



**UFRR**

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE RORAIMA  
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO  
PROGRAMA DE MESTRADO EM FÍSICA**

**LUIS CARLOS RODRIGUES DA SILVEIRA**

**MAGNETIZAÇÃO DE PLATÔ NO MODELO DE ISING  
COMPETITIVO UNIDIMENSIONAL**

Boa Vista

2013

LUIS CARLOS RODRIGUES DA SILVEIRA

**MAGNETIZAÇÃO DE PLATÔ NO MODELO DE ISING  
COMPETITIVO UNIDIMENSIONAL**

Dissertação de mestrado apresentado como pré-requisito para obtenção do título de Mestre em Física pelo programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Roraima.

Orientador: Prof. Dr. Ijanílio Gabriel de Araújo

Co-orientador: Prof. Dr. Minos Martins Adão Neto

Boa Vista

2013

Dados Internacionais de Catalogação na publicação (CIP)  
Biblioteca Central da Universidade Federal de Roraima

S587m Silveira, Luís Carlos Rodrigues da.  
Magnetização de platô no modelo de Ising competitivo  
unidimensional / Luís Carlos Rodrigues da Silveira. -- Boa  
Vista, 2013.  
80 f : il.

Orientador: Prof. Dr. Ijanílio Gabriel de Araújo.  
Co-orientador: Prof. Dr. Minos Martins Adão Neto  
Dissertação (mestrado) – Universidade Federal de  
Roraima, Programa de Pós-Graduação em Física.

1 – Magnetismo. 2 – Física. 3 – Modelo de Ising. I – Título.  
II. – Araújo, Ijanílio Gabriel de (orientador).

CDU- 537.6

LUIS CARLOS RODRIGUES DA SILVEIRA

**MAGNETIZAÇÃO DE PLATÔ NO MODELO DE ISING COMPETITIVO  
UNIDIMENSIONAL**

Dissertação apresentada como pré-requisito para conclusão do Curso de Mestrado do Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Roraima. Área de concentração: Física da Matéria Condensada e Mecânica Estatística. Defendida em 30 de julho de 2013 e avaliada pela seguinte banca examinadora:



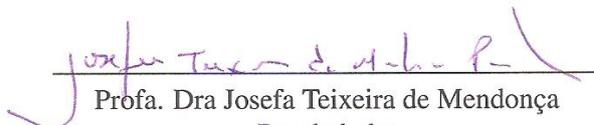
---

Prof. Dr. Ijanílio Gabriel de Araújo  
Departamento de Física - UFRR



---

Prof. Dr. Ananias Monteiro Mariz  
Departamento de Física Teórica e  
Experimental - UFRN



---

Profa. Dra Josefa Teixeira de Mendonça  
Pacobahyba  
Departamento de Física-UFRR

A Deus e a minha família.

## AGRADECIMENTO

Agradeço ao Deus Eterno que me proporcionou este privilégio de finalizar este curso. A minha querida mãe, Edionéa Rodrigues da Silveira e meu pai Damil Tavares da Silveira, que se esforçaram para que atingisse meus objetivos, possibilitando subir mais um degrau na escada do conhecimento, e pela sabedoria que Deus lhes concedeu de conduzir minha formação educacional.

A todos meus familiares, com ênfase a minha querida esposa Andrea Martins dos Santos Silveira, e minhas filhas: Larissa Martins dos Santos Silveira, Laila Martins dos Santos Silveira e Letícia Martins dos Santos Silveira, pela compreensão de muitas horas dedicadas a este trabalho, e pelo incentivo e carinho nesses dois anos de intenso trabalho acadêmico.

Aos professores do Programa de Pós-Graduação em Física da UFRR: Dr. José Carlos, Dr. Miguel Gustavo de Campos Batista, Dr. Cássio Sérgio, Dr. Eliel Eleutério Farias e especialmente aos professores: Dr. Ijanílio Gabriel de Araújo (orientador) pela paciência e horas de ensino, Dra. Josefa Teixeira de Mendonça Pacobahyba pelos ensinamentos e discussões nas disciplinas de Mecânica Estatística e Fenômenos Críticos e Transições de Fase, Dr. Lindeval Fernandes de Lima pelo suporte no editor de texto LaTeX, Dr. Luiz Henrique Pacobahyba pelo apoio e convívio, Dr. Roberto Câmara pelos ensinamentos de Eletromagnetismo e ao Dr. Mínos Martins Adão Neto (UFAM), pelas discussões e contribuições.

Ao meu amigo Eduardo da Silva Lepletier, pelas palavras de força e estímulo para conclusão deste importante trabalho e a Cleide de Melo Lepletier pela colaboração significativa na correção ortográfica desta dissertação.

