $H_c = 4.224J$ ) que induzirá a um comportamento paramagnético instável (divergência de  $\chi_t$  em  $T = 0$ ) e com isto teremos o aparecimento de um ponto de mínimo acompanhado depois da transição de fase (ponto de máximo). Observe, ainda, que este fenômeno anômalo ocorre apenas em campos intensos, próximos do valor do campo crítico  $H_c = 4.224J$ . Devemos mencionar que este comportamento anômalo não acontece em sistemas clássicos, por exemplo, modelo de Ising ( $\Delta = 1$ )<sup>2</sup>, sendo portanto um fenômeno

---

<sup>2</sup>No capítulo 2, e mais precisamente na Fig.(2.7) apresentamos o comportamento da susceptibilidade total em função da temperatura para o modelo de Ising AF com diversos valores do campo  $H$ . Não observamos nenhuma anomalia, garantindo assim ser este fenômeno uma manifestação dos efeitos quânticos.

de natureza quântica que reproduzimos qualitativamente usando uma simples metodologia de EFT-2, e que servirá a seguir para descrever os resultados experimentais do composto AF  $La_2CuO_4$ [30, 31].

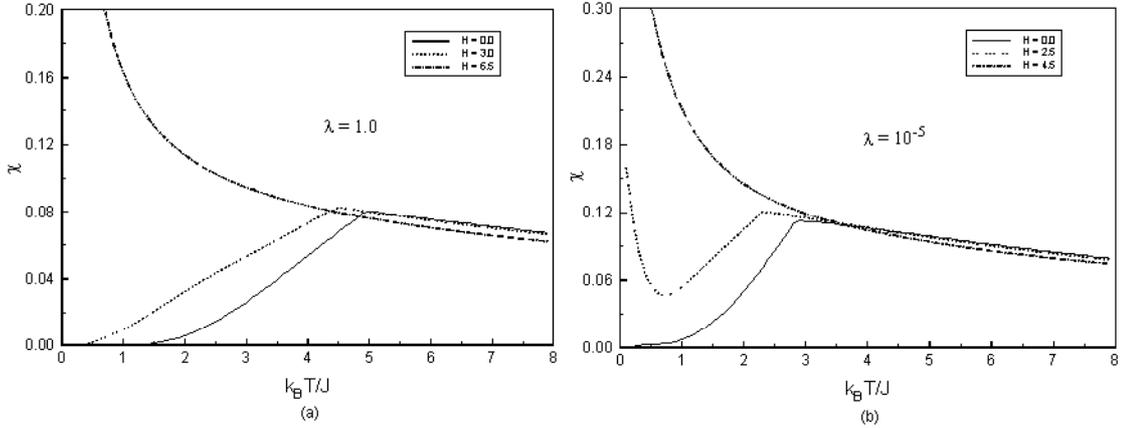


Figura 3.8: Comportamento da susceptibilidade total em função da temperatura para o metamagneto Heisenberg quântico de spin 1/2 anisotrópico variando  $\lambda$  e  $H$ .

### 3.4.2 Comparação Teoria - Experimento

Do ponto de vista experimental, o comportamento da susceptibilidade total do antiferromagneto  $La_{2-x}CuO_{4-y}$  sugere uma anomalia[31] que foi comprovada por vários métodos experimentais[1, 30, 32, 33]. Estes resultados indicam que a interação de troca antiferromagnética interplanar nesse sistemas tem forte influência. Como já mencionamos, a fase isolante para esse material é descrita por um antiferromagneto Heisenberg quasi bidimensional. Na Fig.(3.9) apresentamos o resultado experimental para a susceptibilidade total do  $La_{2-x}CuO_{4-y}$ [25] e o tratamento teórico dado aqui nesse trabalho.

Os resultados teóricos sugerem um valor para a interação de troca  $J = 474,5cm^{-1}$  e um campo externo da ordem de  $H = 1,43T$ . Esses dados podem ser comparados aos valores experimentais  $J = 500cm^{-1}$ [1] e  $J = 1000cm^{-1}$ [30] para a interação de troca intraplanar antiferromagnética.

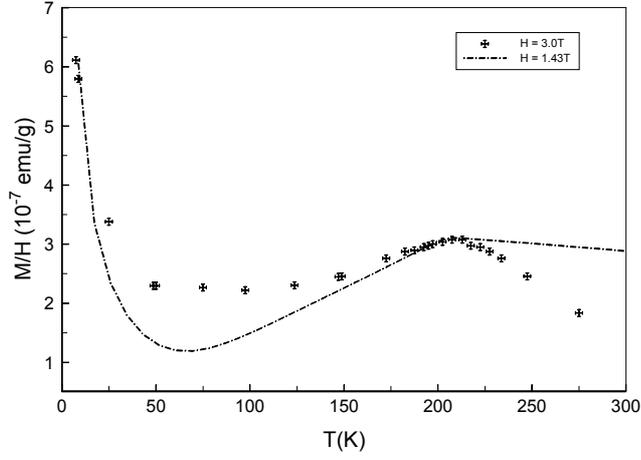


Figura 3.9: Susceptibilidade total do composto antiferromagnético  $La_2CuO_4$  em função da temperatura. A linha tracejado representa o resultado teórico obtido nesse trabalho.

### 3.4.3 Energia Interna e Calor Específico

A energia interna por partícula pode ser calculada tomando a média do Hamiltoniano (3.2) dada por

$$u = \langle \mathcal{H} \rangle = \frac{\langle \mathcal{H} \rangle_A + \langle \mathcal{H} \rangle_B}{2}, \quad (3.27)$$

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

$$\langle \mathcal{H} \rangle_{A,B} = \left\langle J[(1 - \Delta)(S_1^{xA} S_2^{xB} + S_1^{yA} S_2^{yB}) + S_1^{zA} S_2^{zB}] \right\rangle + \left\langle a_{1,2}^{B,A} S_{1,2}^{zA,B} \right\rangle, \quad (3.28)$$

sendo  $a_i^\nu = J \left( \sum_{\delta}^3 S_{i+\delta}^{z\nu} + \lambda \sum_{\delta\lambda}^2 S_{i+\delta\lambda}^{z\nu} \right) - H$ , com  $i = 1(\nu = A), 2(\nu = B)$ .

Portanto, substituindo (3.28) em (3.27) ficaremos com a energia por partícula dada por

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{H} \rangle &= -\frac{1}{2} \left\{ \left\langle J \left[ (1 - \Delta) \left( S_1^{xA} S_2^{xB} + S_1^{yA} S_2^{yB} \right) + S_1^{zA} S_2^{zB} \right] \right\rangle + \right. \\ &\quad \left. \left\langle a_1^B S_1^{zA} \right\rangle + \left\langle a_2^A S_2^{zB} \right\rangle \right\} - H \frac{(m_A + m_B)}{2}, \end{aligned} \quad (3.29)$$

onde  $m_\nu = \langle S_n^{z\nu} \rangle$  ( $\nu = A$  para  $n = 1$  e  $\nu = B$  para  $n = 2$ ).

As funções de correlação  $\langle S_i^{\nu A} S_{i+\delta}^{\nu B} \rangle$  são obtidas por

$$\langle S_i^{\nu A} S_{i+\delta}^{\nu B} \rangle = \left\langle \frac{\text{Tr} \left\{ S_i^{\nu A} S_{i+\delta}^{\nu B} \exp(-\beta \mathcal{H}) \right\}}{\text{Tr} \left\{ \exp(-\beta \mathcal{H}) \right\}} \right\rangle, \quad (3.30)$$

que reescrita em termos da função de partição ficará

$$\langle S_i^{\nu A} S_{i+\delta}^{\nu B} \rangle = \left\langle \frac{\partial \ln Z}{\partial A_\nu} \right\rangle, \quad (3.31)$$

onde  $\nu = x, y, z$  com  $A_{x,y} = K(1 - \Delta)$  e  $A_z = K$ .

Para os termos que envolvem as interações intraplanos e interplanos, entre os primeiros vizinhos mais próximos, a partir do uso da técnica do operador diferencial teremos

$$\begin{aligned} \left\langle \left( \sum_{\delta \neq 1} J_{i,i+\delta} S_{i+\delta}^{z(A,B)} \right) S_i^{z(B,A)} \right\rangle &= \left\langle \left( \sum_{\delta \neq 1} J_{i,i+\delta} S_{i+\delta}^{z(A,B)} \right) \frac{\text{Tr} \left\{ S_i^{z(B,A)} \exp(-\beta \mathcal{H}) \right\}}{\text{Tr} \left\{ \exp(-\beta \mathcal{H}) \right\}} \right\rangle \\ &= \frac{\partial}{\partial (\beta D_\nu)_{(B,A)}} \left\langle \exp \left( -\beta \sum_{\delta \neq 1} J_{i,i+\delta} S_{i+\delta}^{z(A,B)} D_\nu \right) \right\rangle f_n(x, y) \Big|_{x,y=0}, \end{aligned} \quad (3.32)$$

onde  $f_n(x, y)$  uma função é dada pela Eq.(3.13) para a subrede A  $n = 1$  e subrede  $n = 2$ .

Substituindo (3.31) e (3.32) na Eq.(3.29), e usando EFT em conjunto com as definições  $m_A = m + m_s$  e  $m_B = m - m_s$ , a energia interna por partícula finalmente ficará na forma

$$u = -\frac{1}{2} \left\{ 2J^2 \beta (1 - \Delta) \sum_{p=0}^3 \sum_{q=0}^2 \sum_{k=0}^3 \sum_{r=0}^2 A_{pqkr}(T, \Delta, \lambda, H) (m - m_s)^{p+q} (m + m_s)^{k+r} + \right.$$

$$\begin{aligned}
& J \sum_{p=0}^3 \sum_{q=0}^2 \sum_{k=0}^3 \sum_{r=0}^2 B_{pqkr}(T, \Delta, \lambda, H) (m - m_s)^{p+q} (m + m_s)^{k+r} + \\
& \left. [J(6 + 4\lambda)(m + m_s)] \sum_{p=0}^3 \sum_{q=0}^2 \sum_{k=0}^3 \sum_{r=0}^2 C_{pqkr}(T, \Delta, \lambda, H) (m - m_s)^{p+q} (m + m_s)^{k+r} \right\} - \\
& Hm, \tag{3.33}
\end{aligned}$$

onde os coeficientes  $\{\theta_{pqkr}(T, \Delta, \lambda, H), \theta = A, B, C \text{ e } D\}$  têm a mesma forma do coeficiente  $a_{pqkr}(T, \Delta, \lambda, H)$  apresentado na Eq.(3.12) com as respectivas funções  $f_n(x, y)$  dadas por

$$A_{pqkr}(T, \Delta, \lambda, H) \rightarrow f(x, y) = \frac{\frac{\exp(2K)}{W(x,y)} \sinh[W(x, y)]}{\cosh(x + y - 2\beta H) + \exp(2K) \cosh[W(x, y)]}; \tag{3.34}$$

$$B_{pqkr}(T, \Delta, \lambda, H) \rightarrow f(x, y) = \frac{-\cosh(x + y - 2\beta H) + \exp(2K) \cosh[W(x, y)]}{\cosh(x + y - 2\beta H) + \exp(2K) \cosh[W(x, y)]}; \tag{3.35}$$

$$C_{pqkr}(T, \Delta, \lambda, H) \rightarrow f(x, y) = \frac{-\sinh(x + y - 2\beta H) + (x - y) \exp(2K) \frac{\sinh[W(x,y)]}{W(x,y)}}{\cosh(x + y - 2\beta H) + \exp(2K) \cosh[W(x, y)]}, \tag{3.36}$$

onde  $W(x, y) = \sqrt{(x - y)^2 + 4K^2(1 - \Delta)^2}$ .

Todos os coeficientes presentes nas propriedades termodinâmicas desse trabalho foram calculados analiticamente usando a identidade  $\exp(aD_x + bD_y)g(x, y) = g(x + a, y + b)$  com o *software* MAPLE V, e são grandes o suficiente para exprimi-los aqui, portanto, omitiremos por achar desnecessários para análise dos resultados numéricos. O programa desenvolvido no MAPLE V é bastante eficiente para ser aplicado em diversas redes (3), interações competitivas e mais adiante será usado na descrição de filmes finos e super-redes magnéticas.

Para o modelo de Heisenberg AF isotrópico ( $\Delta = 0$ ), a energia interna será calculada via EFT-2 resolvendo o sistema de Eqs.(3.11) para as magnetizações de subredes  $m_A$  e  $m_B$  com valores de  $\lambda, H, T$  fixos, e depois serão substituídos na Eq.(3.33), assim sendo obtemos um conjunto de pontos  $\{u(T, \lambda, H)\}$ . Fixando  $\lambda = 10^{-5}$  (rede quase-2d) e  $\lambda = 1$  (rede 3d) nas

Fig.(3.10a) e (3.10b), respectivamente apresentamos o comportamento da energia interna em função da temperatura para diversos valores do campo  $H$ . Para  $H < H_c$  [ $H_c(\lambda = 1) = 6.224J$  e  $H_c(\lambda = 10^{-5}) = 4.224J$ ], observamos que  $u(T)$  decresce em módulo com uma derivada nula em  $T = 0$  e apresentado uma descontinuidade (mudança de concavidade) na temperatura de transição  $T_N(\lambda, H)$ . Quando  $H > H_c$  entramos na fase desordenada e a energia interna é contínua em todo intervalo de temperatura. Nas Figs.(3.11a) e (3.11b) temos o comportamento do calor específico em função da temperatura, que são obtidos por derivações numéricas dos resultados das energia interna apresentadas nas Figs.(3.10a) e (3.10b), respectivamente. Na região de baixos campos ( $H < H_c$ ), o calor específico cresce a partir de zero em  $T = 0$  (3ª lei da termodinâmica) até atingir uma descontinuidade em  $T = T_N(\lambda, H)$ , sofrendo uma transição de fase de segunda ordem, e depois na fase paramagnética ( $T > T_N$ ) o calor específico diminui a medida que  $T$  cresce, apresentando um comportamento assintótico do tipo  $\frac{1}{T^2}$  quando  $T \gg T_N$ . No caso de altos campos ( $H > H_c$ ) não presenciemos transição de fase, apenas o calor específico atinge um ponto de máximo e depois diminui com o aumento da temperatura.

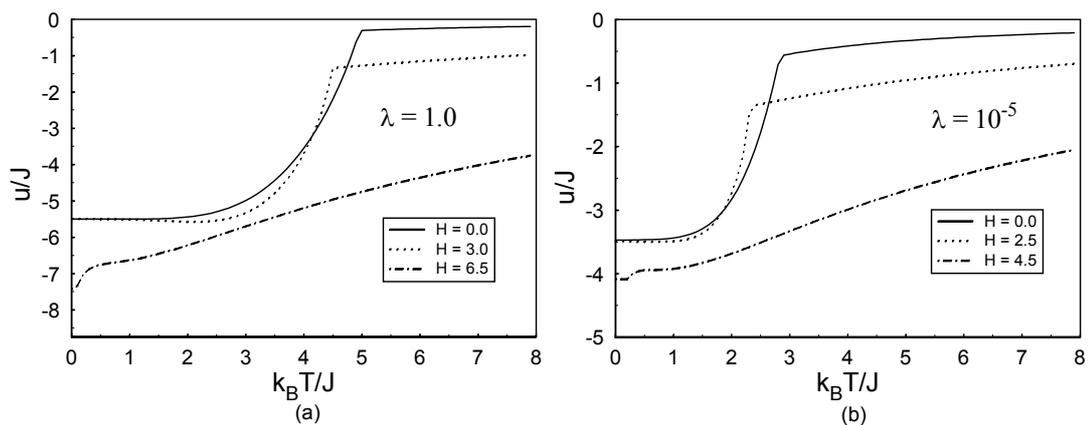


Figura 3.10: Comportamento da energia interna do metamagneto Heisenberg isotrópico em função da temperatura reduzida para  $\lambda = 1$  (rede 3d)(a) e  $\lambda = 10^{-5}$  (rede quase-2d)(b) e diversos valores de  $H$  indicados na curva.

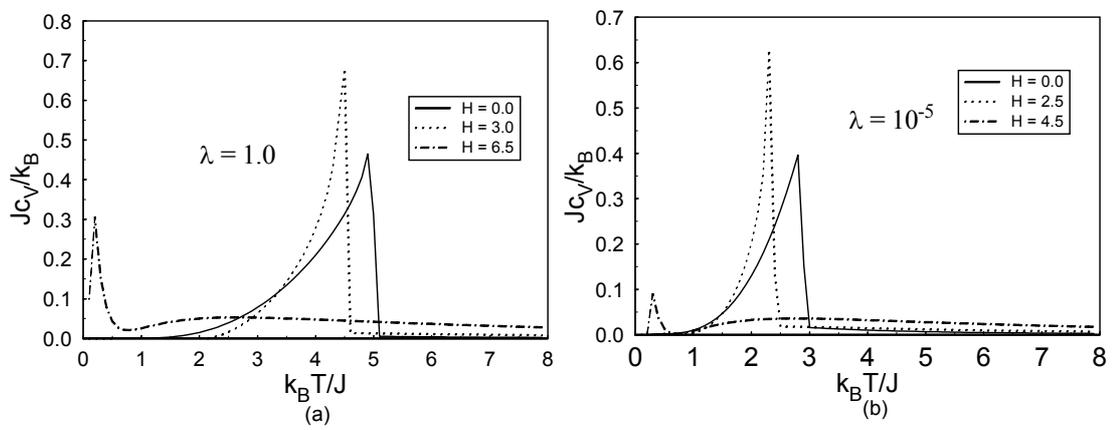


Figura 3.11: Calor específico do metamagneto Heisenberg isotrópico ( $\Delta = 0$ ) obtido por derivação numérica das Figs.[3.10(a) e (b)].

# REFERÊNCIAS

- [1] SHIRANE, G., ENDOH, Y., BIRGENEAU, R. J., KASTNER, M. A., HIDAKA, Y., ODA, M., SUZUKI, M., MURAKAMI, T., *Phys. Rev. Lett.* **59**, 1613 (1987).
- [2] ENDOH, Y., et. al., *Phys. Rev. B* **37**, 7443 (1988).
- [3] HERNÁNDEZ, L., DIEP, H. T., BERTRAND, D., *Phys. Rev. B* **47**, 2602 (1993); *Phys. Rev. B* **48**, 15772 (1993).
- [4] NETO, M., DE SOUSA, J. R., *Phys. Rev. B*, in press (2004).
- [5] FITTIPALDI, I. P., *J. Mag. Mag. Mater.* **131**, 43 (1994).
- [6] NÉEL, L., *Ann. Phys.* **17**, 61 (1932).
- [7] KINCARD, J. M., COHEN, E. G. D., *Phys. Rep.* **22**, 5 (1975); MOREIRA, A. F. S., FIGUEIREDO, W., HENRIQUES, V. B., *Eur. Phys. J. B* **27**, 153 (2002).
- [8] STRYLEWSKI, E., GIORDANO, N., *Adv. Phys.* **26**, 487 (1977); SCHMIDT, V. A., FRIEDBERG, S. A., *Phys. Rev. B* **1**, 2250 (1970).
- [9] KATSUMATA, K., KATORI, H. A., SHAPIRO, S. M., SHIRANE, G., *Phys. Rev. B* **55**, 11466 (1997); BINCK, 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).
- [10] GALAM, S., YOKOI, C. S. O., 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).

- [11] 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).
- [12] Ver também dissertação de mestrado do Edgar Bublitz, *Transição de Fase Quântica Induzida Por Campo Externo*, UFAM (2003).
- [13] SAKAI, T., TAKAHASHI, M., *Phys. Rev. B* **57**, R8091 (1998); OKUMISH, K., HIEIDA, Y., AKUTSU, Y., *Phys. Rev. B* **59**, 6806 (1999).
- [14] OSHIKAWA, M., YAMANAKA, M., AFFLECK, I., *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1984 (1997); TOTSUKA, K., *Phys. Lett. A* **228**, 103 (1997).
- [15] OKUNISHI, K., HIEIDA, Y., AKUTSU, Y., *Phys. Rev. B* **60**, R6953 (1999).
- [16] LANGARI, A., *Phys. Rev. B* **58**, 14467 (1998).
- [17] BUBLITZ, E., DE SOUSA, J. R., *Phys. Lett. A* **323**, 9 (2004).
- [18] OVCHINNIKOV, A. A., DMITRIEV, D. M., KRINOV, V. Ya., CHERANOVSKII, V. O., *Phys. Rev. B* **68**, 214406 (2003).
- [19] NETO, M., DE SOUSA, J. R., *Phys. Lett. A* **330**, 322 (2004).
- [20] VIANA, J. R., NOGUEIRA, Y., DE SOUSA, J. R., *Phys. Lett. A* **311**, 480 (2003).
- [21] FALK, H., *Phys. Rev. A* **133**, 1382 (1964).
- [22] PAN, K. W., *Phys. Rev. B* **244**, 169 (1998); *ibid Phys. Lett. A* **271**, 291 (2000).
- [23] MERMIN, N. D., WAGNER, H., *Phys. Rev. Lett.* **22**, 1133 (1966).
- [24] DE SOUSA, J. R., BRANCO, N. S., BOECHAT, B., CORDEIRO, C., *Physica A* **328**, 167 (2003) e referências citadas.
- [25] COLLINS, R. T., SCHLESINGER, Z., SHAFER, M. W., MCGUIRE, T. R., *Phys. Rev. B* **37**, 5817 (1988).
- [26] HONMURA, R., KANEYOSHI, T., *J. Phys.* **C12**, 3970 (1979).
- [27] CABRAL NETO, J. , DE SOUSA, J. R., *Phys. Lett. A*, in press (2004).

- [28] ARAÚJO, I. G., CABRAL NETO, J., DE SOUSA, J. R., *Physica A* **260**, 150 (1998).
- [29] GRIFFITHS, R. B., WHEELER, J. C., *Phys. Rev. A* **2**, 1047(1970).
- [30] LYONS, K. B., FLEURY, P. A., REMURA, J. P., NEGRAN, T. J., *Phys. Rev. B* **37**, 2353 (1988).
- [31] FUJITA, T., et. al., *Jpn. J. Appl. Phys.* **26**, L368 (1987); UCHIDA, S., et. al., *ibid.* **26**, L445 (1987); GREENE, R. L., et. al., *Solid State Commun.* **63**, 379 (1987).
- [32] VAKNIN, D., et. al., *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2802 (1987); YAMAGUCHI, Y., et. al., *Jpn. J. Appl. Phys.* **26**, L447 (1987).
- [33] MITSUDA, S., et. al., *Phys. Rev. B* **36**, 822 (1987); FRELTOFT, T., et. al., *ibid.* **36**, 826 (1987).

## Capítulo 4

# Termodinâmica e Criticalidade no Modelo de Filme Fino Heisenberg

### 4.1 Considerações Gerais

Entender o comportamento magnético e térmico de filmes finos e ultrafinos representa um grande avanço tanto do ponto de vista teórico como experimental na medida em que a necessidade de fontes cada vez mais seguras e eficientes de armazenamento de informação, via gravação magnética, vem sendo considerada. A redução do espaço ocupado *versus* maior quantidade de informação, possibilita o surgimento de novas tecnologias de crescimento de filmes finos magnéticos a partir de um substrato, possibilitando a formação das mais variadas estruturas caracterizadas tanto pela geometria de sua rede cristalina (heteroestruturas) quanto pelo tipo de interação existente entre os elementos da rede, os íons, constituindo uma super-rede. Como exemplo, citamos o fato de que microbaterias utilizadas em aparelhos eletrônicos portáteis estão sendo desenvolvidas com a tecnologia de filmes finos, possibilitando baterias de dimensão da ordem de 15 microns[1]. Além de uma visão tecnológica, os filmes finos têm importância teórica para o entendimento da ordem magnética e do fenômeno da transição de fase em sistemas de baixa dimensionalidade, onde superfícies delimitadoras influenciam no comportamento do interior do material com surgimento de fenômenos interessantes, como também possibilitando verificar a hipótese de universalidade. O conhecimento detalhado das interações microscópicas se faz necessário em função dos efeitos provocados durante o processo de composição e

preparação. Por exemplo, o uso de filmes ultra-finos magnéticos para armazenamento de dados requer a fixação da magnetização aplicada no filme e leitura desses dados com máxima precisão. Mudanças na composição do filme podem alterar as propriedades e sua sensibilidade na presença de um campo externo. A habilidade em efetuar mudanças na caracterização de um filme é fundamental para o estabelecimento de sua estrutura física fazendo com que sua performance seja otimizada gerando significativos resultados tecnológicos. Os filmes finos podem ser preparados por vários métodos diferentes, mas todos eles se baseiam na deposição gradual de átomos ou moléculas do material desejado sobre uma superfície do outro material conhecido como substrato. Os métodos mais utilizados são a deposição em alto vácuo, por evaporação térmica ou bombardeio por feixe de elétrons, e a deposição por pulverização (*sputtering*). No método em alto vácuo, as substâncias que contêm os elementos do material desejado são aquecidas até evaporar no interior de uma câmara evacuada. O vapor aquecido expande-se rapidamente, fazendo com que os átomos ou moléculas sejam depositados sobre a superfície do substrato, formando um filme fino. O filme assim produzido pode ser amorfo ou cristalino, dependendo do controle no processo. No método de *sputtering* os átomos são arrancados por meio de colisão dos íons que formam um gás propositalmente colocado na câmara de deposição[2]. O controle maior da deposição atômica feita camada por camada através de técnicas modernas de alto vácuo, como o método de crescimento epitaxial[3], tem garantido formar novas estruturas de filmes, nas mais diversas orientações. Verifica-se que os diferentes planos de orientação de crescimento provocam mudança na distância entre as camadas do filme: 1,246 Å para  $Ni(110)$ , 1,762 Å para  $Ni(100)$ , 2,035 Å para  $Ni(111)$ . A simetria do sistema é modificada surgindo uma variação na temperatura crítica para sistemas compostos pela mesma substância com orientações cristalinas diferentes. Resultados experimentais mostram que filmes de  $Ni$  e  $Cu$ [4, 5, 6, 7] têm  $T_c(111) > T_c(100) > T_c(110)$ . A descoberta do efeito magneto-óptico de superfície denominado Efeito Kerr, que através de incidência de laser ( $\lambda = 632nm$ ) numa determinada direção, pode informar o comportamento da magnetização em função da temperatura[8, 9]. A ordem magnética do filme é afetada pela variação da temperatura do sistema. Allenspach e Bischof[10], usando microscópio eletrônico estudaram a variação da estrutura dos domínios magnéticos em filmes finos de  $Fe/Cu(001)$ . Abaixo da temperatura característica, os momentos magnéticos reorientam-se da direção perpendicular para a direção paralela ao plano do filme, fenômeno

este conhecido como transição de reorientação. Desta maneira, neste capítulo estudaremos a criticalidade e termodinâmica do filme fino Heisenberg.

## 4.2 Modelo e Formalismo

Com o advento da mecânica quântica, Dirac, London e Heisenberg propuseram um modelo - **Modelo de Heisenberg** - para explicar microscopicamente o magnetismo na matéria, e descobriram a interação de troca (*exchange*) baseada no princípio de exclusão de Pauli. Atualmente, o modelo de Heisenberg quântico de spins 1/2 é tratado na literatura nas descrições dos compostos supercondutores formados por planos de  $CuO_2$  e em filmes finos. Modelos teóricos tratam a estrutura dos filmes finos considerando uma rede cristalina infinita no plano XY com duas superfícies delimitadoras na direção axial (eixo  $z$ ), e a interação de exchange  $J = J_{superfície}$  se o sítio pertencer à superfície e  $J = J_{bulk}$  se estiver no *bulk*. Nos experimentos em filmes finos é observado que aumentando o tamanho do filme ( $\ell$ ) a partir do valor mínimo, observamos uma mudança de classe de universalidade (*crossover*) [11, 12].

Neste capítulo estudaremos as propriedades magnética e térmica de um sistema constituído de um filme fino numa rede cúbica simples com interações F e AF no modelo de Heisenberg anisotrópico quântico de spin - 1/2. A seguir, como primeira propriedade magnética, desenvolveremos os cálculos para a magnetização do filme fino, e posteriormente encontraremos a susceptibilidade longitudinal. A energia interna e o calor específico serão determinados, e também o comportamento crítico do sistema. Consideraremos o seguinte Hamiltoniano de Heisenberg anisotrópico de spin-1/2:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \left[ \left( \eta_x S_i^x S_j^x + \eta_y S_i^y S_j^y \right) + S_i^z S_j^z \right] - H \sum_i S_i^z, \quad (4.1)$$

onde  $J_{ij}$  é a energia de interação e  $H$  o campo externo. Para  $J_{ij} > 0$  teremos interação F e  $J_{ij} < 0$  interação AF. A anisotropia do sistema é associada aos parâmetros  $\eta_x$  e  $\eta_y$ :  $\eta_x = \eta_y = 0$  simetria Ising,  $\eta_x = 0$  e  $\eta_y = 1$  simetria XY e  $\eta_x = \eta_y = 1$  simetria Heisenberg isotrópico.  $S_i^\nu$  ( $\nu = x, y, z$ ) é a componente  $\nu$  do operador de spin no sítio  $i$ . Considerando um filme magnético delimitado por duas superfícies com  $\ell$  camadas (planos), então a interação  $J_{ij}$  assumirá os seguintes valores:  $J_{ij} = J_s$  para sítios pertencentes as superfícies livres ( $n = 1, \ell$ ) e

$J_{ij} = J$  a sítios não pertencentes, pelo menos um, a superfície (*bulk*).

Vamos escrever o Hamiltoniano (4.1) com aglomerado de dois spins ( $N = 2$ ) para a estrutura de rede sugerida (rede cúbica simples), onde o filme fino magnético é constituído de  $\ell$  camadas ( $n = 1, 2, \dots, \ell$ ) e o Hamiltoniano da  $n$ -ésima camada,  $\mathcal{H}_n$ , será descrito de forma que contenha a interação entre aglomerados formados por pares de partículas ( aglomerados com  $N = 2$  partículas) e por íons livres que atuam em cada par de aglomerado, ou seja,

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_n = & -J_n \left[ \left( \eta_x S_{1n}^{xA} S_{2n}^{xB} + \eta_y S_{1n}^{yA} S_{2n}^{yB} \right) + S_{1n}^{zA} S_{2n}^{zB} \right] - HS_{1,n}^{zA} - HS_{2,n}^{zA} \\
& -J_n \left[ \left( \eta_x S_{1n}^{xA} \sum_{\vec{\delta}}^3 S_{1+\vec{\delta},n}^{xB} + \eta_y S_{1n}^{yA} \sum_{\vec{\delta}}^3 S_{1+\vec{\delta},n}^{yB} \right) + S_{1n}^{zA} \sum_{\vec{\delta}}^3 S_{1+\vec{\delta},n}^{zB} \right] \\
& -J_n \left[ \left( \eta_x S_{2n}^{xB} \sum_{\vec{\delta}}^3 S_{2+\vec{\delta},n}^{xA} + \eta_y S_{2n}^{yB} \sum_{\vec{\delta}}^3 S_{2+\vec{\delta},n}^{yA} \right) + S_{2n}^{zB} \sum_{\vec{\delta}}^3 S_{2+\vec{\delta},n}^{zA} \right] \\
& -J_{n-1} \left[ \left( \eta_x S_{1,n}^{xA} \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{1+\vec{\delta},n-1}^{xB} + \eta_y S_{1,n}^{yA} \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{1+\vec{\delta},n-1}^{yB} \right) + S_{1,n}^{zA} \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{1+\vec{\delta},n-1}^{zB} \right] \\
& -J_{n-1} \left[ \left( \eta_x S_{2,n}^{xB} \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{2+\vec{\delta},n-1}^{xA} + \eta_y S_{2,n}^{yB} \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{2+\vec{\delta},n-1}^{yA} \right) + S_{2,n}^{zB} \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{2+\vec{\delta},n-1}^{zA} \right] \\
& -J_{n+1} \left[ \left( \eta_x S_{1,n}^{xA} \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{1+\vec{\delta},n+1}^{xB} + \eta_y S_{1,n}^{yA} \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{1+\vec{\delta},n+1}^{yB} \right) + S_{1,n}^{zA} \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{1+\vec{\delta},n+1}^{zB} \right] \\
& -J_{n+1} \left[ \left( \eta_x S_{2,n}^{xB} \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{2+\vec{\delta},n+1}^{xA} + \eta_y S_{2,n}^{yB} \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{2+\vec{\delta},n+1}^{yA} \right) + S_{2,n}^{zB} \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{2+\vec{\delta},n+1}^{zA} \right], \quad (4.2)
\end{aligned}$$

onde a interação de troca  $J_0 = 0$ ,  $J_1 = J_\ell = J_s$  (nas superfícies) e  $J_n = J$  para  $n \neq 1, \ell$  (no *bulk*), a soma é realizada sobre os primeiros vizinhos mais próximos com direção dada pelo vetor  $\vec{\delta}$ . Observe que dividimos o sistema em duas subredes, A e B, para que possamos analisar separadamente filmes finos F e AF.

Aplicando a *aproximação axial*<sup>1</sup>, ou seja, considerando que o sistema tenha uma direção

---

<sup>1</sup>Teoricamente, a aproximação axial é utilizada com o objetivo de podermos diagonalizar analiticamente o

preferencial (eixo  $\vec{Oz}$ ), ficaremos com o seguinte Hamiltoniano reduzido aproximado para a n-ésima camada

$$\begin{aligned}
-\beta\mathcal{H}_n &= K_n \left[ \left( \eta_x S_{1,n}^{xA} S_{2,n}^{xB} + \eta_y S_{1,n}^{yA} S_{2,n}^{yB} \right) + S_{1,n}^{zA} S_{2,n}^{zB} \right] + \\
&\quad \left( K_n a_{1,n}^B + K_{n-1} a_{1,n-1}^B + K_{n+1} a_{1,n+1}^B + L \right) S_{1,n}^{zA} + \\
&\quad \left( K_n a_{2,n}^A + K_{n-1} a_{2,n-1}^A + K_{n+1} a_{2,n+1}^A + L \right) S_{2,n}^{zB}, \tag{4.3}
\end{aligned}$$

onde  $K_0 = 0$ ,  $K_1 = K_\ell = \beta J_s$ ,  $K_n = \beta J$  para  $n \neq 1, \ell$ ,  $L = \beta H$ ,  $a_{i,n}^\nu = \sum_{\vec{\delta}}^3 S_{i+\vec{\delta},n}^{z\nu}$ ,  $a_{i,n-1}^\nu = \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{i+\vec{\delta},n-1}^{z\nu}$ ,  $a_{i,n+1}^\nu = \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{i+\vec{\delta},n+1}^{z\nu}$  ( $\nu = A, i = 1$  e  $\nu = B, i = 2$ ) e  $\beta = 1/k_B T$  ( $k_B$  é a constante de Boltzmann).

Como primeira propriedade do filme fino calculamos a magnetização por spin da subrede A ou B para cada camada, ou seja,  $m_{n\nu} = \langle S_{i,n}^{z\nu} \rangle$  é obtida

$$m_{n\nu} = \langle S_{i,n}^{z\nu} \rangle = \left\langle \frac{\text{Tr} \left\{ S_{i,n}^{z\nu} e^{-\beta\mathcal{H}_n} \right\}}{\text{Tr} \left\{ e^{-\beta\mathcal{H}_n} \right\}} \right\rangle. \tag{4.4}$$

Em termos da função de partição  $Z_n = \text{Tr} \left\{ e^{-\beta\mathcal{H}_n} \right\}$ , a Eq(4.4) será reescrita por

$$m_{n\nu} = \left\langle \frac{\partial \ln Z_n}{\partial x_{\nu,n}} \right\rangle, \tag{4.5}$$

onde  $x_{\nu,n} = K_n a_{i,n}^\nu + K_{n-1} a_{i,n-1}^\nu + K_{n+1} a_{i,n+1}^\nu + L$ .

Por tratarmos de um sistema quântico,  $\mathcal{H}$  é um operador que representaremos por uma matriz de ordem  $4 [= (2S + 1)^2, S = 1/2]$ . Com a diagonalização da matriz  $\mathcal{H}$ , a função de partição ficará

$$Z_n = \sum_{j=1}^4 e^{-\beta\lambda_j} \tag{4.6}$$

onde  $\{\lambda_j\}$  são os autovalores da matriz  $\mathcal{H}$ . Escrevemos o Hamiltoniano (4.3) na base de dois spins dada por  $\{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\}$ , ficaremos

---

Hamiltoniano no aglomerado finito.

$$[-\beta\mathcal{H}_n] = \begin{pmatrix} b_1 & 0 & 0 & c \\ 0 & b_2 & d & 0 \\ 0 & d & b_3 & 0 \\ c & 0 & 0 & b_4 \end{pmatrix} \quad (4.7)$$

sendo  $b_1 = K_n + (K_n a_{1,n} + K_{n-1} a_{1,n-1} + K_{n+1} a_{1,n+1} + L) + (K_n a_{2,n} + K_{n-1} a_{2,n-1} + K_{n+1} a_{2,n+1} + L)$ ,  
 $b_2 = -K_n + (K_n a_{1,n} + K_{n-1} a_{1,n-1} + K_{n+1} a_{1,n+1} + L) - (K_n a_{2,n} + K_{n-1} a_{2,n-1} + K_{n+1} a_{2,n+1} + L)$ ,  
 $b_3 = -K_n - (K_n a_{1,n} + K_{n-1} a_{1,n-1} + K_{n+1} a_{1,n+1} + L) + (K_n a_{2,n} + K_{n-1} a_{2,n-1} + K_{n+1} a_{2,n+1} + L)$ ,  
 $b_4 = -K_n - (K_n a_{1,n} + K_{n-1} a_{1,n-1} + K_{n+1} a_{1,n+1} + L) - (K_n a_{2,n} + K_{n-1} a_{2,n-1} + K_{n+1} a_{2,n+1} + L)$ ,  
 $c = K_n (\eta_x - \eta_y)$  e  $d = K_n (\eta_x + \eta_y)$ . Diagonalizando a matriz  $[-\beta\mathcal{H}_n]$  para cada camada ( $n = 1, 2, \dots, \ell$ ), encontramos seus autovalores. Substituindo os valores dos  $\{\lambda_i\}$  na função de partição (4.6) e reescrevendo-a, obtemos

$$Z_n = 2e^{-K_n} \cosh(W_n^+) + 2e^{K_n} \cosh(W_n^-) \quad (4.8)$$

onde  $W_n^\pm = \sqrt{(A_1 \mp A_2)^2 + K_n^2 (\eta_x \pm \eta_y)^2}$ ,  $A_1 = K_n a_{2,n}^B + K_{n-1} a_{2,n-1}^B + K_{n+1} a_{2,n+1}^B + L$  e  $A_2 = K_n a_{1,n}^A + K_{n-1} a_{1,n-1}^A + K_{n+1} a_{1,n+1}^A + L$ .

Substituindo (4.8) em (4.5) ficaremos com a magnetização da subrede  $\nu = A, B$  da  $n$ -ésima camada dada por

$$m_{n\nu} = \left\langle \frac{\Omega_n^- \sinh(W_n^-) - (-1)^{p+1} \Omega_n^+ \exp(-2K_n) \sinh(W_n^+)}{\cosh(W_n^-) + \exp(-2K_n) \cosh(W_n^+)} \right\rangle \quad (4.9)$$

onde  $\Omega_n^\pm = \frac{A_1 \mp A_2}{W_n^\pm}$ ,  $p = 1$  para  $\nu = A$  e  $p = 2$  para  $\nu = B$ .

Usando a técnica do operador diferencial (apresentada em detalhes no capítulo 2 deste trabalho) e a teoria de campo efetivo (EFT-2), podemos reescrever a Eq.(4.9) e encontrar o seguinte conjunto de equações acopladas

$$m_{1,(A,B)} = \begin{pmatrix} \alpha_{sx} + m_{1,(B,A)} \beta_{sx} \\ \alpha_y + m_{2,(A,B)} \beta_y \end{pmatrix}^3 \begin{pmatrix} \alpha_x + m_{2,(B,A)} \beta_x \\ f_{1,(A,B)}(x, y) |_{x,y=0} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \alpha_{sy} + m_{1,(A,B)} \beta_{sy} \end{pmatrix}^3 \quad (4.10)$$

para a magnetização da 1ª superfície ( $n = 1$ ),

$$\begin{aligned}
m_{n,(A,B)} &= \left( \alpha_x + m_{n,(B,A)} \beta_x \right)^3 \left( \alpha_x + m_{n-1,(B,A)} \beta_x \right) \left( \alpha_x + m_{n+1,(B,A)} \beta_x \right) \times \\
&\quad \left( \alpha_y + m_{n,(A,B)} \beta_y \right)^3 \left( \alpha_y + m_{n-1,(A,B)} \beta_y \right) \left( \alpha_y + m_{n+1,(A,B)} \beta_y \right) \\
&\quad f_{n,(A,B)}(x, y) |_{x,y=0}, \tag{4.11}
\end{aligned}$$

para a magnetização da n-ésima camada, e

$$\begin{aligned}
m_{\ell,(A,B)} &= \left( \alpha_{sx} + m_{\ell,(B,A)} \beta_{sx} \right)^3 \left( \alpha_x + m_{\ell-1,(B,A)} \beta_x \right) \times \left( \alpha_{sy} + m_{\ell,(A,B)} \beta_{sy} \right)^3 \\
&\quad \left( \alpha_y + m_{\ell-1,(A,B)} \beta_y \right) f_{\ell,(A,B)}(x, y) |_{x,y=0}, \tag{4.12}
\end{aligned}$$

para magnetização da última superfície ( $n = \ell$ ),  $\alpha_{s\nu} = \cosh(K_s D_\nu)$ ,  $\beta_{s\nu} = \sinh(K_s D_\nu)$ ,  $\alpha_\nu = \cosh(K D_\nu)$ ,  $\beta_\nu = \sinh(K D_\nu)$  ( $\nu = x, y$ ) com

$$f_{n,(A,B)}(x, y) = \frac{\frac{(x+y+2\beta H)}{W_n^-(x,y)} \sinh [W_n^-(x, y)] - (-1)^{p+1} \frac{(x-y)}{W_n^+(x,y)} \exp(-2K_n) \sinh [W_n^+(x, y)]}{\cosh [W_n^-(x, y)] + \exp(-2K_n) \cosh [W_n^+(x, y)]}, \tag{4.13}$$

onde  $W_n^\pm(x, y) = \sqrt{[(x + \beta H) \mp (y + \beta H)]^2 + K_n^2 (\eta_x \pm \eta_y)^2}$ .

O conjunto de equações de estado, Eqs.(4.10)-(4.12), descrevem o comportamento da magnetização de uma dada subrede em função da temperatura para um filme fino magnético, de tamanho  $\ell$ , na presença de um campo longitudinal externo  $H$ .

Dois casos podemos tratar nas Eqs.(4.10)-(4.12), o ferromagnético (F)( $K_n > 0$ ) e o caso antiferromagnético (AF)( $K_n < 0$ ). Podemos ainda estudar o sistema em seu interior (*bulk*), onde aplicamos a condição limite  $\ell \gg 1$  e assim temos  $m_n = m_{n-1} = m_{n+1} = m$ .

### 4.3 Filme Fino Ferromagnético

Usando a condição de contorno para as subredes  $\mathbf{F}$ , onde  $m_A = m_B = m$  e expandindo as Eqs.(4.10)-(4.12) para uma rede cúbica simples ( $\mathfrak{z} = 6$ ) encontramos as seguintes expressões

$$m_1 = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 \left[ a_{1,1kq}(H, T, J_s, J) + a_{2,1kq}(H, T, J_s, J)m_2 + a_{3,1kq}(H, T, J_s, J)m_2^2 \right] m_1^{k+q}, \quad (4.14)$$

$$\begin{aligned} m_n = & \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 \left[ a_{1,nkq}(H, T, J) + a_{2,nkq}(H, T, J)(m_{n-1} + m_{n+1}) + a_{3,nkq}(H, T, J)m_{n-1}m_{n+1} + \right. \\ & a_{4,nkq}(H, T, J)(m_{n-1} + m_{n+1})^2 + a_{5,nkq}(H, T, J)m_{n-1}^2 m_{n+1}^2 + \\ & \left. a_{6,nkq}(H, T, J) \left( m_{n-1}^2 m_{n+1} + m_{n-1} m_{n+1}^2 \right) \right] m_n^{k+q}, \end{aligned} \quad (4.15)$$

$$m_\ell = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 \left[ a_{1,\ell kq}(T, J_s, J) + a_{2,\ell kq}(T, J_s, J)m_\ell + a_{3,\ell kq}(T, J_s, J)m_{\ell-1}^2 \right] m_\ell^{k+q}, \quad (4.16)$$

onde os coeficientes  $a_{1,1kq}(H, T, J_s, J)$ ,  $a_{2,1kq}(H, T, J_s, J)$ ,  $a_{3,1kq}(H, T, J_s, J)$ ,  $a_{1,nkq}(H, T, J)$ ,  $a_{2,nkq}(H, T, J)$ ,  $a_{3,nkq}(H, T, J)$ ,  $a_{4,nkq}(H, T, J)$ ,  $a_{5,nkq}(H, T, J)$ ,  $a_{6,nkq}(H, T, J)$ ,  $a_{1,\ell kq}(H, T, J_s, J)$ ,  $a_{2,\ell kq}(H, T, J_s, J)$  e  $a_{3,\ell kq}(H, T, J_s, J)$  são apresentados no apêndice B.