Aos meus colegas de mestrado: Eronildo Cornélio de Castro, Jucilene Oliveira de Sousa, Melanie Kaline Turquete, Rochelle Gomes de Souza, Emerson Lopes de Amorim, e a meu colega Kaylens Lee Jhonson Lira de Souza, que colaboram na troca de conhecimentos.

À Universidade Federal de Roraima.

## RESUMO

Neste trabalho será estudado a magnetização de platô no modelo de Ising competitivo unidimensional com interações de primeiros e segundos vizinhos em rede linear, através do uso da teoria do campo efetivo (**EFT**) por meio da técnica do operador diferencial com aglomerados de um spin e dois spins. O modelo de Ising unidimensional é estudado com interação competitiva antiferromagnética  $J_1 < 0$  entre os primeiros vizinhos alinhados antiparalelamente com o spin do sítio central, e interação ferromagnética  $J_2 > 0$  entre os segundos vizinhos alinhados paralelamente. Com auxílio da utilização do formalismo da teoria do campo efetivo, com base na técnica do operador diferencial, será discutido quando ocorre a formação de platô influenciado pelo parâmetro  $\alpha = \frac{J_2}{J_1}$ . Este parâmetro será avaliado com valores de baixo campo magnético, em que se espera investigar a presença de platô. A partir do campo magnético crítico ( $h > h_c$ ), espera-se encontrar o campo de saturação  $h_s$ , correspondente a magnetização de saturação, e de modo equivalente, para valores do campo magnético  $h$  abaixo do campo de saturação  $h_s$  ( $h < h_s$ ), verificamos a existência de campo magnético crítico  $h_c$  para o modelo estudado.

Palavra-chave: modelo de Ising; interações competitivas; magnetização de platô.

## ABSTRACT

This work will study the magnetization of the plateau in one-dimensional Ising model with competitive interactions of nearest and next-nearest-neighbors in linear network, through the use of the theory of effective field (EFT) using the technique of differential operator with clusters a spin and two spins. The one-dimensional Ising model will be studied with competitive interactions antiferromagnetic,  $J_1 < 0$  between the nearest-neighbors aligned parallel to the central site spin, and interaction ferromagnetic  $J_2 > 0$  between the next-nearest-neighbors. By using the formalism of effective field theory, based on the technique of differential operator, will be discussed when formation occurs plateau influenced by the parameter  $\alpha = \frac{J_2}{J_1}$ . The parameter is evaluated with a low magnetic field, where it expects to find the presence of plateau. From the critical magnetic field ( $h > h_c$ ), one expects to find the saturation field  $h_s$  corresponding to saturation magnetization and below this field ( $h < h_c$ ) we verified the critical magnetic field  $h_c$  for the model.

Key-Words: Ising model; competitive interactions; magnetization plateau.

## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Comportamento das magnetizações espontâneas dos compostos formados por Níquel (Ni), Cobalto (Co) e Ferro (Fe). . . . .	16
Figura 2 – Representação de alinhamento: (a) Na ausência de campo magnético, os momentos atômicos estão orientados aleatoriamente; (b) Quando um campo magnético $\vec{H}$ é aplicado, os dipolos tendem a se alinhar com o campo externo. . . . .	19
Figura 3 – Característica típica da susceptibilidade diamagnética e paramagnética. . . . .	20
Figura 4 – Representação para o ordenamento ferromagnético em $T = 0$ . . . . .	22
Figura 5 – Ciclo de histerese. . . . .	23
Figura 6 – Magnetização em função da temperatura. . . . .	24
Figura 7 – Dependência da susceptibilidade magnética com a temperatura para um material ferromagnético. . . . .	25
Figura 8 – Paramagnetismo de Curie-Weiss. . . . .	26
Figura 9 – Representação para o ordenamento antiferromagnético. . . . .	26
Figura 10 – Arranjos do ordenamento dos spins dos íons $Mn^{+2}$ de óxido de magnésio $MnO$ . . . . .	27
Figura 11 – Os índices de reflexão se baseiam em células de $8.85\text{Å}$ a $80\text{K}$ e de $4.43\text{Å}$ a $293\text{K}$ . A temperatura mais elevada dos íons $Mn^{+2}$ ainda são magnéticos, mas eles não são mais ordenados. . . . .	28
Figura 12 – Comportamento da susceptibilidade a campo nulo, em função da temperatura do composto antiferromagnético $MnCl_2 \cdot 4H_2O$ . . . . .	30
Figura 13 – Susceptibilidade magnética de um ordenamento antiferromagnético com campo aplicado paralelo e perpendicular à direção da magnetização de duas sub-redes, dependente da Temperatura. . . . .	30
Figura 14 – Diagrama de fase no plano $T-H$ para o sal antiferromagnético $NiCl_2 \cdot 6H_2O$ obtido experimentalmente. . . . .	31
Figura 15 – Diagrama de fase $T-H$ para o composto metamagnético $Dy_3Al_5O_{12}$ , obtido experimentalmente (LANDAU et al., 1970). . . . .	32
Figura 16 – Representação para o ordenamento ferrimagnético é equivalente a duas redes, diferentes das sub-redes ferromagnéticas. . . . .	33
Figura 17 – Arranjos dos spins da magnetita $FeO \cdot Fe_2O_3$ . . . . .	33
Figura 18 – Cadeia de Ising com uma estrutura infinita fechada. . . . .	35
Figura 19 – Vórtice devido à periodicidade no modelo XY, em que há excitações interessantes com topologia não trivial - vórtices e anti-vórtices marcados para a esquerda por quadrados vermelhos e verdes. Em caminho de rastreamento em torno de um vórtice ou anti-vórtice gira revolução completa em $\pm 2\pi$ . . . . .	40