As Eqs.(4.14)-(4.16) são resolvidas auto-consistentemente (ou seja, numericamente). A partir delas podemos determinar a dependência da magnetização com a temperatura de cada camada  $m_n$  e a magnetização total do filme fino  $m = \frac{1}{\ell} \sum_{n=1}^{\ell} m_n$  para vários tamanhos  $\ell$ . Na região crítica, região de altas temperaturas, a magnetização total do sistema tende a zero ( $m \rightarrow 0$ ) assim como a de cada camada ( $m_n \rightarrow 0$ ) na ausência de campo externo[12], onde predominam os termos lineares de  $m$ . Considerando existência de campo ( $H \neq 0$ ) o sistema não apresentará o fenômeno da transição de fase.

#### 4.3.1 Susceptibilidade magnética

A susceptibilidade é a grandeza física importante no estudo de sistemas magnéticos pois descreve as características na mudança da magnetização com um campo aplicado, ou seja, mostra

a resposta do sistema ao 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.

Para a  $n$ -ésima camada do filme a susceptibilidade é obtida através da derivação

$$\chi_n = \left( \frac{\partial m_n}{\partial H} \right)_{H=0}. \quad (4.17)$$

O valor da susceptibilidade do filme é calculado seguindo o formalismo desenvolvido por Wang e colaboradores[13], onde cada camada do filme é tratada analogamente a um sistema constituído de  $\ell$  capacitores associados em série. Deste forma, a susceptibilidade total será obtida por

$$(1 + \chi)^{-1} = \frac{1}{\ell} \sum_{n=1}^{\ell} (1 + \chi_n)^{-1}, \quad (4.18)$$

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

A partir das Eqs.(4.14)-(4.16) e usando a definição Eq.(4.17) encontramos as susceptibilidades do filme fino para cada camada que são dadas por

$$\chi_1 = G_1(T, J_s, J, m_1, m_2)\chi_1 + G_2(T, J_s, J, m_1, m_2)\chi_2 + G'_3(T, J_s, J, m_1, m_2), \quad (4.19)$$

$$\begin{aligned} \chi_n &= G_{n-1}(T, J, m_{n-1}, m_n, m_{n+1})\chi_{n-1} + G_n(T, J, m_{n-1}, m_n, m_{n+1})\chi_n + \\ &G_{n+1}(T, J, m_{n-1}, m_n, m_{n+1})\chi_{n+1} + G'_n(T, J, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}), \end{aligned} \quad (4.20)$$

e

$$\chi_\ell = G_\ell(T, J_s, J, m_\ell, m_{\ell-1})\chi_\ell + G_{\ell-1}(T, J_s, J, m_\ell, m_{\ell-1})\chi_{\ell-1} + G'_\ell(T, J_s, J, m_\ell, m_{\ell-1}), \quad (4.21)$$

onde as funções  $G_n(T, J, m_{n-1}, m_n, m_{n+1})$  estão detalhadas no apêndice B.

Resolvendo simultaneamente o sistema de equações lineares dadas pelas Eqs.(4.19)-(4.21) encontramos  $\{\chi_n, n = 1, \dots, \ell\}$ , como funções de  $\{m_n\}$  obtidas das Eqs.(4.14)-(4.16) que depois substituído na expressão (4.18) obtemos a dependência da susceptibilidade total com a temperatura, e que será analisada a seguir.

### 4.3.2 Limite de Estabilidade da Fase Ferromagnética

A dependência da temperatura de transição com o tamanho do filme é um aspecto importante tanto do ponto de vista experimental como teórico no que diz respeito aos vários parâmetros do sistema tais como: o tamanho do filme ( $\ell$ ), a estrutura geométrica, os elementos que compõe o sistema e a excitação externa. Resultados experimentais mostram que em alguns filmes ultrafinos  $T_c$  é pequeno (mas, não nulo) somente quando  $\ell > \ell_{\min}$  [um exemplo é o filme de *Ni* em *Cu*(100)[5], onde para uma monocamada do filme  $\ell = 1$  é não magnética]. Desde então as pesquisas por materiais com essas características têm tido um considerável interesse.

Teoricamente, para a reprodução dos resultados experimentais da temperatura crítica do filme fino tem sido usada a seguinte relação de escala[14, 15, 16]

$$T_c(\ell) = T_c(\infty) \left(1 - \frac{A}{\ell^\lambda}\right), \quad (4.22)$$

onde  $T_c(\infty)$  é temperatura de Curie para o *bulk* e  $\lambda$  dependem do tamanho do filme. A constante  $A$  pode ser interpretada com o número de monocamadas com temperatura de Curie nula.

Considerando que o sistema seja tratado via modelo de Heisenberg, o teorema de Mermin-Wagner requer que a temperatura de transição seja nula para o Heisenberg isotrópico bidimensional ( $\ell = 1$ ). Entretanto, foi mostrado que mesmo uma pequena anisotropia leva o sistema a um ordenamento magnético com temperatura de transição diferente de zero, mesmo em duas dimensões[17], assim sendo como a presente aproximação introduz uma certa anisotropia para uma única camada ( $\ell = 1$ ) obtemos  $T_c \neq 0$ .

Outro interessante aspecto no estudo de filmes finos magnéticos está relacionado a mudança da dimensionalidade, quando  $\ell$  muda  $\ell = \ell_{\min}$  (2d) para um  $\ell = \ell_1$  (3d). Este fato é influenciado pela interação de troca da superfície ser menor comparada ao *bulk*. A comparação de resultados teóricos, para a temperatura crítica do filme fino[18], com os resultados experimentais, medidos em filmes ultrafinos de *Ni*(001) em substrato de *Cu*(001) e *Ni*(111) em *W*(110)[5], mostram

$T_c^{teor}(\ell) > T_c^{exp}(\ell)$ . Essa diferença no resultado pode ser devido ao fato que a interação de troca foi considerada uniforme em todo o filme fino e também o uso do modelo de Ising para simular os dados experimentais. No caso do filme de  $Ni(111)$  a magnetização está no plano e o modelo mais apropriado é o XY, enquanto o filme ultrafino de  $Ni(001)$  a magnetização é normal e o uso do modelo de Ising seria justificado (usado como primeira aproximação) *a priori*. Mas o fato de  $T_c[Ni(111)] > T_c[Ni(001)]$  fisicamente implica que o uso do modelo de Ising para simular o filme  $Ni(001)$  não é adequado. Para uma melhor descrição dos dados experimentais do filme magnético  $Ni(001)$  seria o modelo de Heisenberg isto porque  $T_c(XY) > T_c(\text{Heisenberg})$ .

Do ponto de vista teórico, o modelo mais usado no estudo das propriedades magnéticas de superfícies é o modelo de Ising. Nesta seção o modelo quântico de Heisenberg é usado para tratar o filme fino via teoria de campo efetivo em aglomerado de dois spins (EFT-2).

Considerando um filme fino ferromagnético, descrito pelo modelo quântico de Heisenberg anisotrópico de spin 1/2, sem campo externo, temos o comportamento crítico desse sistema usando o argumento que  $m_n \rightarrow 0$  com a aproximação da temperatura do seu valor crítico e portanto, tomamos apenas os termos lineares das Eqs.(4.14)-(4.16) resultando nas seguintes equações:

$$m_1 = [a_{1,101}(0, T, J_s, J) + a_{1,110}(0, T, J_s, J)]m_1 + a_{2,100}(0, T, J_s, J)m_2, \quad (4.23)$$

$$m_n = a_{2,n00}(0, T, J)m_{n-1} + [a_{1,n01}(0, T, J) + a_{1,n10}(0, T, J)]m_n + a_{2,n00}(0, T, J)m_{n+1}, \quad (4.24)$$

$$m_\ell = [a_{1,101}(0, T, J_s, J) + a_{1,110}(0, T, J_s, J)]m_\ell + a_{2,100}(0, T, J_s, J)m_{\ell-1}, \quad (4.25)$$

sendo

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{1,101}(0, T, J_s, J) = 3\alpha_{xs}^3 \alpha_{sy}^2 \beta_{ys} \alpha_x \alpha_y f(x, y) |_{x,y=0} \\ a_{1,110}(0, T, J_s, J) = 3\alpha_{xs}^2 \alpha_{sy}^3 \beta_{xs} \alpha_x \alpha_y f(x, y) |_{x,y=0} \\ a_{2,100}(0, T, J_s, J) = \alpha_{xs}^3 \alpha_{sy}^3 (\alpha_x \beta_y + \alpha_y \beta_x) f(x, y) |_{x,y=0} \\ a_{1,n01}(0, T, J) = 3\alpha_x^5 \alpha_y^4 \beta_y f(x, y) |_{x,y=0} \\ a_{1,n10}(0, T, J) = 3\alpha_x^4 \alpha_y^5 \beta_x f(x, y) |_{x,y=0} \\ a_{2,n00}(0, T, J) = (\alpha_x^5 \alpha_y^4 \beta_y + \alpha_x^4 \alpha_y^5 \beta_x) f(x, y) |_{x,y=0} \end{array} \right. \quad (4.26)$$

onde os coeficientes são determinados pelo uso da relação  $\exp(aD_x + bD_y)f(x, y) = f(x+a, y+b)$  e a função  $f(x, y)$  é dada por

$$f(x, y) = \frac{\frac{(x+y)}{W_n^-(x,y)} \sinh [W_n^-(x, y)] + \frac{(x-y)}{W_n^+(x,y)} \exp(-2K_n) \sinh [W_n^+(x, y)]}{\cosh [W_n^-(x, y)] + \exp(-2K_n) \cosh [W_n^+(x, y)]}, \quad (4.27)$$

sendo  $W_n^\pm(x, y) = \sqrt{(x \mp y)^2 + K_n^2 (\eta_x \pm \eta_y)^2}$ , com  $K_n = \beta J_n$ ,  $K_1 = K_s$  e  $K_{n \neq 1, \ell} = K$ .

Na forma matricial as Eqs.(4.23)-(4.25) podem ser reescritas na forma  $AM = 0$ , onde  $M$  é a matriz coluna das magnetizações e  $A$  é definida por

$$A = \begin{pmatrix} a & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & b & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & b & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & b & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 1 & b & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 1 & a \end{pmatrix}_{\ell \times \ell}, \quad (4.28)$$

onde  $a = [3a_1^F(0, T, J_s, J) - 1]/a_2^F(0, T, J_s, J)$  e  $b = [3a_3^F(0, T, J_s, J) - 1]/a_3^F(0, T, J_s, J)$ , com

$$\left\{ \begin{array}{l} a_1^F(0, T, J_s, J) = a_{1,101}(0, T, J_s, J) + a_{1,110}(0, T, J_s, J) \\ a_2^F(0, T, J_s, J) = a_{2,100}(0, T, J_s, J) \\ a_3^F(0, T, J_s, J) = a_{1,n01}(0, T, J) + a_{1,n10}(0, T, J) \end{array} \right. \quad (4.29)$$

Admitindo solução não trivial  $M \neq 0$  teremos  $\det(A) = 0$ . Resolvendo, encontramos de forma generalizada

$$\det(A_\ell) = (ab - 1)^2 D_{\ell-3}(b) - 2a(ab - 1)D_{\ell-4}(b) + a^2 D_{\ell-5}(b) \quad (4.30)$$

com

$$D_\ell(b) = \frac{1}{\sqrt{b^2 - 4}} \left\{ \left[ \frac{b + \sqrt{b^2 - 4}}{2} \right]^{\ell+1} - \left[ \frac{b - \sqrt{b^2 - 4}}{2} \right]^{\ell+1} \right\} \quad (4.31)$$

para  $b^2 > 4$  e

$$D_\ell(b) = \frac{\sin[\theta(\ell + 1)]}{\sin(\theta)} \quad (4.32)$$

para  $b^2 \leq 4$ , onde  $\theta = \cos^{-1}(\frac{b}{2})$ .

Além da dependência da temperatura crítica com o número de camadas do filme fino e seus constituintes, há a influência do valor do spin  $S(\frac{1}{2}$  finito ou  $\infty$ ). Por conta disto, passaremos agora a tratar o filme fino no modelo de Heisenberg clássico dado por

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (4.33)$$

onde  $\mathbf{S}_i = (S_i^1, S_i^2, \dots, S_i^D)$  são vetores de módulo  $D^{\frac{1}{2}}$  (ou seja,  $|\mathbf{S}_i| = D^{\frac{1}{2}}$ ) com  $D$  componentes e  $J_{ij}$  a interação de troca. Para a simetria Heisenberg temos  $D = 3$ . A metodologia usada para o cálculo da magnetização média via EFT-2 segue o mesmo processo desenvolvido no capítulo 2, seção 2.4, desse trabalho, onde calculamos a função de partição de uma integral no espaço de fase das variáveis de spin. Portanto, como resultado teremos o mesmo conjunto de equações como as Eqs.(4.23)-(4.25) para a criticalidade e linha crítica dada pela Eq.(4.31), porém os valores dos coeficientes são calculados a partir da seguinte função<sup>2</sup>:

$$f_n(x, y) = \frac{\sinh(x + y) + \Phi_D \sinh(x - y)}{\cosh(x + y) + \Phi_D \cosh(x - y)}, \quad (4.34)$$

$$\text{com } \Phi_D = \frac{I_{\frac{D}{2}-1}(DK_n) - I_{\frac{D}{2}}(DK_n)}{I_{\frac{D}{2}-1}(DK_n) + I_{\frac{D}{2}}(DK_n)}.$$

Os métodos de aproximação usados na mecânica estatística são constantemente analisados

---

<sup>2</sup>Para detalhes da obtenção da Eq.(4.34) ver Refs.[19] e [20].

na sua eficácia na investigação de modelos complexos, onde se deseja compreender o comportamento das grandezas físicas na obtenção de diagramas de fase, por exemplo. Os filmes finos constituem um exemplo destes novos sistemas. Uma das ferramentas de cálculo matemático das grandezas físicas é a aproximação de aglomerados que deve apresentar resultados satisfatórios em sistemas com alta dimensionalidade quando comparado à métodos rigorosos de simulação numérica. O uso da aproximação axial (eixo fácil) gera no sistema uma pequena anisotropia responsável pela ocorrência de transição de fase no modelo de Heisenberg isotrópico bidimensional, em desacordo com o teorema de Mermin-Wagner [21].

Alguns resultados teóricos não físicos ou anômalos presente no comportamento de grandezas termodinâmicas em modelos quânticos devem-se a três fatores: (1) o tipo de aproximação usada; (2) o efeito do tamanho finito do aglomerado e (3) efeitos competitivos nas interações do Hamiltoniano. Através de diagonalização numérica exata, Bonner e Fisher[22] estudaram as propriedades termodinâmicas do modelo de Heisenberg quântico de spin  $1/2$  numa rede unidimensional F e AF. Considerando a rede finita  $N = 2$  até 11 o calor específico em função da temperatura foi calculado, variando a anisotropia de *exchange*. A 3ª lei da termodinâmica (calor específico nulo em  $T = 0$ ) foi satisfeita e aumenta até um valor máximo  $T_{máx.}$  e diminui posteriormente indo a zero quando  $T \rightarrow \infty$  na forma  $c \simeq 1/T^2$ , o que caracteriza um sistema sem transição de fase. Por outro lado, para o sistema AF o calor específico apresenta um comportamento anômalo com a presença de dois máximos, um em baixa temperatura e outro em alta temperatura. Aumentando o valor de N, Bonner e Fisher verificaram que o primeiro ponto de máximo do calor específico em baixas temperaturas diminui monotonicamente a zero quando  $N \rightarrow \infty$ , mostrando ser este comportamento anômalo devido ao efeito de tamanho finito da rede que é altamente relevante na região de baixas temperaturas, e que é mais predominante em sistemas quânticos.

### 4.3.3 Energia Interna e Calor Específico

A energia interna por partícula relativa da *n-ésima* camada pode ser calculada tomando a média do Hamiltoniano (4.1). Faremos isso para uma rede cúbica simples ( $\mathfrak{z} = 6$ ) no modelo proposto de Heisenberg quântico anisotrópico de spin  $1/2$ , considerando os dois tipos de interação de troca F e AF. De acordo com o procedimento adotado para o cálculo das propriedades

para filmes finos encontramos o seguinte resultado:

Na idéia de tratarmos o sistema dividido em duas subredes, vamos considerar que a energia interna do sistema possa ser escrita, para cada camada do filme, na forma

$$\langle \mathcal{H} \rangle_n = \frac{\langle \mathcal{H} \rangle_{nA} + \langle \mathcal{H} \rangle_{nB}}{2}, \quad (4.35)$$

onde  $\langle \mathcal{H} \rangle_{nA}$  e  $\langle \mathcal{H} \rangle_{nB}$  são os valores médios das energias para as subredes A e B, respectivamente. Assim, o valor médio da energia por partícula na *aproximação axial* para uma subrede é dada por

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{H} \rangle_{n,(A,B)} &= - \left\langle J_n \left[ \left( \eta_x S_{1,n}^{xA} S_{2,n}^{xB} + \eta_y S_{1,n}^{yA} S_{2,n}^{yB} \right) + S_{1,n}^{zA} S_{2,n}^{zB} \right] \right\rangle - \\ &\quad \left\langle \left( J_n a_{i,n}^{B,A} + J_{n-1} a_{i,n-1}^{B,A} + J_{n+1} a_{i,n+1}^{B,A} \right) S_{i,n}^{z(A,B)} \right\rangle - H \left\langle S_{i,n}^{z(A,B)} \right\rangle \end{aligned} \quad (4.36)$$

onde  $J_0 = 0$ ,  $J_1 = J_\ell = J_s$ ,  $J_n = J$ ,  $a_{i,0}^\nu = 0$ ,  $a_{i,n}^\nu = \sum_{\vec{i}+\vec{\delta},n}^3 S^{z\nu}$ ,  $a_{i,n+1}^\nu = \sum_{\vec{i}+\vec{\delta},n+1}^1 S^{z\nu}$  ( $\nu = A, i = 1$  e  $\nu = B, i = 2$ ) para  $n \neq 1$ .

Substituindo (4.36) na Eq.(4.35), a energia interna por partícula da  $n$ -ésima camada ficará

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{H} \rangle_n &= -\frac{1}{2} \left\{ \left\langle J_n \left[ \left( \eta_x S_{1,n}^{xA} S_{2,n}^{xB} + \eta_y S_{1,n}^{yA} S_{2,n}^{yB} \right) + S_{1,n}^{zA} S_{2,n}^{zB} \right] \right\rangle + \right. \\ &\quad \left. \left\langle \left( J_n a_{2,n}^B + J_{n-1} a_{2,n-1}^B + J_{n+1} a_{2,n+1}^B \right) S_{1,n}^{zA} \right\rangle + \right. \\ &\quad \left. \left\langle \left( J_n a_{1,n}^A + J_{n-1} a_{1,n-1}^A + J_{n+1} a_{1,n+1}^A \right) S_{2,n}^{zB} \right\rangle \right\} - H \frac{(m_{1A} + m_{1B})}{2}, \end{aligned} \quad (4.37)$$

onde  $m_{n\nu} = \langle S_n^{z\nu} \rangle$  ( $\nu = A, B$ ).

Os termos que surgem no cálculo da energia, Eq.(4.37), relacionados com a função de correlação  $\langle S_{i,n}^A S_{i+\delta,n}^B \rangle$  são obtidos por

$$\langle S_{i,n}^{\nu A} S_{i+\delta,n}^{\nu B} \rangle = \left\langle \frac{Tr \left\{ S_i^{\nu A} S_{i+\delta}^{\nu B} \exp(-\beta \mathcal{H}) \right\}}{Tr \left\{ \exp(-\beta \mathcal{H}) \right\}} \right\rangle, \quad (4.38)$$

que a partir da função de partição Eq.(4.8) ficará

$$\left\langle S_{i,n}^{\nu A} S_{i+\delta,n}^{\nu B} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial \ln Z_n}{\partial A_\nu} \right\rangle, \quad (4.39)$$

onde  $\nu = x, y, z$  com  $A_x = K_n \eta_x$ ,  $A_y = K_n \eta_y$  e  $A_z = K_n$ .

Para os termos que envolvem a interação entre os primeiros vizinhos mais próximos a partir do uso da técnica do operador diferencial teremos

$$\begin{aligned} \left\langle \left( \sum_{\delta \neq 1} J_{i,i+\delta} S_{i+\delta}^{z(A,B)} \right) S_{i,n}^{z(B,A)} \right\rangle &= \left\langle \left( \sum_{\delta \neq 1} J_{i,i+\delta} S_{i+\delta}^{z(A,B)} \right) \frac{\text{Tr} \left\{ S_{i,n}^{z(B,A)} \exp(-\beta \mathcal{H}) \right\}}{\text{Tr} \left\{ \exp(-\beta \mathcal{H}) \right\}} \right\rangle \\ &= \frac{\partial}{\partial (\beta D_\nu)_{(B,A)}} \left\langle \exp \left( -\beta \sum_{\delta \neq 1} J_{i,i+\delta} S_{i+\delta}^{z(A,B)} D_\nu \right) \right\rangle f(x, y) \Big|_{x,y=0}, \end{aligned} \quad (4.40)$$

com  $\nu = x, y$ ,  $D_\nu$  é o operador diferencial e  $f(x, y)$  uma função a ser determinada para o aglomerado de dois spins.

Aplicando a condição de contorno para o caso F ( $m_n = m_A = m_B$ ) e a teoria EFT, encontramos

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{H} \rangle_1^F &= -\frac{1}{2} \left[ J_s^2 \beta (\eta_x + \eta_y) G_{11}^F(T, J_s, m_1, m_2) + J_s G_{12}^F(T, J_s, m_1, m_2) + \right. \\ &\quad \left. (6J_s m_1 + 2J m_2) G_{13}^F(T, J_s, m_1, m_2) \right], \end{aligned} \quad (4.41)$$

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{H} \rangle_n^F &= -\frac{1}{2} \left[ J_n^2 \beta (\eta_x + \eta_y) G_{n1}^F(T, J_n, m_{n1}, m_{n-1}, m_{n+1}) + J_n G_{n2}^F(T, J_n, m_{n1}, m_{n-1}, m_{n+1}) + \right. \\ &\quad \left. (6J_n m_n + 2J_{n-1} m_{n-1} + 2J_{n+1} m_{n+1}) G_{n3}^F(T, J_n, m_{n1}, m_{n-1}, m_{n+1}) \right], \end{aligned} \quad (4.42)$$

e

$$\langle \mathcal{H} \rangle_\ell^F = -\frac{1}{2} \left[ J_s^2 \beta (\eta_x + \eta_y) G_{\ell 1}^F(T, J_s, m_\ell, m_{\ell-1}) + J_s G_{\ell 2}^F(T, J_s, m_\ell, m_{\ell-1}) + \right.$$

$$(6J_s m_\ell + 2J m_{\ell-1}) G_{\ell 3}^F(T, J_s, m_\ell, m_{\ell-1}) \Big]. \quad (4.43)$$

Os coeficientes encontrados nas Eqs.(4.41)-(4.43) são obtidos quando aplicado a técnica sugerida, da mesma forma quando calculamos a magnetização média do filme fino. Para maiores detalhes veja apêndice B.

Resolvendo numericamente o conjunto de Eqs.(4.23)-(4.25), para  $\ell, T, \eta_x, \eta_y$  e  $J_s/J$  fixos, encontramos as magnetizações de cada camada, que substituídas nas Eqs.(4.41)-(4.43) obtemos as energias médias por camada, então definido a energia média total por

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \frac{1}{\ell} \sum_{n=1}^{\ell} \langle \mathcal{H} \rangle_n, \quad (4.44)$$

encontraremos o calor específico por derivação numérica do comportamento da energia interna  $u(T) \equiv \langle \mathcal{H} \rangle$  em função da temperatura. Este procedimento tem sido utilizado recentemente por Kaneyoshi[23] para tratar do filme fino Ising ferromagnético com campo transversal.

## 4.4 Filme Fino Antiferromagnético

Em comparação ao filme fino ferromagnético discutido na seção anterior, o filme fino antiferromagnético tem sido pouco estudado[24, 25, 26]. Nesse sistema as flutuações quânticas podem produzir novos resultados em baixas temperaturas em sistemas não-homogêneos, como por exemplo, no modelo de Heisenberg frustrado[27] ou super-redes antiferromagnéticas[28]. Na Ref.[25] o perfil da magnetização em baixas temperaturas foi analisado, e uma oscilação nas magnetizações das camadas do material foi observada para as quatro primeiras camadas. Em altas temperaturas esse comportamento desaparece adquirindo o comportamento comum próximo da temperatura crítica observado em vários sistemas incluindo o filme fino ferromagnético[29]-[33]. Nos prévios trabalhos[11, 20], desenvolvemos a técnica do operador diferencial para tratar do filme fino ferromagnético no modelo de Heisenberg clássico[20] e quântico[11, 20], onde a temperatura crítica da rede cúbica simples foi obtida.

A partir da metodologia apresentada na seção anterior, nós estudaremos agora o filme fino quântico antiferromagnético, na presença de um campo externo longitudinal, numa rede cúbica simples composta de  $\ell$  camadas na direção  $\vec{Oz}$ . Esse sistema é descrito pelo Hamiltoniano

(4.1) com a permuta  $J_{ij} \rightarrow -J_{ij}$ . Portanto, com a aplicação da metodologia encontramos as propriedades magnéticas magnetização e susceptibilidade dadas a seguir

#### 4.4.1 Magnetização e Susceptibilidade

A equação de estado para esse sistema é escrita sob a condição de permutação da constante de acoplamento  $K$  para  $-K$  (sendo  $K = \beta J$ ). Efetuando as mesmas manipulações algébricas, quando tratamos o filme fino ferromagnético, encontramos o seguinte conjunto de equações para as magnetizações das  $\ell$  camadas

$$m_{1,(A,B)} = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 \left[ a_{1,1kq}^{AF}(H, T, J_s, J_b) + a_{2,1kq}^{AF}(H, T, J_s, J_b) m_{2,(B,A)} + a_{3,1kq}^{AF}(H, T, J_s, J_b) m_{2,(B,A)}^2 \right] m_{1,(B,A)}^{k+q}, \quad (4.45)$$

$$m_{n,(A,B)} = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 \left[ a_{1,nkq}^{AF}(H, T, J_b) + a_{2,nkq}^{AF}(H, T, J_b) (m_{n-1,(B,A)} + m_{n+1,(B,A)}) + a_{3,nkq}^{AF}(H, T, J_b) m_{n-1,(B,A)} m_{n+1,(B,A)} + a_{4,nkq}^{AF}(H, T, J_b) (m_{n-1,(B,A)} + m_{n+1,(B,A)})^2 + a_{5,nkq}^{AF}(H, T, J_b) m_{n-1,(B,A)}^2 m_{n+1,(B,A)}^2 + a_{6,nkq}^{AF}(H, T, J_b) \left( m_{n-1,(B,A)}^2 m_{n+1,(B,A)} + m_{n-1,(B,A)} m_{n+1,(B,A)}^2 \right) \right] m_{n,(B,A)}^{k+q}, \quad (4.46)$$

e

$$m_{\ell,(A,B)} = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 \left[ a_{1,\ell kq}^{AF}(T, J_s, J_b) + a_{2,\ell kq}^{AF}(T, J_s, J_b) m_{\ell,(B,A)} + a_{3,\ell kq}^{AF}(T, J_s, J_b) m_{\ell-1,(B,A)}^2 \right] m_{\ell,(B,A)}^{k+q}, \quad (4.47)$$

onde os coeficientes  $a_{1,1kq}^{AF}(H, T, J_s, J_b)$ ,  $a_{2,1kq}^{AF}(H, T, J_s, J_b)$ ,  $a_{3,1kq}^{AF}(H, T, J_s, J_b)$ ,  $a_{1,nkq}^{AF}(H, T, J_b)$ ,  $a_{2,nkq}^{AF}(H, T, J_b)$ ,  $a_{3,nkq}^{AF}(H, T, J_b)$ ,  $a_{4,nkq}^{AF}(H, T, J_b)$ ,  $a_{5,nkq}^{AF}(H, T, J_b)$ ,  $a_{6,nkq}^{AF}(H, T, J_b)$ ,  $a_{1,\ell kq}^{AF}(H, T, J_s, J_b)$ ,  $a_{2,\ell kq}^{AF}(H, T, J_s, J_b)$  e  $a_{3,\ell kq}^{AF}(H, T, J_s, J_b)$  são apresentados no apêndice B para o caso AF.

Com o objetivo de estudarmos a termodinâmica do sistema AF introduzimos duas variáveis:

a magnetização total  $m = \frac{1}{2}(m_A + m_B)$  e a magnetização *staggered*  $m_s = \frac{1}{2}(m_A - m_B)$ , onde  $m_s$  é considerada como o parâmetro de ordem de sistema, ou seja, na região crítica ( $T = T_N$  temperatura de Néel)  $m_s \rightarrow 0$ . A introdução das variáveis  $m_A = m + m_s$  e  $m_B = m - m_s$  nas equações de estado desse sistema gera um conjunto de  $2\ell$  equações auto-consistentes a serem resolvidas. Na ausência de campo externo podemos aplicar a condição de contorno  $m_A = -m_B = m_s$  nas Eqs.(4.45)-(4.47), ficando portanto a magnetização total nula ( $m = 0$ ), resultando num sistema de equações com a forma das Eqs.(4.14)-(4.16) e os coeficientes dados no apêndice B.

No processo do entendimento de um filme fino AF, em que agora estamos interessados, no cálculo da susceptibilidade magnética é importante introduzirmos o chamado campo *staggered*  $H_{st}$  conjugado ao parâmetro de ordem  $m_s$  (magnetização *staggered*)[34]. 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 *Zeeman* inserido no Hamiltoniano (4.1) será dado por

$$\mathcal{H}_A = -H_A \sum_{i \in A} S_{iA}^z, \quad (4.48)$$

enquanto nos sítios pertencentes a subrede B (spin *down*) teremos

$$\mathcal{H}_B = -H_B \sum_{i \in B} S_{iB}^z, \quad (4.49)$$

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

$$\chi_{n,st} = \left( \frac{\partial m_{n,s}}{\partial H_{st}} \right)_{H_{st}=0}. \quad (4.50)$$

Por outro lado, definimos a susceptibilidade total, ou direta,  $\chi$  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 para cada camada

$$\chi_n = \left( \frac{\partial m_n}{\partial H} \right)_{H_{st}=0}. \quad (4.51)$$

Assim, derivando as Eqs.(4.45) - (4.47) em relação aos campos  $H_{st}$  e  $H$ , fazendo em seguida  $H_{st} = 0$  (e  $H = 0$ ), encontramos da susceptibilidade *staggered* e total, na ausência de campo, para cada camada do filme dadas por

$$\chi_{1\nu} = G_1^{AF}(T, J_s, J, m_1, m_2)\chi_{1\nu} + G_2^{AF}(T, J_s, J, m_1, m_2)\chi_{2\nu} + G_3'^{AF}(T, J_s, J, m_1, m_2), \quad (4.52)$$

$$\begin{aligned} \chi_{n\nu} = & G_{n-1}^{AF}(T, J, m_{n-1}, m_n, m_{n+1})\chi_{n-1,\nu} + G_n^{AF}(T, J, m_{n-1}, m_n, m_{n+1})\chi_{n,\nu} + \\ & G_{n+1}^{AF}(T, J, m_{n-1}, m_n, m_{n+1})\chi_{n+1,\nu} + G_n'^{AF}(T, J, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}), \end{aligned} \quad (4.53)$$

e

$$\chi_{\ell\nu} = G_\ell^{AF}(T, J_s, J, m_\ell, m_{\ell-1})\chi_{\ell\nu} + G_{\ell-1}^{AF}(T, J_s, J, m_\ell, m_{\ell-1})\chi_{\ell-1,\nu} + G_\ell'^{AF}(T, J_s, J, m_\ell, m_{\ell-1}), \quad (4.54)$$

onde  $\nu = t$  para a susceptibilidade total  $\chi$  e  $\nu = st$  para susceptibilidade *staggered*  $\chi_{st}$ .

Resolvendo as Eqs.(4.52)-(4.54) encontramos a dependência de  $\chi_{st}$  e  $\chi$  com a temperatura do filme a campo nulo em cada camada. Substituindo estas susceptibilidade na Eq.(4.18) encontramos as respectivas susceptibilidades do filme de tamanho  $\ell$ .

#### 4.4.2 Limite de Estabilidade da Fase Antiferromagnética

Na presença de um campo externo longitudinal, o filme fino antiferromagnético Heisenberg é definido aqui como filme fino metamagneto quântico. Obtemos a linha crítica da transição de fase de segunda ordem, fronteira entre a fase antiferromagnética (AF)( $m_{ns} \neq 0$ ) na região de baixos campos e a fase paramagnética (P)( $m_{ns} = 0$ ) em altos campos, fazendo  $m_{ns} \rightarrow 0$  com a aproximação da temperatura do sistema de seu valor crítico, onde tomamos apenas os termos

lineares de  $m_{n_s}$  nas Eqs.(4.45)-(4.47) quando fazemos a substituição  $m_A = m + m_s$  e  $m_B = m - m_s$ . Este processo gera um conjunto de  $2\ell$  equações que são resolvidas simultaneamente produzindo o diagrama  $T - H$  e  $m_{n_o}$  (que corresponde ao valor de  $m_n$  quando  $m_{n_s} = 0$ , isto é, na linha crítica) para cada intensidade do campo externo  $H$  e o tamanho  $\ell$  do filme. No capítulo 3 desse trabalho estudamos a criticalidade do *bulk* do metamagneto Heisenberg usando da mesma metodologia.

Por outro lado, considerando  $H = 0$  estudamos a dependência da temperatura crítica com o tamanho do filme e a razão da interação de troca  $J_s$  (superfície) e  $J$  (*bulk*)  $\Delta \equiv \frac{J_s}{J} - 1$ . Neste caso teremos  $m_n = 0$  para todo intervalo de temperatura com  $m_{n_s} \rightarrow 0$ . O conjunto de equações composto pelas Eqs.(4.45)-(4.47) torna-se

$$m_{s1} = [a_{1,101}^{AF}(0, T, J_s, J) - a_{1,110}^{AF}(0, T, J_s, J)]m_{s1} + a_{2,100}^{AF}(0, T, J_s, J)m_{s2}, \quad (4.55)$$

$$m_n = a_{2,n00}^{AF}(0, T, J)m_{s,n-1} + [a_{1,n01}^{AF}(0, T, J) - a_{1,n10}^{AF}(0, T, J)]m_{s,n} + a_{2,n00}^{AF}(0, T, J)m_{s,n+1}, \quad (4.56)$$

$$m_{s\ell} = [a_{1,101}^{AF}(0, T, J_s, J) + a_{1,110}^{AF}(0, T, J_s, J)]m_{s\ell} + a_{2,100}^{AF}(0, T, J_s, J)m_{s,\ell-1}, \quad (4.57)$$

com

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{1,101}^{AF}(0, T, J_s, J) = 3\alpha_{x_s}^3 \alpha_{s_y}^2 \beta_{y_s} \alpha_x \alpha_y f(x, y) |_{x,y=0} \\ a_{1,110}^{AF}(0, T, J_s, J) = 3\alpha_{x_s}^2 \alpha_{s_y}^3 \beta_{x_s} \alpha_x \alpha_y f(x, y) |_{x,y=0} \\ a_{2,100}^{AF}(0, T, J_s, J) = \alpha_{x_s}^3 \alpha_{s_y}^3 (\alpha_x \beta_y - \alpha_y \beta_x) f(x, y) |_{x,y=0} \\ a_{1,n01}^{AF}(0, T, J_b) = 3\alpha_x^5 \alpha_y^4 \beta_y f(x, y) |_{x,y=0} \\ a_{1,n10}^{AF}(0, T, J_b) = 3\alpha_x^4 \alpha_y^5 \beta_x f(x, y) |_{x,y=0} \\ a_{2,n00}^{AF}(0, T, J_b) = (\alpha_x^5 \alpha_y^4 \beta_y - \alpha_x^4 \alpha_y^5 \beta_x) f(x, y) |_{x,y=0} \end{array} \right. \quad (4.58)$$

onde a função  $f(x, y)$  é dada por

$$f(x, y) = \frac{-\frac{(x+y)}{W_n^-(x,y)} \sinh [W_n^-(x, y)] - \frac{(x-y)}{W_n^+(x,y)} \exp(2K_n) \sinh [W_n^+(x, y)]}{\cosh [W_n^-(x, y)] + \exp(2K_n) \cosh [W_n^+(x, y)]}, \quad (4.59)$$

sendo  $W_n^\pm(x, y) = \sqrt{(x \mp y)^2 + K_n^2 (\eta_x \pm \eta_y)^2}$ , com  $K_n = \beta J_n$ ,  $K_1 = K_s$  e  $K_{n \neq 1} = K_b$ .

A partir daqui seguiremos os mesmos passos utilizados quando calculamos a linha crítica para o filme fino F.

### 4.4.3 Energia interna e Calor Específico

Analisando os sistema considerando que as interações de troca sejam do tipo AF, ou seja, permutando  $K \rightarrow -K$  e seguindo a metodologia apresentada para o caso anterior, F, encontramos o seguinte resultado para a energia interna AF:

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{H} \rangle_1^{AF} &= -\frac{1}{2} \left\{ J_s^2 \beta \eta_x G_{11}^{AF}(m_1, m_2, m_{s_1}, m_{s_2}, H, T, J_s) + J_s^2 \beta \eta_y G_{12}^{AF}(m_1, m_2, m_{s_1}, m_{s_2}, H, T, J_s) + \right. \\ & J_s G_{13}^{AF}(m_1, m_2, m_{s_1}, m_{s_2}, H, T, J_s) + [3J_s(m_1 - m_{s_1}) + J(m_2 - m_{s_2})] \\ & G_{14}^{AF}(m_1, m_2, m_{s_1}, m_{s_2}, H, T, J_s) + [3J_s(m_1 + m_{s_1}) + J(m_2 + m_{s_2})] \\ & \left. G_{15}^{AF}(m_1, m_2, m_{s_1}, m_{s_2}, H, T, J_s) \right\} - H m_1 \end{aligned} \quad (4.60)$$

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{H} \rangle_n^{AF} &= -\frac{1}{2} \left\{ J^2 \beta \eta_x G_{n1}^{AF}(m_{n-1}, m_n, m_{n+1}, m_{s_{n-1}}, m_{s_n}, m_{s_{n+1}}, H, T, J) + \right. \\ & J^2 \beta \eta_y G_{n2}^{AF}(m_{n-1}, m_n, m_{n+1}, m_{s_{n-1}}, m_{s_n}, m_{s_{n+1}}, H, T, J) + \\ & J G_{n3}^{AF}(m_{n-1}, m_n, m_{n+1}, m_{s_{n-1}}, m_{s_n}, m_{s_{n+1}}, H, T, J) + [J(m_{n-1} - m_{s_{n-1}}) + 3J(m_n - m_{s_n}) + \\ & J(m_{n+1} - m_{s_{n+1}})] G_{n4}^{AF}(m_{n-1}, m_n, m_{n+1}, m_{s_{n-1}}, m_{s_n}, m_{s_{n+1}}, H, T, J) + \\ & [J(m_{n-1} + m_{s_{n-1}}) + 3J(m_n + m_{s_n}) + J(m_{n+1} + m_{s_{n+1}})] \\ & \left. G_{n5}^{AF}(m_{n-1}, m_n, m_{n+1}, m_{s_{n-1}}, m_{s_n}, m_{s_{n+1}}, H, T, J) \right\} - H m_n \end{aligned} \quad (4.61)$$

$$\begin{aligned}
\langle \mathcal{H} \rangle_\ell^{AF} = & -\frac{1}{2} \left\{ J_s^2 \beta \eta_x G_{\ell 1}^{AF}(m_\ell, m_{\ell-1}, m_{s_\ell}, m_{s_{\ell-1}}, H, T, J_s) + J_s^2 \beta \eta_y G_{\ell 2}^{AF}(m_\ell, m_{\ell-1}, m_{s_\ell}, m_{s_{\ell-1}}, H, T, J_s) + \right. \\
& J_s G_{\ell 3}^{AF}(m_\ell, m_{\ell-1}, m_{s_\ell}, m_{s_{\ell-1}}, H, T, J_s) + [3J_s(m_\ell - m_{s_\ell}) + J(m_{\ell-1} - m_{s_{\ell-1}})] \\
& G_{\ell 4}^{AF}(m_\ell, m_{\ell-1}, m_{s_\ell}, m_{s_{\ell-1}}, H, T, J_s) + [3J_s(m_\ell - m_{s_\ell}) + J(m_{\ell-1} - m_{s_{\ell-1}})] \\
& \left. G_{\ell 5}^{AF}(m_\ell, m_{\ell-1}, m_{s_\ell}, m_{s_{\ell-1}}, H, T, J_s) \right\} - H m_\ell
\end{aligned} \tag{4.62}$$

onde apresentamos o coeficientes representados pelas funções  $G_{nj}^{AF}$  ( $j = 1, 2, 3, 4, 5$ ) no apêndice B.

O calor específico será determinado de forma numérica a partir da curva  $u(T)$ .

## 4.5 Resultados e Discussões

### 4.5.1 Propriedades Termodinâmicas

Apresentamos a seguir o comportamento das grandezas termodinâmicas encontradas no tratamento matemático desenvolvido nesse capítulo: magnetização, susceptibilidade, energia interna e calor específico. Este último foi obtida de forma numérica diretamente do gráfico  $u(T)$  através de primeira derivada em relação à temperatura reduzida  $k_B T/J$ . Todos os cálculos numéricos foram desenvolvidos com uso do método de Newton-Raphson para sistemas de equações não lineares associado à decomposição LU (matriz triangular inferior e superior). Este estudo foi desenvolvido para um filme fino com diferentes números de camadas com interações do tipo F e AF.

Inicialmente, mostramos na Fig.(4.1) o comportamento da magnetização total de um filme fino F em função da temperatura reduzida para vários valores de  $\ell$ , Fig.(4.1a), e para um valor fixo de  $\ell$  com vários valores do parâmetro  $J_s/J$ , Figs.(4.1b) e (4.1c), comparando as curvas com a obtida para o *bulk*. A medida que crescemos o número de camadas na estrutura do filme, a magnetização tende ao comportamento do *bulk*, ocasionado pela diminuição dos efeitos de superfície. Para  $J_s/J \leq (J_s/J)_{crítico}$  a superfície está fracamente acoplada e a magnetização do filme é menor do que o *bulk*, e quando  $J_s/J > (J_s/J)_{crítico}$  o efeito de superfície é predominante de modo que a magnetização do filme é superior a da magnetização do bulk. Nas Figs.(4.2a e

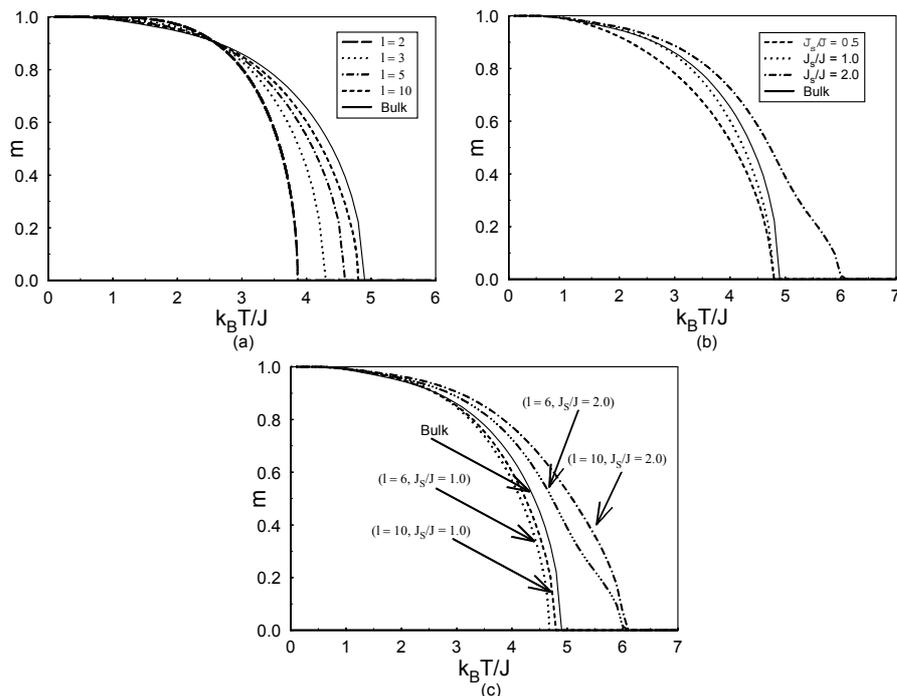


Figura 4.1: Magnetização do filme fino Heisenberg ferromagnético em função da temperatura para vários valores de  $\ell$  com parâmetro  $J_s/J = 1.0$  (a), para  $\ell = 10$  e vários valores de  $J_s/J$  (b) e valores de  $\ell$  e  $J_s/J$  (c).

b) temos o comportamento da magnetização *staggered* para o filme fino Heisenberg AF, onde observamos comportamentos similares ao do caso F.

A existência de ordenamentos diferenciados variando o valor da razão  $J_s/J$ , na análise do comportamento da magnetização em filme fino próximo à criticalidade, é observada na Fig.(4.3) para o caso F de tamanho  $\ell = 10$ . Na Fig.(4.3a) usamos  $J_s/J = 1.0$  e observamos um efeito maior na magnetização, quanto a sua mudança, em spins presentes à camadas próximas as superfícies ( $\ell = 1$  e  $\ell = 10$ ) que aumenta com o aumento da temperatura. Neste caso, temos  $J_s/J < (J_s/J)_{crit.} = 1.349$  e portanto o efeito de superfície é menos predominante do que o bulk, conseqüentemente a medida que penetramos no interior (aumentando n), o sistema fica mais correlacionado aumentando assim a magnetização monotonicamente com aumento de n. Observe a simetria na curva  $m_n(T)$  em função de n, ou seja,  $m_1(T) = m_\ell(T)$ ,  $m_2(T) = m_{\ell-1}(T), \dots$ . Em particular, para  $\ell = 10$  temos:  $m_1(T) = m_{10}(T)$ ,  $m_2(T) = m_9(T)$ ,  $m_3(T) =$

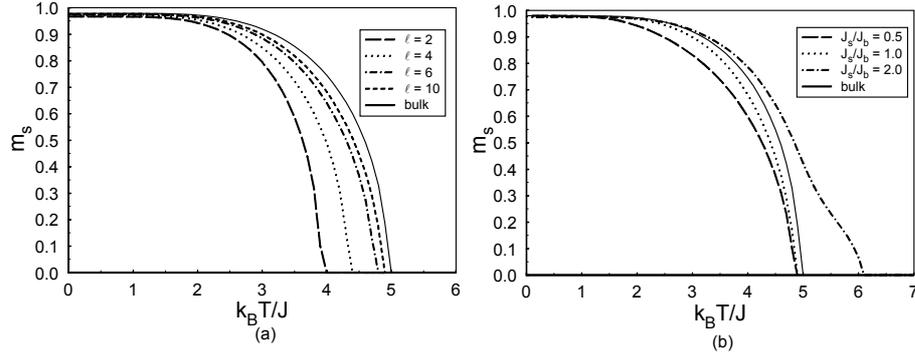


Figura 4.2: Comportamento da magnetização do filme fino Heisenberg antiferromagnético em função da temperatura reduzida para vários valores de  $\ell$  com  $J_s/J = 1.0$ (a) e vários valores de  $J_s/J$  com  $\ell = 10$ (b).

$m_8(T)$ ,  $m_4(T) = m_7(T)$  e  $m_5(T) = m_6(T)$ . Para  $T = T_c(\ell, J_s/J)$  as magnetizações de todas as camadas  $n = 1, 2, \dots, \ell$  se anulam simultaneamente, por isto analisamos as curvas para  $T \leq T_c$ . Por outro lado, a medida que a interação da superfície cresce em relação ao *bulk* ( $J_s/J$ ) temos um fortalecimento magnético da superfície, que será refletida com um valor da magnetização das bordas maior do que o interior (*bulk*) e ocorre quando  $J_s/J \geq (J_s/J)_{crit.}$ . Nas Fig.(4.3b e c) temos os comportamentos de  $m_n$  versus  $n$  para  $J_s/J = (J_s/J)_{crit.}$  e  $J_s/J = 2.0 > (J_s/J)_{crit.}$ , respectivamente. Notamos nestes dois últimos casos, que devido ao forte acoplamento da superfície (efeito de bordas) a magnetização decresce a medida que penetramos no interior (*bulk*) do sistema.

Na Fig.(4.4) temos o comportamento da susceptibilidade total do filme fino F em função da temperatura reduzida  $k_B T/J$  para  $\ell = 10$  e vários valores da razão  $J_s/J$ , na ausência de campo externo. Observamos, também, a influência da interação entre superfície-bulk ao ponto em que o sistema apresenta transição de fase, onde inicialmente vimos o mesmo efeito na magnetização do sistema. A susceptibilidade *staggerd* associada ao parâmetro de ordem para o filme fino AF terá o mesmo comportamento do apresentado para o filme fino F, ou seja, há também ocorrência de divergência quando  $T = T_N$ , onde  $T_N > T_c$ .

Na Fig.(4.5) mostramos o comportamento da susceptibilidade total de um filme fino AF quando variamos os valores da interação superfície-*bulk* para um filme fino com  $\ell = 10$  camadas.

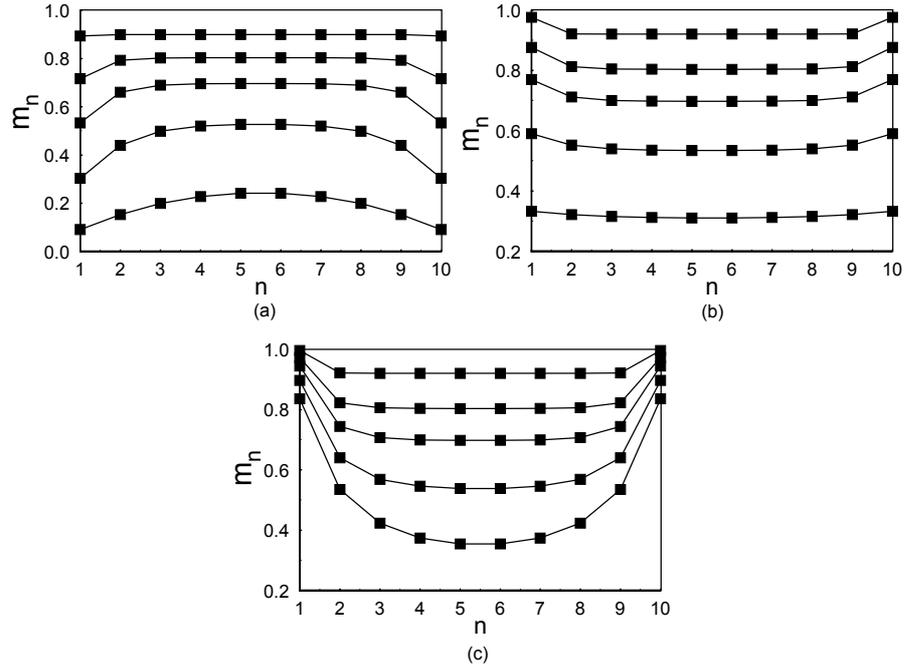


Figura 4.3: Perfil da magnetização de cada camada de um filme fino Heisenberg ferromagnético. Na ordem decrescente apresentamos as curvas para  $\frac{T}{T_c(\ell=10)} = 0.5, 0.7, 0.8, 0.9$  e  $0.98$  com o parâmetro  $\frac{J_s}{J} = 1.0$ (a),  $(\frac{J_s}{J})_{crit.} = 1.349$ (b) e  $\frac{J_s}{J} = 2.0$ (c).

Neste caso, a transição de fase é caracterizada pelo ponto de máximo em  $T = T_N$ .

A energia interna e o calor específico são mostrados nas Figs.(4.6) e (4.7), respectivamente, para os filmes finos F e AF em função da temperatura com os diferentes valores das interações de troca. Observamos novamente a influência do parâmetro da interação de troca no sistema. Temos a descontinuidade do calor específico na temperatura crítica, com  $T_N < T_c$  de acordo com resultados de grupo de renormalização[35].

#### 4.5.2 Filme Fino Metamagneto

No capítulo anterior apresentamos as propriedades termodinâmicas do metamagneto quântico de spin  $1/2$  para uma rede cúbica simples com aglomerado finito no interior do sistema, ou seja, o *bulk* onde observamos a influência da interação de troca interplanos descrita com  $J_{\perp} = \lambda J$ . Apresentaremos a seguir os resultados das propriedades termodinâmicas para um

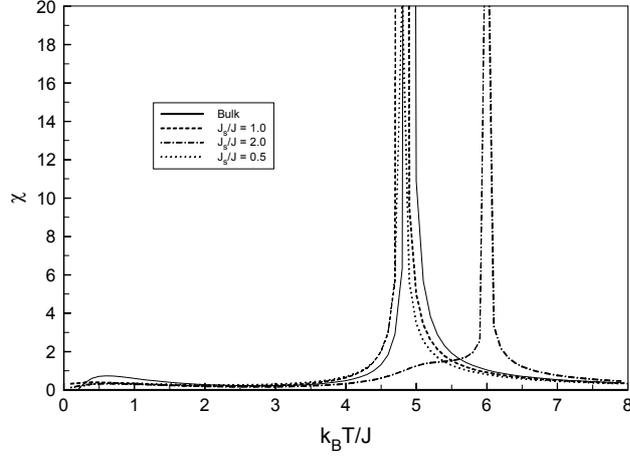


Figura 4.4: Comportamento da susceptibilidade longitudinal de um filme fino Heisenberg quântico ferromagnético para uma rede cúbica simples de spin  $1/2$  para  $\ell = 10$  com vários valores do parâmetro  $\frac{J_s}{J}$ .

filme fino metamagneto contendo  $\ell = 10$  camadas via EFT-2. Neste caso, a interação de troca interplanos é definida por  $J_{\perp} = J$  (como o fizemos para o filme na ausência de campo). Mostramos também o estudo realizado nesse sistema via campo médio (MFT). A influência do campo externo no sistema produz mudança no comportamento das propriedades termodinâmicas do filme fino levando a diferentes pontos no qual o sistema apresenta transição de fase.

Resolvendo numericamente o conjunto de Eqs.(4.45)-(4.47), para  $T, H, \eta_x$  e  $\eta_y$  fixos, obtemos a dependência da magnetização total  $m$  e *staggered*  $m_s$  em função da temperatura. Na Fig.(4.8) mostramos as magnetizações  $m_s$  e  $m$  em função da temperatura para diferentes campos  $H$ . O aumento no valor de  $H$  faz crescer a magnetização total  $m$  do filme enquanto a magnetização  $m_s$  diminui. A influência do campo se traduz no ordenamento dos spins: quando  $H$  aumenta mais spins são flipados na sua direção e a magnetização total aumenta. Na temperatura crítica  $T = T_N(H)$  a magnetização *staggered*  $m_s$  vai a zero segundo uma lei de potência de  $t = \frac{T - T_N}{T_N}$  com  $\beta = 1/2$  ( $m_s \simeq -t^\beta$ ) e a magnetização total  $m$  apresenta um ponto de máximo. A medida

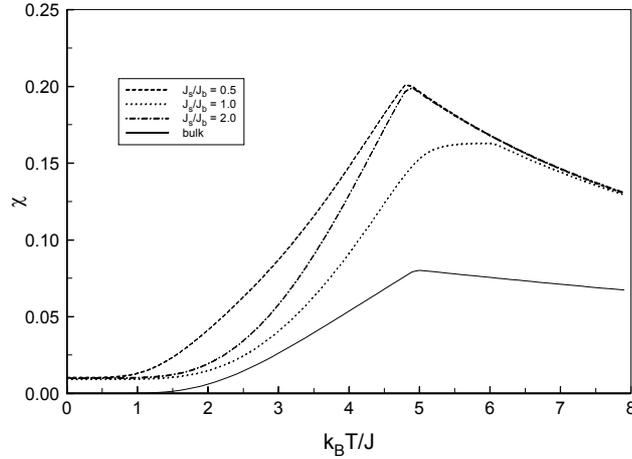


Figura 4.5: Susceptibilidade longitudinal de um filme fino Heisenberg quântico antiferromagnético para uma rede cúbica simples de spin 1/2 para  $\ell = 10$  com vários valores do parâmetro  $\frac{J_s}{J}$ .

que o campo cresce  $T_N(H)$  decresce.

Quando a aproximação usada é a de campo médio (MFT-2), as expressões para as magnetizações de subrede (A e B), Eq.(4.9), são dadas calculando a média dos argumentos das funções hiperbólicas[12]. Na Fig.(4.9) mostramos as curvas  $m_s(T)$  e  $m(T)$  via MFT-2 para o filme fino metamagneto, com  $\ell = 10$  camadas, para vários valores do campo  $H$ . Comparando as curvas das Figs. (4.8) com as das Figs.(4.9) verificamos claramente a equivalência (qualitativa) dos resultados, mas isto ficará justificado o uso de EFT-2 quando analisarmos o diagrama de fase.

O diagrama de fase do filme fino metamagneto no plano  $T - H$  é apresentado na Fig.(4.10) para  $J_s/J = 1.0$  e vários tamanhos do filme  $\ell = 2, 3, 5, 10$  que são comparados ao resultado do *bulk* ( $\ell = \infty$ ), (ver capítulo 3). Obtemos a curva crítica  $T_N(H)$  fazendo  $m_{ns} \rightarrow 0$  quando aproximamos da temperatura crítica do sistema, onde tomamos apenas os termos lineares de  $m_{ns}$  nas Eqs.(4.45)-(4.47). A linha crítica de transição de fase de segunda ordem é a fronteira entre a fase antiferromagnética (AF)( $m_{ns} \neq 0$ ) na região de baixos campos e a fase paramagnética (P)( $m_{ns} = 0$ ) na região de altos campos. Observamos que os diagramas de fases são

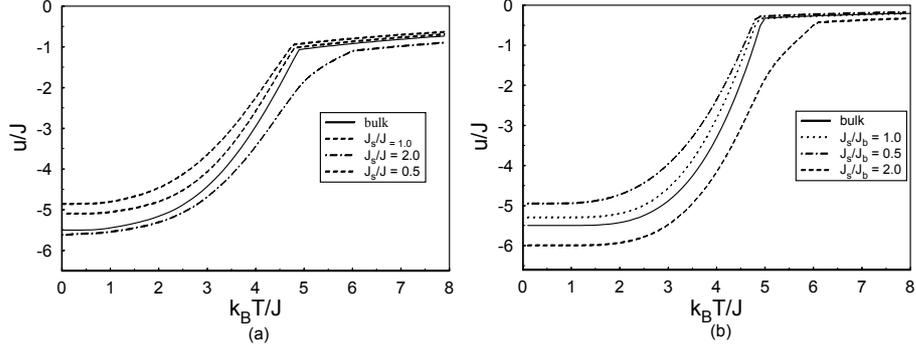


Figura 4.6: Energia interna do filme fino com  $\ell = 10$  camadas para diferentes valores de  $\frac{J_s}{J_b}$  numa rede cúbica simples descrita pelo modelo de Heisenberg quântico de spin  $1/2$ : (a) caso F e (b) caso AF.

diferentes quando comparamos o *bulk* com o filme fino. Os resultados mostram que em  $T = 0$  a transição de fase ocorre para  $\ell \geq 3(3d)$ ,  $1 < \ell < 3$  (região intermediária) e  $\ell = 1(2d)$  com  $H_c(\ell) = 6.224, 5.210$  e  $4.224$ , respectivamente, indicando a mudança no comportamento crítico do sistema. Há neste caso um comportamento distinto de  $T_N(H, \ell)$  quando  $\ell = 3$  na região de baixa temperatura (limite crítico da dimensionalidade do sistema), onde observamos a mudança na curvatura na qual o sistema vem tendendo para um campo crítico em duas dimensões mas finalmente atinge um valor de campo crítico tridimensional. Este fato mostra a presença de um *crossover*  $2d \rightarrow 3d$ , de acordo com medidas experimentais[5].

Na Fig.(4.11), para  $\ell = 10$  e  $J_s/J = 1.0$ , mostramos a susceptibilidade magnética total em função da temperatura para diversos valores do campo  $H$  na teoria EFT-2 [Fig.(4.11a)] e MFT-2 [Fig.(4.11b)]. Observamos que com o aumento do campo  $H$  o ponto de máximo desloca-se de forma gradual em direção a  $T = 0$ . Para altos valores do campo magnético ( $2 \lesssim H/J \leq H_c/J$ ), observamos um comportamento anômalo em baixas temperaturas semelhante ao comportamento para o *bulk* ( $\ell = \infty$ ) na Fig.(3-8b). Esta analogia entre o filme Heisenberg AF e o Heisenberg AF quase-2d para a susceptibilidade na região de baixas temperaturas, certamente poderá ser explicada na discussão de filmes finos com interações pequenas entre camadas.

Os resultados da energia interna e calor específico são apresentados nas Figs.(4.12) e (4.13), respectivamente. O calor específico obtido por EFT-2 (4.13a) e MFT-2 (4.13b) são bastantes

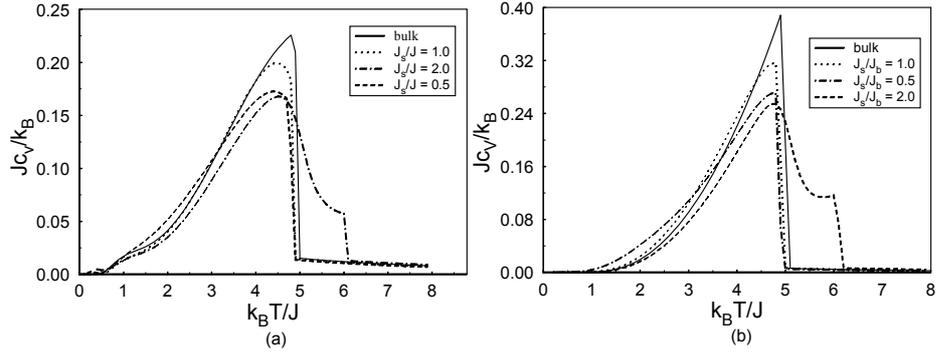


Figura 4.7: Dependência do calor específico do filme fino Heisenberg isotrópico de spin 1/2 obtida por derivação numérica dos resultados da energia interna da Fig.(4.6): (a) caso F e (b) caso AF. Apresentamos as curvas para  $\ell = 10$  e  $\ell = \infty$ .

similares, onde não observamos nenhum comportamento anômalo em baixas temperaturas.

### 4.5.3 Comportamento das Temperaturas Críticas

Na Fig.(4.14) apresentamos a temperatura crítica como função do tamanho  $\ell$  para diferentes valores da interação superfície-bulk  $\Delta \equiv \frac{J_s}{J_b} - 1$  no filme fino com valores de spins finito [ $T_c$  e  $T_N$  Heisenberg quântico] e infinito [ $T_c$  Heisenberg clássico]. Neste caso vemos que os diagramas de fase são diferentes dos apresentados, no capítulo 2 desse trabalho, para um sistema semi-infinito. A principal diferença está no fato do filme fino não apresentar temperaturas críticas  $T_{c,N}^s$  (temperatura crítica de superfície) e  $T_{c,N}^b$ , mas uma temperatura bem definida  $T_{c,N}$  a qual depende do tamanho do filme. O novo ponto multicrítico ( $\Delta_c^{F,AF}$ ) pode ser definido com um valor particular de  $\Delta^{F,AF}$  onde a temperatura crítica do filme é  $T_{c,N}(\ell)$  não depende de  $\ell$ . O valor numérico de  $\Delta_c^{F,AF}$  é o mesmo do encontrado para o sistema semi-infinito. A Fig.(4.14) mostra que para  $\Delta^{F,AF} > \Delta_c^{F,AF}$  a temperatura crítica  $T_{c,N}(\ell)$  do filme é menor do que a temperatura  $T_{c,N}^b$  do *bulk*, e aumenta com o crescimento do valor de  $\ell$  aproximando de forma assintótica da temperatura  $T_{c,N}^b$ . Para  $\Delta^{F,AF} = \Delta_c^{F,AF}$ , a temperatura crítica  $T_{c,N}(\ell)$  independe de  $\ell$ , e é igual a  $T_{c,N}^b$ . Quando  $\Delta^{F,AF} < \Delta_c^{F,AF}$ , a temperatura crítica do filme é maior do que  $T_{c,N}^b$  e  $T_{c,N}^s$ , se comparado ao sistema semi-infinito, diminuindo com o aumento de  $\ell$ . Comparando as temperaturas críticas do filme fino F com AF temos  $T_N(\ell) > T_c(\ell)$  para o caso

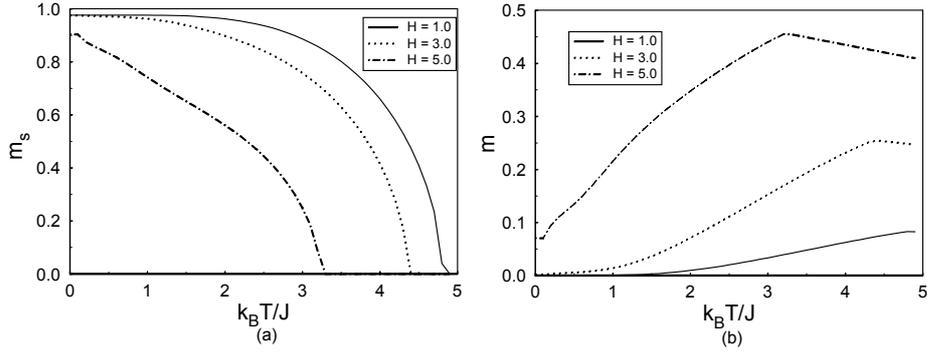


Figura 4.8: Dependência da magnetização em função da temperatura reduzida para o filme fino metamagneto via EFT-2 com  $J_s/j = 1.0$  e vários valores de  $H$ : (a) magnetização *staggered* e (b) magnetização da total.

quântico e  $T_N(\ell) = T_c(\ell)$  para o clássico. Para o modelo clássico  $D$ -vetorial a criticalidade é invariante pela troca do sinal da interação de troca no Hamiltoniano, isto é, o modelo  $D$ -vetorial F é isomorfo ao AF, na ausência de campo externo.

Na Fig.(4.15) apresentamos a dependência da temperatura reduzida em função da razão da interação de troca superfície-*bulk*  $J_s/J_b$  para vários valores de  $\ell$  para o filme fino Heisenberg quântico [Fig.(4.15a) F e Fig.(4.15b) AF] e clássico [Fig.(4.15c)]. Acima do valor crítico  $\Delta_c^F = 0.349$ ,  $\Delta_c^{AF} = 0.346$  e  $\Delta_c = 0.332$  [linha pontilhada na Fig.(4.15)] para o sistema semi-infinito quântico (F e AF) e clássico, respectivamente, a temperatura de transição aumenta com o incremento de  $\ell$  no filme, enquanto que abaixo de  $\Delta_c$  ela diminui. Isto ocorre porque a influência da interação de troca da superfície,  $J_s$ , diminui com o incremento de  $\ell$  e para um dado valor da razão  $J_s/J_b$  a temperatura de ordenamento global do sistema progressivamente diminui. No ponto multicrítico  $\Delta = \Delta_c^{F,AF}$ ,  $T_{c,N}(\ell)$  é independente de  $\ell$  e igual a  $T_{c,N}^b$ . Isto é observado na Fig.(4.15), onde  $T_{c,N}^b$  a  $T_{c,N}^s$  do sistema semi-infinito estão representados pelas linhas pontilhada e tracejada, respectivamente. Estudando o modelo de Heisenberg clássico, Ref.[11], para as simetrias XY ( $D = 2$ ) e Ising ( $D = 1$ ) no presente formalismo (EFT-2) para a rede cúbica simples nós encontramos as temperatura críticas reduzidas  $k_B T_c^b/J = 5.034, 5.031$  para as simetrias Ising e XY, respectivamente. Neste casos  $\Delta_c = 0.317$ (Ising) e  $\Delta_c = 0.321$ (XY) e os comportamentos dos diagramas de fase são similares ao caso do modelo de Heisenberg e

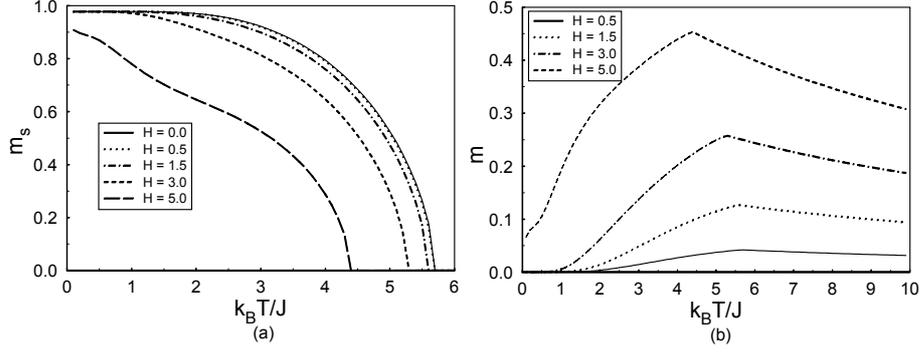


Figura 4.9: Dependência da magnetização em função da temperatura reduzida para o filme fino Heisenberg via MFT-2 com  $J_s/J = 1.0$  e vários valores de  $H$ : (a) magnetização *staggered* e (b) magnetização da total.

omitiremos neste trabalho.

A teoria de campo médio (MFT) é uma importante ferramenta no estudo de sistemas complexos na física do estado sólido e mecânica estatística. Quando uma descrição exata do comportamento crítico de um sistema não é possível, podemos analisar qualitativamente o diagrama de fase e as propriedades termodinâmica com uso da MFT. Nesse trabalho quando a aproximação MFT é usada as expressões para as magnetizações das camadas, Eq.(4.9), são dadas calculando a média dos argumentos das funções hiperbólicas<sup>3</sup>. Assim, a Eq.(4.9) para o filme fino ferromagnético com número de coordenação  $\mathfrak{z} = \mathfrak{z}_o + 2\mathfrak{z}_1$  no modelo quântico anisotrópico de Heisenberg, onde  $\mathfrak{z}_o$  corresponde ao número de coordenação de sítios pertencentes ao mesmo plano e  $\mathfrak{z}_1$  aos planos adjacentes, fica

$$m_n \simeq \frac{\Omega_- \sinh(W_-)}{\cosh(W_-) + \exp(-2K_n) \cosh[K_n(\eta_x + \eta_y)]}, \quad (4.63)$$

com

$$W_- = \sqrt{[(\mathfrak{z}_o - 1)J_n m_n + \mathfrak{z}_1 J_{n-1} m_{n-1} + \mathfrak{z}_1 J_{n+1} m_{n+1}]^2 + K_n^2 (\eta_x - \eta_y)^2}, \quad (4.64)$$

onde  $\Omega_- = \frac{[(\mathfrak{z}_o - 1)J_n m_n + \mathfrak{z}_1 J_{n-1} m_{n-1} + \mathfrak{z}_1 J_{n+1} m_{n+1}]}{W_-}$ ,  $J_o = J_{\ell+1} = 0$ ,  $J_1 = J_\ell = J_s$  e  $J_n = J_b$  para

<sup>3</sup>Fizemos esse procedimento no Capítulo 2 desse trabalho para o modelo de Ising como exemplo.

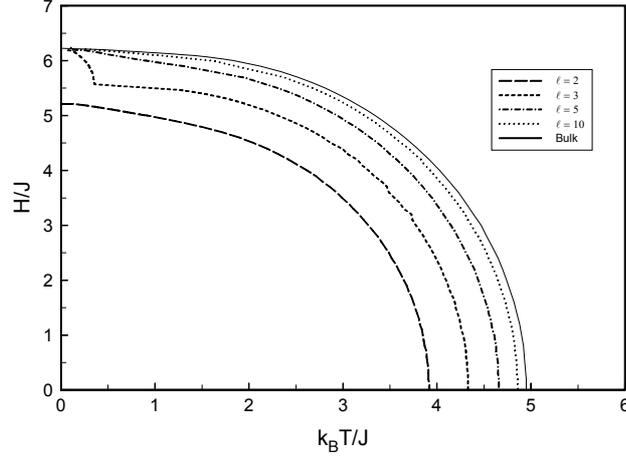


Figura 4.10: Diagrama de fase no plano  $H - T$  para o filme fino Heisenberg quântico antiferromagnético.

$n \neq 1, \ell,$

Próximo da temperatura crítica  $T_c$  podemos linearizar a Eq.(4.63) e encontrarmos os valores de  $T_c$  para as várias estruturas sugeridas nessa seção a partir do conjunto de equações geradas por

$$m_n = \Phi_n(K_n)[(\tilde{z}_o - 1) J_n m_n + \tilde{z}_1 J_{n-1} m_{n-1} + \tilde{z}_1 J_{n+1} m_{n+1}], \quad (4.65)$$

onde  $\Phi_n(K_n) = 2\{\cosh[K_n(\eta_x - \eta_y)] + \exp(-2K_n) \cosh[K_n(\eta_x + \eta_y)]\}^{-1} \{[K_n(\eta_x - \eta_y)] \sinh[K_n(\eta_x - \eta_y)]\}$  e  $K_n = \beta J_n$ .

Apresentamos na Fig.(4.16) a dependência da temperatura normalizada  $T_c(\ell)/T_c(bulk)$  como função do tamanho  $\ell$  do filme para o caso em que  $J_s = J_b = J$  nas redes: FCC(001), FCC(111), SC(001) e BCC(111). Observamos que o número de coordenação da rede ( $\tilde{z}_o$  e  $\tilde{z}_1$ ) é responsável pela forte dependência da temperatura  $T_c(\ell)$  com a estrutura da rede. O resultado numérico mostra que  $T_c[\text{FCC}(111)] > T_c[\text{FCC}(001)]$  em acordo com resultados experimentais para filmes finos  $Ni(001)$  e  $Ni(111)$ (estrutura de rede FCC), isto é,  $T_c[Ni(001)] < T_c[Ni(111)]$ [36].

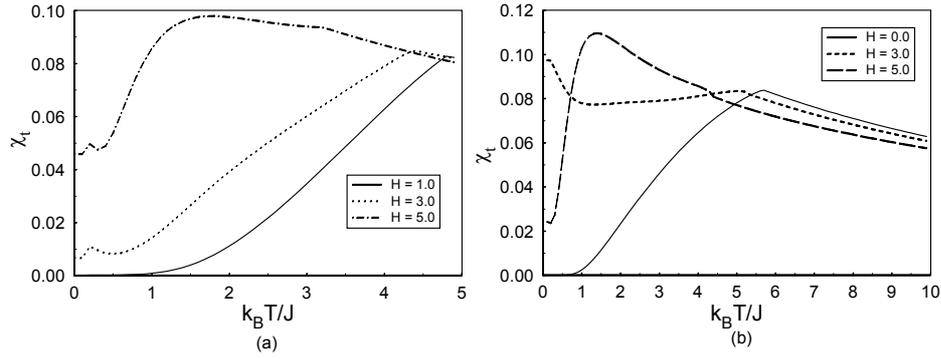


Figura 4.11: Susceptibilidade total do filme fino Heisenberg AF em função da temperatura reduzida para vários valores de  $H$  com  $J_s = J = 1.0$ : (a) via EFT-2 e (b) via MFT-2.

#### 4.5.4 Classe de Universalidade em Filmes Ultrafinos

A influência de tamanho finito no fenômeno crítico é um tópico interessante a ser considerado, em particular por causa do avanço das técnicas de crescimento epitaxial necessária para uma preparação precisa de filmes finos, e representa um importante aspecto de materiais magnéticos nos quais explorar a classe de universalidade testando teorias específicas na determinação de expoentes críticos e parâmetros de escala. Baseado em argumentos teóricos de grupo de renormalização, e verificação de resultados experimentais em vários materiais magnéticos, a classe de universalidade é caracterizada por um pequeno número de parâmetros como a dimensionalidade do sistema (1d, 2d ou 3d) e a simetria do parâmetro de ordem. Para sistemas com diferentes dimensionalidades deve haver diferentes valores de expoentes críticos. Por exemplo, o modelo de Ising 3d (*bulk*) apresenta  $\nu = 0.63$  (expoente associado ao comprimento de correlação  $\xi \sim |t|^{-\nu}$ ) enquanto no limite 2d tem valor exato  $\nu = 1.00$ . Os sistemas quasi-bidimensionais oferecem oportunidades para o estudo do efeito de tamanho finito associado ao fato de que se pode modificar a estrutura e a composição das superfícies e os filme finos usando modernas técnicas da ciência de superfícies.

Como vimos na seção anterior, a temperatura crítica  $T_c$  depende do tamanho do filme fino,  $T_c(\ell)$ , aproximando-se da temperatura do bulk  $T_c(\infty)$  por um fator de escala  $\ell$  (que é o número de camadas). A relação de proximidade  $T_c(\ell)$  com  $T_c(\infty)$  pode ser descrita por uma lei de potência dada pela Eq.(4.22), caracterizada pelo um expoente  $\lambda$ .

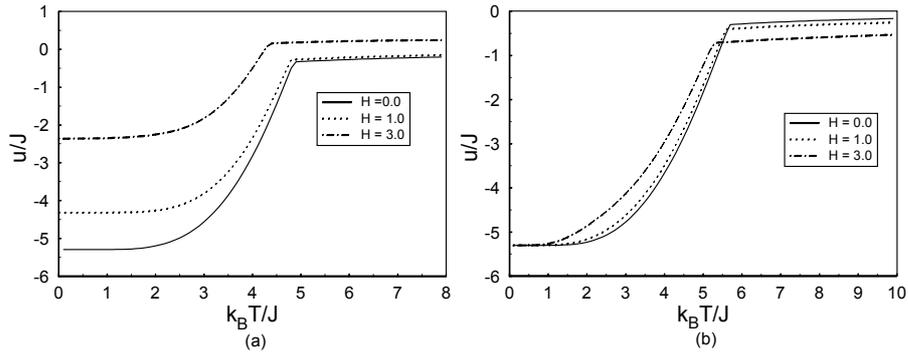


Figura 4.12: Dependência da energia interna com a temperatura para vários valores de  $H$  de um filme fino Heisenberg AF via EFT-2 (a) e MFT-2(b), onde  $J_s = J = 1.0$ .

A teoria de escala[37] nos diz que a tamanho finito do filme limita a divergência do comprimento de correlação  $\xi$  em  $T_c$ , e o expoente  $\lambda$  presente na Eq.(4.22) assume o valor  $\lambda = \frac{1}{\nu}$ , onde  $\nu$  é o expoente do comprimento de correlação 3d, refletindo numa apropriada classe de universalidade. Por exemplo, o valores esperados de  $\lambda$  nos modelos 3d de Ising, XY e Heisenberg são 1.586, 1.492 e 1.413, respectivamente[38].

Investigando o diagrama de fase do modelo quântico Heisenberg de spin-1/2 anisotrópico, usando MFT, em aglomerado com 2 spins, Eq.(4.65), para diferentes tipos de redes e faces do cristal, com diferentes números de coordenação  $\mathfrak{z}_o$  e  $\mathfrak{z}_1$  para sítios pertencentes ao mesmo plano e planos adjacentes, respectivamente, encontramos os resultados mostrados na Fig.(4.17) para o modelo proposto ( $\eta_x = \eta_y = 1$ ) e para a simetria planar modelo XY( $\eta_x = 1$  e  $\eta_y = 0$ ) com  $J_s = J_b = J$ .

Analisando os resultados, observamos que o número de coordenação da rede ( $\mathfrak{z}_o$  e  $\mathfrak{z}_1$ ) é responsável pela forte dependência de  $T_c(\ell)$  na estrutura da rede. Numericamente, resolvendo o conjunto de equações geradas a partir da Eq.(4.64) encontramos  $T_c[\text{FCC}(111)] > T_c[\text{FCC}(001)]$ , porque o número de coordenação no plano ( $\mathfrak{z}_o$ ) da estrutura FCC(111)( $\mathfrak{z}_o = 6$ ) é maior do que FCC(001)( $\mathfrak{z}_o = 4$ ), onde qualitativamente os resultados para  $T_c(\ell)$  estão de acordo com os dados experimentais(discutido na seção anterior). Na Fig.(4.17) temos a dependência de  $T_c(\ell)$  com  $\ell$  variando entre 10 e 20 camadas numa escala log-log para a determinação do expoente crítico  $\lambda$  com o uso da Eq.(4.22). Para as quatro orientações de superfícies sugeri-

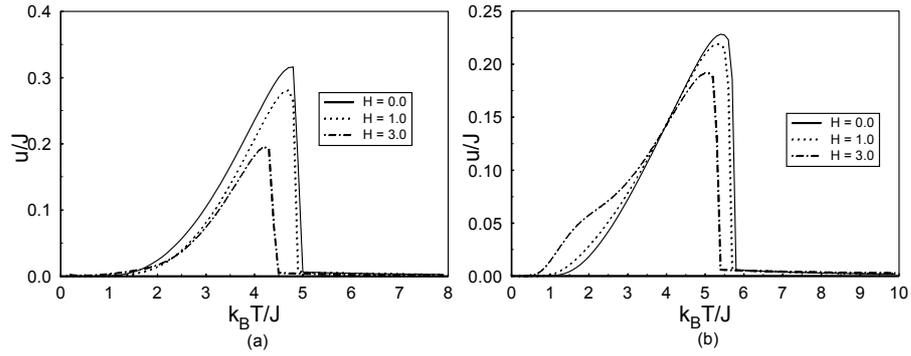


Figura 4.13: Calor específico em função da temperatura reduzida para o filme fino Heisenberg AF com  $J_s = J = 1.0$  com vários valores de  $H$ , obtido por derivação numérica da Fig.(4-12): (a) EFT-2 e (b) MFT-2.

das [FCC(001), FCC(111), SC(001) e BCC(111)] todos os resultados obedecem um comportamento linear com aproximadamente a mesma inclinação para um modelo escolhido, ou seja,  $\lambda(H) \simeq 1.65$  (Fig.4.17a),  $\lambda(XY) \simeq 1.76$  (Fig.4.17b), e estão qualitativamente de acordo com a hipótese da classe de universalidade. Devemos mencionar, que apesar de termos analisado a classe de universalidade dos filmes finos usando MFT-2, esperamos resultados qualitativos (e talvez até quantitativos) semelhantes ao usarmos EFT-2. Portanto, não analisamos estes aspectos pelo uso do operador diferencial por envolver cálculos analíticos demasiadamente grandes e desnecessários no momento.

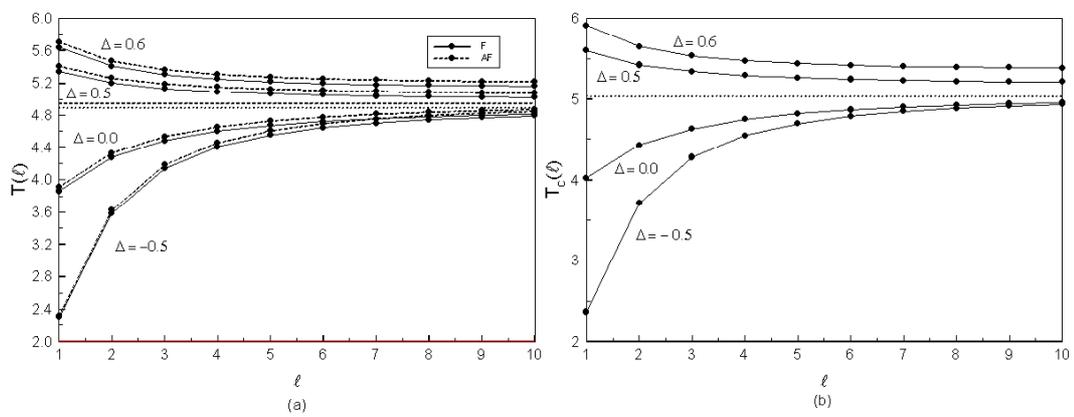


Figura 4.14: Temperatura reduzida  $T_c(\ell)$  como função do tamanho do filme  $\ell$  para vários valores da razão interação superfície-*bulk*  $\Delta_{F,AF}$ . A linha pontilhada corresponde a temperatura crítica do *bulk*. (a) Heisenberg quântico, (b) Heisenberg clássico.

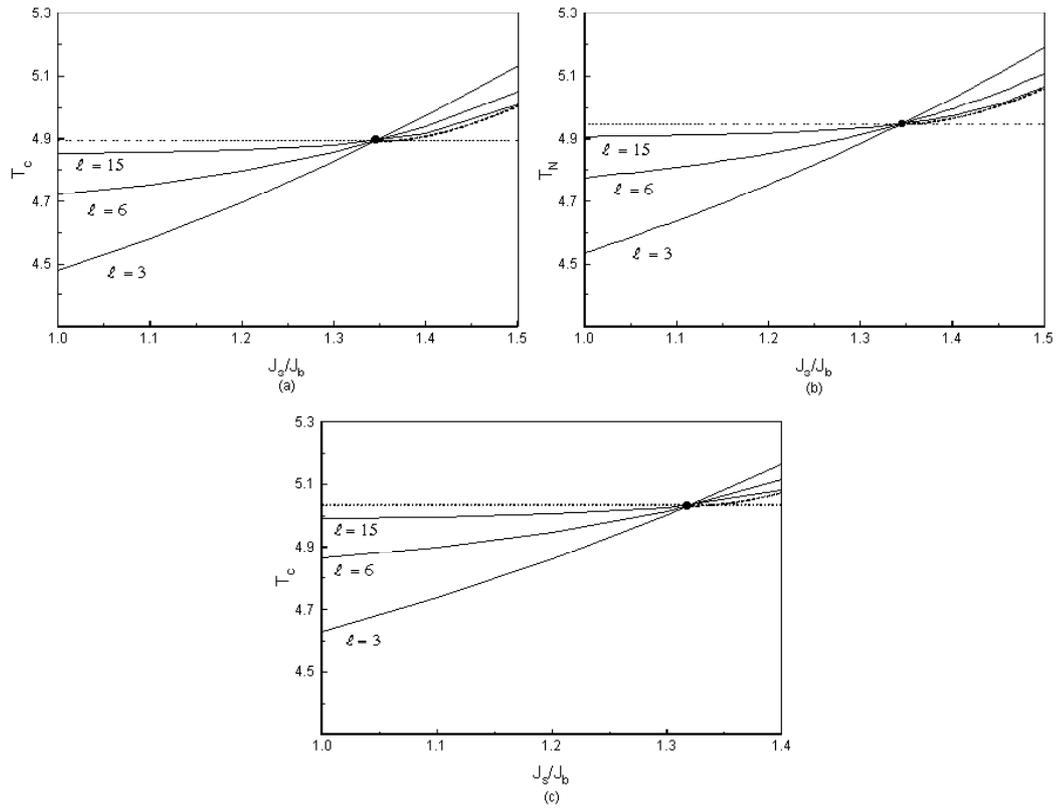


Figura 4.15: Temperatura crítica reduzida  $T_c(\ell)$  como função da razão da interação de troca  $J_s/J_b$  para vários valores de  $\ell$ . As linhas tracejada e pontilhada correspondem ao sistema com  $\ell \rightarrow \infty$  (semi-infinito) e a temperatura do bulk, respectivamente. (a) Heisenberg quântico F, (b) Heisenberg quântico AF, (c) Heisenberg clássico.