Figura 20 – Ilustrações para os vórtices (a) e anti-vórtices (b). O giro dos spins depende da diferença de sentido de rotação ao longo de um caminho, por isso, não é alterado, caso todos os spins juntos possuam mesmo ângulo. . . . .	41
Figura 21 – Ilustração de um sistema com $N$ partículas interagentes do aglomerado $\Omega$ e sua vizinhança e $\Omega'$ fora da vizinhança. . . . .	47
Figura 22 – Ilustração de um aglomerado de $N = 1$ spin representado pelo spin central $\sigma_1$ e seus primeiros vizinhos representado $(\sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \sigma_5)$ . . . . .	51
Figura 23 – (a) Magnetização $m$ como uma função do campo magnético $h$ . $D = 1$ , $T = 0.01$ (por unidade de $J$ ). $h_c$ é o ponto inicial do campo magnético para a magnetização diferente de zero e $h_s$ é o campo de saturação correspondente a magnetização de saturação. (b) Diagrama de fase da magnetização do estado fundamental, em que os símbolos quadrados pequenos representam o campo inicial do platô em $m = \frac{1}{2}$ , e os círculos pequenos, o campo saturado. . . . .	58
Figura 24 – Ilustração no aglomerado de $N = 1$ spin para o modelo de Ising competitivo unidimensional com interações de primeiros e segundos vizinhos, respectivamente, antiferromagnética e ferromagnética. . . . .	60
Figura 25 – Diagrama de fase $\frac{h}{J_1}$ versus $\alpha$ . . . . .	64
Figura 26 – Início de formação de platô no modelo de Ising $J_1 - J_2$ numa rede linear unidimensional, para um aglomerado de tamanho $N = 1$ spin. . . . .	65
Figura 27 – Magnetização total, exibindo a formação de platô em $m = 0$ e $m = 1$ no modelo de Ising $J_1 - J_2$ numa rede linear unidimensional, para um aglomerado de tamanho $N = 1$ spin. . . . .	65
Figura 28 – Ilustração do modelo de Ising unidimensional com interações de primeiros e segundos vizinhos, no aglomerado de dois spins em rede linear. . . . .	67
Figura 29 – Diagrama de fase $\frac{h}{J_1}$ versus $\alpha$ para $N = 2$ spins . . . . .	71
Figura 30 – Gráfico $m$ versus $\frac{h}{J_1}$ para $T = 1.6$ . . . . .	71
Figura 31 – Representação do Gráfico $m$ versus $\frac{h}{J_1}$ para $T = 1.0$ . . . . .	72
Figura 32 – Formação de platô em $m = 0$ e $m = 1$ no modelo de Ising para $N = 2$ spins com $m$ versus $\frac{h}{J_1}$ em uma rede linear unidimensional. . . . .	72
Figura 33 – Magnetização total versus $\frac{h}{J_1}$ , exibindo a formação de platô em $m = 0$ e $m = 1$ no modelo de Ising $J_1 - J_2$ numa rede linear unidimensional, para um aglomerado de tamanho $N = 2$ spins. . . . .	73
Figura 34 – Magnetização total para $m$ versus $\frac{h}{J_1}$ , para a formação dos platoes para $m = 0$ e $m = 1$ com variação de $T$ . . . . .	73

## LISTA DE TABELAS

- Tabela 1 – Classificação de alguns elementos e compostos em paramagnéticos e diamagnéticos com seus respectivos valores de susceptibilidade. . . . . 21
- Tabela 2 – Tipo de ordenamento magnético de substância que passa para o estado anti-ferromagnético inferior à temperatura de Néel - (ff - magnetismo fraco). . . 29