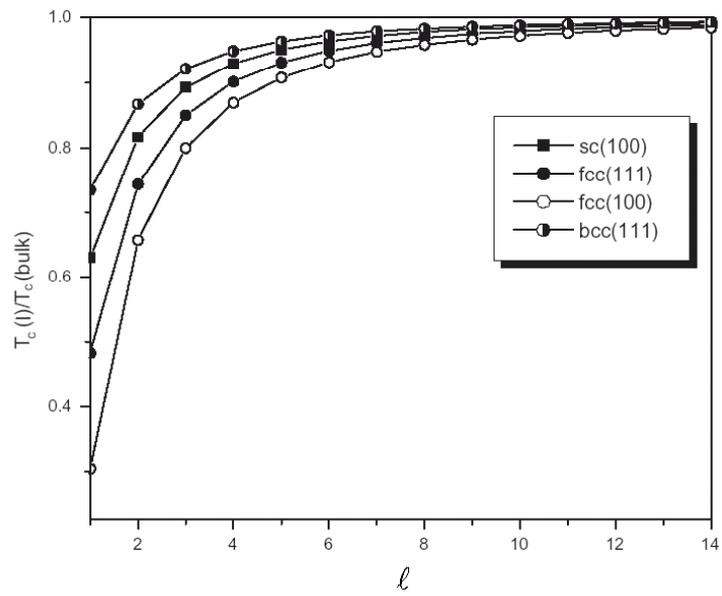
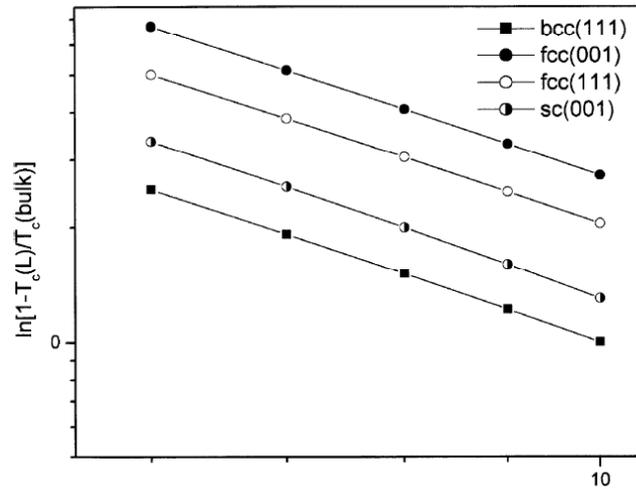
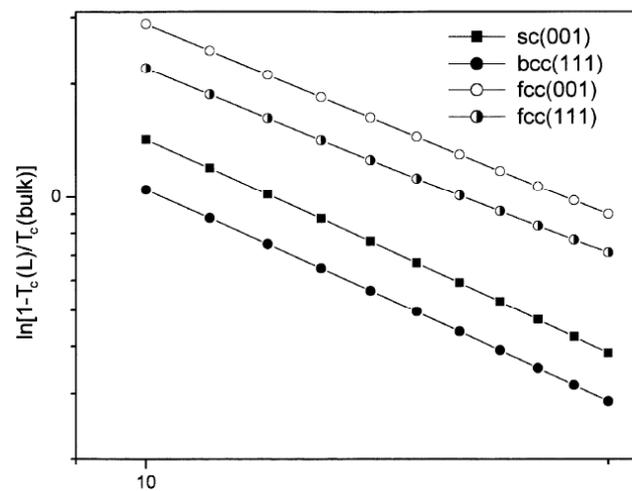


Figura 4.16: Dependência da temperatura normalizada  $T_c(\ell)/T_c(bulk)$  para o modelo de Heisenberg em redes com estrutura SC(001), BCC(111), FCC(001) e FCC(111) com  $J_s = J_b = J$ [29].



(a)



(b)

Figura 4.17: Expoente crítico  $\lambda$  utilizando o modelo XY(a) e Heisenberg (b) para quatro tipos de redes em um filme fino com 20 camadas[29].

# REFERÊNCIAS

- [1] SANTOS, R. C., *Jornal da Unicamp*, Edição **222**, pág. 8 (2003).
- [2] REZENDE, SÉRGIO M., *A Física de Materiais e Dispositivos Eletrônicos*, Editora da Universidade Federal de Pernambuco, Recife, PE, 1996.
- [3] DÜRR, W., TABORELLI, M., PAUL, O., LANDOLT, M., *Phys. Rev. Lett.* **62**, 206 (1989).
- [4] SCHNEIDER, C. M., *Phys. Rev. Lett.* **64**, 1059 (1990).
- [5] LI, YI, BABERCHKE, K., *Phys. Rev. Lett.* **68**, 1208 (1992).
- [6] TUSCHER, M., ARVANTIS, D., YOKOYAMA, T., LEDERER, T., BABERCHKE, K., *Surf. Scient.* **307**, 1096 (1994).
- [7] TJENG, L. H., IDZERDA, Y. U., RUDOLF, P., SETTE, F., CHEN, C. T., *J. Magn. Mater.* **109**, 288 (1992).
- [8] HUANG, F., KIEF, M. T., MANKEY, G. J., WILLIS, R. F., *Phys. Rev. B* **49**, 3962 (1994).
- [9] HUANG, F., KIEF, M. T., MANKEY, G. J., WILLIS, R. F., *J. Appl. Phys.* **73**, 6760 (1993).
- [10] ALLENSPACH, R., BISHOF, A., *Phys. Rev. Lett.* **69**, 3385 (1992).
- [11] CABRAL NETO, J., de SOUSA, J. Ricardo, PLASCAK, J. A., *Phys. Rev. B* **66**, 064417(2002).

- [12] AMAZONAS, M. A. de Sousa, *Método Variacional para Filmes Finos e Super-redes Magnéticas*, Dissertação de Mestrado, UFAM(2003).
- [13] WANG, C. L., SMITH, S. R. P., TILLEY, D. R., *J. Phys. Condens. Matter* **6**, 9633 (1994).
- [14] BARBERSCHKE, K., *Appl. Phys. A: Mater. Sci. Process.* **62**, 417 (1996).
- [15] WILHEM, F., BOVENSIEPEN, U., SCHERZ, A. POULOPOULOS, P., NEY, A., WENDE, H., CEBALLOS, G., BABERSCHKE, K., *J. Magn. Magn. Mater.* **22**, 163 (2000).
- [16] WANG, J. T., ZHOU, L., WANG, D. S., KAWAZOE, Y., *Phys. Rev. B* **62**, 3354 (2000).
- [17] (a) DE SOUSA, J. R., ARAÚJO, I. G., *Phys. Lett. A* **272**, 33 (2000); (b) *Solid State Commun.* **115**, 265 (2000); (c) BRANCO, N. S., DE SOUSA, J. R., *Phys. Rev. B* **62**, 5742 (2000).
- [18] LIN, D. L., CHE, H., GEORGE, T. F., *Phys. Rev. E* **49**, 2155 (1994).
- [19] ARAÚJO, I. G., CABRAL NETO, J., de SOUSA, J. R., *Physica A* **260**, 150 (1998).
- [20] CABRAL NETO, J., DE SOUSA, J.R., *J. Magn. Magn. Mater.* **268**, 298 (2004).
- [21] MERMIN, N. D., WAGNER, H., *Phys. Rev. Lett.* **22**, 113 (1966).
- [22] BONNER, J. C., FISHER, M. E., *Phys. Rev. A* **135**, 640 (1964).
- [23] KANEYOSHI, T. *Physica A*, in press (2004).
- [24] CARRIÇO, A. S., CAMPLEY, R. E., *Phys. Rev. B* **45**, 13117 (1992).
- [25] DIEP, H. T., *Phys. Rev. B* **43**, 8509 (1991).
- [26] PAN, K. K., *Phys. Rev. B* **64**, 224401 (2001).
- [27] PELES, A., SOUTHERM, B. W., *Phys. Rev. B* **69**, 81403 (2004).
- [28] DIEP, H. T., *Phys. Rev. B* **40**, 4818 (1989).

- [29] AMAZONAS, M. S., CABRAL NETO, J., DE SOUSA, J. R., *Physica A* **331**, 198 (2004);  
ibid *J. Magn. Magn. Mater.* **270**, 119 (2004).
- [30] GOU, W., SHI, L. P., LIN, D. L., *Phys. Rev. B* **62**, 14259 (2000).
- [31] CUCCI, C., PINI, M. G., POLITI, P. RETTORI, A., *J. Magn. Magn. Mater.* **231**, 98  
(2001).
- [32] ZHANG, R., WILLS, R. F., *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2665 (2001).
- [33] KRECH, M., *Phys. Rev. B* **62**, 6360 (2000).
- [34] GRIFFITHS, R. B., WHEELER, J. C., *Phys. Rev. A* **2**, 1047(1970).
- [35] ARAÚJO, I. G., DE SOUSA, J. R., BRANCO, N. S., *Physica A* **305**, 585 (2002).
- [36] HONG, Q., *Phys. Rev. B* **49**, 11859 (1994).
- [37] DOMB, C., *J. Phys. A* **6**, 1296 (1973).
- [38] ZINN-JUSTIN, J., *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*, Oxford University  
Press, Oxford, 1989.

## Capítulo 5

# Super-Rede Magnética

### 5.1 Considerações Gerais

Um maior controle no crescimento de filmes magnéticos se deu pelo avanço na moderna ciência do vácuo, em particular a técnica de crescimento *epitaxial*. É possível, hoje, construir um filme magnético camada por camada conhecendo ainda o tipo de átomo constituinte do sistema. A presença de átomos diferentes na estrutura do filme magnético modifica as propriedades físicas deste filme, já que a interação de troca entre eles depende das características de cada átomo[1].

A estrutura de um filme pode ser formada com camadas alternadas de átomos magnéticos (do tipo F e AF) e não magnéticos (podendo serem considerados como impurezas) ou constituído apenas de átomos magnéticos. Outros aspectos importantes, que alteram as propriedades físicas de super-redes, estão relacionados ao tamanho da célula unitária e a topologia global da rede. Isto tem motivado tanto estudos teóricos[2]-[11] quanto experimentais[12, 13] desses sistemas.

Estudos realizados em filmes de Ferro (Fe) crescido em monocamadas de Ouro (Au) e Gadolínio (Gd) crescido em Tungstênio (W), mostram o comportamento crítico e a variação das propriedades físicas com o número de monocamadas presentes na estrutura[13, 14]. Resultados experimentais como esses serviram de guia para a elaboração de condições de contorno apropriadas na aplicação dos diferenciados modelos estatísticos utilizados na literatura.

Usando o formalismo teórico de Ginzburg-Landau, Fishman, Schwable e Schwenk[4] encontraram a temperatura de transição e o espectro das ondas de spin para um sistema de multicamadas periodicamente alternadas de átomos ferromagnéticos diferentes. O ponto em

que o sistema sofre transição de fase foi objeto de investigação no trabalho de Tilley[6] utilizando o formalismo de Landau na determinação da temperatura crítica de vários sistemas. Essa metodologia apresenta maiores condições de contorno além da inclusão do sinal da interação de troca na superfície delimitadora.

Barnás[7], derivou um conjunto de equações gerais de dispersão para o *bulk* e a superfície magnética polarizada, no estudo de super-redes com número arbitrário de monocamadas diferentes. Tais equações são aplicadas nos modos magnetostáticos e propagação de onda retardada na geometria de Voigt[8]. Usando o modelo de Heisenberg, Ma e Tasi[9] estudaram a variação no comprimento de onda de modulação com a temperatura de Curie no tratamento de uma super-rede magnética, onde os resultados concordam qualitativamente com experimentos em filmes de Cu/Ni[10]. Super-redes compostas por materiais do tipo F e AF, dispostos de forma alternadas foram investigadas por Hinchey e Mills[2, 3].

Teoricamente, tratamos um sistema magnético numa estrutura de super-redes, considerando uma rede cristalina infinita no plano XY com duas superfícies delimitadoras na direção axial (eixo  $\vec{Oz}$ ). Considerando que o sistema seja constituído de dois tipos de materiais, A e B, relacionamos essa composição ao filme fino fazendo as interações de troca nas superfícies assumirem valores diferentes e associados aos tipos de materiais, como também nas interações interplanos e entre planos no bulk. Podemos considerar as interações entre elementos de mesmo plano por  $J_A$ , se os mesmos pertencerem ao material do tipo A e  $J_B$  ao material do tipo B. Para as interações entre os planos tomamos a interação por  $J_{AB}$ , onde essa diferença(entre os material A e B) pode ser no sinal da interação de troca. Isto ocorre no sistema constituído por *Fe/Gd* e *Co/Gd*[15, 16], onde Gd, Fe e Co são materiais ferromagnéticos, mas quando arranjados formando a estrutura *Fe/Gd* e *Co/Gd* as interações entre planos são antiferromagnéticas[17, 18]. De outra forma, a magnitude dos spins dos materiais A e B podem ser diferentes. Campos anisotrópicos podem alinhar os spins de um dado material, por exemplo A em paralelo no bulk, enquanto os do tipo B na interface assumem uma direção perpendicular[19, 20].

Os tratamentos teóricos via modelo de Heisenberg foram pouco explorados na literatura[21, 22]. No entanto, a introdução deste modelo possibilitou verificar as excitações elementares dos spins localizados em cada sítio da super-rede.

A partir dos trabalhos de Bloch[23], Holstein e Primakoff[24] e Kubo[25], alguns autores

lidaram com as excitações de ondas de spin em sistemas de filmes finos com poucas camadas, onde apresentam ordem magnética[26]-[28]. É geralmente aceito que para estruturas de rede mais complexas, isto é, para o caso em que o número de spins por célula unitária é maior que dois, o problema não pode ser resolvido explicitamente em termos dos elementos de matriz de cada vetor  $\vec{k}$ . Geralmente, utiliza-se métodos numéricos para resolver o problema[28]-[30] e resultados contraditórios são obtidos devido a diferença de métodos empregados[26],[31]-[33].

Entre os mais interessantes sistemas de super-redes magnéticas estão aqueles que apresentam alguma tipo de acoplamento antiferromagnético. Neste caso a interação de troca favorece algum tipo de alinhamento antiparalelo, enquanto que havendo campo externo, esse favorece um arranjo do tipo ferromagnético. Sendo assim, essas estruturas apresentam resultados interessantes no regime de transição de fase, onde a temperatura depende do tamanho da super-rede e do campo externo.

Um exemplo interessante de super-rede magnética é a formada por Gd/Y[34, 35], onde Y é um material não magnético. Embora os átomos de Ítrio não sejam magnéticos, quando arranjados aos de Gadolínio há um efeito antiferromagnético entre eles. Se um campo magnético for aplicado paralelo as camadas, o sistema terá um arranjo macroscópico antiferromagnético. Yafet e colaboradores[36, 37] mostram que isso se dá essencialmente devido a interação RKKY(Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida). A interação RKKY é usada para tratar sistemas em que existem impurezas magnética e não magnéticas num substrato. Neste caso, uma impureza magnética polariza os elétrons do gás de elétrons quando próximos a estes levando informação a outro átomo magnético. A interação resultante é de longo alcance e tem um valor oscilante, de modo que podemos ter, dependendo da distância entre os vizinhos, interações Ferromagnéticas (F) ou Antiferromagnéticas (AF):, ou seja

$$J(R) \simeq A [\text{sen}(2k_F R)] / (2k_F R)^3, \quad (5.1)$$

onde  $k_F$  é a vetor de onda de Fermi e  $R$  a distância entre duas impurezas magnéticas. Observamos que a interação de troca é oscilante e que dependendo da distância  $R$  entre as impurezas pode ter valor positivo ou negativo. Ao invés de somente considerar duas impurezas com um dado spin, Yafet considerou dois planos constituídos de impurezas e mostrou que a interação de troca ainda é oscilatória

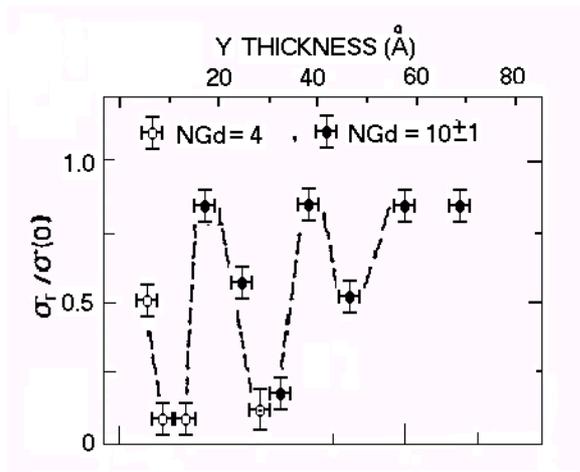


Figura 5.1: Comportamento experimental da magnetização a campo nulo para o sistema com multicamadas de Gd/Y com função do números de camadas de Y.

$$J(z) \simeq B [\text{sen}(2k_F z)] / z^2, \quad (5.2)$$

onde  $z$  e a distância entre planos.

O comportamento oscilatório da interação de troca como função do espaçamento entre camadas do filme com estrutura de super-rede formado por Gd/Y foi demonstrado experimentalmente por Kwo *et al*[34]. O resultado experimental para a magnetização a campo nulo como função do número de camadas de Y é apresentado na Fig.5.1 para um sistema constituído de multicamadas de Gd/Y. Podemos entender que a interação de troca desse sistema é F onde a magnetização é diferente de zero e AF quando é proxima a zero indicando que os spins de Gd interagem antiparalelamente com seus vizinhos. Um série[38] de estruturas (Fe/Cr, Co/Ru, Co/Cu) foram estudadas, onde as camadas constituídas de átomos não magnéticos media uma interação de troca entre as camadas de átomos magnéticos. Como no caso do Gd/Y a interação de troca F ou AF depende do espaçamento entre as camadas do filme.

Em sistemas diluídos, substâncias como  $\text{Cs}_3\text{Cl}_5$ ,  $\text{DyPo}_4$ ,  $\text{Fe}_p\text{Mg}_{1-p}\text{Cl}_2$ ,  $\text{Fe}_p\text{Co}_{1-p}\text{Cl}_2$  e  $\text{Mn}_p\text{Te}$ , são bem descritas quando tratadas através do modelo de Ising. Tais estruturas podem ser sintetizadas pois cada monocamada é regulada em escala atômica[39]. Kaneyoshi *et al*[40], mostraram que fenômenos físicos novos aparecem quando tratado um sistema de filme fino, via

teoria de campo efetivo, com diluição na superfície. Usando o modelo de Ising diluído no estudo do filme fino, Ferchmin e Maciejewski[41], observaram que a fase magnética da superfície pode aparecer quando a concentração de átomos magnéticos na mesma é bastante alta.

Os casos mencionados anteriormente são concernentes a sistemas de Ising com spin  $1/2$ . No caso em que  $S = 1$ , as propriedades do bulk de sistemas magnéticos no modelo de Ising[42], sistemas magnéticos semi-infinitos[43] e filmes finos magnéticos Ising[43]-[46] são discutidos, porém, dificuldades matemáticas são introduzidas em estudos de super-redes para spins maiores que 1.

Aouad e colaboradores[47] trataram uma super-rede ferromagnética no modelo de Ising de spin 1 diluída e encontraram os diagramas de fase e suas propriedades magnéticas utilizando teoria de campo efetivo associada à distribuição de probabilidade relativa à variável de spins desenvolvida por Tucker e Saber[48] e observaram a influência da concentração de átomos nas propriedades físicas da estrutura. A super-rede Heisenberg não tem sido tratada na literatura via teoria de campo efetivo. Por isto a motivação de estudar neste trabalho.

## 5.2 Formalismo

Neste momento analisaremos uma super-rede constituída por materiais do tipo A e B. A estrutura da super-rede será organizada de forma alternada periodicamente obedecendo a ordem ABAB...AB, para os casos: *i*) A e B são ferromagnéticos (F), *ii*) A ferromagnético (F) e B antiferromagnético (AF) e *iii*) A e B antiferromagnéticos (AF). Outra configuração que adotaremos será AAA...BB, onde o material do tipo A será F e B AF, respectivamente. Todas essas configurações serão constituintes de um filme fino contendo  $\ell$  camadas conforme ilustração, para uma super-rede alternada, na ausência de campo externo, apresentada na Fig.(5.2) para uma rede bidimensional.

Trataremos o sistema considerando que apenas a interação de troca entre os elementos que compõem a super-rede seja relevante frente aos outros tipos de interações magnéticas encontradas, tais como: dipolar, Zeeman, spin-órbita, etc. O modelo no qual nos propomos a estudar as propriedades térmica e magnética da super-rede, como também a criticalidade desse sistema é o modelo de Heisenberg anisotrópico quântico de spin  $1/2$ . Escrevemos o modelo proposto

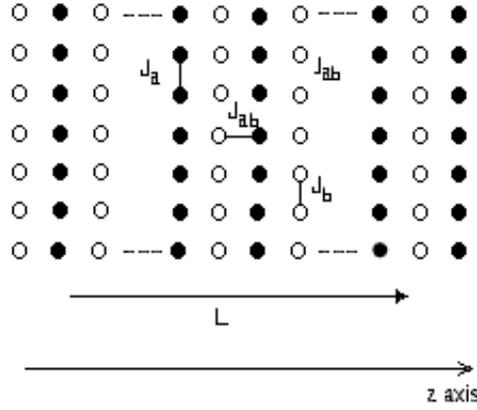


Figura 5.2: Representação esquemática de uma super-rede de materiais A e B configurados de forma alternada periodicamente em duas dimensões.

através do seguinte Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \left[ \left( \eta_x S_i^x S_j^x + \eta_y S_i^y S_j^y \right) + S_i^z S_j^z \right] - H \sum_i S_i^z, \quad (5.3)$$

onde  $J_{ij}$  é a energia de interação de troca e  $H$  o campo externo. Para  $J_{ij} > 0$  teremos interação F e  $J_{ij} < 0$  interação AF. Considerando a super-rede magnética, a energia de interação de troca assumirá os seguintes valores:  $J_{ij} = J_{as}$  para sítios pertencentes a superfície livre constituída de material do tipo A,  $J_{ij} = J_{bs}$  quando a superfície livre for constituída de material do tipo B,  $J_{ij} = J_a$  no interior (*bulk*) para material do tipo A,  $J_{ij} = J_b$  no caso em o material seja do tipo B e  $J_{ij} = J_{ab}$  entre camadas do filme (ver Fig.2). Os termos  $\eta_x$  e  $\eta_y$  são os parâmetros de anisotropia de *exchange*,  $S_i^\nu$  ( $\nu = x, y, z$ ) a componente  $\nu$  do operador de spin com a soma feita sobre os primeiros vizinhos mais próximos. O Hamiltoniano (1) reduz-se aos casos particulares: i) modelo de Ising ( $\eta_x = \eta_y = 0$ ); ii) modelo planar ou XY ( $\eta_x = 0$  e  $\eta_y = 1$ ) e iii) modelo de Heisenberg isotrópico ( $\eta_x = \eta_y = 1$ ).

Na idéia proposta, vamos a seguir calcular as propriedades magnética e térmica para uma super-rede com as configurações mencionadas.

## 5.3 Propriedades Térmica e Magnética de Super-Rede

### 5.3.1 Super-rede alternada F ou AF

A metodologia usada nesse trabalho para descrever a super-rede é escrever o Hamiltoniano (1) de cada camada ( $\ell$ ), desde a superfície livre A, de um aglomerado de dois spins, até a outra superfície livre B. Considerando que o filme tenha um número par de camadas com a configuração de super-rede ABAB...AB, camadas cujo  $n = 1$  (superfície),  $3, \dots, 2\ell - 1$  são constituídas de sítios de material do tipo A com interação de troca  $J_a$ , e para  $n = 2, \dots, 2\ell - 2$  constituído de sítios de material do tipo B com interação de troca  $J_b$ .

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

$$\begin{aligned}
 -\beta\mathcal{H}_n = & K_n \left[ \left( \eta_x S_{1,n}^{x\mathbb{A}} S_{2,n}^{x\mathbb{B}} + \eta_y S_{1,n}^{y\mathbb{A}} S_{2,n}^{y\mathbb{B}} \right) + S_{1,n}^{z\mathbb{A}} S_{2,n}^{z\mathbb{B}} \right] + \\
 & \left( K_n a_{1,n}^{\mathbb{B}} + K_{n-1} a_{1,n-1}^{\mathbb{B}} + K_{n+1} a_{1,n+1}^{\mathbb{B}} + \beta H \right) S_{1,n}^{z\mathbb{A}} + \\
 & \left( K_n a_{2,n}^{\mathbb{A}} + K_{n-1} a_{2,n-1}^{\mathbb{A}} + K_{n+1} a_{2,n+1}^{\mathbb{A}} + \beta H \right) S_{2,n}^{z\mathbb{B}}, \quad (5.4)
 \end{aligned}$$

onde  $K_0 = 0$ ,  $K_1 = \beta J_{as}$ ,  $K_\ell = \beta J_{bs}$ ,  $K_p = \beta J_b$  para  $p = 2, \dots, 2\ell - 2$ ,  $K_i = \beta J_a$  para  $i = 3, \dots, 2\ell - 1$ ,  $a_{i,n}^\nu = \sum_{\vec{\delta}}^3 S_{i+\vec{\delta},n}^{z\nu}$ ,  $a_{i,n-1}^\nu = \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{i+\vec{\delta},n-1}^{z\nu}$ ,  $a_{i,n+1}^\nu = \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{i+\vec{\delta},n+1}^{z\nu}$  ( $\nu = \mathbb{A}$ ,  $i = 1$  e  $\nu = \mathbb{B}$ ,  $i = 2$ ) e  $\beta = 1/k_B T$  ( $k_B$  é a constante de Boltzmann). Aqui  $\mathbb{A}$  e  $\mathbb{B}$  são índices associados ao tratamento dado quando dividimos o sistema em duas subredes.

De acordo com a identidade de Callen-Suzuki[49], a média da magnetização por spins de uma dada subrede,  $\mathbb{A}$  ou  $\mathbb{B}$ , para cada camada,  $m_n^\nu = \langle S_{i,n}^{z\nu} \rangle$ , é obtida por

$$m_n^\nu = \langle S_{i,n}^{z\nu} \rangle = \left\langle \frac{\text{Tr} \left\{ S_{i,n}^{z\nu} e^{-\beta\mathcal{H}_n} \right\}}{\text{Tr} \left\{ e^{-\beta\mathcal{H}_n} \right\}} \right\rangle, \quad (5.5)$$

onde  $\nu = \mathbb{A}$ ,  $i = 1$  e  $\nu = \mathbb{B}$ ,  $i = 2$ .

Em termos da função de partição  $Z_n = \text{Tr} \left\{ e^{-\beta\mathcal{H}_n} \right\}$ , a Eq(5.4) será dada por

$$m_n^\nu = \left\langle \frac{\partial \ln Z_n}{\partial x_{\nu,n}} \right\rangle, \quad (5.6)$$

onde  $x_{\nu,n} = K_n a_{i,n} + K_{n-1} a_{i,n-1} + K_{n+1} a_{i,n+1} + \beta H$ .

Portanto, seguindo a metodologia empregada no capítulo 3 para o cálculo da magnetização de um sistema de filme fino puro, encontramos o seguinte conjunto de equações para a super-rede alternada

$$m_1 = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 \left[ a_{1,1kq}(T, J_{as}, J_{ab}) + a_{2,1kq}(T, J_{as}, J_{ab})m_2 + a_{3,1kq}(T, J_{as}, J_{ab})m_2^2 \right] m_1^{k+q}; \quad (5.7)$$

$$\begin{aligned} m_n = & \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 \left[ a_{1,nkq}(T, J_n, J_{ab}) + a_{2,nkq}(T, J_n, J_{ab})(m_{n-1} + m_{n+1}) + a_{3,nkq}(T, J_n, J_{ab})m_{n-1}m_{n+1} + \right. \\ & a_{4,nkq}(T, J_n, J_{ab})(m_{n-1} + m_{n+1})^2 + a_{5,nkq}(T, J_n, J_{ab})m_{n-1}^2 m_{n+1}^2 + \\ & \left. a_{6,nkq}(T, J_n, J_{ab}) \left( m_{n-1}^2 m_{n+1} + m_{n-1} m_{n+1}^2 \right) \right] m_n^{k+q}; \end{aligned} \quad (5.8)$$

$$m_\ell = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 \left[ a_{1,\ell kq}(T, J_{bs}, J_{ab}) + a_{2,\ell kq}(T, J_{bs}, J_{ab})m_\ell + a_{3,\ell kq}(T, J_{bs}, J_{ab})m_{\ell-1}^2 \right] m_\ell^{k+q}, \quad (5.9)$$

onde usamos a condição de contorno para as subredes  $\mathbf{F}$ ,  $m_{\mathbb{A}} = m_{\mathbb{B}} = m$ , numa rede cúbica simples ( $\mathfrak{z} = 6$ ) e quando  $n$  par teremos  $J_n = J_b$  e  $n$  ímpar  $J_n = J_a$ .

O conjunto de Eqs.(5.7)-(5.9), determina o comportamento da magnetização com a temperatura e a interação de troca entre os elementos que compõem a super-rede. Assim, podemos calcular a magnetização de cada camada  $m_n$  e a magnetização total da super-rede  $m = \frac{1}{\ell} \sum_{n=1}^{\ell} m_n$  para vários tamanhos  $\ell$ .

Para construirmos a super-rede alternada AF fazemos a permuta de  $K \rightarrow -K$  no Hamiltoniano e aplicamos a condição de contorno para subredes, onde  $m_{\mathbb{A}} = -m_{\mathbb{B}} = m$ , considerando que no sistema não exista campo externo. Esse procedimento leva ao conjunto de equações equivalentes às Eqs.(5.7)-(5.9) com os coeficientes escritos para a super-rede AF. Os coefi-

cientes  $a_{1,1kq}(T, J_{as}, J_{ab})$ ,  $a_{2,1kq}(T, J_{as}, J_{ab})$ ,  $a_{3,1kq}(T, J_{as}, J_{ab})$ ,  $a_{1,nkq}(T, J_n, J_{ab})$ ,  $a_{2,nkq}(T, J_n, J_{ab})$ ,  $a_{3,nkq}(T, J_n, J_{ab})$ ,  $a_{4,nkq}(T, J_n, J_{ab})$ ,  $a_{5,nkq}(T, J_n, J_{ab})$ ,  $a_{6,nkq}(T, J_n, J_{ab})$ ,  $a_{1,\ell kq}(T, J_{bs}, J_{ab})$ ,  $a_{2,\ell kq}(T, J_{bs}, J_{ab})$  e  $a_{3,\ell kq}(T, J_{bs}, J_{ab})$  são apresentados no apêndice C para a super-rede alternada F e AF.

A susceptibilidade longitudinal magnética total  $\chi$  será dada por

$$(1 + \chi)^{-1} = \frac{1}{\ell} \sum_{n=1}^{\ell} (1 + \chi_n)^{-1}, \quad (5.10)$$

sendo  $\ell$  é o número total de camadas e  $\chi_n = \left( \frac{\partial m_n}{\partial H} \right)_{H=0}$  a susceptibilidade longitudinal de cada camada à campo nulo. Efetuando os cálculos para susceptibilidade  $\chi_n$ , encontramos o seguinte conjunto de equações lineares em  $\chi$

$$\chi_1 = G_1(T, J_{as}, J_{ab}, m_1, m_2)\chi_1 + G_2(T, J_{as}, J_{ab}, m_1, m_2)\chi_2 + G_3(T, J_{as}, J_{ab}, m_1, m_2); \quad (5.11)$$

$$\begin{aligned} \chi_n = & G_{n-1}(T, J_n, J_{ab}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1})\chi_{n-1} + G_n(T, J_n, J_{ab}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1})\chi_n + \\ & G_{n+1}(T, J_n, J_{ab}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1})\chi_{n+1} + G'_n(T, J_n, J_{ab}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}); \end{aligned} \quad (5.12)$$

$$\chi_\ell = G_\ell(T, J_{bs}, J_{ab}, m_\ell, m_{\ell-1})\chi_\ell + G_{\ell-1}(T, J_{bs}, J_{ab}, m_\ell, m_{\ell-1})\chi_{\ell-1} + G'_\ell(T, J_{bs}, J_{ab}, m_\ell, m_{\ell-1}), \quad (5.13)$$

com as funções  $G_n(T, J_n, J_{ab}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1})$  detalhadas no apêndice C para o caso em que a super-rede é F e AF.

Para o cálculo da energia interna da super-rede, seguimos a mesma metodologia aplicada ao filme fino, capítulo 3 desse trabalho, onde obtemos o seguinte resultado para a energia interna por partícula de cada camada

$$u_1^{(F,AF)} = -\frac{1}{2} \left[ J_{as}^2 \beta \eta_x V_{11}^{F,AF}(T, J_{as}, J_{ab}, m_1, m_2) + J_{as}^2 \beta \eta_y V_{12}^{F,AF}(T, J_{as}, J_{ab}, m_1, m_2) + \right.$$

$$\begin{aligned}
& J_s V_{13}^{F,AF}(T, J_{as}, J_{ab}, m_1, m_2) + \\
& (6J_{as}m_1 + 2J_{ab}m_2) V_{14}^{F,AF}(T, J_{as}, J_{ab}, m_1, m_2) \Big]; \tag{5.14}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
u_n^{(F,AF)} &= -\frac{1}{2} \left[ J_n^2 \beta \eta_x V_{n1}^{F,AF}(T, J_n, J_{ab}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) + J_n^2 \beta \eta_y V_{n2}^{F,AF}(T, J_n, J_{ab}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) + \right. \\
& J_n V_{n3}^{F,AF}(T, J_n, J_{ab}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) + \\
& \left. (6J_n m_n + 2J_{ab} m_{n-1} + 2J_{ab} m_{n+1}) V_{n4}^{F,AF}(T, J_n, J_{ab}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) \right]; \tag{5.15}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
u_\ell^{(F,AF)} &= -\frac{1}{2} \left[ J_{bs}^2 \beta \eta_x V_{\ell1}^{F,AF}(T, J_{bs}, J_{ab}, m_\ell, m_{\ell-1}) + J_{bs}^2 \beta \eta_y V_{\ell2}^{F,AF}(T, J_{bs}, J_{ab}, m_\ell, m_{\ell-1}) + \right. \\
& J_s V_{\ell3}^{F,AF}(T, J_s, m_\ell, m_{\ell-1}) + \\
& \left. (6J_s m_\ell + 2J m_{\ell-1}) V_{\ell4}^{F,AF}(T, J_s, m_\ell, m_{\ell-1}) \right]. \tag{5.16}
\end{aligned}$$

Portanto, as Eqs(5.14)-(5.16) nos dá o comportamento da energia interna por partícula para a n-ésima camada da uma super-rede alternada com configurações F e AF. Para uma super-rede composta por  $\ell$  camadas, determinamos a energia interna média  $u$  através da relação  $u = \frac{1}{\ell} \sum_{n=1}^{\ell} u_n$  que dá o comportamento médio da super-rede.

O calor específico é obtido através do cálculo da primeira derivada da energia em relação à temperatura reduzida  $t = k_B T/J$ . Podemos realizar este cálculo utilizando recursos da derivação numérica diretamente na curva obtida de  $u$  em função de  $t$ .

### 5.3.2 Super-rede com de camadas F e AF Alternadas

Um aspecto interessante da física do estado sólido é a descoberta de novos materiais ou a exploração de novas classes de materiais, cujas propriedades físicas podem apresentar resultados diferentes dos encontrados nas literatura. O desenvolvimento de novos materiais está associado ao estudo de novos compostos arranjados em estruturas de super-redes alternadas. Assim, pode-se criar novos materiais em laboratório com novas propriedades físicas. Ainda é possível construir super-redes de extraordinária qualidade a partir de compostos semicondutores. As

super-redes podem ser constituídas de uma variedade de materiais, onde a composição destes podem produzir substâncias com qualidade superior em comparação aos compostos tradicionais (*bulk*).

Podemos esperar resultados interessantes se formarmos uma super-rede constituída de camadas ferromagnética e antiferromagnética arranjadas de forma alternada, F-AF-F-AF, e com  $\ell_1$  camadas ferromagnéticas e  $\ell_2$  camadas antiferromagnéticas (F-F-AF-AF), onde  $\ell = \ell_1 + \ell_2$ . Passaremos a estudar essas combinações a partir do modelo proposto supondo não existir campo externo atuante. A Fig.5.2 pode representar um esquema, em duas dimensões, para a primeira configuração de super-rede, onde as “bolinhas brancas” representam elementos F e as “bolinhas pretas” representam elementos AF. Assim, teremos para  $n$  ímpar camadas com material do tipo F (com  $\ell = 1$  a superfície F) e para  $n$  par camadas de material AF (com  $n = \ell$  a superfície AF), onde  $n = 1, 2, 3, \dots, \ell$  (sendo  $\ell$  um número par de camadas). Portanto, seguindo o procedimento apresentado anteriormente, para o modelo proposto, encontramos a magnetização, por camada, dada por

$$m_1 = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 \left[ a_{1,1kq}^F(T, J_{SF}, J_{AF}) + a_{2,1kq}^F(T, J_{SF}, J_{AF})m_2 + a_{3,1kq}^F(T, J_{SF}, J_{AF})m_2^2 \right] m_1^{k+q}, \quad (5.17)$$

com  $n$  par teremos

$$m_n = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 \left[ a_{1,nkq}^{AF}(T, J_F, J_{AF}) + a_{2,nkq}^{AF}(T, J_F, J_{AF})(m_{n-1} + m_{n+1}) + a_{3,nkq}^{AF}(T, J_F, J_{AF})m_{n-1}m_{n+1} + a_{4,nkq}^{AF}(T, J_F, J_{AF})(m_{n-1} + m_{n+1})^2 + a_{5,nkq}^{AF}(T, J_F, J_{AF})m_{n-1}^2 m_{n+1}^2 + a_{6,nkq}^{AF}(T, J_F, J_{AF}) \left( m_{n-1}^2 m_{n+1} + m_{n-1} m_{n+1}^2 \right) \right] m_n^{k+q}, \quad (5.18)$$

com  $n$  ímpar teremos

$$m_n = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 \left[ a_{1,nkq}^F(T, J_F, J_{AF}) + a_{2,nkq}^F(T, J_F, J_{AF})(m_{n-1} + m_{n+1}) + a_{3,nkq}^F(T, J_F, J_{AF})m_{n-1}m_{n+1} + \right.$$

$$\begin{aligned}
& a_{4,nkq}^F(T, J_F, J_{AF})(m_{n-1} + m_{n+1})^2 + a_{5,nkq}^F(T, J_F, J_{AF})m_{n-1}^2 m_{n+1}^2 + \\
& a_{6,nkq}^F(T, J_F, J_{AF}) \left( m_{n-1}^2 m_{n+1} + m_{n-1} m_{n+1}^2 \right) m_n^{k+q}, \tag{5.19}
\end{aligned}$$

e para a  $\ell$ -ésima camada:

$$m_\ell = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 \left[ a_{1,\ell kq}^{AF}(T, J_{SAF}, J_F) + a_{2,\ell kq}^{AF}(T, J_{SAF}, J_F)m_{\ell-1} + a_{3,\ell kq}^{AF}(T, J_{SAF}, J_F)m_{\ell-1}^2 \right] m_\ell^{k+q}, \tag{5.20}$$

sendo os coeficientes envolvidos nas Eqs.(5.17) - (5.20) estão apresentados em detalhes no apêndice C.

Para a susceptibilidade longitudinal à campo nulo, teremos

$$\chi_1 = G_1^F(T, J_{SF}, J_{AF}, m_1, m_2)\chi_1 + G_2^F(T, J_{SF}, J_{AF}, m_1, m_2)\chi_2 + G_3^F(T, J_{SF}, J_{AF}, m_1, m_2), \tag{5.21}$$

sendo  $n$  par

$$\begin{aligned}
\chi_n &= G_{n-1}^{AF}(T, J_F, J_{AF}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1})\chi_{n-1} + G_n^{AF}(T, J_F, J_{AF}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1})\chi_n + \\
& G_{n+1}^{AF}(T, J_F, J_{AF}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1})\chi_{n+1} + G_n^{AF'}(T, J_F, J_{AF}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}), \tag{5.22}
\end{aligned}$$

com  $n$  ímpar

$$\begin{aligned}
\chi_n &= G_{n-1}^F(T, J_F, J_{AF}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1})\chi_{n-1} + G_n^F(T, J_F, J_{AF}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1})\chi_n + \\
& G_{n+1}^F(T, J_F, J_{AF}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1})\chi_{n+1} + G_n^{F'}(T, J_F, J_{AF}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}), \tag{5.23}
\end{aligned}$$

e para a  $\ell$ -ésima camada

⋮

$$\chi_\ell = G_\ell^{AF}(T, J_{SAF}, J_F, m_\ell, m_{\ell-1})\chi_\ell + G_{\ell-1}^{AF}(T, J_{SAF}, J_F, m_\ell, m_{\ell-1})\chi_{\ell-1} + G_\ell^{AF'}(T, J_{SAF}, J_F, m_\ell, m_{\ell-1}). \quad (5.24)$$

No desenvolvimento dos cálculos para a determinação da energia interna dessa configuração encontramos o seguinte conjunto de equações:

$$\begin{aligned} u_1 = & -\frac{1}{2} \left\{ J_{SF}^2 \beta (\eta_x + \eta_y) V_{11}(T, J_{SF}, J_{AF}, m_1, m_2) + V_{12}(T, J_{SF}, J_{AF}, m_1, m_2) + \right. \\ & J_{SF} V_{13}(T, J_{SF}, J_{AF}, m_1, m_2) + \\ & \left. [6J_{SF}m_1 + (J_F + J_{AF})m_2] V_{14}^{F,AF}(T, J_{as}, J_{ab}, m_1, m_2) \right\}; \end{aligned} \quad (5.25)$$

para  $n$  par

$$\begin{aligned} u_n = & -\frac{1}{2} \left\{ J_{AF}^2 \beta \eta_x V_{n1}^{AF}(T, J_F, J_{AF}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) + J_{AF}^2 \beta \eta_y V_{n2}^{AF}(T, J_F, J_{AF}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) + \right. \\ & J_{AF} V_{n3}^{AF}(T, J_F, J_{AF}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) + \\ & \left. [6J_{AF}m_n + (J_{AF} + J_F)m_{n-1} + (J_{AF} + J_F)m_{n+1}] V_{n4}^{AF}(T, J_F, J_{AF}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) \right\}; \end{aligned} \quad (5.26)$$

para  $n$  ímpar

$$\begin{aligned} u_n = & -\frac{1}{2} \left[ J_F^2 \beta (\eta_x + \eta_y) V_{n1}^F(T, J_F, J_{AF}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) + J_F V_{n2}^F(T, J_F, J_{AF}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) + \right. \\ & \left. [6J_Fm_n + (J_{AF} + J_F)m_{n-1} + (J_{AF} + J_F)m_{n+1}] V_{n4}^F(T, J_F, J_{AF}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) \right]; \end{aligned} \quad (5.27)$$

e para a  $\ell$ -ésima camada

$$\begin{aligned} u_\ell = & -\frac{1}{2} \left\{ J_{SAF}^2 \beta \eta_x V_{\ell 1}^{AF}(T, J_{SAF}, J_F, m_\ell, m_{\ell-1}) + J_{SAF}^2 \beta \eta_y V_{\ell 2}^{AF}(T, J_{SAF}, J_F, m_\ell, m_{\ell-1}) + \right. \\ & \left. J_{SAF} V_{\ell 3}^{AF}(T, J_{SAF}, J_F, m_\ell, m_{\ell-1}) \right\} \end{aligned}$$

$$\left[ 6J_{SAF}m_\ell + (J_{AF} + J_F)m_{\ell-1} \right] V_{\ell 4}^{AF}(T, J_{SAF}, J_F, m_\ell, m_{\ell-1}) \Big\}, \quad (5.28)$$

com os termos  $V_{1j}^F(T, J_{SF}, J_{AF}, m_1, m_2)$ ,  $V_{nj}^{F,AF}(T, J_F, J_{AF}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1})$  e  $V_{\ell j}^{AF}(T, J_{SAF}, J_F, m_\ell, m_{\ell-1})$  (sendo  $j = 1, 2, 3, 4$ ) detalhados no apêndice C.

A partir das Eqs.(5.25)-(5.26) podemos ver a dependência da energia interna com a temperatura e o tipo de interação de troca. Na seção seguinte, a dos resultados, apresentaremos as curvas da energia interna para essa configuração fazendo variar a temperatura do sistema como também os valores das interações F e AF. O calor específico é calculado diretamente utilizando recursos da derivação numérica diretamente na curva obtida de  $u$  em função de  $T$ .

### 5.3.3 Super-Rede com Camadas F e AF

Na Fig.(5.3) representa o arranjo para a segunda configuração que iremos estudar. Temos nela representado, em duas dimensões, uma super-rede composta de  $\ell_1$  camadas F (bolinhas pretas) e  $\ell_2$  camadas AF (bolinhas brancas) sendo  $\ell_1 + 1$  a interface do sistema.

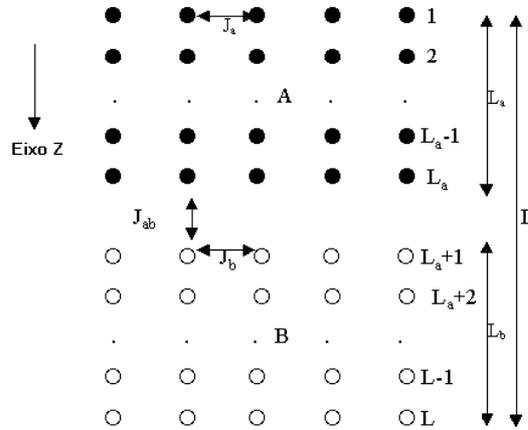


Figura 5.3: Representação esquemática de uma estrutura de super-rede de materiais A com tamanho  $L_a$  e B com tamanho  $L_b$ .

A partir dos resultados encontrados para a super-rede alternada pura, isto é, F ou AF, obtidos na seção 4.2.1 deste capítulo podemos escrever a magnetização de cada camada como

combinação desse resultados, com excessão para a interface. Assim, para  $n = 1, 2, \frac{\ell}{2} - 1$  (com  $n = 1$  a superfície F) teremos camadas F e para  $n = \frac{\ell}{2} + 2, \frac{\ell}{2} + 3, \dots, \ell$  camadas AF (com  $n = \ell$  a superfície AF). A interface é determinada entre as camadas  $n = \frac{\ell}{2}$  (F) e  $n = \frac{\ell}{2} + 1$  (AF). Nestes estudos consideramos um número par de camadas. Então, as equações ficam

$$m_1 = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 \left[ a_{1,1kq}(T, J_{SF}, J_F) + a_{2,1kq}(T, J_{SF}, J_F)m_2 + a_{3,1kq}(T, J_{SF}, J_F)m_2^2 \right] m_1^{k+q}, \quad (5.29)$$

para  $n = 1, 2, \frac{\ell}{2} - 1$  temos

$$\begin{aligned} m_n = & \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 \left[ a_{1,nkq}(T, J_F) + a_{2,nkq}(T, J_F)(m_{n-1} + m_{n+1}) + a_{3,nkq}(T, J_F)m_{n-1}m_{n+1} + \right. \\ & a_{4,nkq}(T, J_F)(m_{n-1} + m_{n+1})^2 + a_{5,nkq}(T, J_F)m_{n-1}^2 m_{n+1}^2 + \\ & \left. a_{6,nkq}(T, J_F) \left( m_{n-1}^2 m_{n+1} + m_{n-1} m_{n+1}^2 \right) \right] m_n^{k+q}, \end{aligned} \quad (5.30)$$

quando  $n = \frac{\ell}{2}$  e  $n = \frac{\ell}{2} + 1$  encontramos

$$\begin{aligned} m_n = & \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 \left[ a_{1,nkq}(T, J_F, J_{AF}) + a_{2,nkq}(T, J_F, J_{AF})m_{n-1} + a_{3,nkq}(T, J_F, J_{AF})m_{n+1} + \right. \\ & a_{4,nkq}(T, J_F, J_{AF})m_{n-1}m_{n+1} + a_{5,nkq}(T, J_F, J_{AF})(m_{n+1}^2 + m_{n-1}m_{n-1}) \\ & a_{6,nkq}(T, J_F, J_{AF})(m_{n+1}m_{n-1} + m_{n-1}^2) + a_{7,nkq}(T, J_F, J_{AF})m_{n-1}^2 m_{n+1}^2 + \\ & \left. a_{8,nkq}(T, J_F, J_{AF})m_{n-1}m_{n+1}^2 + a_{9,nkq}(T, J_F, J_{AF})m_{n-1}^2 m_{n+1} \right] m_n^{k+q}, \end{aligned} \quad (5.31)$$

onde o coeficientes são apresentados no apêndice C.

Para  $n = \frac{\ell}{2} + 2, \frac{\ell}{2} + 3, \dots$  obtemos

$$\begin{aligned} m_n = & \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 \left[ a_{1,nkq}(T, J_{AF}) + a_{2,nkq}(T, J_{AF})(m_{n-1} + m_{n+1}) + a_{3,nkq}(T, J_{AF})m_{n-1}m_{n+1} + \right. \\ & \left. a_{4,nkq}(T, J_{AF})(m_{n-1} + m_{n+1})^2 + a_{5,nkq}(T, J_{AF})m_{n-1}^2 m_{n+1}^2 + \right. \end{aligned}$$

$$a_{6,nkq}(T, J_{AF}) \left( m_{n-1}^2 m_{n+1} + m_{n-1} m_{n+1}^2 \right) \Big] m_n^{k+q}, \quad (5.32)$$

e na  $\ell$ -ésima camada

$$m_\ell = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 \left[ a_{1,\ell k q}(T, J_{SAF}, J_{AF}) + a_{2,\ell k q}(T, J_{SAF}, J_{AF}) m_\ell + a_{3,\ell k q}(T, J_{SAF}, J_{AF}) m_{\ell-1}^2 \right] m_\ell^{k+q}, \quad (5.33)$$

A susceptibilidade longitudinal à campo nulo é obtida a partir da definição  $\chi_n = \left( \frac{\partial m_n}{\partial H} \right)_{H=0}$ , onde  $m_n$  é a magnetização de cada camada da super-rede aqui tratada. Assim, aplicando a definição encontramos as mesmas expressões para a susceptibilidade quando tratamos a super-rede F, Eqs.(5.11)-(5.12), onde devemos ainda trocar  $J_{as} \rightarrow J_{SF}$ ,  $J_{ab} \rightarrow J_F$  e  $J_n \rightarrow J_F$ , com a condição  $n < \frac{\ell}{2}$  (onde  $n$  é o número de camadas). Para  $n > \frac{\ell}{2} + 1$  temos uma super-rede AF, e portanto as Eqs.(5.11)-(5.12) são configuradas para este sistema, com já mencionamos anteriormente na subseção 5.2.1, com a permuta de  $J_{bs} \rightarrow J_{SAF}$ ,  $J_{ab} \rightarrow J_{AF}$  e  $J_n \rightarrow J_{AF}$ . No caso em que  $n = \frac{\ell}{2}$  e  $n = \frac{\ell}{2} + 1$ , a susceptibilidade tem a mesma forma da Eq.(5.12) com as funções  $G(T, J_F, J_{AF}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1})$  e  $G'(T, J_F, J_{AF}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1})$  dadas no apêndice C.

A energia interna deste sistema é determinada com a combinação de resultados já encontrados para a super-rede F e AF. Para  $n < \frac{\ell}{2}$  temos um sistema F, então tomamos as Eqs.(5.14)-(5.16) do sistema F. Para  $n > \frac{\ell}{2} + 1$  o sistema AF. Para  $n = \frac{\ell}{2}$  temos

$$u_n = -\frac{1}{2} \left\{ J_F^2 \beta \eta_x V_{n1}^F(T, J_F, J_{AF}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) + J_F^2 \beta \eta_y V_{n2}^F(T, J_F, J_{AF}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) + J_F V_{n3}^F(T, J_F, J_{AF}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) + [6J_F m_n + 2J_F m_{n-1} + (J_{AF} + J_F) m_{n+1}] V_{n4}^F(T, J_F, J_{AF}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) \right\}, \quad (5.34)$$

e para  $n = \frac{\ell}{2} + 1$  obtemos

$$u_n = -\frac{1}{2} \left\{ J_{AF}^2 \beta \eta_x V_{n1}^{AF}(T, J_F, J_{AF}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) + J_{AF}^2 \beta \eta_y V_{n2}^{AF}(T, J_F, J_{AF}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) + J_{AF} V_{n3}^{AF}(T, J_F, J_{AF}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) + \right.$$

$$\left[ 6J_{AF}m_n + (J_{AF} + J_F)m_{n-1} + 2J_{AF}m_{n+1} \right] V_{n4}^{AF}(T, J_F, J_{AF}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) \Big\}, \quad (5.35)$$

onde os termos  $V^{F,AF}(T, J_F, J_{AF}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1})$  são detalhados no apêndice C. Portanto, das Eqs.(5.29) - (5.33) obtemos a magnetização total  $m = \frac{1}{\ell} \sum_{n=1}^{\ell} m_n$  bem com a susceptibilidade, e da Eq.(5.34) a energia média e posteriormente por derivação numérica encontramos o calor específico.

## 5.4 Comportamento Crítico da Super-rede

Nesta seção, estamos interessados nos cálculos da criticalidade do sistema caracterizado por uma super-rede F e AF alternada, onde nessa condição a magnetização tende a zero. Conseqüentemente, todos os termos de ordem superiores aos lineares são desconsiderados, e obtemos um conjunto de equações lineares. Para uma super-rede F alternada ficamos com o seguinte conjunto de equações:

$$m_1 = [a_{1,101}(T, J_{as}, J_{ab}) + a_{1,110}(T, J_{as}, J_{ab})]m_1 + a_{2,100}(T, J_{as}, J_{ab})m_2; \quad (5.36)$$

$$m_n = a_{2,n00}(T, J_n, J_{ab})m_{n-1} + [a_{1,n01}(T, J_n, J_{ab}) + a_{1,n10}(T, J_n, J_{ab})]m_n + a_{2,n00}(T, J_n, J_{ab})m_{n+1}; \quad (5.37)$$

$$m_\ell = [a_{1,101}(T, J_{bs}, J_{ab}) + a_{1,110}(T, J_{bs}, J_{ab})]m_\ell + a_{2,100}(T, J_{bs}, J_{ab})m_{\ell-1}. \quad (5.38)$$

As Eqs.(5.36)-(5.38) podem ser reescritas na forma matricial  $AM = 0$ , onde  $M$  é a matriz

das magnetizações do sistema e  $A$  a matriz dos coeficientes, ou seja

$$\begin{pmatrix} a_s & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & b & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & a & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & b & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 1 & a & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 1 & b_s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_1 \\ m_2 \\ m_3 \\ m_4 \\ \vdots \\ m_n \\ \vdots \\ m_\ell \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (5.39)$$

Os elementos da matriz  $A$  estão associados aos coeficientes das Eqs.(5.36)-(5.38) como segue:

$$a_s = \frac{[a_{1,101}(T, J_{as}, J_{ab}) + a_{1,110}(T, J_{as}, J_{ab})] - 1}{a_{2,100}(T, J_{as}, J_{ab})}; \quad (5.40)$$

$$b, a = \frac{[a_{1,n01}(T, J_{b,a}, J_{ab}) + a_{1,n10}(T, J_{b,a}, J_{ab})]}{a_{2,n00}(T, J_{b,a}, J_{ab})}; \quad (5.41)$$

$$b_s = \frac{[a_{1,101}(T, J_{bs}, J_{ab}) + a_{1,110}(T, J_{bs}, J_{ab})] - 1}{a_{2,100}(T, J_{bs}, J_{ab})}. \quad (5.42)$$

A solução não trivial desse sistema será quando  $\det(A) = 0$ , encontrando uma relação generalizada para o determinante da matriz  $A$  dada por

$$\det(A_{2\ell}) = \left[ a_s b_s - \left( \frac{a_s}{a} - \frac{b_s}{b} \right) \right] \det(B_{2\ell-2}) + \left[ 1 - \left( \frac{a_s}{a} - \frac{b_s}{b} \right) \right] \det(B_{2\ell-4}), \quad (5.43)$$

com a relação de recorrência

$$\det(B_{2\ell}) = (ab - 2) \det(B_{2\ell-2}) - \det(B_{2\ell-4}). \quad (5.44)$$

Resolvemos a relação de recorrência acima obtemos

$$\det(B_{2\ell}) = \frac{1}{\sinh(\theta)} \{ \sinh[(\ell + 1)\theta] + \sinh(\ell\theta) \}, \quad (5.45)$$

onde  $ab - 2 = 2 \cosh(\theta)$ .

Para o caso em que  $ab > 2$  não teremos solução para a Eq.(5.45), ou seja, raízes reais. Se  $ab \leq 2$  teremos valores de  $\theta$  imaginários ( $\theta = i\varphi$ ) e a função hiperbólica comporta-se como função trigonométrica de  $\varphi$ . A solução para a Eq.(5.43), a temperatura crítica, será obtida fazendo  $\det(A_{2\ell}) = 0$  e conseqüentemente  $\varphi = \frac{2\pi}{2\ell+1}$ . Da Eq.(5.43) podemos obter, a partir das condições acima apresentadas, a temperatura crítica do filme fino com a configuração de super-rede alternada F e AF de tamanho  $\ell$  (as camadas são medidas em unidades de rede e constantes em nossos cálculos).

## 5.5 Resultados e Discussões

Nesta seção apresentamos as curvas que descrevem o comportamento das propriedades térmica e magnética de uma super-rede magnética alternada com interações de troca tipo ferromagnética (F) e antiferromagnética (AF), como também o comportamento crítico do sistema, no modelo quântico de Heisenberg isotrópico.

O método numérico usado, para a determinação das raízes de um sistema de equações acopladas não lineares, foi o de Newton-Raphson. Nesse processo usamos o método de decomposição  $LU$ , onde o sistema de equações é reduzido a um par de sistemas triangulares com matrizes  $L$  (matriz triangular inferior) e  $U$  (matriz triangular superior).

As grandezas termodinâmicas são agora analisadas segundo o tipo de material (A e B), que se configura com o tipo de interação de troca entre eles. Arranjamos quatro tipos de super-redes: o primeiro construído tendo interações de troca do tipo F, arranjados alternadamente caracterizados por materiais A e B; o segundo tem o mesmo arranjo mas interações de troca do tipo AF; o terceiro apresenta um arranjo alternado entre substâncias com interações F e AF; o quarto, e último, é formado por um conjunto de  $\ell_1$  camadas de material com interação de troca F e  $\ell_2$  camadas de material com interação de troca do tipo AF, onde  $\ell = \ell_1 + \ell_2$  (sendo  $\ell$  um número par, inclusive para os outros arranjos). Assim, para o primeiro e segundo arranjos as interações de troca são dadas por: *configuração 1* ( $J_{as} = J_{bs} = J_a = J_b = J_{ab} = 1.0$ ), *configuração 2* ( $J_{as} = J_{bs} = 0.5$ ,  $J_a = 1.0$ ,  $J_b = 0.5$ ,  $J_{ab} = 0.5$ ), *configuração 3* ( $J_{as} = J_{bs} = 0.5$ ,  $J_a = 1.0$ ,  $J_b = 0.5$ ,  $J_{ab} = 2.0$ ). No caso do terceiro e quarto arranjos adotamos as seguintes

configurações: *configuração 1* ( $J_{SF} = J_{SAF} = J_F = J_{AF} = 1.0$ ), *configuração 2* ( $J_{SF} = J_F = 0.5$  e  $J_{SAF} = J_{AF} = 1.0$ ), *configuração 3* ( $J_{SF} = J_F = 1.0$  e  $J_{SAF} = J_{AF} = 0.5$ ). Estudamos esses arranjos em função da temperatura reduzida  $\frac{k_B T}{J}$ , onde em cada configuração fizemos as interações de troca serem iguais a um múltiplo de  $J$ .

### 5.5.1 Super-rede com configurações F e AF

#### a) Magnetização

A partir do conjunto de Eqs.(5.7)-(5.9), obtemos o comportamento da magnetização em função da temperatura reduzida, mostrada na Fig.(5.4) para a super-rede F e Fig.(5.5) para a super-rede AF, no modelo de Heisenberg isotrópico ( $\eta_x = \eta_y = 1.0$ ) de spin 1/2 numa rede cúbica simples, para as diferentes configurações em um filme com tamanho  $\ell = 10$ . Observamos que mudanças nas configurações modificam as temperaturas críticas dos sistemas F e AF na ordem:  $T(\text{configuração3}) > T(\text{configuração1}) > T(\text{configuração2})$ . Qualitativamente, o comportamento da magnetização está de acordo com o previsto fisicamente não havendo descontinuidade, caracterizando assim uma transição de fase de 2<sup>a</sup> ordem. Notamos também que há um cruzamento entre as curvas de configurações 1 e 3, de forma mais acentuada para a super-rede AF. Este cruzamento se dá pelo fato da magnetização das camadas de material B serem menores que as das camadas de material do tipo A na configuração 3, veja Fig.(5.7) para o sistema F e Fig.(5.9) para o AF. A interação de troca entre as camadas,  $J_{ab}$ , produz o efeito do cruzamento, com  $J_{ab} = 2J$ , levando os sistemas a temperaturas críticas  $T_c^{(3)} = 5.413$  e  $T_N^{(3)} = 6.414$ .

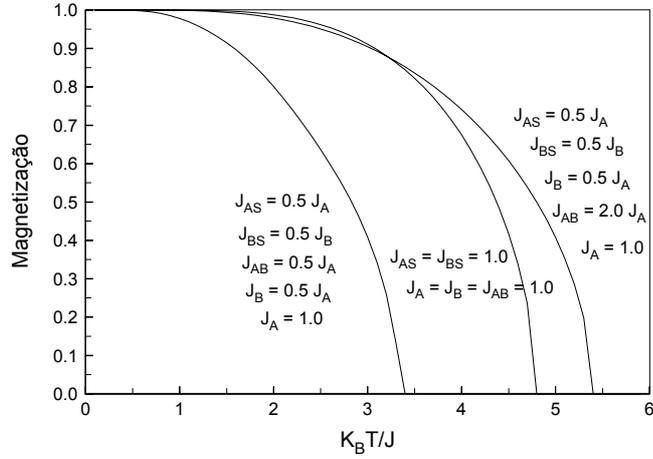


Figura 5.4: Dependência da magnetização com a temperatura reduzida para uma super-rede Heisenberg alternada ferromagnética. Apresentamos as curvas da magnetização para vários valores das interações de troca  $J_{AS}$ ,  $J_{BS}$ ,  $J_{AB}$ ,  $J_A$ ,  $J_B$ .

Nas Figs.(5.6) e (5.7) para o sistema F, e Figs.(5.8) e (5.9) para o sistema AF, temos a magnetização *versus* camada (com número total de camadas  $\ell = 10$ ) para vários valores da razão  $\frac{T}{T_c(\ell=10)} = 0.1, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9, 0.98$ , apresentadas em ordem decrescente. Observamos que na configuração 1, a magnetização da superfície e de camadas adjacentes desordenam primeiro que as do interior do sistema (*bulk*). No caso da configuração 2 temos um comportamento oscilatório de ordem-desordem nas camadas do filme próximo da temperatura crítica  $T_c^{(3)} = 5.413$ , e  $T_N^{(3)} = 6.414$  para a super-rede AF. É observado também uma simetria entre as camadas do filme diametralmente opostas.

## b) Susceptibilidade

A susceptibilidade longitudinal magnética para a super-rede alternada F e AF é apresentada na Fig.(5.10) e Fig(5.13), respectivamente, em função da temperatura crítica à campo nulo para as três configurações de interação de troca propostas. Este resultado é encontrado a partir das Eqs.(5.11)-(5.13). Vemos que a descontinuidade da função  $\chi(T)$ , localizada na temperatura

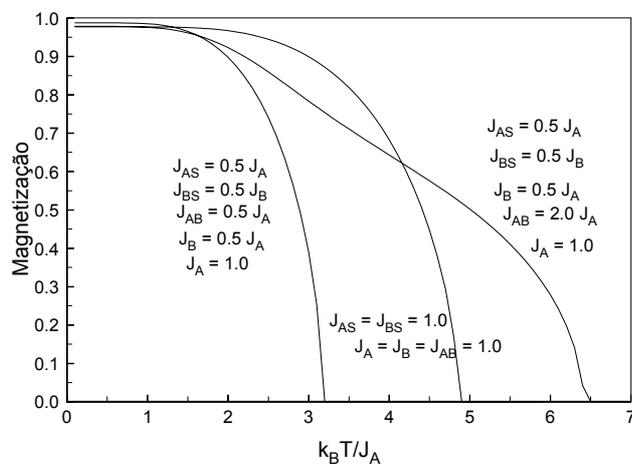


Figura 5.5: Dependência da magnetização com a temperatura reduzida para uma super-rede Heisenberg alternada antiferromagnética. Apresentamos as curvas da magnetização para vários valores das interações de troca  $J_{AS}$ ,  $J_{BS}$ ,  $J_{AB}$ ,  $J_A$ ,  $J_B$ .

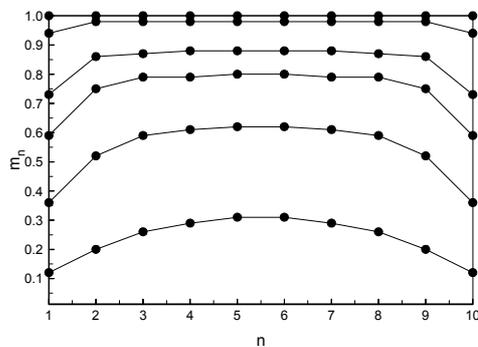


Figura 5.6: Perfil da magnetização de cada camada da super-rede Heisenberg ferromagnética. Na ordem decrescente apresentamos as curvas para  $T/T_c(\ell = 10) = 0.1, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9$  e  $0.98$  com  $J_{AS} = J_{BS} = J_A = J_B = J_{AB} = 1.0$ .

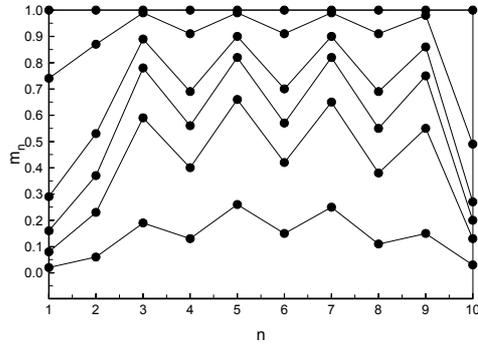


Figura 5.7: Perfil da magnetização de cada camada da super-rede Heisenberg ferromagnética. Na ordem decendente apresentamos as curvas para  $T/T_c (\ell = 10) = 0.1, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9$  e  $0.98$  com  $J_{AS} = J_{BS} = J_B = 0.5J_A$ ,  $J_{AB} = 2J_A$  e  $J_A = 1.0$ .

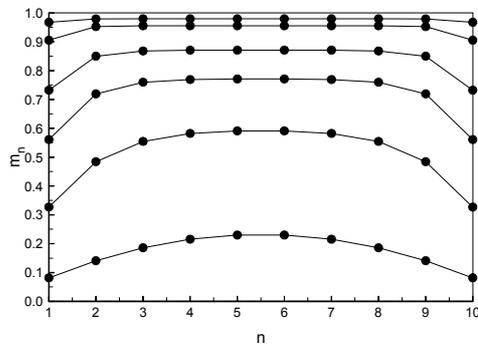


Figura 5.8: Perfil da magnetização de cada camada da super-rede Heisenberg antiferromagnética. Na ordem decendente apresentamos as curvas para  $T/T_c (\ell = 10) = 0.1, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9$  e  $0.98$  com  $J_{AS} = J_{BS} = J_A = J_B = J_{AB} = 1.0$ .

crítica, depende da configuração adotada. Nas Figs.(5.11) e (5.12) para super-rede F e nas Figs.(5.14) e (5.15) para a super-rede AF apresentamos a susceptibilidade por camada, com os mesmos valores de  $\frac{T}{T_c(\ell=10)}$  usados para a magnetização. Nessas figuras, as curvas  $\chi$  versus camada estão em ordem crescentes dos valores de  $\frac{T}{T_c(\ell=10)}$ . Um comportamento oscilatório é também observado próximo da temperatura crítica  $T_c^{(3)}$  e  $T_N^{(3)}$ , mostrado nas Figs.(5.12b) e (5.15).

### c) Energia e Calor Específico

Nas Figs.(5.16) e (5.19) temos o comportamento da energia interna em função da temperatura, obtida a partir das Eqs.(5.14)-(5.16), para as super-redes F e AF alternada para as três configurações. A influência da interação de troca na energia interna torna o sistema mais correlacionado, caso da configuração 1, e menos correlacionado para a configuração 2. Este efeito, como já visto na magnetização, torna a super-rede menos sensível (configuração 1) ou mais sensível (configuração 2) à mudança de temperatura. A energia interna por camada apresenta também um comportamento oscilatório próximo a temperatura crítica da configuração 3.

O calor específico foi obtido a partir de derivação numérica da energia interna. A influência da interação de troca no calor específico produz um deslocamento do ponto de descontinuidade, onde sofre transição de fase. Apesar disto, o comportamento do calor específico é o fisicamente esperado, sendo descontínuo em  $T = T_c$  para o F e  $T = T_N$  para o AF, indo a zero quando  $T \rightarrow 0$  (3ª lei da termodinâmica) e  $T \rightarrow \infty$ .

## 5.5.2 Super-rede alternada de camadas F e AF

Neste momento direcionamos nossa atenção ao estudo das propriedades térmica e magnética para uma super-rede com camadas constituídas de interações do tipo F e AF, mencionado no início dessa seção como terceiro arranjo.

### a) Magnetização

A partir das Eqs.(5.17)-(5.20) obtemos a dependência da magnetização da super-rede composta de camadas F e AF. Apresentamos os resultados na Fig.(5.24) para vários valores da interação de troca. A mistura de camadas, F e AF, produz na super-rede temperaturas de

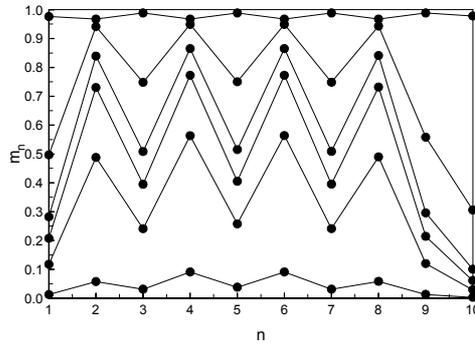


Figura 5.9: Perfil da magnetização de cada camada da super-rede Heisenberg antiferromagnética. Na ordem decendente apresentamos as curvas para  $T/T_c$  ( $\ell = 10$ ) = 0.1, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9 e 0.98 com  $J_{AS} = J_{BS} = J_B = 0.5J_A$ ,  $J_{AB} = 2J_A$  e  $J_A = 1.0$ .

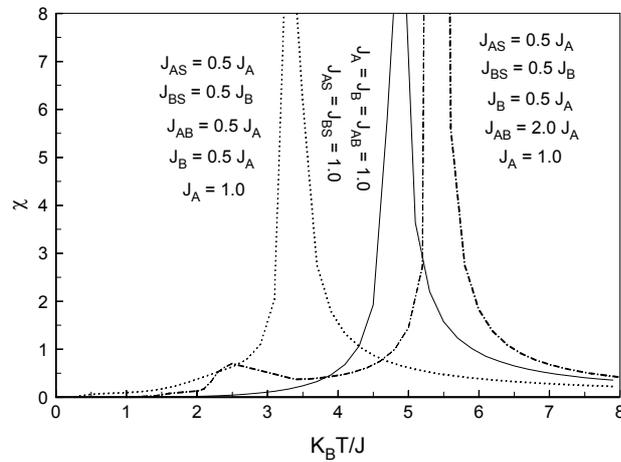


Figura 5.10: Comportamento da susceptibilidade em função da temperatura para uma super-rede Heisenberg ferromagnética alternada com vários valores da interação de troca.

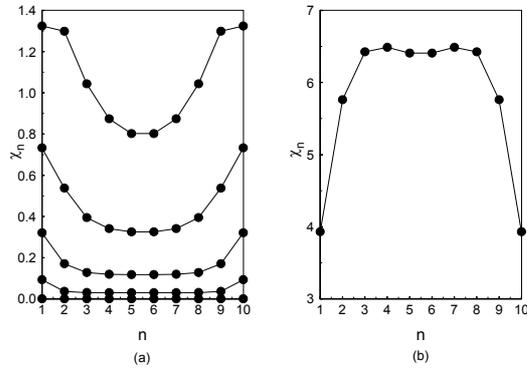


Figura 5.11: (a) Perfil da susceptibilidade magnética de cada camada da super-rede Heisenberg ferromagnética. Na ordem decendente apresentamos as curvas para  $T/T_c(\ell = 10) = 0.1, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9$  com  $J_{AS} = J_{BS} = J_A = J_B = J_{AB} = 1.0$ . (b) Para  $T/T_c(\ell = 10) = 0.98$ .

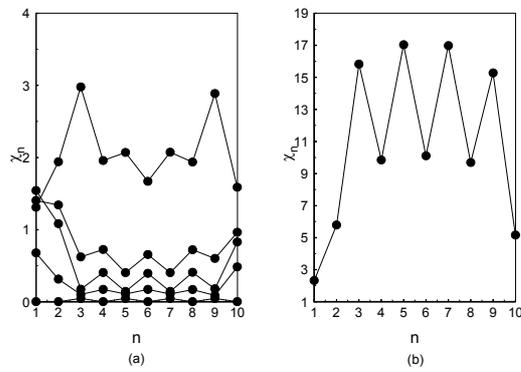


Figura 5.12: (a) Perfil da susceptibilidade magnética de cada camada da super-rede Heisenberg ferromagnética. Na ordem decendente apresentamos as curvas para  $T/T_c(\ell = 10) = 0.1, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9$  com  $J_{AS} = J_{BS} = J_B = 0.5J_A, J_{AB} = 0.5J_A$  e  $J_A = 1.0$ . (b) Para  $T/T_c(\ell = 10) = 0.98$ .

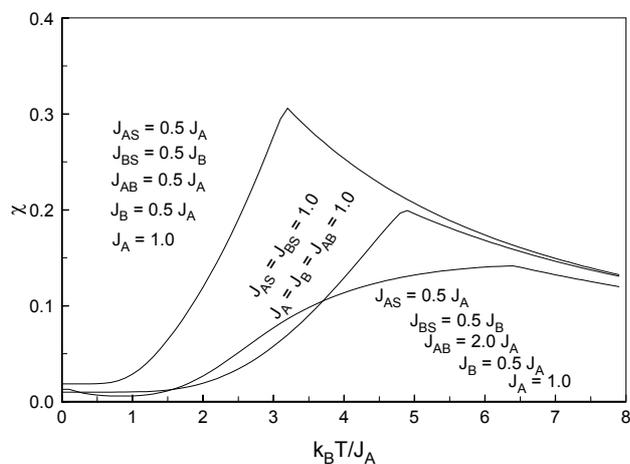


Figura 5.13: Comportamento da susceptibilidade logitudinal magnética em função da temperatura reduzida para uma super-rede Heisenberg antiferromagnética alternada. Apresentamos as curvas da magnetização para vários valores das interações de troca  $J_{AS}$ ,  $J_{BS}$ ,  $J_{AB}$ ,  $J_A$ ,  $J_B$ .

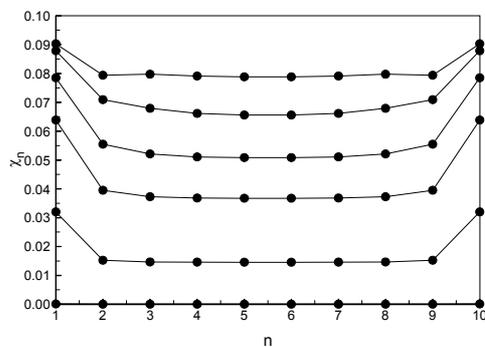


Figura 5.14: Perfil da susceptibilidade magnética de cada camada da super-rede Heisenberg antiferromagnética alternada. Na ordem decrescente apresentamos as curvas para  $T/T_c$  ( $\ell = 10$ ) = 0.1, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9 e 0.98 com  $J_{AS} = J_{BS} = J_A = J_B = J_{AB} = 1.0$ .

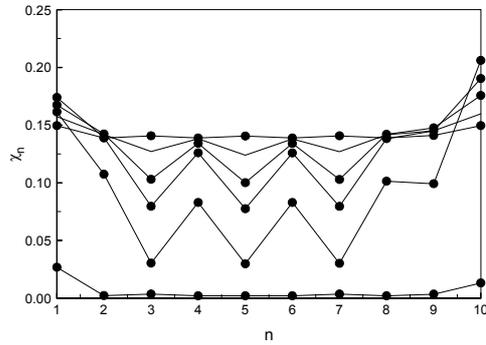


Figura 5.15: Perfil da susceptibilidade magnética de cada camada da super-rede Heisenberg anti-ferromagnética alternada. Na ordem decendente apresentamos as curvas para  $T/T_c$  ( $\ell = 10$ ) = 0.1, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9 e 0.98 com  $J_{AS} = J_{BS} = J_B = 0.5J_A$ ,  $J_{AB} = 2J_A$  e  $J_A = 1.0$ .

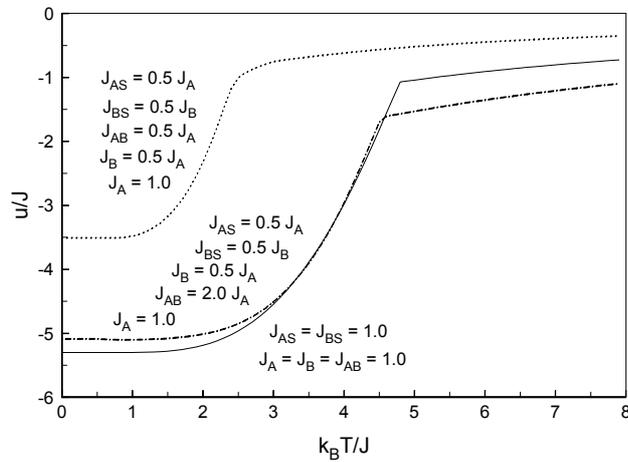


Figura 5.16: Energia interna de uma super-rede Heisenberg ferromagnética alternada para vários valores de interação de troca em função da temperatura.

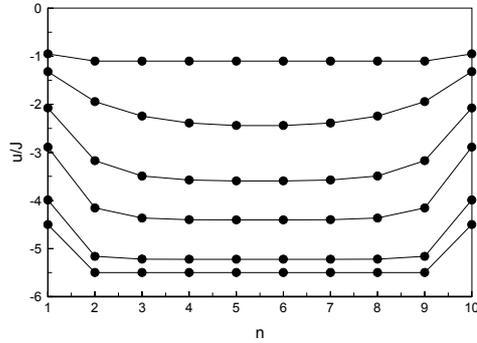


Figura 5.17: Energia interna por camada para uma super-rede Heisenberg ferromagnética alternada. Na ordem decendente apresentamos as curvas para  $T/T_c$  ( $\ell = 10$ ) = 0.1, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9 e 0.98 com  $J_{AS} = J_{BS} = J_A = J_B = J_{AB} = 1.0$ .

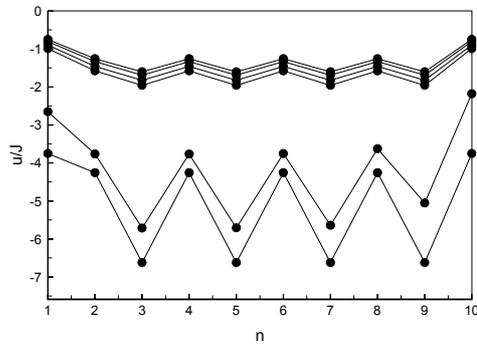


Figura 5.18: Energia interna de cada camada da super-rede Heisenberg ferromagnética alternada. Na ordem decendente apresentamos as curvas para  $T/T_c$  ( $\ell = 10$ ) = 0.1, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9 e 0.98 com  $J_{AS} = J_{BS} = J_B = 0.5J_A$ ,  $J_{AB} = 2J_A$  e  $J_A = 1.0$ .

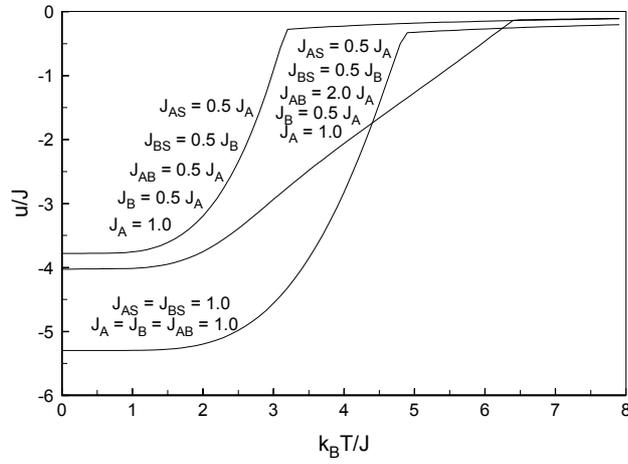


Figura 5.19: Energia interna de uma super-rede Heisenberg antiferromagnética alternada para vários valores de interação de troca em função da temperatura.

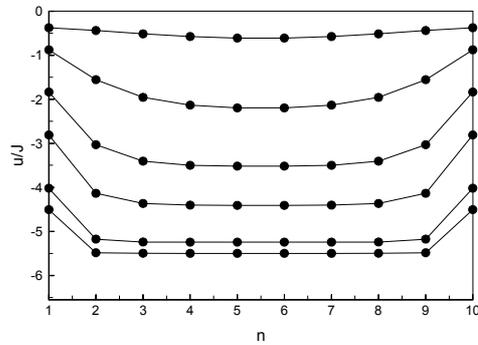


Figura 5.20: Energia interna por camada para uma super-rede Heisenberg antiferromagnética alternada. Na ordem decendente apresentamos as curvas para  $T/T_c (\ell = 10) = 0.1, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9$  e  $0.98$  com  $J_{AS} = J_{BS} = J_A = J_B = J_{AB} = 1.0$ .

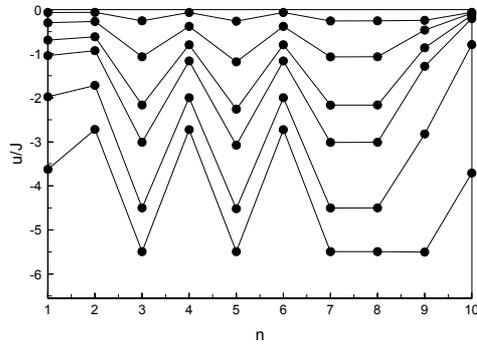


Figura 5.21: Energia interna de cada camada da super-rede Heisenberg antiferromagnética alternada. Na ordem decendente apresentamos as curvas para  $T/T_c$  ( $\ell = 10$ ) = 0.1, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9 e 0.98 com  $J_{AS} = J_{BS} = J_B = 0.5J_A$ ,  $J_{AB} = 2J_A$  e  $J_A = 1.0$ .

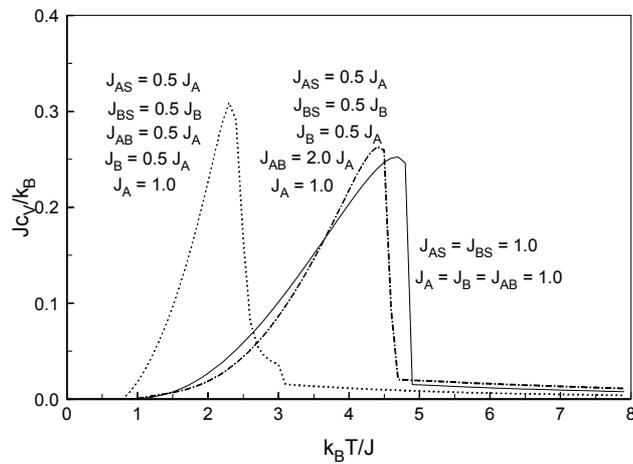


Figura 5.22: Calor específico de uma super-rede Heisenberg ferromagnética alternada para vários valores de interação de troca em função da temperatura.

transição diferentes comparadas aos casos que chamaremos aqui de puros: super-rede F ou AF. A magnetização por camada, veja Figs(5.25)-(5.27), tem comportamento oscilatório quando a interação de troca,  $J_F$  e  $J_{AF}$ , são diferentes. As curvas são apresentadas, na ordem decrescente, para  $T/T_{F/AF} (\ell = 10) = 0.1, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9$  e  $0.98$ , também para os outros resultados desta subseção.

### b) Susceptibilidade

A susceptibilidade para a super-rede composta (F/AF) é mostrada na Fig.(5.28) a partir das Eqs.(5.21)-(5.24). Observamos que a composição leva o sistema a ter um comportamento típico de uma super-rede AF, ou seja, a transição de fase ocorre em temperaturas críticas onde não há divergência na susceptibilidade magnética. Essa super-rede comporta-se como uma super-rede AF pura. Isto pode ser visto também na Fig.(5.32), onde vemos que a energia interna do sistema está muito próxima dos valores encontrados para uma super-rede AF pura. Para desordenarmos o sistema necessitamos fornecer energia térmica com valores próximos ao de uma super-rede AF pura. A susceptibilidade por camada é apresentada nas Figs.(5.29)-(5.31) e vemos que o comportamento oscilatório é mais evidente comparado com a super-rede AF pura.

### c) Energia Interna e Calor específico

A dependência da energia interna, para essa composição dada pelas Eqs.(5.25)-(5.28), com a temperatura é mostrada na Fig.(5.32) para diferentes valores da interação de troca  $J_F$  e  $J_{AF}$ . As *configurações 2 e 3* (correspondendo a  $J_{SF} = J_F = 0.5$  e  $J_{SAF} = J_{AF} = 1.0$ , e  $J_{SF} = J_F = 1.0$  e  $J_{SAF} = J_{AF} = 0.5$ , respectivamente) apresentam mesma energia interna para temperaturas próximas de zero. O comportamento da energia interna por camada é mostrado na Fig.(5.33) para a *configuração 1*. Para as *configurações 2 e 3* temos um comportamento análogo ao da *configuração 1*. O calor específico é apresentado da Fig.(5.34), onde vemos o seu comportamento descontínuo na temperatura crítica do sistema.

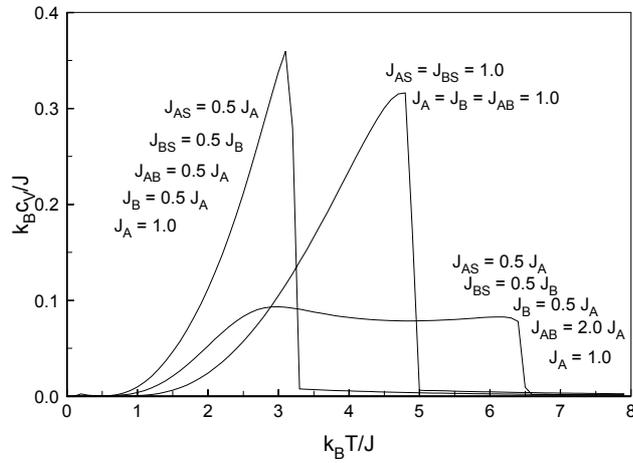


Figura 5.23: Calor específico de uma super-rede Heisenberg antiferromagnética alternada para vários valores de interação de troca em função da temperatura.

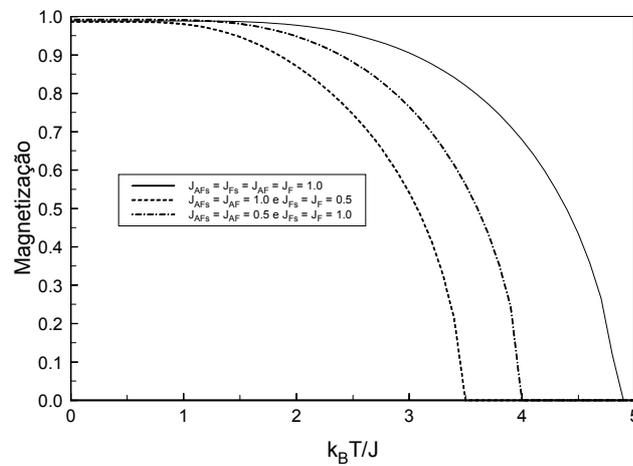


Figura 5.24: Dependência da magnetização com a temperatura reduzida para uma super-rede Heisenberg F e AF numa rede cúbica simples para alguns valores da interação de troca  $J_{SF}$  e  $J_{AF}$ .

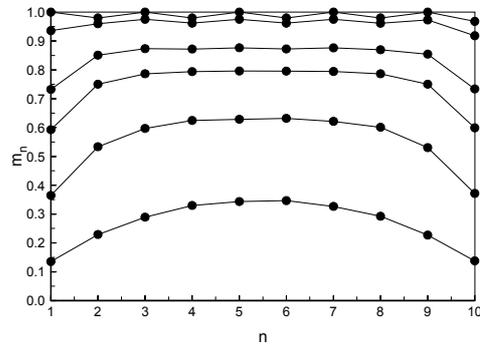


Figura 5.25: Comportamento da magnetização por camada para a super-rede Heisenberg alternada de camadas F e AF numa rede cúbica simples com interações de troca  $J_{SF} = J_{SAF} = J_F = J_{AF} = 1.0$ .

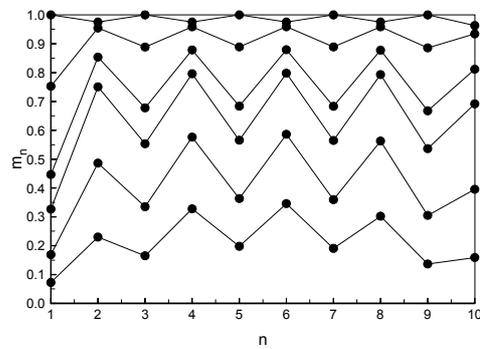


Figura 5.26: Comportamento da magnetização por camada para a super-rede Heisenberg alternada F e AF numa rede cúbica simples com interações de troca  $J_{SF} = J_F = 0.5$  e  $J_{SAF} = J_{AF} = 1.0$ .

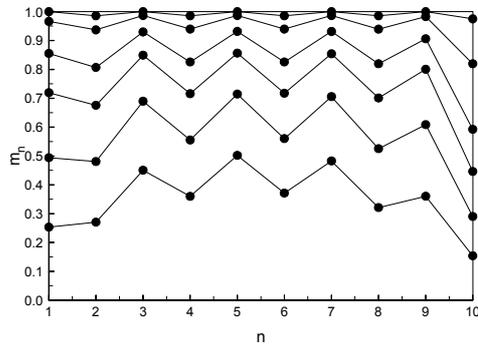


Figura 5.27: Comportamento da magnetização por camada para a super-rede Heisenberg alternada de camadas F e AF numa rede cúbica simples com interações de troca  $J_{SF} = J_F = 1.0$  e  $J_{SAF} = J_{AF} = 0.5$ .