# SUMÁRIO

<b>LISTA DE ILUSTRAÇÕES</b> . . . . .	<b>9</b>
<b>SUMÁRIO</b> . . . . .	<b>12</b>
<b>1 INTRODUÇÃO</b> . . . . .	<b>14</b>
1.1 NOTA SOBRE O MAGNETISMO . . . . .	14
1.2 SISTEMAS MAGNÉTICOS . . . . .	15
1.3 FASES MAGNÉTICAS . . . . .	17
1.3.1 Diamagnetismo . . . . .	17
1.3.2 Paramagnetismo . . . . .	19
1.3.3 Ferromagnetismo . . . . .	22
1.3.4 Antiferromagnetismo . . . . .	26
1.3.5 Ferrimagnetismo . . . . .	32
1.4 ALGUNS MODELOS MAGNÉTICOS IMPORTANTES . . . . .	34
1.4.1 Modelo de Ising . . . . .	34
1.4.2 Modelo de Heisenberg . . . . .	36
1.4.3 Modelo XY ou Planar . . . . .	39
1.4.4 Modelo Hubbard . . . . .	41
1.5 APRESENTAÇÃO DA DISSERTAÇÃO . . . . .	42
<b>2 TEORIA DE CAMPO EFETIVO</b> . . . . .	<b>44</b>
2.1 CONSIDERAÇÕES INICIAIS . . . . .	44
2.2 TÉCNICA DO OPERADOR DIFERENCIAL . . . . .	46
2.2.1 IDENTIDADE DE CALLEN-SUZUKI . . . . .	48
2.3 CONSIDERAÇÕES . . . . .	53
<b>3 MAGNETIZAÇÃO DE PLATÔ NO MODELO DE ISING SIMPLES</b> . . . . .	<b>56</b>
3.1 ESTRUTURA DE PLATÔ . . . . .	56
3.2 EXISTÊNCIA DE MAGNETIZAÇÃO DE PLATÔ . . . . .	57
3.3 CONSIDERAÇÕES . . . . .	58
<b>4 MODELO E FORMALISMO</b> . . . . .	<b>59</b>
4.1 DESCRIÇÃO DO MODELO PARA AGLOMERADO DE $N = 1$ SPIN . . . . .	59
4.2 TÉCNICA DO OPERADOR DIFERENCIAL . . . . .	61
4.3 MODELO DE ISING COMPETITIVO UNIDIMENSIONAL EM AGLOMERADOS DE $N = 2$ SPINS . . . . .	66

---

<b>5 CONSIDERAÇÕES FINAIS . . . . .</b>	<b>75</b>
<b>REFERÊNCIAS . . . . .</b>	<b>77</b>

# 1 INTRODUÇÃO

O estudo da magnetização em sistemas de baixas dimensões tem sido objeto de muitas pesquisas na literatura, desde o artigo pioneiro de Bethe (BAI; CHEN, 2012). Os plátos de baixa dimensionalidade de spins, em baixa temperatura, têm atraído atenção de pesquisadores, em que estudos teóricos e experimentais foram feitos para compreender a formação destes e o interesse da física de baixa energia em sistemas de spins unidimensional, tais como: sistemas-Haldane, escadas de spins e *gapped* spin-Peierls (BAI; FEI CHEN, 2012). Na maioria dos artigos teóricos, os plátos na magnetização foram obtidos para vários tratamentos de modelos de spins, como exemplo, cadeias não homogêneas - Heisenberg (HIDA, 1994), escadas de spins (CABRA, 1997), bem como para modelos bidimensionais (KUBO, 1997). Na sequência, antes de explorarmos a análise de estudo de platô, veremos uma nota sucinta sobre magnetismo.

## 1.1 NOTA SOBRE O MAGNETISMO

A origem do magnetismo é um dos tópicos de essencial importância para a pesquisa básica, tanto em materiais isolantes, quanto para materiais metálicos e suas ligas. Entre os metais e isolantes existem características bem diferentes, pois os momentos magnéticos têm sua origem na estrutura básica que constitui os materiais. Os momentos magnéticos dos íons dos isolantes estão localizados e fixos na rede cristalina, enquanto os elétrons dos metais ocupam estados de bandas largas de energia, onde estão associados aos elétrons, podendo se mover sobre toda superfície do material.

O comportamento magnético de um material é determinado pela forma como os spins interagem, e se as interações são desprezíveis podemos chamá-lo paramagnético, ou seja, na ausência de campo externo, a orientação dos spins é desordenada, não havendo magnetização espontânea. A função de resposta ao campo magnético, a susceptibilidade  $\chi$ , depende da temperatura pela lei de Curie  $\chi = \frac{C}{T}$ .