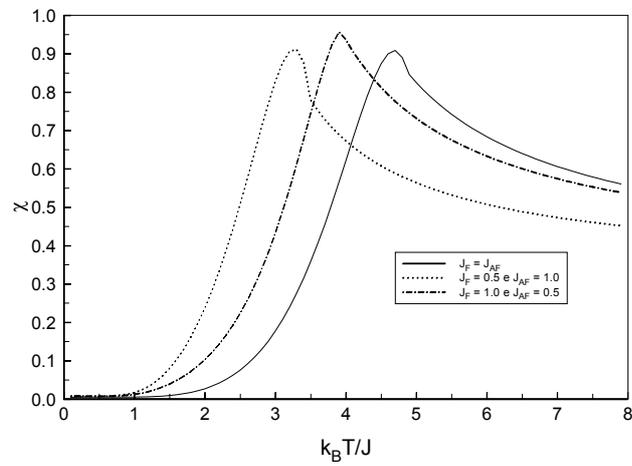


Figura 5.28: Susceptibilidade magnética de uma super-rede Heisenberg composta de materiais F e AF em camadas alternadas numa rede cúbica simples para diferentes interações de troca.

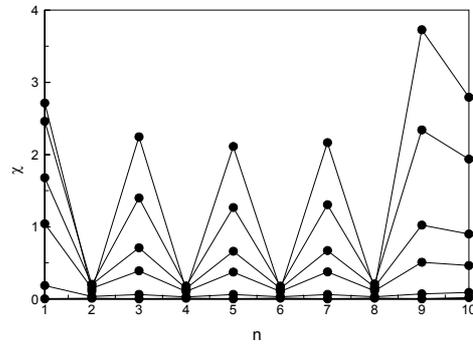


Figura 5.29: Valores da susceptibilidade magnética por camada para uma super-rede composta de materiais F e AF no modelo de Heisenberg isotrópico para a configuração 1:  $J_{SF} = J_{SAF} = J_F = J_{AF} = 1.0$ .

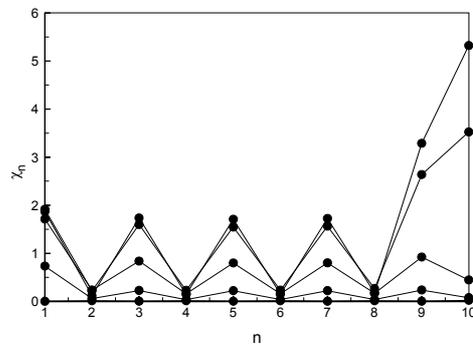


Figura 5.30: Susceptibilidade magnética por camada para uma super-rede Heisenberg composta de materiais F e AFn uma rede cúbica simples para a configuração 1:  $J_{SF} = J_F = 0.5$  e  $J_{SAF} = J_{AF} = 1.0$ .

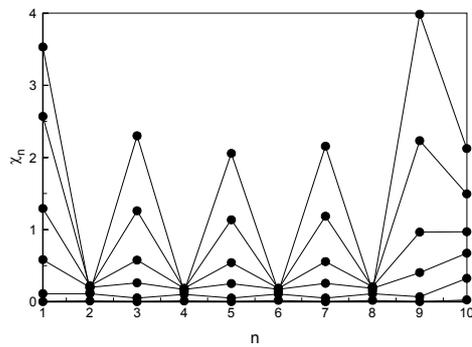


Figura 5.31: Susceptibilidade magnética por camada para uma super-rede Heisenberg composta de materiais F e AF numa rede cúbica simples para a configuração 1:  $J_{SF} = J_F = 1.0$  e  $J_{SAF} = J_{AF} = 0.5$ .

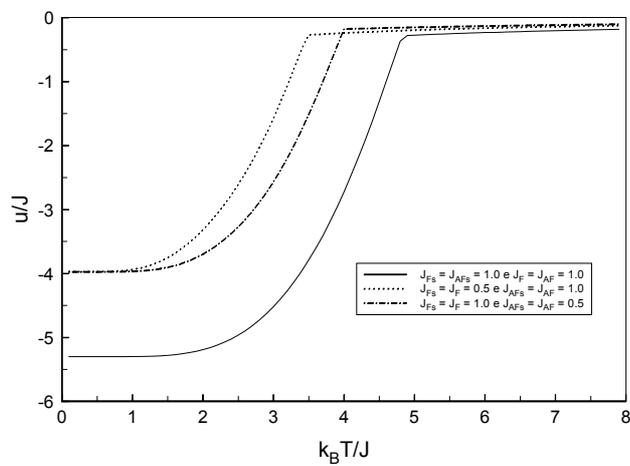


Figura 5.32: Energia interna da super-rede Heisenberg composta de camadas alternadas F e AF numa rede cúbica simples em função da temperatura reduzida para diferentes interações de troca.

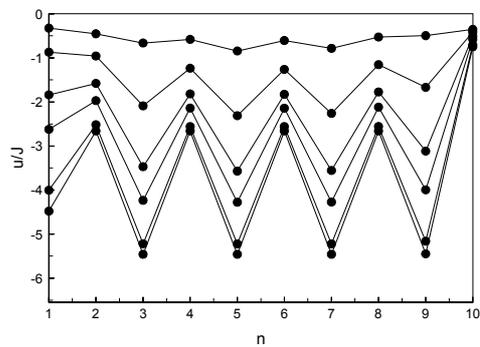


Figura 5.33: Energia interna por camada para uma super-rede Heisenberg AF numa rede cúbica. Na ordem decrescente apresentamos as curvas para  $J_{SF} = J_F = J_{SAF} = J_{AF} = 1.0$ .

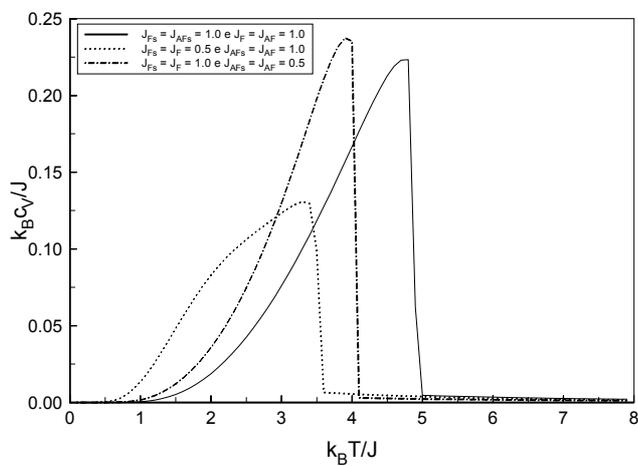


Figura 5.34: Calor específico da composição de super-rede Heisenberg F e AF em função da temperatura reduzida para diferentes valores da interação de troca numa rede cúbica simples.

### 5.5.3 Super-rede composta F/AF

Estudamos uma super-rede composta de  $\ell_1$  camadas F e  $\ell_2$  camadas AF (com  $\ell = \ell_1 + \ell_2$ ), formando uma pastilha composta de dois materiais diferentes. Ilustramos esse arranjo na Fig.(5.3). Apresentamos os resultados para três configurações adotadas: *configuração 1* ( $J_{SF} = J_{SAF} = J_F = J_{AF} = 1.0$ ), *configuração 2* ( $J_{SF} = J_F = 0.5$  e  $J_{SAF} = J_{AF} = 1.0$ ), *configuração 3* ( $J_{SF} = J_F = 1.0$  e  $J_{SAF} = J_{AF} = 0.5$ ).

#### a) Magnetização

A curva da magnetização em função da temperatura reduzida é obtida a partir das Eqs.(5.29)-(5.33). Na Fig.(5.35) temos a dependência da magnetização desse arranjo em função da temperatura reduzida com diferentes valores da interação de troca  $J_F$  e  $J_{AF}$ . Vemos que as configurações 1 e 2 têm a mesma temperatura crítica. A influência das camadas de material AF, na super-rede, pode ser observada nas figuras Fig.(5.36) e Fig.(5.37), onde a interação de troca  $J_F = J_{AF}$  (*configuração 1*) e  $J_{AF} = 2J_F$  (*configuração 2*), respectivamente. Em ambas as configurações a magnetização das camadas F vão a zero primeiro que as camadas AF, levando o sistema a temperaturas críticas quase iguais  $T_{F/AF} = 4.669$ (*configuração 1*) e  $4660$ (*configuração 2*). Na configuração 3, onde  $J_F = 2J_{AF}$ , ocorre o inverso das anteriores [veja Fig.(5.38)].

#### b) Susceptibilidade

A curva da susceptibilidade magnética para esse arranjo fica determinada com a combinação de resultados encontrados para a super-rede pura F e AF Eqs.(5.11)-(5.12). Portanto, na Fig.(5.39) mostramos o comportamento da susceptibilidade magnética em função da temperatura. A transição de fase é indicada nos pontos onde a curva da susceptibilidade sofre descontinuidade, correspondendo a temperatura crítica do sistema. Neste caso vemos que a descontinuidade é mais acentuada comparada a um super-rede AF, porém não ocorre a divergência que é observada numa super-rede F. Vemos então, que a composição das camadas F e AF produz esse efeito na susceptibilidade.

O comportamento da susceptibilidade em cada camada do sistema é observado nas Figs.(5.40)-(5.42) para as três configurações sugeridas. A influência da interação de troca produz um efeito oscilatório em  $\chi_n$  entre camadas F e AF.

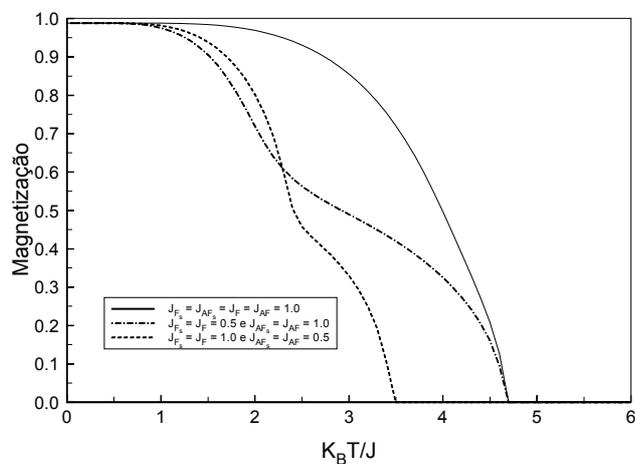


Figura 5.35: Magnetização da super-rede Heisenberg com camadas F superposta em camadas AF em função da temperatura reduzida numa rede cúbica simples. As curvas são apresentadas para vários valores da interação de troca F e AF.

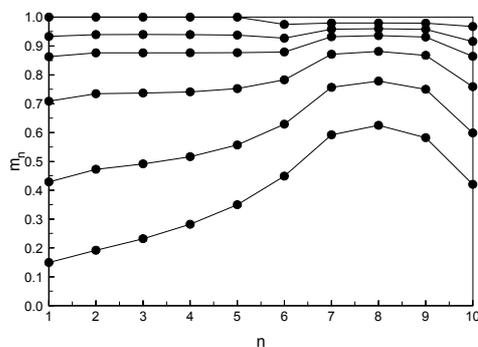


Figura 5.36: Perfil da magnetização por camada para uma super-rede Heisenberg composta de  $\ell_1$  camadas F e  $\ell_2$  camadas AF com  $J_F = J_{AF} = 1.0$ , numa rede cúbica simples. As curvas são apresentadas para  $T/T_{F?AF}$  ( $\ell = 10$ ) = 0.1, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9 e 0.98.

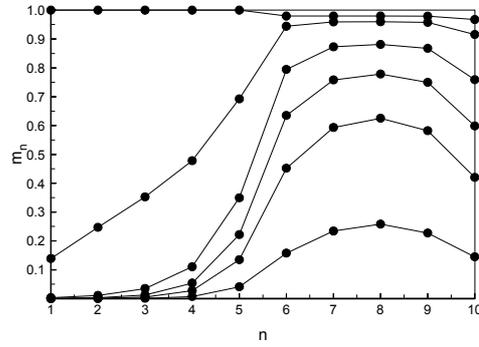


Figura 5.37: Perfil da magnetização por camada para uma super-rede Heisenberg composta de  $\ell_1$  camadas F e  $\ell_2$  camadas AF com  $J_F = 0.5$  e  $J_{AF} = 1.0$ , numa rede cúbica simples. As curva são apresentadas para  $T/T_{F?AF} (\ell = 10) = 0.1, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9$  e  $0.98$ .

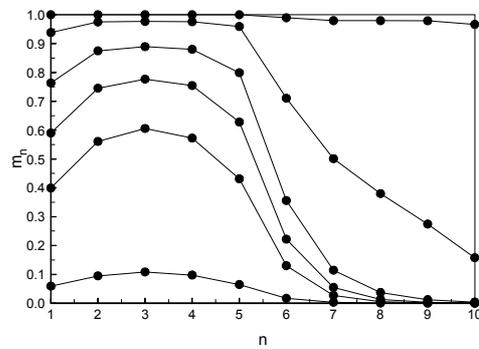


Figura 5.38: Perfil da magnetização por camada para uma super-rede Heisenberg composta de  $\ell_1$  camadas F e  $\ell_2$  camadas AF com  $J_F = 1.0$  e  $J_{AF} = 0.5$ , numa rede cúbica simples. As curva são apresentadas para  $T/T_{F?AF} (\ell = 10) = 0.1, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9$  e  $0.98$ .

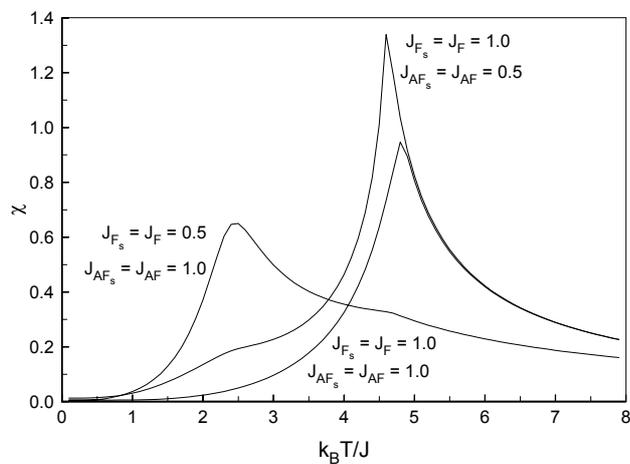


Figura 5.39: Perfil da susceptibilidade magnética em função da temperatura para um super-rede Heisenberg composta de camadas F e camadas AF para vários valores da interação de troca numa rede cúbica simples.

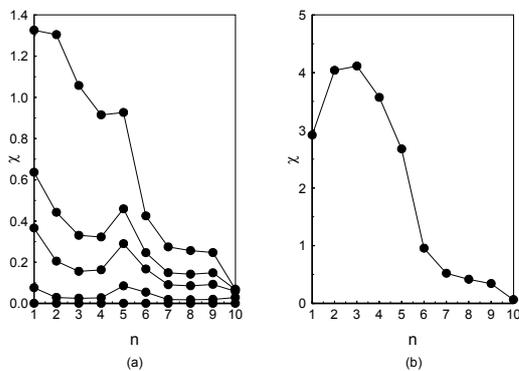


Figura 5.40: Susceptibilidade magnética da super-rede Heisenberg composta F e AF por camada como  $J_{SF} = J_{SAF} = J_F = J_{AF} = 1.0$ . (a) valores da susceptibilidade para  $T/T_{F,AF} (\ell = 10) = 0.1, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9$ , em ordem decrescente. (b) Para  $T/T_{F,AF} (\ell = 10) = 0.98$ .

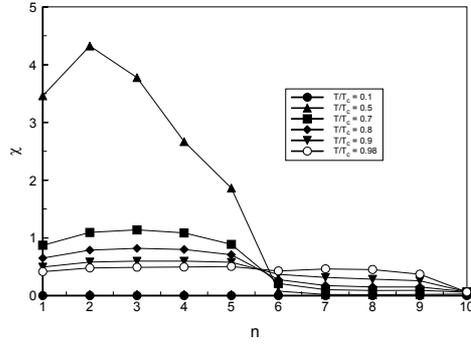


Figura 5.41: Susceptibilidade magnética da super-rede Heisenberg composta F e AF por camada como  $J_{SF} = J_F = 0.5$  e  $J_{SAF} = J_{AF} = 1.0$ , numa rede cúbica simples.

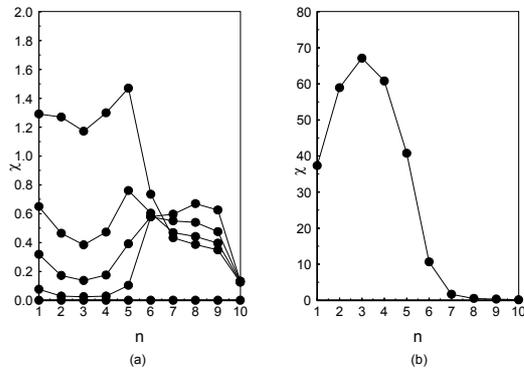


Figura 5.42: Susceptibilidade magnética da super-rede Heisenberg composta F e AF por camada como  $J_{SF} = J_F = 1.0$  e  $J_{SAF} = J_{AF} = 0.5$ . (a) valores da susceptibilidade para  $T/T_{F,AF} (\ell = 10) = 0.1, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9$ , em ordem decrescente. (b) Para  $T/T_{F,AF} (\ell = 10) = 0.98$ .

### c) Energia Interna e Calor específico

A energia interna é obtida com a combinação das Eqs.(5.14)-(5.16), quando tratamos a super-rede com as configurações F e AF, e as Eqs.(5.34) e (5.35). Mostramos na Fig.(5.43) a dependência da energia interna com a temperatura reduzida com diferentes valores da interação de troca. O comportamento da energia interna para cada camada é apresentado nas Figs.(5.44)-(5.46), onde observamos a mudança na energia em função do material. O calor específico apresenta um comportamento diferente dos casos anteriores. Para um temperatura  $T < T_{\text{crítico}}$  a curva mostra um pico, nas configurações 2 e 3, que não caracteriza uma transição de fase.

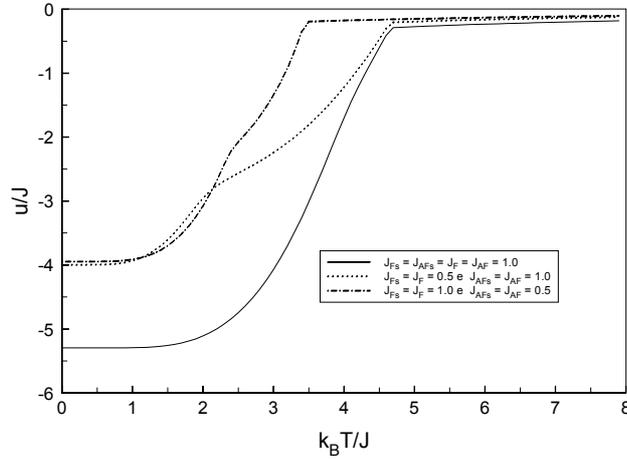


Figura 5.43: Energia interna da super-rede Heisenberg composta de camadas F e AF, numa rede cúbica simples, em função da temperatura reduzida para diferentes interações de troca.

A seguir apresentamos na tabela(5.1) as temperaturas críticas para os filmes finos, com número de camadas  $\ell = 10$ , estruturado em super-redes para as configurações sugeridas no modelo de Heisenberg isotrópico, na teoria de campo efetivo (EFT), associado à técnica do operador diferencial. Vemos na tabela(5.1) a influência da interação de troca na temperatura crítica da super-rede, evidente nas configurações 2 e 3, e a influência do material observado na configuração 1. Na seção a seguir estudaremos o comportamento crítico das super-redes para os arranjos de super-rede alternada F e AF e para camadas alternadas de F e AF.

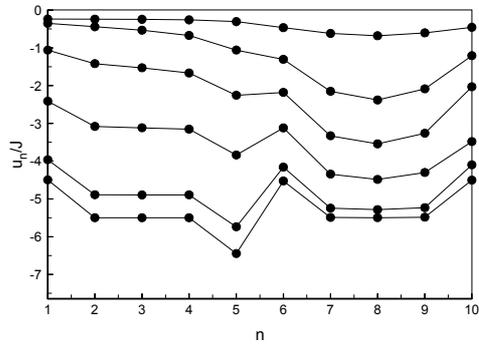


Figura 5.44: Energia interna por camada para uma super-rede Heisenberg composta F e AF numa rede cúbica simples. Na ordem decendente apresentamos as curvas para  $J_{SF} = J_F = J_{SAF} = J_{AF} = 1.0$ .

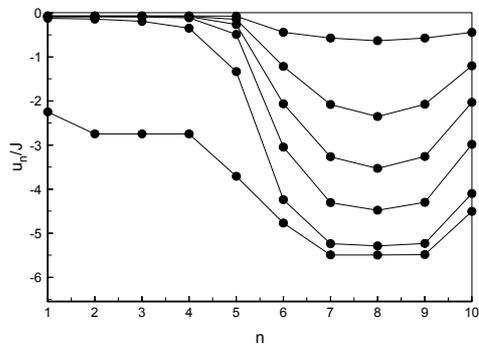


Figura 5.45: Energia interna por camada para uma super-rede Heisenberg composta F numa rede cúbica simples. Na ordem decendente apresentamos as curvas para  $J_{SF} = J_F = 0.5$  e  $J_{SAF} = J_{AF} = 1.0$ .

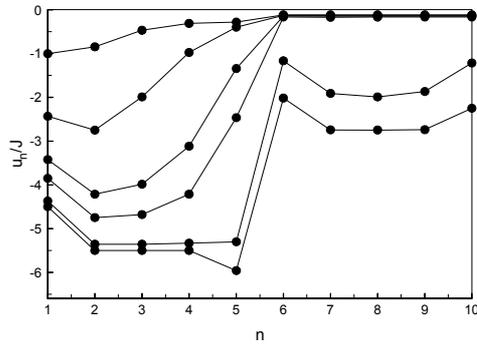


Figura 5.46: Energia interna por camada para uma super-rede Heisenberg composta F e AF numa rede cúbica simples. Na ordem decendente apresentamos as curvas para  $J_{SF} = J_F = 1.0$  e  $J_{SAF} = J_{AF} = 0.5$ .

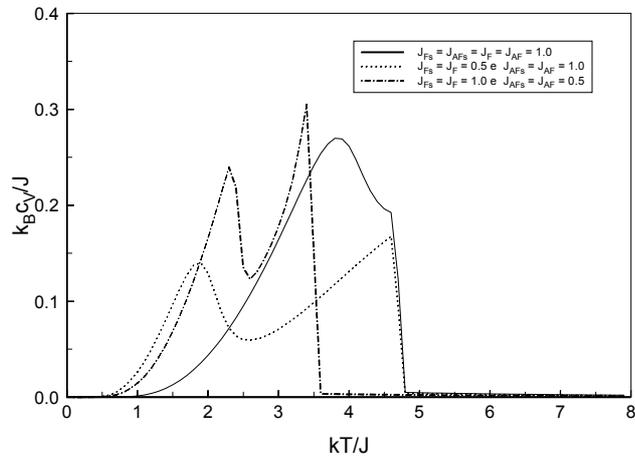


Figura 5.47: Calor específico da super-rede Heisenberg composta F e AF em função da temperatura reduzida para diferentes valores da interação de troca numa rede cúbica simples.

Tabela 5.1: Temperatura crítica para um super-rede constituída de materiais F e AF na forma pura, alternada e composta para o modelo de Heisenberg isotrópico

Super-Rede	configuração 1	configuração 2	configuração 3
F	4.869	3.245	5.521
AF	4.967	3.332	5.599
F-AF-F-AF	4.947	3.538	4.109
F-F-AF-AF	4.669	4.660	3.450

#### 5.5.4 Criticalidade da super-rede

Apresentamos os nossos resultados para as temperaturas críticas das super-redes para dois arranjos: super-rede alternada F e AF e com camadas alternadas F e AF, através dos diagramas de fases nos planos  $(T, \ell)$  e  $(T, c)$ , que são obtidos das Eqs.(5.43) e (5.45) para o modelo de Heisenberg isotrópico. Nas Fig.(5.48) e Fig(5.49) mostramos a dependência da temperatura crítica com o tamanho da super-rede para diferentes valores das interações de troca:  $J_{as} = J_{bs} = J_a = J_b = J_{ab} = 1.0$  correspondendo a linha tracejada,  $J_{as} = J_{bs} = J_b = 0.5, J_a = 1.0$  e  $J_{ab} = 2.0$  a linha contínua e  $J_{as} = J_{bs} = J_b = 0.5, J_a = 1.0$  e  $J_{ab} = 0.5$  a linha pontilhada. As linhas horizontais representam as temperaturas do *bulk* de cada condição mencionada anteriormente. Observamos que para valores pequenos de  $\ell$  a temperatura crítica é menor do que a temperatura do *bulk*, tendendo a esse valor quando o tamanho do filme é aumentado. Para o caso em que a interação interplanos  $J_{AB} = 2.0$ (linha contínua), ou seja, uma maior interação entre os planos das camadas, observamos valores de temperatura crítica maiores.

Nas Fig.(5.50) e Fig.(5.51) construímos um diagrama de fase mostrando a temperatura de Curie como função do parâmetro de modificação  $c$  associada as interações das superfícies ( $J_{AS} = cJ_A$  e  $J_{BS} = cJ_B$ ) e do *bulk*, para diferentes tamanhos do filme:  $\ell = 4, \ell = 10$  e  $\ell = \infty$ . A dependência da temperatura neste caso é observada apenas para valores pequenos de  $c$ , onde o sistema de tamanho  $\ell$  tende a mesma temperatura a partir de certo valor desse parâmetro. O aumento do parâmetro  $c$  provoca uma maior interação dos sítios pertencentes ao mesmo plano (interação intraplanos), assim o sistema desordena numa temperatura maior.

Para a composição de camadas alternadas entre F e AF mostramos nas Figs.(5.52) e (5.53). Neste caso, observamos que o comportamento da temperatura crítica com a concentração é

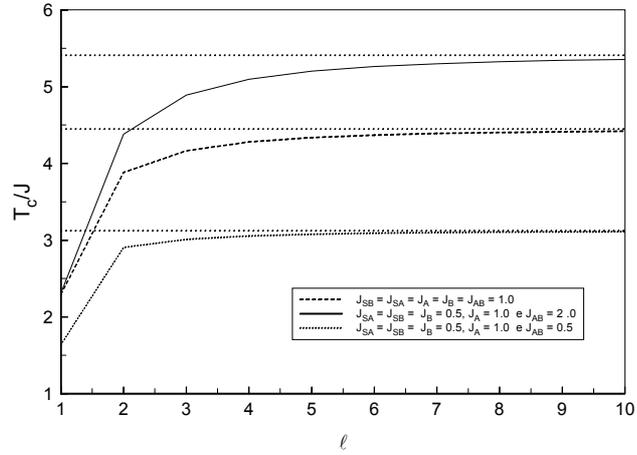


Figura 5.48: Dependência da temperatura crítica  $T_c/J$  para a super-rede Heisenberg alternada F numa rede cúbica simples com  $J_B = J_A$  e  $J_{AB} = J$  (linha tracejada),  $J_B = 0.5J$  e  $J_{AB} = 2J$  (linha contínua) e  $J_B = 0.5J$  e  $J_{AB} = 0.5J$  (linha pontilhada). Fizemos  $J = 1.0$ .

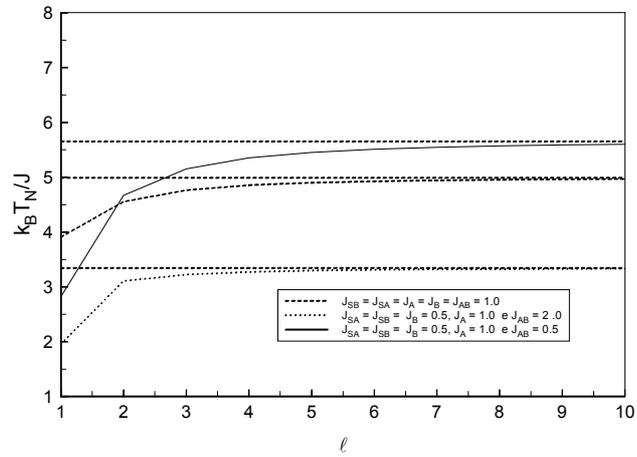


Figura 5.49: Dependência da temperatura crítica  $T_c/J$  para a super-rede alternada AF no de Heisenberg quântico de spin 1/2 isotrópico com  $J_B = J_A$  e  $J_{AB} = J$  (linha tracejada),  $J_B = 0.5J$  e  $J_{AB} = 2J$  (linha contínua) e  $J_B = 0.5J$  e  $J_{AB} = 0.5J$  (linha pontilhada).

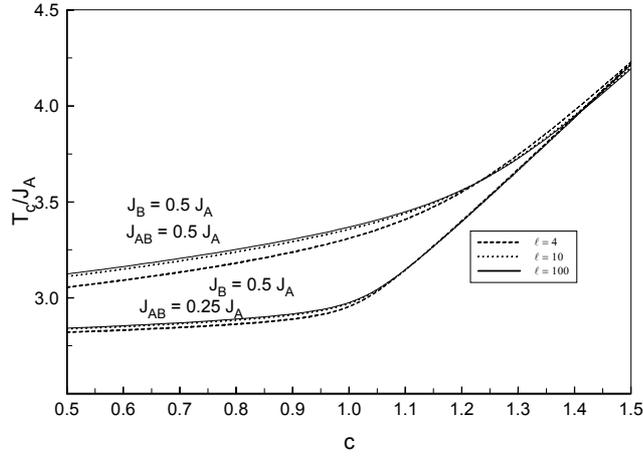


Figura 5.50: Dependência da temperatura crítica  $T_c/J_A$  da super-rede magnética alternada F com modificação das interações de troca nas superfícies de um parâmetro  $c$ , para  $J_B = 0.5J_A$ ,  $J_{AB} = 0.5J_A$  e  $J_B = 0.5J_A$ ,  $J_{AB} = 0.25J_A$  e  $J_A = 1.0$ .

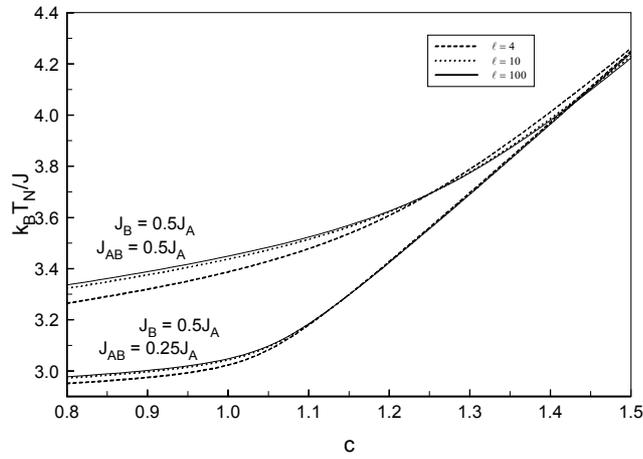


Figura 5.51: Dependência da temperatura crítica  $T_c/J_A$  da super-rede magnética alternada AF com modificação das interações de troca nas superfícies de um parâmetro  $c$ , para  $J_B = 0.5J_A$ ,  $J_{AB} = 0.5J_A$  e  $J_B = 0.5J_A$ ,  $J_{AB} = 0.25J_A$  e  $J_A = 1.0$ .

linear.

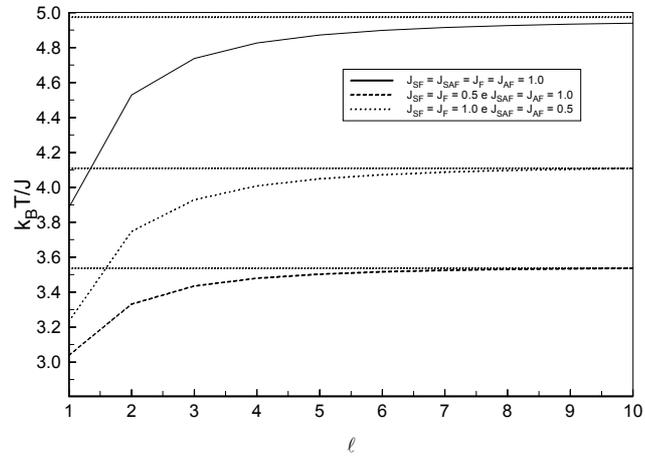


Figura 5.52: Dependência da temperatura crítica  $T_c/J$  para a super-rede composta F e AF no de Heisenberg quântico de spin 1/2 isotrópico com  $J_{SF} = J_{SAF} = J_F = J_{AF} = 1.0$  (linha contínua),  $J_{SF} = J_F = 0.5$  e  $J_{SAF} = J_{AF} = 1.0$  (linha tracejada) e  $J_{SF} = J_F = 1.0$  e  $J_{SAF} = J_{AF} = 0.5$  (linha pontilhada).

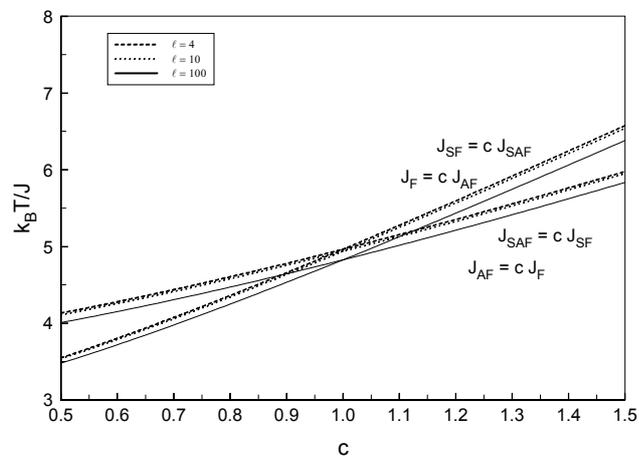


Figura 5.53: Dependência da temperatura crítica  $T_c/J_A$  da super-rede Heisenberg magnética alternada com modificação das interações de troca nas superfícies de um parâmetro  $c$ , para  $J_{SF} = cJ_{SAF}$ ,  $J_F = cJ_{AF}$  e  $J_{SAF} = cJ_{SF}$ ,  $J_{AF} = cJ_F$ .

# REFERÊNCIAS

- [1] CAMLEY, R. E., STAMPS, R. L., *J. Phys.: Condens. Matt.* 5, 3727 (1993).
- [2] HINCHEY, L. L., MILLS, D. L., *Phys. Rev. B* 33, 3329 (1986).
- [3] HINCHEY, L. L., MILLS, D. L., *Phys. Rev. B* 34, 3329 (1986).
- [4] FISHMAN, F., SCHWABLE, F., SCHWENK, D., *Phys. Lett. A* 121, 192 (1987).
- [5] CAMLEY, R. E., TILLEY, D. R., *Phys. Rev. B* 37, 3413 (1988).
- [6] TILLEY, D. R., *Solid Stat. Commum.* 65, 657 (1988).
- [7] BARNÁS, J., *J. Phys. C* 21, 1021 (1995).
- [8] BARNÁS, J., *J. Phys.: Condens. Matt.* 2, 7173 (1990).
- [9] MA, H. R., TASI, C. H., *Solid Stat. Commum.* 55, 499 (1985).
- [10] ZHENG, J. Q., KETTERSON, J. B., FALCO, C. M. SCHULLER, I. K., *J. Appl. Phys.* 53, 3150 (1982).
- [11] SY, H. K., OW, M. H., *J. Phys.: Condens. Matt.* 4, 5891 (1994).
- [12] THOMSON, M. A., ERSKINE, J. L., *Phys. Rev. B* 31, 6832 (1985).
- [13] DURR, W., TABORELLI, M., PAUL, O., GERMAR, R., GUDAT, W., PESCIA, D. LANDOTLT, M., *Phys. Rev. Lett.* 62, 206 (1989).
- [14] FARLE, M., BABERSCHKE, K., *Phys. Rev. Lett.* 58, 511 (1987).
- [15] MORISHITA, T, TOGAMI, Y., TSUSHIMA, K. *J. Phys. Soc. Japan* 54, 37 (1985).

- [16] TSUNASHIMA, S., ICHIKAWA, T. NAWATE, M. UCHIYAMA, S., *J. Physique Coll.* **49 C8**, 1803 (1988).
- [17] WELLER, D., ALVARADO, S. F., GUDAT, W. SCHRODER, K, CAMPAGNA, M, *Phys. Rev. Lett* **54**, 1555 (1985).
- [18] MOORJANI, K, COEY, J. M., *Magnetic Glasses*, New York: Elsevier, **cap. 6** (1984).
- [19] PAPPAS, D. P., KÄMPER, P., MILLER, B. P., HOSPSTER, H. FOWLER, D. E., BRUNDLE, C. R., LUNTZ, A. C., SHEN, Z. X., *Phys. Rev. Lett.* **66**, 504 (1991).
- [20] ERICKSON, R. P., MILLS, D. L., *Phys. Rev. B* **44**, 825 (1991).
- [21] DIEP, H. T., *Phys. Rev. B* **43**, 8641 (1991).
- [22] ZHANG ZI-DONG, *Phys. Rev, B* **55**, 9610 (1997).
- [23] BLOCH, F., *Z. Phys.* **61**, 206 (1930).
- [24] HOLSTEIN, T., PRIMAKOFF, *Phys. Rev.* **58**, 1098(1940).
- [25] KUBO, R., *Phys. Rev.* **87**, 568 (1952).
- [26] del MORAL, A., *J. Phys. Condens. Matter* **4**, 4687 (1992); **4**, 4703 (1992).
- [27] KAPLAN, T. A., *Phys. Rev.* **119**, 1460 (1960); **109**, 782 (1958).
- [28] SÁENZ, A. W., *Phys. Rev.* **125**, 1940 (1962).
- [29] WALLACE, D. C., *Phys. Rev.* **128**, 1614 (1962).
- [30] MEYER, H., HARRIS, A. B., *J. Appl. Phys.* **31**, 49 (1960).
- [31] DOUGLAS, R. L., *Phys. Rev.* **120**, 1612 (1960).
- [32] COFTA, H., *Bull. Acad. Pol. Sci., Ser. Sci. Math., Astr. Phys.* **VI**, 519 (1958).
- [33] ZIMAN, J. M., *Proc. Phys. Soc. London, Ser. A* **65**, 540 (1952); **65**, 548 (1952); **66**, 89 (1953).

- [34] KWO, J., HONG, M., Di SALVO, F. J., WASZCZAK, J. V., MAJKRZAK, C. F., *Phys. Rev. B* 35, 7925 (1987).
- [35] KWO, J., GYORGY, E.M., McWHAN, D. B., HONG, M., Di SALVO, F. J., VETTIER, C., BOWER, J. E., *Phys. Rev. Lett.* 55, 1402 (1985).
- [36] CAMLEY, R. E., RAHMAN, T. S., MILLS, D. L., *Phys. Rev. B* **27**, 261 (1983).
- [37] GRIMSDITH, M., KAHN, M. R., KUENY, A., SCHULLER, I. K., *Phys. Rev. Lett* **51**, 498 (1983).
- [38] PARKIN, S. S. P. , *Phys. Rev. Lett.* **67**, 3598 (1991).
- [39] SHINJO, T., HOSOITO, N., KAWAGUCHI, K., TAKADA, T., ENDOH, T., AJIRO, Y., FRIEDT, J. M., *J. Phys. Soc. Jpn.* 52, 3154 (1983).
- [40] KANEYOSHI, T., TAMURA, I., SARMENTO, E. F., *Phys. Rev. B.* 28, 6491 (1983).
- [41] FERCHMIN, A. R., MACEIJEWSKI, W., *J. Phys.: Condens. Matt.* 12, 4311 (1979).
- [42] TUCKER, J. W., *J. Magn. Magn. Matt.* 102, 144 (1991).
- [43] LI, Z. Y., XU, S. L., LIN, D. L., GEORGE, T. F., *Physica B* 182, 249 (1992).
- [44] ZHONG, J. L., YANG, C. Z., LI, J. L., *J. Phys.: Condens. Matt.* 3, 1301 (1991).
- [45] CHENG JIA, WANG, X., *J. Phys.: Condens. Matt.* 8, 5745 (1996).
- [46] SABER, A., AINANE, A., SABER, M., ESSAOUDI, I., DUJARDIN, F., STÈBÈ, B., *J. Phys.: Condens. Matt.* 12, 43 (2000).
- [47] AOUAD, N., LAABOUDI, B., KEROUAD, M., SABER, M., *Phys. Rev. B* 63, 54436 (2001).
- [48] TUCKER, J. W., SABER, M., PELITI, L., *Physica A* 206, 497 (1994).
- [49] SÁ BARRETO, F. C., FITTIPALDI, I. P., *Physica*, A129, 360 (1985).

## Capítulo 6

# Conclusão e Perspectivas Futuras

Neste trabalho utilizamos a técnica do operador diferencial via teoria de campo efetivo (EFT) para estudarmos as propriedades termodinâmicas e a criticalidade do modelo de Heisenberg com estrutura de filmes finos e super-redes. A influência do sinal da interação de troca (F e AF), do campo magnético externo  $H$  e do tamanho (número de camadas  $\ell$ ) do filme foram analisadas.

No capítulo 2, estudamos as propriedades térmica e magnética para o modelo de Ising antiferromagnético na presença de um campo externo  $H$  no interior (*bulk*) do sistema de uma cúbica simples ( $\mathfrak{z} = 6$ ). Usamos a técnica do operador diferencial via teoria de campo efetivo em aglomerado de um spin (EFT-1). Como resultado, encontramos as magnetizações  $m_s(T, H)$  e  $m(T, H)$  para vários valores e temperatura e campo  $H$ . A influência da temperatura e do campo externo é de produzir desordem no sistema, onde  $T_N(H > 0) < T_N(H = 0)$ . Por outro lado, a presença do campo  $H$  induz magnetização na direção axial produzindo, em baixas temperaturas, um crescimento da magnetização total  $m(T, H)$ , devido a existência do ordenamento AF. Na região de altas temperaturas, onde o ordenamento AF é destruído, a magnetização  $m(T, H)$  decresce com o aumento da temperatura. Entre as regiões de baixa e alta temperaturas a magnetização  $m(T, H)$  apresenta uma descontinuidade em  $T = T_N(H)$ , caracterizando a transição de fase ( $2^a$  ordem) deste sistema. A relação entre  $T_N$  e  $H$  é dada por uma linha contínua, que representa o limite de estabilidade entre as fases AF e P (paramagnética). Observamos uma anomalia na região de altos campo, onde a curva  $T_N$  versus  $H$  apresenta uma reentrância. Isto foi observado quando também tratamos o modelo de Ising-1/2 AF via MFT-

1. Esta reentrância não é observada nos métodos mais precisos, tal como simulação de Monte Carlo. Outra grandeza física importante, que é a susceptibilidade magnética, foi analisada em função de  $T$  e  $H$ . A susceptibilidade magnética total apresenta uma descontinuidade, em  $T = T_N(H)$ , indicando a transição de fase, onde sofre um deslocamento gradual por conta do campo  $H[T_N(H > 0) < T_N(H = 0)]$ . A transição também é observada na susceptibilidade *staggered* com uma divergência em  $T = T_N(H)$ . A energia interna em função da temperatura foi calculada e vimos que próximo de  $T = 0$ , todos os spins estão alinhados de forma antiparalela ( $\uparrow\downarrow\uparrow$ ). Isto é devido ao fato de todos os spins do aglomerado estarem correlacionados de maneira que a energia total  $u/J = 6$ , onde 6 é o número de coordenação. Através de derivação direta obtemos o calor específico, onde a medida que a temperatura cresce o calor específico aumenta monoticamente, e em  $T = T_N(H)$  sofre uma descontinuidade indicando assim a transição de fase.

No capítulo 3, analisamos o metamagneto quântico de spin 1/2 via EFT-2 no modelo de Heisenberg anisotrópico de spin 1/2, sem existência de superfícies delimitadoras introduzimos dois novos parâmetros ao sistema:  $\Delta$  (parâmetro de anisotropia) e  $\lambda J$  (interação interplano). Estudando o sistema no estado fundamental ( $T = 0$ ) em função dos parâmetros  $(\Delta, \lambda)$ , observamos que o campo crítico  $H_c(\Delta, \lambda)$  tem comportamento linear em função do parâmetro  $\lambda$ , para  $\Delta = 1$  (metamagneto Heisenberg isotrópico) e  $\Delta = 0$  (metamagneto Ising). Para  $T \neq 0$ , a criticalidade do sistema muda com o parâmetro  $\lambda$ . A influência do parâmetro  $\lambda$  é associada com a mudança da dimensionalidade do sistema, onde  $\lambda \rightarrow 0$  esperamos um comportamento 2d para o sistema. O efeito provocado por  $\lambda$  nas propriedades termodinâmicas é observado nas curvas características da magnetização, susceptibilidade, energia interna e calor específico, quando gera uma dependência  $T_N(\lambda, H)$ . No limite quase-2d ( $\lambda = 10^{-5}$ ), observamos a presença de um comportamento anômalo, para  $H \gtrsim 2.0J$ , 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  $\lambda$  pequeno e o aumento do campo  $H$  torna o sistema mais instável em direção a desordem. Ou seja, um regime paramagnético instável surge para um certo valor de  $H > H_c$ . Este fenômeno não é observado no modelo de Ising ( $\Delta = 1$ ), sendo portanto uma manifestação quântica do sistema. Essa anomalia é observada em resultados experimentais para o composto AF  $La_2CuO_4$ , indicando a forte influência da interação de

troca interplanar.

No capítulo 4, extendemos nossos estudos para tratarmos de estruturas nas formas de filmes finos Heisenberg F e AF. A presença de superfícies muda o comportamento das propriedades magnéticas e térmica associada a razão  $J_s/J$ , além do tamanho  $\ell$  do filme. A medida que crescemos o número de camadas do filme, a magnetização tende ao comportamento do *bulk*, devido a pouca influência da superfície no sistema. Por outro lado, mantendo fixo o número de camadas e variando a razão  $J_s/J$ , observamos que para  $J_s/J > (J_s/J)_{crit.}$  o forte acoplamento da superfície produz magnetização, próximo as bordas do filme, maior do que no interior. Isto também pode ser observado na susceptibilidade total para o filme F e *staggered* para o filme AF, ambos na ausência de campo externo em função da temperatura. A forte interação de superfície desloca gradualmente o ponto em que o sistema apresenta transição de fase, com temperaturas  $T_{c,N}(\ell) > T_{c,N}^b(\ell = \infty)$ . A energia interna, em função da temperatura, também responde ao efeito de superfície com valores de energia menores, em módulo, do que o *bulk*, por ter uma maior correlação na superfície, que reflete no comportamento do calor específico com valores máximos, ponto de transição, menores do que o *bulk*. Para  $J_s/J \leq (J_s/J)_{crit.}$  a magnetização de filme é menor do que o *bulk*, caracterizando uma fraco acoplamento na superfície, refletindo nas outras propriedades termodinâmicas: susceptibilidade, energia interna e calor específico. Estes comportamentos são observados em filmes com interações F e AF.

A influência do campo externo  $H$  no filme fino metamagneto Heisenberg AF foi analisada, assim como a dependência da temperatura crítica em função de  $H$  para  $\ell \geq 2$ . O aumento no valor de  $H$  faz crescer a magnetização total  $m$  do filme enquanto a magnetização  $m_s$  diminui. Ou seja, mais spins são flipados na direção do campo e conseqüentemente a magnetização total aumenta. Para valores altos do campo magnético, observamos um comportamento anômalo na região de baixa temperatura, analisado para um filme com  $\ell = 10$ , semelhante ao encontrado para o *bulk*. Este resultado pode ser tema para análises futuras de filmes finos com pequena interação entreplanos adjacentes. Não observamos tal comportamento na energia interna e no calor específico. Para três valores de  $\ell$  encontramos diferentes valores do campo crítico  $H_c(\ell)$ :  $H_c(\ell \geq 3) = 6.224$ ,  $H_c(1 < \ell < 3) = 5.210$  e  $H_c(\ell = 2) = 4.294$ , mostrando a influência da dimensionalidade ( $2d \rightarrow 3d$ ). Comparando as temperaturas críticas do filme fino F e AF, na ausência do campo  $H$ , temos  $T_N(\ell) > T_c(\ell)$  para o caso quântico e  $T_N(\ell) = T_c(\ell)$  para o

sistema clássico, e ambas aumentam com o incremento de  $\ell$  aproximando de forma assintótica da temperatura do *bulk*,  $T_N(\text{bulk})$  e  $T_c(\text{bulk})$ , para  $J_s/J < (J_s/J)_{\text{crit.}}$ . Sendo  $J_s/J > (J_s/J)_{\text{crit.}}$ ,  $T_{c,N}(\ell) > T_{c,N}(\text{bulk})$  e  $T_{c,N}(\ell)$  diminui com o incremento de  $\ell$ . No caso  $J_s/J = (J_s/J)_{\text{crit.}}$ , a temperatura crítica  $T_{c,N}(\ell)$  independe de  $\ell$ . Estudando a dependência da temperatura crítica com o número de coordenação, para um filme fino F sem campo externo, observamos a forte influência da estrutura da rede na temperatura crítica. O resultado numérico mostra que:  $T_c[\text{FCC}(111)] > T_c[\text{FCC}(001)]$  e comparado a resultados experimentais para filmes finos de  $\text{Ni}(001)$  e  $\text{Ni}(111)$  (estrutura FCC):  $T_c[\text{Ni}(111)] > T_c[\text{Ni}(001)]$ .

No capítulo 5, tratamos de super-redes Heisenberg F e AF, onde a termodinâmica e criticalidade foram analisadas em função de mudanças nas interações de troca: quanto ao sinal da interação (F e AF) e os valores delas. A mudança na configuração do sistema (valores da interação de troca  $J$  diferentes) modifica a temperatura de transição, mas mantém a característica da magnetização como uma função contínua. Para as super-redes F e AF com interação entreplanos  $J_{ab} = 0.5$  e  $2.0$  (e mantendo fixas as interações interplanos  $J_{as}, J_{bs}, J_a$  e  $J_b$ ), observamos um cruzamento entre as curvas  $m(T)$  para os referidos valores de  $J_{ab}$ , com maior ênfase na super-rede AF. Isto ocorre pela diferença nas magnetizações por camada, dos idealizados materiais A e B, ocasionado pela mudança na interação de troca dos mesmos. Outro fato importante, é o comportamento oscilatório, de ordem-desordem, da magnetização por camada para as super-redes em função da configuração e do sinal da interação de troca (F e AF), observado em resultados experimentais de super-rede formada de  $Gd/Y$ . O resultado observado na susceptibilidade das super-redes F e AF é uma dependência de  $\chi(T)$  com a configuração do sistema, onde a descontinuidade ocorre em pontos de temperaturas diferentes:  $T_{c,N}(\ell, J_{ab} = 2.0) > T_{c,N}(\ell, J_{ab} = 0.5)$ , e também é observado um comportamento oscilatório próximo da temperatura crítica. Na energia interna, a mudança na configuração, torna a super-rede menos sensível ou mais sensível à mudança de temperatura, apresentando também um comportamento oscilatório próximo a temperatura crítica. A influência da interação de troca no calor específico produz um deslocamento do ponto de descontinuidade, onde o sistema sofre transição de fase. A dependência da temperatura crítica da super-rede é observada em função do tamanho do sistema ( $\ell$ ) e dos parâmetros de acoplamento (diferentes interações de troca), e o aumento no número de camadas reduz a influência da superfície e a temperatura crítica

tende a do *bulk*. Um parâmetro  $c$  (parâmetro de concentração) foi introduzido às interações de superfície e o sistema de tamanho  $\ell$  tende a mesma temperatura a partir de certo valor desse parâmetro. O aumento do parâmetro  $c$  provoca uma maior interação dos sítios pertencentes ao mesmo plano (interação intraplanos), assim o sistema desordena numa temperatura maior.

Como perspectivas futuras de trabalhos, estaremos interessados nos seguintes tópicos:

1) Analisar a classe de universalidade dos filmes finos e super-redes magnéticas via simulação de Monte Carlo, ou seja, dependência dos expoentes críticos e amplitudes críticas  $\left(\frac{A_+}{A_-}, \frac{C_+}{C_-}\right)$  como função do tamanho de sistema e parâmetro envolvidos (por exemplo, razão entre interação de superfície e *bulk*). Resultados preliminares realizados em colaboração com Amazonas e de Sousa, usando grupo de renormalização na aproximação de campo médio (MFRG) em aglomerado de tamanho pequeno ( $N' = 1$  e  $N = 2$ ), tem mostrado um comportamento do expoente  $\beta$  da magnetização para o filme fino Ising em acordo qualitativo com medidas experimentais do filme  $Ni(001)$ . Nosso interesse será além de tratar filmes e super-redes Ising usar o modelo de Heisenberg;

2) Efeito de desordem é outro fator importante e não explorado através de simulação de Monte Carlo e teorias de campo efetivo (para o modelo de Heisenberg);

3) Efeito de frustração também será explorado, haja visto ser um fator importante na explicação dos resultados experimentais dos compostos supercondutores de altas temperaturas, formados por planos de  $CuO_2$  (exemplo,  $La_{2-x}Ba_xCuO_4$ ), com estruturas de filmes finos.

4) Outro interesse nosso é analisar um filme fino Heisenberg (F e AF) amorfo, onde propusemos como protótipo a introdução de ligações aleatórias apenas na superfície como uma forma de simular “deformações” estruturais no filme;

5) Analisar as excitações elementares (ondas de spin) dos filmes finos Heisenberg quântico AF via formalismo da função de Green dependente de dois tempos e temperatura (F.G.T.T);

6) Estudar o efeito da interação dipolar em super-redes magnética via F.G.T.T.

Certamente, outros trabalhos surgirão no decorer do desenvolvimento dessas propostas mencionadas acima.

## Apêndice A

# Integrais do Modelo $O(n)$ <sup>1</sup>

Consideremos a expressão geral

$$\int d\mathbf{S}_1 d\mathbf{S}_2 \delta(n - |\mathbf{S}_1|^2) \delta(n - |\mathbf{S}_2|^2) F(\mathbf{S}_i) e^{K\mathbf{S}_{1l} \cdot \mathbf{S}_{2l}} \quad (\text{A.1})$$

Vamos inicialmente resolver a integral

$$I = \int d\mathbf{S}_1 \delta(n - |\mathbf{S}_1|^2) F(\mathbf{S}_i) e^{K\mathbf{S}_{1l} \cdot \mathbf{S}_{2l}} \quad (\text{A.2})$$

Usando a representação integral para a função delta

$$\delta(x) = \frac{a}{2\pi i} \int_{\varepsilon - i\infty}^{\varepsilon + i\infty} du e^{uax} \quad (\text{A.3})$$

na integral (??) ficará

$$I = \frac{K}{2\pi i} \int d\mathbf{S}_1 \int_{\varepsilon - i\infty}^{\varepsilon + i\infty} du e^{uK(n - |\mathbf{S}_1|^2)} F(\mathbf{S}_i) e^{K\mathbf{S}_{1l} \cdot \mathbf{S}_{2l}} \quad (\text{A.4})$$

Para calcular essas integrais é conveniente trocar a ordem das integrações. Supondo que

---

<sup>1</sup>Os cálculos das integrais no espaço de fase têm como alcance o trabalho pioneiro de Stanley [17], onde o modelo  $O(n)$  sem campo externo em uma dimensão foi resolvido exatamente.

$F(\mathbf{S}_i) = \prod_{\alpha=1}^n F(S_i^\alpha)$  reescrevemos a integral (??) na forma

$$I = \frac{K}{2\pi i} \int_{\varepsilon-i\infty}^{\varepsilon+i\infty} du e^{uKn} \prod_{\alpha=1}^n \int dS_1^\alpha F(S_i^\alpha) e^{K[S_1^\alpha S_2^\alpha - u(S_1^\alpha)^2]} \quad (\text{A.5})$$

A integral I contém m integrais independentes em  $S_1^\alpha$ . Para  $F(S_i^\alpha) = 1$  temos m integrais gaussianas com a condição de que  $\sum_{\alpha=1}^n (S_i^\alpha)^2 = n$ , portanto

$$I_1 = \frac{K}{2\pi i} \left(\frac{\pi}{K}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{\varepsilon-i\infty}^{\varepsilon+i\infty} du u^{-\frac{n}{2}} e^{Kn\left(u+\frac{1}{4u}\right)} \quad (\text{A.6})$$

Fazendo uma mudança de variável  $X \equiv nK$  e  $Y \equiv unK$

$$I_1 = \frac{K}{(nK)^{1-\frac{n}{2}}} \left(\frac{\pi}{K}\right)^{\frac{1}{2}} \left\{ \frac{1}{2\pi i} \int_{\varepsilon-i\infty}^{\varepsilon+i\infty} dY Y^{-\frac{n}{2}} e^{\left(Y+\frac{X^2}{4Y}\right)} \right\} \quad (\text{A.7})$$

O termo entre chaves em (A.7) é exatamente a função de Bessel modificada de primeira espécie de ordem  $\left(\frac{n}{2} - 1\right)$ . Sendo assim,

$$I_1 = \frac{K}{2} \left(\frac{2\pi}{K}\right)^{\frac{n}{2}} I_{\frac{n}{2}-1}(nK) \quad (\text{A.8})$$

e fazendo  $\xi = \frac{K}{2} \left(\frac{2\pi}{K}\right)^{\frac{n}{2}}$

$$I_1 = \int d\mathbf{S}_1 \delta(n - |\mathbf{S}_1|^2) e^{K\mathbf{S}_{1i}^A \cdot \mathbf{S}_{2i}^B} = \xi I_{\frac{n}{2}-1}(nK) \quad (\text{A.9})$$

A integral referente à área da hipersfera  $\int d\mathbf{S}_2 \delta(n - |\mathbf{S}_2|^2)$  pode ser calculada tomando o limite

$$\int d\mathbf{S}_2 \delta(n - |\mathbf{S}_2|^2) = \lim_{K \rightarrow 0} \int d\mathbf{S}_2 \delta(n - |\mathbf{S}_2|^2) e^{K\mathbf{S}_{1i} \cdot \mathbf{S}_{2i}} = \frac{(\pi)^{\frac{n}{2}} (n)^{\frac{n}{2}-1}}{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)} = \Omega \quad (\text{A.10})$$

Façamos agora que  $F(S_i^\alpha)$  satisfaça

$$F(S_i^\alpha) = \begin{cases} S_i^\alpha & \text{para } \alpha = 1 \\ 1 & \text{para } \alpha \neq 1 \end{cases} \quad (\text{A.11})$$

Teremos então, após resolver as integrais gaussianas (??) e seguindo o mesmo procedimento que

$$I_2 = \int d\mathbf{S}_1 \delta(n - |\mathbf{S}_1|^2) S_1^1 e^{K\mathbf{S}_{1l} \cdot \mathbf{S}_{2l}} = \xi S_2^1 I_{\frac{n}{2}}(nK) \quad (\text{A.12})$$

Da mesma forma que calculamos (A.10) encontraremos que

$$\int d\mathbf{S}_2 \delta(n - |\mathbf{S}_2|^2) S_2^1 = \lim_{K \rightarrow 0} \int d\mathbf{S}_2 \delta(n - |\mathbf{S}_2|^2) S_2^1 e^{K\mathbf{S}_{1l} \cdot \mathbf{S}_{2l}} = 0 \quad (\text{A.13})$$

Se agora

$$F(S_i^\alpha) = \begin{cases} (S_i^\alpha)^2 & \text{para } \alpha = 1 \\ 1 & \text{para } \alpha \neq 1 \end{cases}, \quad (\text{A.14})$$

teremos

$$I_3 = \int d\mathbf{S}_1 \delta(n - |\mathbf{S}_1|^2) (S_1^1)^2 e^{K\mathbf{S}_{1l} \cdot \mathbf{S}_{2l}} = \xi \Omega \left[ \frac{1}{K} I_{\frac{n}{2}}(nK) + I_{\frac{n}{2}+1}(nK) \right] \quad (\text{A.15})$$

Usando a relação de recorrência para as funções de Bessel dada por  $I_{n+1}(x) = I_{n-1}(x) - \frac{2n}{x} I_n(x)$  a integral (A.15) fica

$$I_3 = \int d\mathbf{S}_1 \delta(n - |\mathbf{S}_1|^2) (S_1^1)^2 e^{K\mathbf{S}_{1l} \cdot \mathbf{S}_{2l}} = \xi \Omega I_{\frac{n}{2}-1}(nK) \quad (\text{A.16})$$

Combinadas convenientemente, fornecem diretamente os resultados mostrados na seção (2.3)

$$\int d\mathbf{S}_{1A} d\mathbf{S}_{2B} \delta(n - |\mathbf{S}_{1A}|^2) \delta(n - |\mathbf{S}_{2B}|^2) S_{1l}^A e^{K\mathbf{S}_{1l} \cdot \mathbf{S}_{2l}} = 0 \quad (\text{A.17})$$

$$\int d\mathbf{S}_{1A} d\mathbf{S}_{2B} \delta(n - |\mathbf{S}_{1A}|^2) \delta(n - |\mathbf{S}_{2B}|^2) S_{1l}^A S_{2l}^B e^{K\mathbf{S}_{1l} \cdot \mathbf{S}_{2l}} = \xi \Omega I_{\frac{n}{2}}(nK) \quad (\text{A.18})$$

$$\int d\mathbf{S}_{1A} d\mathbf{S}_{2B} \delta(n - |\mathbf{S}_{1A}|^2) \delta(n - |\mathbf{S}_{2B}|^2) (S_{1l}^A)^2 e^{K\mathbf{S}_{1l} \cdot \mathbf{S}_{2l}} = \xi \Omega I_{\frac{n}{2}-1}(nK) \quad (\text{A.19})$$

$$\int d\mathbf{S}_{1A} d\mathbf{S}_{2B} \delta(n - |\mathbf{S}_{1A}|^2) \delta(n - |\mathbf{S}_{2B}|^2) (S_{1l}^A)^2 S_{2l}^B e^{K\mathbf{S}_{1l} \cdot \mathbf{S}_{2l}} = 0 \quad (\text{A.20})$$

$$\int d\mathbf{S}_{1A} d\mathbf{S}_{2B} \delta(n - |\mathbf{S}_{1A}|^2) \delta(n - |\mathbf{S}_{2B}|^2) e^{K\mathbf{S}_{1l} \cdot \mathbf{S}_{2l}} = \xi \Omega I_{\frac{n}{2}-1}(nK) \quad (\text{A.21})$$

$$\int d\mathbf{S}_{1A} d\mathbf{S}_{2B} \delta(n - |\mathbf{S}_{1A}|^2) \delta(n - |\mathbf{S}_{2B}|^2) S_{2l}^B e^{K\mathbf{S}_{1l} \cdot \mathbf{S}_{2l}} = 0 \quad (\text{A.22})$$

Para o aglomerado de um spin, as integrais  $\rho_l$ ,  $\varphi_l$  e  $\tau_l$  são resolvidas com o recurso dos cálculos anteriores. Assim, calculamos as integrais da seguinte forma:

$$\rho_l = \int d\mathbf{S}_{1A} \delta(n - |\mathbf{S}_{1A}|^2) S_{1l}^{A1} = \lim_{K \rightarrow 0} \int d\mathbf{S}_{1A} \delta(n - |\mathbf{S}_{1A}|^2) S_{1l}^{A1} e^{K\mathbf{S}_{1l} \cdot \mathbf{S}_{2l}} = 0 \quad (\text{A.23})$$

$$\begin{aligned} \varphi_l &= \int d\mathbf{S}_{1A} \delta(n - |\mathbf{S}_{1A}|^2) (S_{1l}^{A1})^2 \\ &= \lim_{K \rightarrow 0} \int d\mathbf{S}_{1A} \delta(n - |\mathbf{S}_{1A}|^2) (S_{1l}^{A1})^2 e^{K\mathbf{S}_{1l} \cdot \mathbf{S}_{2l}} = \Omega \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

$$\tau_l = \int d\mathbf{S}_{1A} \delta(n - |\mathbf{S}_{1A}|^2) = \lim_{K \rightarrow 0} \int d\mathbf{S}_{1A} \delta(n - |\mathbf{S}_{1A}|^2) e^{K\mathbf{S}_{1l} \cdot \mathbf{S}_{2l}} = \Omega \quad (\text{A.25})$$

## Apêndice B

# Coeficientes das Propriedades Magnética e Térmica

### 2.1 Magnetização

Os coeficientes nas Eqs.(4.14)-(4.16) são dados por

$$a_{1,1kq}(H, T, J_s, J_b) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^i \alpha_{xs}^{3-k} \beta_{xs}^k \alpha_x^{3-q} \beta_{ys}^q \alpha_y f_1^{(F,AF)}(x, y) |_{x,y=0}, \quad (\text{B.1})$$

$$a_{2,1kq}(H, T, J_s, J_b) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^i \alpha_{xs}^{3-k} \beta_{xs}^k \alpha_{ys}^{3-q} \beta_{ys}^q (\alpha_x \beta_y + (-1)^j \beta_x \alpha_y) f_1^{(F,AF)}(x, y) |_{x,y=0}; \quad (\text{B.2})$$

$$a_{3,1kq}(H, T, J_{as}, J_{ab}) = (-1)^j \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^i \alpha_{xs}^{3-k} \beta_{xs}^k \alpha_{ys}^{3-q} \beta_{ys}^q \beta_x \beta_y f_1^{(F,AF)}(x, y) |_{x,y=0}; \quad (\text{B.3})$$

$$a_{1,nkq}(H, T, J_b) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^i \alpha_x^{5-k} \beta_x^k \alpha_y^{5-q} \beta_y^q f_n^{(F,AF)}(x, y) |_{x,y=0}; \quad (\text{B.4})$$

$$a_{2,nkq}(H, T, J_b) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^i \alpha_x^{3-k} \beta_x^k \alpha_y^{3-q} \beta_y^q (\alpha_x^2 \alpha_y \beta_y + (-1)^j \alpha_y^2 \alpha_x \beta_x) f_n^{(F,AF)}(x, y) |_{x,y=0}; \quad (\text{B.5})$$

$$a_{3,nkq}(H, T, J_b) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^i \alpha_x^{3-k} \beta_x^k \alpha_y^{3-q} \beta_y^q \left( \alpha_x^2 \beta_y^2 + \alpha_y^2 \beta_x^2 \right) f_n^{(F,AF)}(x, y) |_{x,y=0}; \quad (\text{B.6})$$

$$a_{4,nkq}(H, T, J_b) = (-1)^j \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^i \alpha_x^{4-k} \beta_x^{k+1} \alpha_y^{4-q} \beta_y^{q+1} f_n^{(F,AF)}(x, y) |_{x,y=0}; \quad (\text{B.7})$$

$$a_{5,nkq}(H, T, J_b) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^i \alpha_x^{3-k} \beta_x^{k+2} \alpha_y^{3-q} \beta_y^{q+2} f_n^{(F,AF)}(x, y) |_{x,y=0}; \quad (\text{B.8})$$

$$a_{6,nkq}(H, T, J_b) = (-1)^j \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^i \alpha_x^{3-k} \beta_x^k \alpha_y^{3-q} \beta_y^q \left( \alpha_x \beta_x \beta_y^2 + (-1)^j \alpha_y \beta_y \beta_x^2 \right) f_n^{(F,AF)}(x, y) |_{x,y=0}; \quad (\text{B.9})$$

$$a_{1,\ell k q}(H, T, J_s, J_b) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^i \alpha_{x_s}^{3-k} \beta_{x_s}^k \alpha_{y_s}^{3-q} \beta_{y_s}^q \alpha_y f_\ell^{(F,AF)}(x, y) |_{x,y=0}, \quad (\text{B.10})$$

$$a_{2,\ell k q}(H, T, J_s, J_b) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^i \alpha_{x_s}^{3-k} \beta_{x_s}^k \alpha_{y_s}^{3-q} \beta_{y_s}^q \left( \alpha_x \beta_y + (-1)^j \beta_x \alpha_y \right) f_\ell^{(F,AF)}(x, y) |_{x,y=0}; \quad (\text{B.11})$$

$$a_{3,\ell k q}(H, T, J_s, J_b) = (-1)^j \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^i \alpha_{x_s}^{3-k} \beta_{x_s}^k \alpha_{y_s}^{3-q} \beta_{y_s}^q \beta_x \beta_y f_\ell^{(F,AF)}(x, y) |_{x,y=0}, \quad (\text{B.12})$$

onde ( $j = 1, i = k$ ) temos o filme AF e ( $j = 2, i = 2k$ ) o F, com as funções dadas por

$$f_n^F(x, y) |_{x,y=0} = \frac{\frac{(x+y+2\beta H)}{W_n^-(x,y)} \sinh [W_n^-(x, y)]}{\cosh [W_n^-(x, y)] + \exp(-2K_n) \cosh [W_n^+(x, y)]}, \quad (\text{B.13})$$

com  $W_n^\pm(x, y) = \sqrt{[(x + \beta H) \mp (y + \beta H)]^2 + K_n^2 (\eta_x \pm \eta_y)^2}$ ,  $K_0 = 0$ ,  $K_1 = K_\ell = \beta J_s$ ,  $K_n = \beta J$  para  $n \neq 1$  e  $\beta = 1/k_B T$  ( $k_B$  é a constante de Boltzmann).

Para o sistema antiferromagnético  $f_n(x, y) \rightarrow f_n^{AF}(x, y)$  teremos

$$f_{n,(A,B)}^{AF}(x, y) = \frac{\frac{-(x+y+2\beta H)}{W_n^-(x,y)} \sinh [W_n^-(x, y)] + (-1)^{p+1} \frac{(x-y)}{W_n^+(x,y)} \exp(2K_n) \sinh [W_n^+(x, y)]}{\cosh [W_n^-(x, y)] + \exp(2K_n) \cosh [W_n^+(x, y)]}, \quad (\text{B.14})$$

onde  $p = 1$  para  $\nu = A$  e  $p = 2$  para  $\nu = B$ .

No sistema clássico F

$$f_n^{Fcl}(x, y) = \frac{\sinh(x + y + 2\beta H)}{\cosh(x + y + 2\beta H) + \Phi_r \cosh(x - y)}, \quad (\text{B.15})$$

e AF

$$f_{n,(A,B)}^{AFcl}(x,y) = \frac{-\sinh(x+y+2\beta H) - (-1)^{p+1} \Phi_r \sinh(x-y)}{\cosh(x+y+2\beta H) + \Phi_r \cosh(x-y)}, \quad (\text{B.16})$$

onde  $p = 1$ ,  $\nu = B$ ,  $p = 2$ ,  $\nu = A$  com  $\Phi_r = \frac{I_{\frac{r}{2}-1}(rK_n) - I_{\frac{r}{2}}(rK_n)}{I_{\frac{r}{2}-1}(rK_n) + I_{\frac{r}{2}}(rK_n)}$ .

## 2.2 Susceptibilidade

Os coeficientes são determinados em termos das derivadas de  $a_{j,nkq}(H, T, J)$  em relação ao campo e em seguida fazendo  $H = 0$ . Portanto, para o caso F encontramos

$$G_1(T, J_s, J_b, m_1, m_2) = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 (k+q) [a_{1,1kq}(T, J_s, J_b) + a_{2,1kq}(T, J_s, J_b)m_2 + a_{3,1kq}(T, J_s, J_b)m_2^2] m_1^{k+q-1}; \quad (\text{B.17})$$

$$G_2(T, J_s, J_b, m_1, m_2) = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 [a_{2,1kq}(T, J_s, J_b) + 2a_{3,1kq}(T, J_s, J_b)m_2] m_1^{k+q}; \quad (\text{B.18})$$

$$G_3'(T, J_s, J_b, m_1, m_2) = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 [a'_{1,1kq}(T, J_s, J_b) + a'_{2,1kq}(T, J_s, J_b)m_2 + a'_{3,1kq}(T, J_s, J_b)m_2^2] m_1^{k+q}; \quad (\text{B.19})$$

$$G_{n-1}(T, J_b, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 a_{2,nkq}(T, J_b) + a_{3,nkq}(T, J_b)m_{n+1} + 2a_{4,nkq}(T, J_b)(m_{n-1} + m_{n+1}) + 2a_{5,nkq}(T, J_b)m_{n-1}m_{n+1}^2 + 2a_{6,nkq}(T, J_b)m_{n-1}m_{n+1}m_n^{k+q}; \quad (\text{B.20})$$

$$\begin{aligned}
G_n(T, J_b, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) &= \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 (k+q) [a_{1,1kq}(T, J_b) + a_{2,1kq}(T, J_b)(m_{n-1} + m_{n+1}) + \\
& a_{3,1kq}(T, J_b)m_{n-1}m_{n+1} + a_{4,1kq}(T, J_b)(m_{n-1} + m_{n+1})^2 + \\
& a_{5,1kq}(T, J_b)m_{n-1}^2m_{n+1}^2 + a_{6,1kq}(T, J_b) \\
& (m_{n-1}^2m_{n+1} + m_{n-1}m_{n+1}^2)] m_n^{k+q-1}; \tag{B.21}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
G_{n+1}(T, J_b, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) &= \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 [a_{2,nkq}(T, J_b) + a_{3,nkq}(T, J_b)m_{n-1} + \\
& 2a_{4,nkq}(T, J_b)(m_{n-1} + m_{n+1}) + 2a_{5,nkq}(T, J_b)m_{n-1}^2m_{n+1} + \\
& 2a_{6,nkq}(T, J_b)m_{n-1}m_{n+1}] m_n^{k+q}; \tag{B.22}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
G'_n(T, J_b, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) &= \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 [a'_{1,nkq}(T, J_b) + a'_{2,nkq}(T, J_b)(m_{n-1} + m_{n+1}) + \\
& a'_{3,nkq}(T, J_b)m_{n-1}m_{n+1} + a'_{4,nkq}(T, J_b)(m_{n-1} + m_{n+1})^2 + \\
& a'_{5,nkq}(T, J_b)m_{n-1}^2m_{n+1}^2 + \\
& a'_{6,nkq}(T, J_b)(m_{n-1}^2m_{n+1} + m_{n-1}m_{n+1}^2)] m_n^{k+q}; \tag{B.23}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
G_\ell(T, J_s, J_b, m_\ell, m_{\ell-1}) &= \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 (k+q) [a_{1,\ell kq}(T, J_s, J_b) + a_{2,\ell kq}(T, J_s, J_b)m_{\ell-1} + \\
& a_{3,\ell kq}(T, J_s, J_b)m_{\ell-1}^2] m_\ell^{k+q-1}; \tag{B.24}
\end{aligned}$$

$$G_{\ell-1}(T, J_s, J_b, m_\ell, m_{\ell-1}) = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 [a_{2,\ell kq}(T, J_s, J_b) + 2a_{3,\ell kq}(T, J_s, J_b)m_{\ell-1}] m_\ell^{k+q}; \tag{B.25}$$

$$G'_\ell(T, J_s, J_b, m_\ell, m_{\ell-1}) = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 \left[ a'_{1,\ell k q}(T, J_s, J_b) + a'_{2,\ell k q}(T, J_s, J_b) m_{\ell-1} + a'_{3,\ell k q}(T, J_s, J_b) m_{\ell-1}^2 \right] m_\ell^{k+q}, \quad (\text{B.26})$$

onde  $a'_{n,\ell k q}$  é definido fazendo a permuta de  $f_n^{(F,AF)}(x, y) \rightarrow \frac{\partial f_n^{(F,AF)}(x, y)}{\partial H} \Big|_{H=0}$  nos coeficientes  $a_{n,\ell k q}$ , com

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_n^F(x, y)}{\partial H} \Big|_{H=0} &= \frac{2\beta \sinh(W^-)}{W^- [\cosh(W^-) + \exp(-2K_n) \cosh(W^+)]} + \\ &\frac{2\beta(x+y)^2}{W^- [\cosh(W^-) + \exp(-2K_n) \cosh(W^+)]} \left[ \frac{\cosh(W^-)}{W^-} - \right. \\ &\left. \frac{\sinh(W^-)}{(W^-)^2} - \frac{\sinh^2(W^-)}{W^-} \right], \end{aligned} \quad (\text{B.27})$$

com  $W_n^\pm(x, y) = \sqrt{(x \mp y)^2 + K_n^2 (\eta_x \pm \eta_y)^2}$  e  $\beta = 1/k_B T$ , para  $n = 1$ ,  $K_1 = K_s$  e para  $n \neq 1$ ,  $K_n = K$ .

Para o sistema com tratamento clássico

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_n^{Fcl}(x, y)}{\partial H} \Big|_{H=0} &= \frac{2\beta \cosh(x+y)}{\cosh(x+y) + \Phi_r \cosh(x-y)} - \\ &\frac{2\beta \sinh(x+y) [\sinh(x+y) + \Phi_r \sinh(x-y)]}{[\cosh(x+y) + \Phi_r \cosh(x-y)]^2}. \end{aligned} \quad (\text{B.28})$$

Considerando o caso AF teremos

### 2.2.1 a) Susceptibilidade total $\chi_t$

Aqui temos  $a_{1,1kq}^{AF}(H, T, J_s, J_b)$ ,  $a_{2,1kq}^{AF}(H, T, J_s, J_b)$ ,  $a_{3,1kq}^{AF}(H, T, J_s, J_b)$ ,  $a_{1,nkq}^{AF}(H, T, J_b)$ ,  $a_{2,nkq}^{AF}(H, T, J_b)$ ,  $a_{3,nkq}^{AF}(H, T, J_b)$ ,  $a_{4,nkq}^{AF}(H, T, J_b)$ ,  $a_{5,nkq}^{AF}(H, T, J_b)$ ,  $a_{6,nkq}^{AF}(H, T, J_b)$ ,  $a_{1,\ell k q}^{AF}(H, T, J_s, J_b)$ ,  $a_{2,\ell k q}^{AF}(H, T, J_s, J_b)$  e  $a_{3,\ell k q}^{AF}(H, T, J_s, J_b)$  são os coeficientes para o caso AF aplicados a função:

$$\frac{\partial f_n^{AF}(x, y)}{\partial H} \Big|_{H=0} = \frac{2\beta \sinh(W^-)}{W^- [\cosh(W^-) + \exp(2K_n) \cosh(W^+)]} +$$

$$\frac{2\beta(x+y)^2}{W^+[\cosh(W^-) + \exp(2K_n)\cosh(W^+)]} \left[ \frac{\cosh(W^-)}{W^-} - \frac{\sinh(W^-)}{(W^-)^2} - \frac{\sinh^2(W^-)}{W^-} \right] \quad (\text{B.29})$$

com  $W_n^\pm(x, y) = \sqrt{(x \mp y)^2 + K_n^2(\eta_x \pm \eta_y)^2}$  e  $\beta = 1/k_B T$ , para  $n = 1$ ,  $K_1 = K_s$  e para  $n \neq 1$ ,  $K_n = K$ .

Para o AF

$$\frac{\partial f_n^{AFcl}(x, y)}{\partial H} \Big|_{H=0} = \frac{-2\beta \cosh(x+y)}{\cosh(x+y) + \Phi_r \cosh(x-y)} + \frac{2\beta \sinh(x+y)[\sinh(x+y) + \Phi_r \sinh(x-y)]}{[\cosh(x+y) + \Phi_r \cosh(x-y)]^2}. \quad (\text{B.30})$$

### 2.2.2 b) Susceptibilidade *staggered* $\chi_{st}$

Para o campo *staggered* os coeficientes são definidos a partir da função:

$$\frac{\partial f_n^{AF}(x, y)}{\partial H_{st}} \Big|_{H_{st}=0} = \frac{2\beta \exp(2K_n) \sinh(W^+)}{W^+[\cosh(W^-) + \exp(2K_n)\cosh(W^+)]} + \frac{2\beta \exp(2K_n)(x-y)^2}{W^+[\cosh(W^-) + \exp(2K_n)\cosh(W^+)]} \left[ \frac{\cosh(W^+)}{W^+} - \frac{\sinh(W^+)}{(W^+)^2} - \frac{\sinh^2(W^+)}{W^+} \right] \quad (\text{B.31})$$

com  $W_n^\pm(x, y) = \sqrt{(x \mp y)^2 + K_n^2(\eta_x \pm \eta_y)^2}$  e  $\beta = 1/k_B T$ , para  $n = 1$ ,  $K_1 = K_s$  e para  $n \neq 1$ ,  $K_n = K$ .

No sistema AF

$$\frac{\partial f_n^{AFcl}(x, y)}{\partial H} \Big|_{H=0} = \frac{-2\beta \Phi_r \cosh(x+y)}{\cosh(x+y) + \Phi_r \cosh(x-y)} + \frac{2\beta \Phi_r \sinh(x+y)[\sinh(x+y) + \Phi_r \sinh(x-y)]}{[\cosh(x+y) + \Phi_r \cosh(x-y)]^2}. \quad (\text{B.32})$$

## 2.3 Energia Interna

### 2.3.1 (a) Filme Fino F

Desenvolvendo o método teórico da EFT e usando a idéia do operador diferencial, encontramos a expressão para os coeficientes no cálculo da energia interna do sistema F dada por

$$G_{1j}^F(m_1, m_2, T, J_s) = \sum_{k=0}^{\delta-3} \sum_{q=0}^{\delta-3} \binom{\delta-3}{k} \binom{\delta-3}{q} \alpha_{sx}^{\delta-3-k} \beta_{sx}^k \alpha_x^{\delta-3-q} \beta_{sy}^q \alpha_y g_{1j}^F(x, y) |_{x,y=0} m_1^{k+q} + \sum_{k=0}^{\delta-3} \sum_{q=0}^{\delta-3} \binom{\delta-3}{k} \binom{\delta-3}{q} \alpha_{sx}^{\delta-3-k} \beta_{sx}^k \beta_x \alpha_{sy}^{\delta-3-q} \beta_{sy}^q \beta_y g_{1j}^F(x, y) |_{x,y=0} m_1^{k+q} m_2^2 \quad (\text{B.33})$$

$$G_{nj}^F(m_{n1}, m_{n-1}, m_{n+1}, T, J) = \sum_{k=0}^{\delta-3} \sum_{q=0}^{\delta-3} \binom{\delta-3}{k} \binom{\delta-3}{q} \alpha_x^{\delta-3-k} \beta_x^k \alpha_y^{\delta-3-q} \beta_y^q g_{nj}^F(x, y) |_{x,y=0} m_n^{k+q} + \sum_{k=0}^{\delta-3} \sum_{q=0}^{\delta-3} \binom{\delta-3}{k} \binom{\delta-3}{q} \alpha_x^{\delta-3-k} \beta_x^{k+1} \alpha_y^{\delta-3-q} \beta_y^{q+1} g_{nj}^F(x, y) |_{x,y=0} m_n^{k+q} (m_{n-1} + m_{n+1}) + \sum_{k=0}^{\delta-3} \sum_{q=0}^{\delta-3} \binom{\delta-3}{k} \binom{\delta-3}{q} \alpha_x^{\delta-3-k} \beta_x^{k+2} \alpha_y^{\delta-3-q} \beta_y^{q+2} g_{nj}^F(x, y) |_{x,y=0} m_n^{k+q} m_{n-1}^2 m_{n+1}^2$$

$$G_{\ell j}^F(m_\ell, m_{\ell-1}, T, J_s) = \sum_{k=0}^{\delta-3} \sum_{q=0}^{\delta-3} \binom{\delta-3}{k} \binom{\delta-3}{q} \alpha_{sx}^{\delta-3-k} \beta_{sx}^k \alpha_x^{\delta-3-q} \beta_{sy}^q \alpha_y g_{\ell j}^F(x, y) |_{x,y=0} m_\ell^{k+q} + \sum_{k=0}^{\delta-3} \sum_{q=0}^{\delta-3} \binom{\delta-3}{k} \binom{\delta-3}{q} \alpha_{sx}^{\delta-3-k} \beta_{sx}^k \beta_x \alpha_{sy}^{\delta-3-q} \beta_{sy}^q \beta_y g_{\ell j}^F(x, y) |_{x,y=0} m_\ell^{k+q} m_{\ell-1}^2 \quad (\text{B.35})$$

onde as função dos operadores são dadas por

$$g_{n1}^F(x, y) = \frac{\frac{(\eta_x - \eta_y)}{W_n^-(x, y)} \sinh [W_n^-(x, y)] + \frac{(\eta_x + \eta_y) \exp(-2K_n)}{W_n^+(x, y)} \sinh [W_n^+(x, y)]}{\cosh [W_n^-(x, y)] + \exp(-2K_n) \cosh [W_n^+(x, y)]}; \quad (\text{B.36})$$

$$g_{n2}^F(x, y) = \frac{\cosh [W_n^-(x, y)] - \exp(-2K_n) \cosh [W_n^+(x, y)]}{\cosh [W_n^-(x, y)] + \exp(-2K_n) \cosh [W_n^+(x, y)]}; \quad (\text{B.37})$$

$$g_{n3}^F(x, y) = \frac{\frac{(x+y)}{W_n^-(x, y)} \sinh [W_n^-(x, y)] - \frac{(x-y) \exp(-2K_n)}{W_n^+(x, y)} \sinh [W_n^+(x, y)]}{\cosh [W_n^-(x, y)] + \exp(-2K_n) \cosh [W_n^+(x, y)]}, \quad (\text{B.38})$$

com  $W_n^\pm(x, y) = \sqrt{(x \mp y)^2 + K_n^2 (\eta_x \pm \eta_y)^2}$  e  $\beta = 1/k_B T$ , para  $n = 1, \ell$ ,  $K_1 = K_\ell = K_s$  e para  $n \neq 1$ ,  $K_n = K$ .

### 2.3.2 (b) Filme Fino AF

Apresentamos os coeficientes e as respectivas funções para o filme fino AF na presença de um campo externo. Assim, para camada  $\ell = 1$ , ou seja, na superfície teremos

$$G_{1j}^{AF}(m_1, m_2, ms_1, ms_2, H, T, J_s) = \left[ \sum_{k=0}^{\delta-3} \sum_{q=0}^{\delta-3} \binom{\delta-3}{k} \binom{\delta-3}{q} \alpha_{sx}^{\delta-3-k} \beta_{sx}^k \alpha_x^{\delta-3-q} \beta_{sy}^q \alpha_y g_{1j}^{AF}(x, y) \Big|_{x,y=0} \right] m_{1,B}^k m_{1,(A,B)}^q + \left[ \sum_{k=0}^{\delta-3} \sum_{q=0}^{\delta-3} \binom{\delta-3}{k} \binom{\delta-3}{q} \alpha_{sx}^{\delta-3-k} \beta_{sx}^k \beta_x \alpha_{sy}^{\delta-3-q} \beta_{sy}^q \beta_y g_{1j}^{AF}(x, y) \Big|_{x,y=0} \right] m_{1,(B,A)}^k m_{2,(B,A)} m_{1,(A,B)}^q m_{2,(A,B)}, \quad (\text{B.39})$$

para  $n \geq 2$  encontramos

$$G_{nj}^{AF}(m_{n-1}, m_n, m_{n+1}, ms_{n-1}, ms_n, ms_{n+1}, H, T, J_s) = \sum_{k=0}^{\delta-3} \sum_{q=0}^{\delta-3} \binom{\delta-3}{k} \binom{\delta-3}{q} \alpha_x^{\delta-1-k} \beta_x^k \alpha_y^{\delta-1-q} \beta_y^q g_{nj}^{AF}(x, y) m_{n,(B,A)}^k m_{n,(A,B)}^q + \sum_{k=0}^{\delta-3} \sum_{q=0}^{\delta-3} \binom{\delta-3}{k} \binom{\delta-3}{q} \alpha_x^{\delta-2-k} \beta_x^{k+1} \alpha_y^{\delta-2-q} \beta_y^{q+1} g_{nj}^{AF}(x, y) [m_{n,(B,A)}^k (m_{n-1,(B,A)} + m_{n+1,(B,A)}) + m_{n,(A,B)}^q (m_{n-1,(A,B)} + m_{n+1,(A,B)})]$$

$$\sum_{k=0}^{\mathfrak{z}-3} \sum_{q=0}^{\mathfrak{z}-3} \binom{\mathfrak{z}-3}{k} \binom{\mathfrak{z}-3}{q} \alpha_x^{\mathfrak{z}-3-k} \beta_x^{k+2} \alpha_y^{\mathfrak{z}-3-q} \beta_y^{q+2} g_{nj}^{AF} (m_{n,(B,A)}^k m_{n-1,(B,A)} m_{n+1,(B,A)}) (m_{n,(A,B)}^q m_{n-1,(A,B)} m_n)$$

e para  $n = \ell$  fica

$$\begin{aligned} G_{\ell j}^{AF} (m_\ell, m_{\ell-1}, ms_\ell, ms_{\ell-1}, H, T, J_s) &= \left[ \sum_{k=0}^{\mathfrak{z}-3} \sum_{q=0}^{\mathfrak{z}-3} \binom{\mathfrak{z}-3}{k} \binom{\mathfrak{z}-3}{q} \alpha_{sx}^{\mathfrak{z}-3-k} \beta_{sx}^k \alpha_{sy}^{\mathfrak{z}-3-q} \beta_{sy}^q \alpha_y g_{\ell j}^{AF} (x, y) \right]_{x,y=0} \\ &+ m_{\ell,B}^k m_{\ell,(A,B)}^q + \left[ \sum_{k=0}^{\mathfrak{z}-3} \sum_{q=0}^{\mathfrak{z}-3} \binom{\mathfrak{z}-3}{k} \binom{\mathfrak{z}-3}{q} \alpha_{sx}^{\mathfrak{z}-3-k} \beta_{sx}^k \alpha_{sy}^{\mathfrak{z}-3-q} \beta_{sy}^q \beta_y g_{\ell j}^{AF} (x, y) \right]_{x,y=0} \\ &+ m_{\ell,(B,A)}^k m_{\ell-1,(B,A)} m_{\ell,(A,B)}^q m_{\ell-1,(A,B)}, \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

onde  $m_A = m + ms$ ,  $m_B = m - ms$ , e as funções  $g_{nj}^{AF} (x, y)$  ( $j = 1, 2, 3, 4, 5$ )

$$g_{n1}^{AF} (x, y) = \frac{\frac{(\eta_x - \eta_y)}{W_n^-(x,y)} \sinh [W_n^-(x, y)] + \frac{(\eta_x + \eta_y) \exp(2K_n)}{W_n^+(x,y)} \sinh [W_n^+(x, y)]}{\cosh [W_n^-(x, y)] + \exp(2K_n) \cosh [W_n^+(x, y)]}; \quad (\text{B.42})$$

$$g_{n2}^{AF} (x, y) = \frac{\frac{-(\eta_x - \eta_y)}{W_n^-(x,y)} \sinh [W_n^-(x, y)] + \frac{(\eta_x + \eta_y) \exp(2K_n)}{W_n^+(x,y)} \sinh [W_n^+(x, y)]}{\cosh [W_n^-(x, y)] + \exp(2K_n) \cosh [W_n^+(x, y)]}; \quad (\text{B.43})$$

$$g_{n3}^{AF} (x, y) = \frac{-\cosh [W_n^-(x, y)] + \exp(2K_n) \cosh [W_n^+(x, y)]}{\cosh [W_n^-(x, y)] + \exp(2K_n) \cosh [W_n^+(x, y)]}; \quad (\text{B.44})$$

$$g_{n4}^{AF} (x, y) = \frac{\frac{-(x+y-2\beta H)}{W_n^-(x,y)} \sinh [W_n^-(x, y)] - \frac{(x-y) \exp(2K_n)}{W_n^+(x,y)} \sinh [W_n^+(x, y)]}{\cosh [W_n^-(x, y)] + \exp(2K_n) \cosh [W_n^+(x, y)]}, \quad (\text{B.45})$$

$$g_{n5}^{AF}(x, y) = \frac{\frac{-(x+y-2\beta H)}{W_n^-(x, y)} \sinh [W_n^-(x, y)] + \frac{(x-y) \exp(2K_n)}{W_n^+(x, y)} \sinh [W_n^+(x, y)]}{\cosh [W_n^-(x, y)] + \exp(2K_n) \cosh [W_n^+(x, y)]} \quad (\text{B.46})$$

com  $W_n^+(x, y) = \sqrt{(x-y)^2 + K_n^2 (\eta_x + \eta_y)^2}$ , e  $W_n^-(x, y) = \sqrt{(x+y-2\beta H)^2 + K_n^2 (\eta_x - \eta_y)^2} \beta = 1/k_B T$ , para  $n = 1, \ell$ ,  $K_1 = K_\ell = K_s$  e para  $n \neq 1$ ,  $K_n = K$ .