O tipo de interação pode auxiliar a entender e distinguir as várias formas de alinhamentos entre os spins, que a campo zero pode se apresentar como isolantes, sendo as interações descritas no hamiltoniano de Heisenberg ( $\mathcal{H} = -2 \sum J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$ ), em que o parâmetro  $J_{ij}$  representa a integral de troca entre os vetores de spins  $\vec{S}_i$  e  $\vec{S}_j$ . Quando se tem  $J_{ij} > 0$ , verificamos que a configuração mínima de energia é a de spins alinhados paralelamente, gerando um acoplamento ferromagnético, em que existem pequenas regiões denominadas de domínios. Se aplicarmos um campo magnético externo, os momentos de vários domínios vão se alinhar ao campo e surgir propriedades magnéticas importantes. Para  $J_{ij} < 0$ , os spins tendem a ficar antiparalelos e o acoplamento é denominado de antiferromagnético, sendo que o alinhamento antiparalelo anula o momento magnético do material. Há outras formas de acoplamento, além das já citadas acima.

Por exemplo, pode-se ter um alinhamento antiparalelo, em que não há um cancelamento total do momento magnético, pois os valores dos spins são diferentes. Esta propriedade é denominada de ferrimagnetismo, e o acoplamento é chamado de ferrimagnético.

Abaixo da temperatura crítica  $T_c$  (temperatura de Curie), pode ocorrer o comportamento ferromagnético, e acima da temperatura crítica, o comportamento do material se torna paramagnético, em virtude da agitação térmica. Dentro de uma mesma molécula (intramolecular) ou entre moléculas adjacentes (intermoleculares), o acoplamento dos spins podem ocorrer apenas abaixo da temperatura crítica. O ordenamento magnético pode ficar fortalecido, se houver interação intermolecular presente em sua estrutura. Por outro lado, a interação intramolecular é caracterizada pela interação entre os orbitais, que se baseiam num acoplamento ferromagnético, em que os orbitais ortogonais não se sobrepõem. O acoplamento pode se dar por meio de interações de configurações em que os spins estão mais afastados, haja vista que toda a função de onda do sistema deve ser levada em conta. Podemos citar a interação dipolar entre os spins como outro acoplamento a longo alcance.

As interações moleculares que aparecem entre os spins a baixa temperatura podem produzir acoplamento ferromagnético, antiferromagnético ou ferrimagnético. A seguir, faremos uma descrição de sistemas magnéticos.

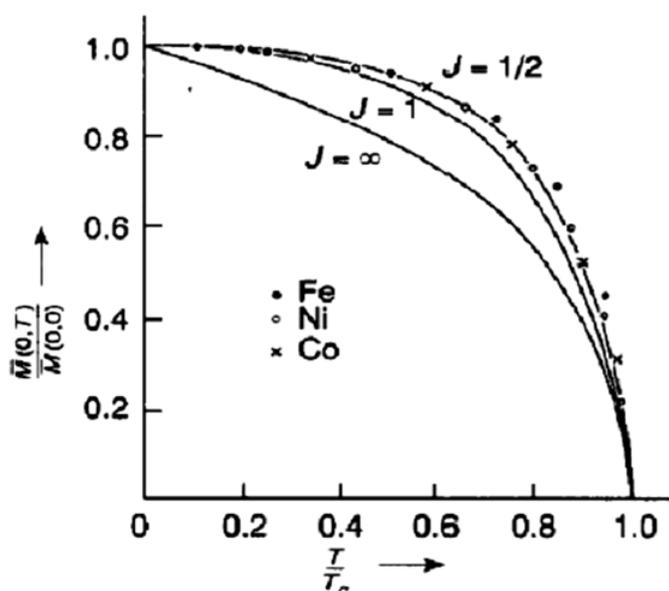
## 1.2 SISTEMAS MAGNÉTICOS

Certas substâncias apresentam propriedades magnéticas, em que Pierre Weiss, no início do século XX, propôs-se a descrever o magnetismo quantitativamente. Os materiais foram denominados de ferromagnéticos, sendo que a teoria de Weiss era capaz de explicar esta propriedade qualitativamente. Na temperatura ambiente, estes materiais apresentam uma imantação natural, também chamada de magnetização espontânea, abaixo da temperatura crítica  $T_c$  (temperatura de Curie), e por isso poderiam ser utilizados como ímãs permanentes, tornando-se paramagnéticos para  $T > T_c$  (na magnetização nula). O princípio básico da teoria de Weiss estabelece que determinado íon do material associado com um único momento magnético interage com o restante do campo do cristal, o qual Weiss chamou de campo molecular, este é proporcional a média dos momentos magnéticos do material. Apesar de ter sido descoberta vários anos antes do modelo atômico de Bohr, a teoria de Weiss ainda é de muita importância para investigações magnéticas interagentes.