## Apêndice C

# Coeficientes para o Filme Fino com Estrutura de Super-rede

Usando a metodologia empregada quando tratemos do filme fino puro escrevemos neste momento os coeficientes, que associados as equações de estado, para o cálculo das grandezas físicas desejadas.

### 3.0.3 Super-rede alternada F ou AF

Neste seção apresentamos os coeficientes para um super-rede alternada F ou AF, referentes aos cálculo das propriedades magnética e térmica.

$$a_{1,1kq}(T, J_{as}, J_{ab}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^i \alpha_{xas}^{3-k} \beta_{xas}^k \alpha_{xab} \alpha_{yas}^{3-q} \beta_{yas}^q \alpha_{yab} f_1^{(F,AF)}(x, y) |_{x,y=0}, \quad (C.1)$$

$$a_{2,1kq}(T, J_{as}, J_{ab}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^i \alpha_{xas}^{3-k} \beta_{xas}^k \alpha_{yas}^{3-q} \beta_{yas}^q (\alpha_{xab} \beta_{yab} + (-1)^j \beta_{xab} \alpha_{yab}) f_1^{(F,AF)}(x, y) |_{x,y=0}; \quad (C.2)$$

$$a_{3,1kq}(T, J_{as}, J_{ab}) = (-1)^j \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^i \alpha_{xas}^{3-k} \beta_{xas}^k \alpha_{yas}^{3-q} \beta_{yas}^q \beta_{xab} \beta_{yab} f_1^{(F,AF)}(x, y) |_{x,y=0}; \quad (C.3)$$

$$a_{1,nkq}(T, J_n, J_{ab}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^i \alpha_{xab}^2 \alpha_{xb}^{3-k} \beta_{xb}^k \alpha_{yab}^2 \alpha_{yb}^{3-q} \beta_{yb}^q f_n^{(F,AF)}(x, y) |_{x,y=0}; \quad (C.4)$$

$$a_{2,nkq}(T, J_n, J_{ab}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^i \alpha_{xb}^{3-k} \beta_{xb}^k \alpha_{yb}^{3-q} \beta_{yb}^q \left( \alpha_{xab}^2 \alpha_{yab} \beta_{yab} + (-1)^j \alpha_{yab}^2 \alpha_{xab} \beta_{xab} \right) f_n^{(F,AF)}(x, y) |_{x,y=0}; \quad (C.5)$$

$$a_{3,nkq}(T, J_n, J_{ab}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^i \alpha_{xb}^{3-k} \beta_{xb}^k \alpha_{yb}^{3-q} \beta_{yb}^q \left( \alpha_{xab}^2 \beta_{yab}^2 + \alpha_{yab}^2 \beta_{xab}^2 \right) f_n^{(F,AF)}(x, y) |_{x,y=0}; \quad (C.6)$$

$$a_{4,nkq}(T, J_n, J_{ab}) = (-1)^j \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^i \alpha_{xab} \alpha_{xb}^{3-k} \beta_{xab} \beta_{xb}^k \alpha_{yab} \alpha_{yb}^{3-q} \beta_{yab} \beta_{yb}^q f_n^{(F,AF)}(x, y) |_{x,y=0}; \quad (C.7)$$

$$a_{5,nkq}(T, J_n, J_{ab}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^i \beta_{xab}^2 \alpha_{xb}^{3-k} \beta_{xb}^k \beta_{yab}^2 \alpha_{yb}^{3-q} \beta_{yb}^q f_n^{(F,AF)}(x, y) |_{x,y=0}; \quad (C.8)$$

$$a_{6,nkq}(T, J_n, J_{ab}) = (-1)^j \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^i \alpha_{xb}^{3-k} \beta_{xb}^k \alpha_{yb}^{3-q} \beta_{yb}^q \left( \alpha_{xab} \beta_{xab} \beta_{yab}^2 + (-1)^j \alpha_{yab} \beta_{yab} \beta_{xab}^2 \right) f_n^{(F,AF)}(x, y) |_{x,y=0}; \quad (C.9)$$

$$a_{1,\ell k q}(T, J_{bs}, J_{ab}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^i \alpha_{xas}^{3-k} \beta_{xbs}^k \alpha_{xab} \alpha_{ybs}^{3-q} \beta_{ybs}^q \alpha_{yab} f_\ell^{(F,AF)}(x, y) |_{x,y=0}, \quad (C.10)$$

$$a_{2,\ell k q}(T, J_{bs}, J_{ab}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^i \alpha_{xbs}^{3-k} \beta_{xbs}^k \alpha_{ybs}^{3-q} \beta_{ybs}^q \left( \alpha_{xab} \beta_{yab} + (-1)^j \beta_{xab} \alpha_{yab} \right) f_\ell^{(F,AF)}(x, y) |_{x,y=0}; \quad (C.11)$$

$$a_{3,\ell k q}(T, J_{bs}, J_{ab}) = (-1)^j \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^i \alpha_{xbs}^{3-k} \beta_{xbs}^k \alpha_{ybs}^{3-q} \beta_{ybs}^q \beta_{xab} \beta_{yab} f_\ell^{(F,AF)}(x, y) |_{x,y=0}, \quad (C.12)$$

onde ( $j = 1, i = k$ ) temos a super-rede AF e ( $j = 2, i = 2k$ ) super-rede F, com as funções dadas por

$$f_n^F(x, y) = \frac{\frac{(x+y)}{W_n^-(x,y)} \sinh [W_n^-(x, y)] - \frac{(x-y)}{W_n^+(x,y)} \exp(-2K_n) \sinh [W_n^+(x, y)]}{\cosh [W_n^-(x, y)] + \exp(-2K_n) \cosh [W_n^+(x, y)]}, \quad (C.13)$$

$$f_{n,(A,B)}^{AF}(x, y) = \frac{-\frac{(x+y)}{W_n^-(x,y)} \sinh [W_n^-(x, y)] + \frac{(x-y)}{W_n^+(x,y)} \exp(2K_n) \sinh [W_n^+(x, y)]}{\cosh [W_n^-(x, y)] + \exp(2K_n) \cosh [W_n^+(x, y)]}, \quad (C.14)$$

sendo  $W_n^\pm(x, y) = \sqrt{(x \mp y)^2 + K_n^2 (\eta_x \pm \eta_y)^2}$ ,  $K_0 = 0$ ,  $K_1 = \beta J_{as}$ ,  $K_\ell = \beta J_{bs}$ ,  $K_p = \beta J_b$  para  $p = 2, \dots, 2\ell - 2$ ,  $K_i = \beta J_a$  para  $i = 3, \dots, 2\ell - 1$ ,  $\alpha_{\nu as} = \cosh(K_{as} D_\nu)$ ,  $\beta_{\nu as} = \sinh(K_{as} D_\nu)$ ,  $\alpha_{\nu a} = \cosh(K_a D_\nu)$ ,  $\beta_{\nu a} = \sinh(K_a D_\nu)$ ,  $\alpha_{\nu ab} = \cosh(K_{ab} D_\nu)$ ,  $\beta_{\nu ab} = \sinh(K_{ab} D_\nu)$ , para  $\nu = x, y$ . Estas funções trigonométricas estão relacionadas ao operador diferencial e associadas a relação de cinemática de spin 1/2.

No cálculo da susceptibilidade temos as seguintes funções

$$G_1(T, J_{as}, J_{ab}, m_1, m_2) = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 (k+q) [a_{1,1kq}(T, J_{as}, J_{ab}) + a_{2,1kq}(T, J_{as}, J_{ab})m_2 + a_{3,1kq}(T, J_{as}, J_{ab})m_2^2] m_1^{k+q-1}; \quad (C.15)$$

$$G_2(T, J_{as}, J_{ab}, m_1, m_2) = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 [a_{2,1kq}(T, J_{as}, J_{ab}) + 2a_{3,1kq}(T, J_{as}, J_{ab})m_2] m_1^{k+q}; \quad (C.16)$$

$$G'_3(T, J_{as}, J_{ab}, m_1, m_2) = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 [a'_{1,1kq}(T, J_{as}, J_{ab}) + a'_{2,1kq}(T, J_{as}, J_{ab})m_2 + a'_{3,1kq}(T, J_{as}, J_{ab})m_2^2] m_1^{k+q}; \quad (C.17)$$

$$G_{n-1}(T, J_n, J_{ab}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 [a_{2,nkq}(T, J_n, J_{ab}) + a_{3,nkq}(T, J_n, J_{ab})m_{n+1} + 2a_{4,nkq}(T, J_n, J_{ab})(m_{n-1} + m_{n+1}) + 2a_{5,nkq}(T, J_n, J_{ab})m_{n-1}m_{n+1}^2 + 2a_{6,nkq}(T, J_n, J_{ab})m_{n-1}m_{n+1}] m_n^{k+q} \quad (C.18)$$

$$G_n(T, J_n, J_{ab}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 (k+q) [a_{1,1kq}(T, J_{as}, J_{ab}) + a_{2,1kq}(T, J_{as}, J_{ab})(m_{n-1} + m_{n+1}) + a_{3,1kq}(T, J_{as}, J_{ab})m_{n-1}m_{n+1} + a_{4,1kq}(T, J_{as}, J_{ab})(m_{n-1} + m_{n+1})^2 + a_{5,1kq}(T, J_{as}, J_{ab})m_{n-1}^2m_{n+1}^2 + a_{6,1kq}(T, J_{as}, J_{ab})(m_{n-1}^2m_{n+1} + m_{n-1}m_{n+1}^2)] m_n^{k+q-1}; \quad (C.19)$$

$$G_{n+1}(T, J_n, J_{ab}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 [a_{2,nkq}(T, J_n, J_{ab}) + a_{3,nkq}(T, J_n, J_{ab})m_{n-1} +$$

$$2a_{4,nkq}(T, J_n, J_{ab})(m_{n-1} + m_{n+1}) + 2a_{5,nkq}(T, J_n, J_{ab})m_{n-1}^2 m_{n+1} + 2a_{6,nkq}(T, J_n, J_{ab})m_{n-1} m_{n+1} \Big] m_n^{k+q}; \quad (\text{C.20})$$

$$G'_n(T, J_n, J_{ab}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 \left[ a'_{1,nkq}(T, J_n, J_{ab}) + a'_{2,nkq}(T, J_n, J_{ab})(m_{n-1} + m_{n+1}) + a'_{3,nkq}(T, J_n, J_{ab})m_{n-1} m_{n+1} + a'_{4,nkq}(T, J_n, J_{ab})(m_{n-1} + m_{n+1})^2 + a'_{5,nkq}(T, J_n, J_{ab})m_{n-1}^2 m_{n+1}^2 + a'_{6,nkq}(T, J_n, J_{ab})(m_{n-1}^2 m_{n+1} + m_{n-1} m_{n+1}^2) \right] m_n^{k+q}; \quad (\text{C.21})$$

$$G_\ell(T, J_{bs}, J_{ab}, m_\ell, m_{\ell-1}) = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 (k+q) \left[ a_{1,\ell kq}(T, J_{bs}, J_{ab}) + a_{2,\ell kq}(T, J_{bs}, J_{ab})m_{\ell-1} + a_{3,\ell kq}(T, J_{bs}, J_{ab})m_{\ell-1}^2 \right] m_\ell^{k+q-1}; \quad (\text{C.22})$$

$$G_{\ell-1}(T, J_{bs}, J_{ab}, m_\ell, m_{\ell-1}) = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 \left[ a_{2,\ell kq}(T, J_{bs}, J_{ab}) + 2a_{3,\ell kq}(T, J_{bs}, J_{ab})m_{\ell-1} \right] m_\ell^{k+q}; \quad (\text{C.23})$$

$$G'_\ell(T, J_{bs}, J_{ab}, m_\ell, m_{\ell-1}) = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 \left[ a'_{1,\ell kq}(T, J_{bs}, J_{ab}) + a'_{2,\ell kq}(T, J_{bs}, J_{ab})m_{\ell-1} + a'_{3,\ell kq}(T, J_{bs}, J_{ab})m_{\ell-1}^2 \right] m_\ell^{k+q}, \quad (\text{C.24})$$

onde  $a'_{n,\ell kq}$  é definido fazendo a permuta de  $f_n^{(F,AF)}(x, y) \rightarrow \frac{\partial f_n^{(F,AF)}(x, y)}{\partial H} \Big|_{H=0}$  nos coeficientes  $a_{n,\ell kq}$ , com

$$\frac{\partial f_n^{F,AF}(x, y)}{\partial H} \Big|_{H=0} = \frac{2\beta \sinh(W^-)}{W^- [\cosh(W^-) + \exp(\mp 2K_n) \cosh(W^+)]} + \frac{2\beta(x+y)^2}{W^- [\cosh(W^-) + \exp(\mp 2K_n) \cosh(W^+)]} \left[ \frac{\cosh(W^-)}{W^-} - \right.$$

$$\frac{\sinh(W^-)}{(W^-)^2} - \frac{\sinh^2(W^-)}{W^-}. \quad (\text{C.25})$$

No desenvolvimento dos cálculos para a energia interna, na ausência de campo externo, para a super-rede F e AF encontramos as seguintes expressões

$$V_{1j}^{F,AF}(T, J_{as}, J_{ab}, m_1, m_2) = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 \left[ a_{1,jkq}(T, J_{as}, J_{ab}) + a_{2,jkq}(T, J_{as}, J_{ab})m_2 + a_{3,jkq}(T, J_{as}, J_{ab})m_2^2 \right] m_1^{k+q}; \quad (\text{C.26})$$

$$\begin{aligned} V_{nj}^{F,AF}(T, J_n, J_{ab}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) &= \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 \left[ a_{1,nkq}(T, J_n, J_{ab}) + a_{2,nkq}(T, J_n, J_{ab})(m_{n-1} + m_{n+1}) + a_{3,nkq}(T, J_n, J_{ab})(m_{n-1} + m_{n+1})^2 \right. \\ &\quad \left. + a_{4,nkq}(T, J_n, J_{ab})(m_{n-1} + m_{n+1})^2 + a_{5,nkq}(T, J_n, J_{ab})m_{n-1}^2 m_{n+1}^2 + a_{6,nkq}(T, J_n, J_{ab}) \left( m_{n-1}^2 m_{n+1} + m_{n-1} m_{n+1}^2 \right) \right] m_n^{k+q}; \end{aligned}$$

$$V_{\ell j}^{F,AF}(T, J_{bs}, J_{ab}, m_\ell, m_{\ell-1}) = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 \left[ a_{1,\ell kq}(T, J_{bs}, J_{ab}) + a_{2,\ell kq}(T, J_{bs}, J_{ab})m_\ell + a_{3,\ell kq}(T, J_{bs}, J_{ab})m_{\ell-1}^2 \right] m_\ell^{k+q}; \quad (\text{C.28})$$

onde os valores de  $V_{nj}^{F,AF}(T, J_n, J_{ab}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1})$  são obtidos a partir dos coeficientes apresentados nas Eqs.(C.1)-(C.3) com as respectivas funções  $f(x, y)$  para o sistema F

$$j = 1, 2 \rightarrow f_1^F(x, y) = \frac{\frac{(\eta_x - \eta_y)}{W_n^-(x, y)} \sinh [W_n^-(x, y)] + \frac{(\eta_x + \eta_y) \exp(-2K_n)}{W_n^+(x, y)} \sinh [W_n^+(x, y)]}{\cosh [W_n^-(x, y)] + \exp(-2K_n) \cosh [W_n^+(x, y)]}; \quad (\text{C.29})$$

$$j = 3 \rightarrow f_2^F(x, y) = \frac{\cosh [W_n^-(x, y)] - \exp(-2K_n) \cosh [W_n^+(x, y)]}{\cosh [W_n^-(x, y)] + \exp(-2K_n) \cosh [W_n^+(x, y)]}; \quad (\text{C.30})$$

$$j = 4 \rightarrow f_3^F(x, y) = \frac{\frac{(x+y)}{W_n^-(x, y)} \sinh [W_n^-(x, y)] - \frac{(x-y) \exp(-2K_n)}{W_n^+(x, y)} \sinh [W_n^+(x, y)]}{\cosh [W_n^-(x, y)] + \exp(-2K_n) \cosh [W_n^+(x, y)]}, \quad (\text{C.31})$$

e para o sistema AF

$$j = 1 \rightarrow f_1^{AF}(x, y) = \frac{\frac{(\eta_x - \eta_y)}{W_n^-(x, y)} \sinh [W_n^-(x, y)] + \frac{(\eta_x + \eta_y) \exp(2K_n)}{W_n^+(x, y)} \sinh [W_n^+(x, y)]}{\cosh [W_n^-(x, y)] + \exp(2K_n) \cosh [W_n^+(x, y)]}; \quad (\text{C.32})$$

$$j = 2 \rightarrow f_1^{AF}(x, y) = \frac{-\frac{(\eta_x - \eta_y)}{W_n^-(x, y)} \sinh [W_n^-(x, y)] + \frac{(\eta_x + \eta_y) \exp(2K_n)}{W_n^+(x, y)} \sinh [W_n^+(x, y)]}{\cosh [W_n^-(x, y)] + \exp(2K_n) \cosh [W_n^+(x, y)]}; \quad (\text{C.33})$$

$$j = 3 \rightarrow f_2^{AF}(x, y) = \frac{-\cosh [W_n^-(x, y)] + \exp(2K_n) \cosh [W_n^+(x, y)]}{\cosh [W_n^-(x, y)] + \exp(2K_n) \cosh [W_n^+(x, y)]}; \quad (\text{C.34})$$

$$j = 4 \rightarrow f_3^{AF}(x, y) = \frac{-\frac{(x+y)}{W_n^-(x, y)} \sinh [W_n^-(x, y)] + \frac{(x-y) \exp(2K_n)}{W_n^+(x, y)} \sinh [W_n^+(x, y)]}{\cosh [W_n^-(x, y)] + \exp(2K_n) \cosh [W_n^+(x, y)]}. \quad (\text{C.35})$$

com  $W_n^\pm(x, y) = \sqrt{(x \mp y)^2 + K_n^2 (\eta_x \pm \eta_y)^2}$ ,  $K_0 = 0$ ,  $K_1 = \beta J_{as}$ ,  $K_\ell = \beta J_{bs}$ ,  $K_p = \beta J_b$  para  $p = 2, \dots, 2\ell - 2$ ,  $K_i = \beta J_a$  para  $i = 3, \dots, 2\ell - 1$ .

### 3.0.4 Super-Rede F/AF

Os coeficientes para essa configuração são dados por

$$a_{1,1kq}^F(T, J_{SF}, J_{AF}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} \alpha_{xSF}^{3-k} \beta_{xSF}^k \alpha_{xAF} \alpha_{ySF}^{3-q} \beta_{ySF}^q \alpha_{yAF} f_1^F(x, y) |_{x,y=0}, \quad (\text{C.36})$$

$$a_{2,1kq}^F(T, J_{SF}, J_{AF}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} \alpha_{xSF}^{3-k} \alpha_{ySF}^{3-q} \left( \alpha_{xAF} \beta_{xSF}^k \beta_{ySF} \beta_{yAF} - \alpha_{yAF} \beta_{ySF}^q \beta_{xSF} \beta_{xAF} \right) f_1^F(x, y) |_{x,y=0}; \quad (\text{C.37})$$

$$a_{3,1kq}^F(T, J_{SF}, J_{AF}) = -\binom{3}{k} \binom{3}{q} \alpha_{xSF}^{3-k} \beta_{xSF}^k \alpha_{ySF}^{3-q} \beta_{ySF}^q \beta_{xAF} \beta_{yAF} f_1^F(x, y) |_{x,y=0}. \quad (\text{C.38})$$

Para a camada  $n = 2$  temos

$$a_{1,2kq}^{AF}(T, J_F, J_{AF}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^q \alpha_{xF}^2 \alpha_{xA}^{3-k} \beta_{xA}^k \alpha_{yF}^2 \alpha_{yA}^{3-q} \beta_{yA}^q f_2^{AF}(x, y)|_{x,y=0}; \quad (C.39)$$

$$a_{2,2kq}^{AF}(T, J_F, J_{AF}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^q \alpha_{xA}^{3-k} \beta_{xA}^k \alpha_{yA}^{3-q} \beta_{yA}^q \left( \alpha_{xF}^2 \alpha_{yF} \beta_{yF} + \alpha_{yF}^2 \alpha_{xF} \beta_{xF} \right) f_2^{AF}(x, y)|_{x,y=0}; \quad (C.40)$$

$$a_{3,2kq}^{AF}(T, J_F, J_{AF}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^q \alpha_{xA}^{3-k} \beta_{xA}^k \alpha_{yA}^{3-q} \beta_{yA}^q \left( \alpha_{xF}^2 \beta_{yF}^2 + \alpha_{yF}^2 \beta_{xF}^2 \right) f_2^{AF}(x, y)|_{x,y=0}; \quad (C.41)$$

$$a_{4,2kq}^{AF}(T, J_F, J_{AF}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^q \alpha_{xF} \alpha_{xA}^{3-k} \beta_{xA}^k \alpha_{yF} \alpha_{yA}^{3-q} \beta_{yA}^q f_2^{AF}(x, y)|_{x,y=0}; \quad (C.42)$$

$$a_{5,2kq}^{AF}(T, J_F, J_{AF}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^q \beta_{xF}^2 \alpha_{xA}^{3-k} \beta_{xA}^k \beta_{yF}^2 \alpha_{yA}^{3-q} \beta_{yA}^q f_2^{AF}(x, y)|_{x,y=0}; \quad (C.43)$$

$$a_{6,2kq}^{AF}(T, J_F, J_{AF}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^q \alpha_{xA}^{3-k} \beta_{xA}^k \alpha_{yA}^{3-q} \beta_{yA}^q \left( \alpha_{xF} \beta_{xF} \beta_{yF}^2 + \alpha_{yF} \beta_{yF} \beta_{xF}^2 \right) f_2^{AF}(x, y)|_{x,y=0}. \quad (C.44)$$

Para  $n = 3$  encontramos

$$a_{1,3kq}^F(T, J_F, J_{AF}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} \alpha_{xA}^2 \alpha_{xF}^{3-k} \beta_{xF}^k \alpha_{yA}^2 \alpha_{yF}^{3-q} \beta_{yF}^q f_3^F(x, y)|_{x,y=0}; \quad (C.45)$$

$$a_{2,3kq}^F(T, J_F, J_{AF}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} \alpha_{xF}^{3-k} \beta_{xF}^k \alpha_{yF}^{3-q} \beta_{yF}^q \left( \alpha_{xA}^2 \alpha_{yA} \beta_{yA} - \alpha_{yA}^2 \alpha_{xA} \beta_{xA} \right) f_3^F(x, y)|_{x,y=0}; \quad (C.46)$$

$$a_{3,3kq}^F(T, J_F, J_{AF}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} \alpha_{xF}^{3-k} \beta_{xF}^k \alpha_{yF}^{3-q} \beta_{yF}^q \left( \alpha_{xA}^2 \beta_{yA}^2 + \alpha_{yA}^2 \beta_{xA}^2 \right) f_3^F(x, y)|_{x,y=0}; \quad (C.47)$$

$$a_{4,3kq}^F(T, J_F, J_{AF}) = - \binom{3}{k} \binom{3}{q} \alpha_{xA} \alpha_{xF}^{3-k} \beta_{xA} \beta_{xF}^k \alpha_{yA} \alpha_{yF}^{3-q} \beta_{yA} \beta_{yF}^q f_3^F(x, y)|_{x,y=0}; \quad (C.48)$$

$$a_{5,3kq}^F(T, J_F, J_{AF}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} \beta_{xA}^2 \alpha_{xF}^{3-k} \beta_{xF}^k \beta_{yA}^2 \alpha_{yF}^{3-q} \beta_{yF}^q f_3^F(x, y)|_{x,y=0}; \quad (C.49)$$

$$a_{6,3kq}^F(T, J_F, J_{AF}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} \alpha_{xF}^{3-k} \beta_{xF}^k \alpha_{yF}^{3-q} \beta_{yF}^q \left( \alpha_{xA} \beta_{xA} \beta_{yA}^2 + \alpha_{yA} \beta_{yA} \beta_{xA}^2 \right) f_3^F(x, y)|_{x,y=0}. \quad (C.50)$$

Para  $n = \ell$  teremos

$$a_{1,\ell k q}^{AF}(T, J_{SAF}, J_F) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^q \alpha_{xSAF}^{3-k} \beta_{xSAF}^k \alpha_{ySAF}^{3-q} \beta_{ySAF}^q \alpha_{yF} f_\ell^{AF}(x, y)|_{x,y=0}, \quad (C.51)$$

$$a_{2,\ell k q}^{AF}(T, J_{SAF}, J_F) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^q \alpha_{xSAF}^{3-k} \beta_{xSAF}^k \alpha_{ySAF}^{3-q} \beta_{ySAF}^q (\alpha_{xF} \beta_{yF} - \beta_{xF} \alpha_{yF}) f_\ell^{AF}(x, y)|_{x,y=0}; \quad (C.52)$$

$$a_{3,\ell k q}^{AF}(T, J_{SAF}, J_F) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^q \alpha_{xSAF}^{3-k} \beta_{xSAF}^k \alpha_{ySAF}^{3-q} \beta_{ySAF}^q \beta_{xF} \beta_{yF} f_\ell^{AF}(x, y)|_{x,y=0}. \quad (C.53)$$

onde as funções  $f_n^{F,AF}(x, y)$  são dadas pelas equações Eq.(C.13) e Eq.(C.14), respectivamente.

Neste caso temos:  $K_1 = \beta J_{SF}$ ,  $K_n = \beta J_F$ , para  $n = 3, 5, \dots$ ,  $K_n = \beta J_{AF}$ , para  $n = 2, 4, \dots$ ,  $K_\ell = \beta J_{SF}$ ,  $\alpha_{\nu S(F,AF)} = \cosh(K_{S(F,AF)} D_\nu)$ ,  $\beta_{\nu S(F,AF)} = \sinh(K_{S(F,AF)} D_\nu)$ ,  $\alpha_{\nu(F,AF)} = \cosh(K_{(F,AF)} D_\nu)$ ,  $\beta_{\nu(F,AF)} = \sinh(K_{(F,AF)} D_\nu)$ , com  $\nu = x, y$ .

A susceptibilidade magnética está associada a funções do tipo  $G^F(T, J_{SF}, J_{AF}, m_1, m_2)$ , no cálculo de  $\chi_1$ ,  $G^{AF,F}(T, J_{(AF,F)}, J_{(F,AF)}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1})$ , para  $\chi_n$  e  $G^{AF}(T, J_{SAF}, J_F, m_{\ell-1}, m_\ell)$ , quando determinamos  $\chi_\ell$ , obtidas da mesma forma que as encontradas nas Eqs.(C.15)-(C.24).

No processo do cálculo da energia interna temos as seguintes expressões

$$V_{1j}^F(T, J_{SF}, J_{AF}, m_1, m_2) = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 \left[ a_{1,jkq}^F(T, J_{SF}, J_{AF}) + a_{2,jkq}^F(T, J_{SF}, J_{AF}) m_2 + a_{3,jkq}^F(T, J_{SF}, J_{AF}) m_2^2 \right] m_1^{k+q} \quad (C.54)$$

para  $n$  par

$$\begin{aligned} V_{nj}^{AF}(T, J_F, J_{AF}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) &= \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 \left[ a_{1,nkq}^{AF}(T, J_F, J_{AF}) + a_{2,nkq}^{AF}(T, J_F, J_{AF})(m_{n-1} + m_{n+1}) + a_{3,nkq}^{AF}(T, J_F, J_{AF})(m_{n-1} + m_{n+1})^2 + a_{4,nkq}^{AF}(T, J_F, J_{AF})(m_{n-1} + m_{n+1})^2 + a_{5,nkq}^{AF}(T, J_F, J_{AF}) m_{n-1}^2 m_{n+1}^2 + a_{6,nkq}^{AF}(T, J_F, J_{AF}) (m_{n-1}^2 m_{n+1} + m_{n-1} m_{n+1}^2) \right] m_n^{k+q}; \end{aligned}$$

para  $n$  ímpar

$$\begin{aligned}
V_{nj}^F(T, J_F, J_{AF}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) &= \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 \left[ a_{1,nkq}^F(T, J_F, J_{AF}) + a_{2,nkq}^F(T, J_F, J_{AF})(m_{n-1} + m_{n+1}) + a_{3,nkq}^F \right. \\
&\quad a_{4,nkq}^F(T, J_F, J_{AF})(m_{n-1} + m_{n+1})^2 + a_{5,nkq}^F(T, J_F, J_{AF})m_{n-1}^2 m_{n+1}^2 + \\
&\quad \left. a_{6,nkq}^F(T, J_F, J_{AF}) \left( m_{n-1}^2 m_{n+1} + m_{n-1} m_{n+1}^2 \right) \right] m_n^{k+q};
\end{aligned}$$

para a  $\ell$ -ésima camada

$$V_{\ell j}^{AF}(T, J_{bs}, J_{ab}, m_\ell, m_{\ell-1}) = \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 \left[ a_{1,\ell kq}(T, J_{SAF}, J_F) + a_{2,\ell kq}(T, J_{SAF}, J_F)m_\ell + a_{3,\ell kq}(T, J_{SAF}, J_F)m_{\ell-1}^2 \right] m_\ell^{k+q} \quad (C.57)$$

onde os valores de  $V_{nj}^{F,AF}(T, J_n, J_{ab}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1})$  são obtidos a partir dos coeficientes apresentados nas Eqs.(C.1)-(C.3) com as respectivas funções  $f(x, y)$  dadas nas Eqs.(2.75)-(2.77) para o sistema F e Eqs.(C.32)-(C.35) para o AF.

### 3.0.5 Super-Rede FF/AFAF

Nesta configuração os coeficientes para a magnetização na interface cuja camada  $n = \frac{\ell}{2}$  são dados a seguir como:

$$a_{1,nkq}(T, J_F, J_{AF}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} \alpha_{xAF} \alpha_{xF}^{3-k+1} \beta_{xF}^k \alpha_{yF}^{3-q+2} \beta_{yF}^q f_n^F(x, y) |_{x,y=0}; \quad (C.58)$$

$$a_{2,nkq}(T, J_F, J_{AF}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} \left( \alpha_{xAF} \alpha_{xF}^{3-k+1} \beta_{xF}^k \alpha_{yF}^{3-q+1} \beta_{yF}^{q+1} + \alpha_{xF}^{3-k} \beta_{xF}^{k+1} \alpha_{xAF} \alpha_{yF}^{3-q+2} \beta_{yF}^q \right) f_n^F(x, y) |_{x,y=0}; \quad (C.59)$$

$$a_{3,nkq}(T, J_F, J_{AF}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} \left( \alpha_{xAF} \alpha_{xF}^{3-k+1} \beta_{xF}^k \alpha_{yF}^{3-q+1} \beta_{yF}^{q+1} + \alpha_{xF}^{3-k+1} \beta_{xF}^k \beta_{xAF} \alpha_{yF}^{3-q+2} \beta_{yF}^q \right) f_n^F(x, y) |_{x,y=0}; \quad (C.60)$$

$$a_{4,nkq}(T, J_F, J_{AF}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} \left( \alpha_{xF}^{3-k} \beta_{xF}^{k+1} \beta_{xAF} \alpha_{yF}^{3-q+2} \beta_{yF}^q + \alpha_{xF}^{3-k+1} \beta_{xF}^k \alpha_{xAF} \alpha_{yF}^{3-q} \beta_{yF}^{q+2} \right) f_n^F(x, y) |_{x,y=0}; \quad (C.61)$$

$$a_{5,nkq}(T, J_F, J_{AF}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} \alpha_{xF}^{3-k+1} \beta_{xF}^k \beta_{xAF} \alpha_{yF}^{3-q+1} \beta_{yF}^{q+1} f_n^F(x, y) |_{x,y=0}; \quad (C.62)$$

$$a_{6,nkq}(T, J_F, J_{AF}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} \alpha_{xF}^{3-k} \beta_{xF}^{k+1} \alpha_{xAF} \alpha_{yF}^{3-q+1} \beta_{yF}^{q+1} f_n^F(x, y) |_{x,y=0}; \quad (C.63)$$

$$a_{7,nkq}(T, J_F, J_{AF}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} \alpha_{xF}^{3-k} \beta_{xF}^{k+1} \beta_{xAF} \alpha_{yF}^{3-q} \beta_{yF}^{q+2} f_n^F(x, y) |_{x,y=0}; \quad (C.64)$$

$$a_{8,nkq}(T, J_F, J_{AF}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} \left( \alpha_{xF}^{3-k+1} \beta_{xF}^k \beta_{xAF} \alpha_{yF}^{3-q} \beta_{yF}^{q+2} + \alpha_{xF}^{3-k} \beta_{xF}^{k+1} \beta_{xAF} \alpha_{yF}^{3-q+1} \beta_{yF}^{q+1} \right) f_n^F(x, y) |_{x,y=0}; \quad (C.65)$$

$$a_{9,nkq}(T, J_F, J_{AF}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} \left( \alpha_{xF}^{3-k} \beta_{xF}^{k+1} \alpha_{xAF} \alpha_{yF}^{3-q} \beta_{yF}^{q+2} + \alpha_{xF}^{3-k} \beta_{xF}^{k+1} \beta_{xAF} \alpha_{yF}^{3-q+1} \beta_{yF}^{q+1} \right) f_n^F(x, y) |_{x,y=0}; \quad (C.66)$$

Quando a camada for  $n = \frac{\ell}{2} + 1$  os coeficientes ficam

$$a_{1,nkq}(T, J_F, J_{AF}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^q \alpha_{yF} \alpha_{yAF}^{3-k+1} \beta_{yAF}^k \alpha_{xAF}^{3-q+2} \beta_{xAF}^q f_n^{AF}(x, y) |_{x,y=0}; \quad (C.67)$$

$$a_{2,nkq}(T, J_F, J_{AF}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^q \left( \alpha_{yF} \alpha_{yAF}^{3-k+1} \beta_{yAF}^k \alpha_{xAF}^{3-q+1} \beta_{xAF}^{q+1} + \alpha_{yAF} \beta_{yAF}^{k+1} \alpha_{yF} \alpha_{xAF}^{3-q+2} \beta_{xAF}^q \right) f_n^{AF}(x, y) |_{x,y=0}; \quad (C.68)$$

$$a_{3,nkq}(T, J_F, J_{AF}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^q \left( \alpha_{yF} \alpha_{yAF}^{3-k+1} \beta_{yAF}^k \alpha_{xAF}^{3-q+1} \beta_{xAF}^{q+1} + \alpha_{yAF}^{3-k+1} \beta_{yAF}^k \beta_{yF} \alpha_{xAF}^{3-q+2} \beta_{xAF}^q \right) f_n^{AF}(x, y) |_{x,y=0}; \quad (C.69)$$

$$a_{4,nkq}(T, J_F, J_{AF}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^q \left( \alpha_{yAF}^{3-k} \beta_{yAF}^{k+1} \beta_{yF} \alpha_{xAF}^{3-q+2} \beta_{xAF}^q + \alpha_{yAF}^{3-k+1} \beta_{yAF}^k \alpha_{yF} \alpha_{xAF}^{3-q} \beta_{xAF}^{q+2} \right) f_n^{AF}(x, y) |_{x,y=0}; \quad (C.70)$$

$$a_{5,nkq}(T, J_F, J_{AF}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^q \alpha_{yAF}^{3-k+1} \beta_{yAF}^k \beta_{yF} \alpha_{xAF}^{3-q+1} \beta_{xAF}^{q+1} f_n^{AF}(x, y) |_{x,y=0}; \quad (C.71)$$

$$a_{6,nkq}(T, J_F, J_{AF}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^q \alpha_{yAF}^{3-k} \beta_{yAF}^{k+1} \alpha_{yF} \alpha_{xAF}^{3-q+1} \beta_{xAF}^{q+1} f_n^{AF}(x, y) |_{x,y=0}; \quad (C.72)$$

$$a_{7,nkq}(T, J_F, J_{AF}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^q \alpha_{yAF}^{3-k} \beta_{yAF}^{k+1} \beta_{yF} \alpha_{xAF}^{3-q} \beta_{xAF}^{q+2} f_n^{AF}(x, y) |_{x,y=0}; \quad (C.73)$$

$$a_{8,nkq}(T, J_F, J_{AF}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^q \left( \alpha_{yAF}^{3-k+1} \beta_{yAF}^k \beta_{yF} \alpha_{xAF}^{3-q} \beta_{xAF}^{q+2} + \alpha_{yAF}^{3-k} \beta_{yAF}^{k+1} \beta_{yF} \alpha_{xAF}^{3-q+1} \beta_{xAF}^{q+1} \right) f_n^{AF}(x, y) |_{x,y=0}; \quad (C.74)$$

$$a_{9,nkq}(T, J_F, J_{AF}) = \binom{3}{k} \binom{3}{q} (-1)^q \left( \alpha_{yAF}^{3-k} \beta_{yAF}^{k+1} \alpha_{yF} \alpha_{xAF}^{3-q} \beta_{xAF}^{q+2} + \alpha_{yAF}^{3-k} \beta_{yAF}^{k+1} \beta_{yF} \alpha_{xAF}^{3-q+1} \beta_{xAF}^{q+1} \right) f_n^{AF}(x, y) |_{x,y=0}. \quad (C.75)$$

As funções  $G(T, J_F, J_{AF}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1})$  e  $G'(T, J_F, J_{AF}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1})$  sã escritas a seguir:

$$\begin{aligned} G_{n-1}(T, J_F, J_{AF}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) &= \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 [a_{2,nkq}(T, J_F, J_{AF}) + a_{4,nkq}(T, J_F, J_{AF})m_{n+1} + a_{5,nkq}(T, J_F, J_{AF})m_{n+1}^2 + \\ & a_{6,nkq}(T, J_F, J_{AF})(m_{n+1} + 2m_{n-1}) + 2a_{7,nkq}(T, J_F, J_{AF})m_{n-1}m_{n+1}^2 + \\ & a_{8,nkq}(T, J_F, J_{AF})m_{n+1}^2 + 2a_{9,nkq}(T, J_F, J_{AF})m_{n-1}m_{n+1}] m_n^{k+q}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} G_n(T, J_F, J_{AF}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) &= \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 (k+q) [a_{1,nkq}(T, J_F, J_{AF}) + a_{2,nkq}(T, J_F, J_{AF})m_{n-1} + a_{3,nkq}(T, J_F, J_{AF})m_{n-1}^2 + \\ & a_{4,nkq}(T, J_F, J_{AF})m_{n-1}m_{n+1} + a_{5,nkq}(T, J_F, J_{AF})(m_{n+1}^2 + m_{n+1}m_{n-1}) + \\ & a_{6,nkq}(T, J_F, J_{AF})(m_{n+1}m_{n-1} + m_{n-1}^2) + a_{7,nkq}(T, J_F, J_{AF})m_{n-1}^2m_{n+1}^2 + \\ & a_{8,nkq}(T, J_F, J_{AF})m_{n-1}m_{n+1}^2 + a_{9,nkq}(T, J_F, J_{AF})m_{n-1}^2m_{n+1}] m_n^{k+q-1}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} G_{n+1}(T, J_F, J_{AF}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) &= \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 [a_{3,nkq}(T, J_F, J_{AF}) + a_{4,nkq}(T, J_F, J_{AF})m_{n-1} + a_{5,nkq}(T, J_F, J_{AF})m_{n-1}^2 + \\ & a_{6,nkq}(T, J_F, J_{AF})m_{n-1} + 2a_{7,nkq}(T, J_F, J_{AF})m_{n+1}m_{n-1}^2 + \end{aligned}$$

$$2a_{8,nkq}(T, J_F, J_{AF})m_{n-1}m_{n+1} + a_{9,nkq}(T, J_F, J_{AF})m_{n-1}^2 \Big] m_n^{k+q};$$

$$\begin{aligned} G_n(T, J_F, J_{AF}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) = & \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 (k+q) \left[ a'_{1,nkq}(T, J_F, J_{AF}) + a'_{2,nkq}(T, J_F, J_{AF})m_{n-1} + a'_{3,nkq}(T, J_F, J_{AF})m_{n-1}^2 \right. \\ & a'_{4,nkq}(T, J_F, J_{AF})m_{n-1}m_{n+1} + a'_{5,nkq}(T, J_F, J_{AF})(m_{n+1}^2 + m_{n+1}m_{n-1}) \\ & a'_{6,nkq}(T, J_F, J_{AF})(m_{n+1}m_{n-1} + m_{n-1}^2) + a'_{7,nkq}(T, J_F, J_{AF})m_{n-1}^2 m_{n+1}^2 + \\ & \left. a'_{8,nkq}(T, J_F, J_{AF})m_{n-1}m_{n+1}^2 + a'_{9,nkq}(T, J_F, J_{AF})m_{n-1}^2 m_{n+1} \right] m_n^{k+q-1}, \end{aligned}$$

onde os coeficientes  $a'_{j,nkq}$  são obtidos a partir de funções idênticas as apresentadas na Eq.(C.25) deste apêndice.

A energia interna desse sistema é escrita em função dos seguintes termos: para  $n = \frac{\ell}{2}$  e para  $n = \frac{\ell}{2} + 1$  ficamos com

$$\begin{aligned} V_{nj}^{F,AF}(T, J_F, J_{AF}, m_{n-1}, m_n, m_{n+1}) = & \sum_{k=0}^3 \sum_{q=0}^3 \left[ a_{1,nkq}(T, J_F, J_{AF}) + a_{2,nkq}(T, J_F, J_{AF})m_{n-1} + a_{3,nkq}(T, J_F, J_{AF})m_{n-1}^2 \right. \\ & a_{4,nkq}(T, J_F, J_{AF})m_{n-1}m_{n+1} + a_{5,nkq}(T, J_F, J_{AF})(m_{n+1}^2 + m_{n+1}m_{n-1}) \\ & a_{6,nkq}(T, J_F, J_{AF})(m_{n+1}m_{n-1} + m_{n-1}^2) + a_{7,nkq}(T, J_F, J_{AF})m_{n-1}^2 m_{n+1}^2 + \\ & \left. a_{8,nkq}(T, J_F, J_{AF})m_{n-1}m_{n+1}^2 + a_{9,nkq}(T, J_F, J_{AF})m_{n-1}^2 m_{n+1} \right] m_n^{k+q}, \end{aligned}$$

sendo os coeficientes  $a_{j,nkq}(T, J_F, J_{AF})$  dados para a camada F nas Eqs.(C.58)-(C.66) e para a camada AF Eqs.(C.67)-(C.75).