Por exemplo, o elemento ferro perde a imantação natural, quando atinge a temperatura de Curie a  $770^\circ C$ , níquel com  $T_c(Ni) = 358^\circ C$  e cobalto com  $T_c(Co) = 1122^\circ C$ . Na figura (1), é exibido os comportamentos das magnetizações em função da temperatura reduzida  $\frac{T}{T_c}$  para os compostos de ferromagnéticos formados pelos elementos mencionados acima. Comparando os resultados experimentais para compostos que se tem estrutura com Fe, Ni e Co, nota-se que na figura (1.1), é mostrado uma tendência ao comportamento universal da magnetização

média normalizada  $\frac{M(T)}{M(0)}$  com seus respectivos valores de saturação, em função da temperatura normalizada com a temperatura crítica  $\frac{T}{T_c}$ , em que se observou que a universalidade próximo da criticalidade  $T \simeq T_c$  é mais consistente. Nota-se também, que o sistema sofreu uma transição de fase em  $T = T_c$  da seguinte forma; para  $T < T_c$ , tem-se uma fase ordenada com menor simetria, que é a fase ferromagnética, e que para  $T > T_c$ , tem-se uma fase de maior simetria, a fase paramagnética. Neste caso, podemos afirmar que o sistema sofreu uma quebra espontânea de simetria.

Figura 1 – Comportamento das magnetizações espontâneas dos compostos formados por Níquel (Ni), Cobalto (Co) e Ferro (Fe).



Fonte: PATHRIA (1996).

Várias propriedades magnéticas dos compostos ferromagnéticos, como  $MnSb$ ,  $CrTe$ ,  $CrO_2$ ,  $EuO$  não podem ser descritas qualitativamente pela teoria de Weiss, visto que apresentam sérias inconsistências do ponto de vista quantitativo. Segundo Weiss, os momentos magnéticos interagem dentro dos materiais fornecendo um ordenamento magnético, cuja energia de interação é do tipo dipolo-dipolo. Entretanto, esta energia dipolar, expressa por  $\Delta E_d \simeq \frac{\mu^2}{a^3}$  onde  $\mu$  é o momento magnético do íon e  $a$  é o parâmetro de rede, não consegue esclarecer fisicamente os altos valores para  $T_c$ . Seguindo a análise qualitativa, pode-se supor que, nos compostos ferromagnéticos, o ordenamento ocorre porque a energia de interação exibida e representada por  $\Delta E_d$  é muito maior do que a energia térmica  $k_B T$ , em que  $k_B$  é a constante de Boltzmann, ou seja,  $\Delta E_d \gg k_B T$ . Na figura (1), nota-se que o comportamento da magnetização decresce à medida que a temperatura  $T$  cresce, ou seja, a ordem é destruída quando chega a  $T_c$ , pois  $\Delta E_d \simeq k_B T_c$  (a energia térmica é da mesma magnitude que  $\Delta E_d$ ). Então, utilizando  $\mu \simeq \mu_B$ , em que  $\mu_B$  é magnéton de Bohr,  $a \simeq 1\text{\AA}$  e encontrando  $T_c \simeq 10^{-1}k$  muito abaixo dos resultados experimentais que mostram  $T_c \simeq 10^3k$ . Nota-se que a interação magnética entre os íons

dos compostos ferromagnéticos<sup>1</sup>, não se originou do forte magnetismo microscópico para altos valores de  $T_c$ .

Sabe-se que o spin com seu momento angular é uma propriedade intrínseca do elétron, o qual é o responsável pelo magnetismo. Fazendo uma síntese do magnetismo presente na matéria, pode-se ter duas origens. Uma devido ao magnetismo localizado, no qual os spins localizados são denominados de isolantes, e outra com o magnetismo itinerante, encontrados nos metais, que é correspondente aos elétrons em movimento, também utilizada por Resende (1996) e Anjos (2012).

Nesta dissertação, nos restringiremos ao modelo magnético no tratamento do modelo de Ising unidimensional com interações competitivas, com o principal objetivo de analisar a existência de platôs. Na seção seguinte, veremos uma descrição mais detalhada sobre as fases magnéticas.

### 1.3 FASES MAGNÉTICAS

Existem diversas fases magnéticas, em que de acordo com a origem microscópica de sua magnetização, serão classificadas de acordo com suas interações internas, como exemplo: Diamagnetismo, Paramagnetismo, Ferromagnetismo, Antiferromagnetismo e Ferrimagnetismo. Nesta dissertação vamos nos ater às fases magnéticas acima.

#### 1.3.1 Diamagnetismo

Os materiais chamados diamagnéticos, não possuem dipolos magnéticos permanentes, isto é, seus átomos ou íons possuem camadas completas, tais como os gases nobres. O momento angular total apresentado é nulo ( $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} = \vec{0}$ ), todavia é possível induzir dipolos magnéticos nestes materiais pela ação de um campo magnético externo, sendo  $\vec{L}$  o momento angular orbital e  $\vec{S}$  o momento de spin (RESENDE, 1996).

O diamagnetismo do bismuto e antimônio, foi observado primeiro por S.J.Brugmans em 1778, e posteriormente, estudado e denominado por Michael Faraday em 1845. Faraday chegou à conclusão de que alguns elementos e quase todos os compostos exibem um comportamento negativo. E ele estava correto, pois todas as substâncias possuem uma contribuição diamagnética. Pode-se ver que a variação do momento angular orbital dos elétrons é induzida pela aplicação do campo externo, uma vez que a variação de campo magnético resulta numa corrente induzida que tende a se opor a esta variação, criando um campo oposto ao aplicado. A aceleração ou desaceleração dos elétrons dos átomos, vem do intenso campo magnético, sendo uma maneira de se opor a ação do campo externo em acordo com a Lei de Lenz<sup>2</sup>. Sendo este

<sup>1</sup> A interação dipolar nem sempre está presente nos compostos magnéticos, pois não explica o forte magnetismo, sendo de natureza intensamente fraca.

<sup>2</sup> De acordo com a lei de Lenz, a corrente induzida em uma espira tem um sentido tal que o campo magnético produzido pela corrente se opõe ao campo magnético que induz a corrente.

fenômeno fraco, pode ocorrer em qualquer átomo, porém somente aparece quando não existem dipolos magnéticos no material (REITZ, 1982). Para valores da susceptibilidade negativa, como é o caso da prata e cobre, e também, valores da ordem de  $10^{-5}$  para sólidos e líquidos,  $10^{-8}$  para gases, podemos classificá-los como diamagnéticos.

O diamagnetismo apresenta uma característica importante, que é o momento por unidade de massa em um determinado campo, sendo constante para uma substância sobre uma ampla região de temperaturas. A resposta magnética ( $\frac{\partial M}{\partial B}$ ) nos materiais diamagnéticos é negativa.

O momento de um dipolo magnético é dado para  $Z$  elétrons por

$$|\vec{\mu}| = -\frac{Ze}{2}w\bar{\rho}^2, \quad (1.1)$$

sendo que  $\bar{\rho}^2 = \bar{x}^2 + \bar{y}^2$  é a raiz quadrada do raio médio da projeção da órbita do elétron, no plano perpendicular ao campo  $\vec{B}$ , que representa a indução magnética, passando através do núcleo,  $e$  a carga do elétron e  $w$  é a frequência de Lamor que é dada por:

$$\vec{w} = \frac{e|\vec{B}|}{2m}, \quad (1.2)$$

em que  $m$  é a massa do elétron. Substituindo a Eq.(1.2) em (1.1), tem-se

$$\vec{\mu} = -\frac{Ze^2}{4m}\bar{\rho}^2\vec{B}. \quad (1.3)$$

A distância média quadrática entre o núcleo e o elétron é  $\bar{r}^2 = \bar{x}^2 + \bar{y}^2 + \bar{z}^2$ . Se tivermos uma distribuição de cargas esfericamente simétricas, teremos:  $\bar{x}^2 = \bar{y}^2 = \bar{z}^2$ , em que

$$\bar{\rho}^2 = \frac{2\bar{r}^2}{3}. \quad (1.4)$$

Sabe-se que cada material responde de acordo com as propriedades dos átomos e moléculas individuais na presença de um campo magnético, assim como a interação entre eles. A magnetização  $\vec{M}$  que representa o estado magnético de um material pode ser relacionada com as propriedades magnéticas do material. Sendo assim, a densidade volumétrica dos dipolos magnéticos pode ser definida como

$$\vec{M} = \frac{1}{V} \sum_i \vec{\mu}_i, \quad (1.5)$$

onde o somatório é realizado sobre todos os momentos de dipolos, em que há dipolos no interior de um volume  $V$ , sendo este considerado grande o suficiente, a fim de que exista excelente média microscópica. A magnetização também pode ser representada por

$$\vec{M} = N\langle\vec{\mu}\rangle, \quad (1.6)$$

correspondendo  $N$  ao número de átomos por unidade de volume  $\frac{n}{V}$  e

$$\langle \vec{\mu} \rangle = \frac{1}{n} \sum_i^n \vec{\mu}_i, \quad (1.7)$$

que expressa o valor médio de momentos de dipolos.

Para o cálculo da susceptibilidade diamagnética por unidade de volume, faz-se uso das Eqs.(1.3) e(1.6). Portanto, a susceptibilidade será dada por:

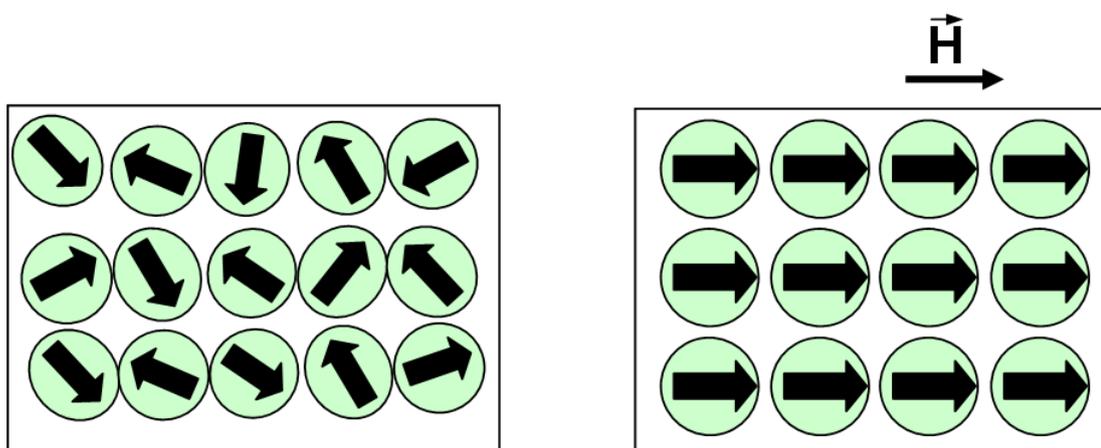
$$\chi = -\frac{ZNe^2}{6m} \sum_i \bar{r}^2, \quad (1.8)$$

que é o resultado clássico de Langevin (KITTEL, 1978).

### 1.3.2 Paramagnetismo

O paramagnetismo pode ser descrito como o fenômeno que ocorre em materiais e possuem momentos magnéticos permanentes, porém independentes uns dos outros. Estes materiais paramagnéticos possuem magnetização nula na ausência de campo externo  $\vec{H}$ , conforme figura (2a). Ao aplicarmos um campo externo, este produz uma pequena magnetização em direção ao campo. Por isso, os materiais paramagnéticos apresentam pequena susceptibilidade positiva da ordem de grandeza de  $10^{-5}$  a  $10^{-3}$  (SI) (RESENDE, 1996), de acordo com a figura (2b).

Figura 2 – Representação de alinhamento: (a) Na ausência de campo magnético, os momentos atômicos estão orientados aleatoriamente; (b) Quando um campo magnético  $\vec{H}$  é aplicado, os dipolos tendem a se alinhar com o campo externo.

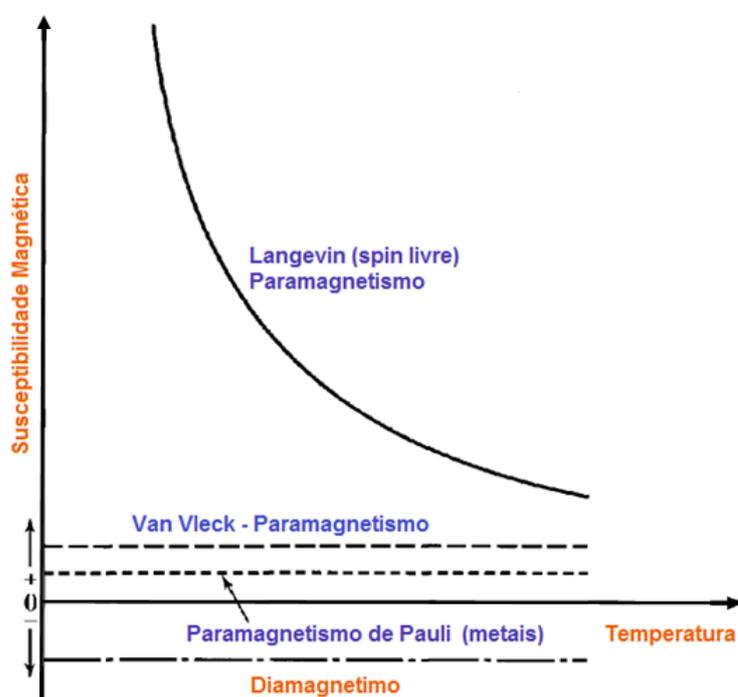


A dependência  $\chi(T)$  com a temperatura e a magnitude do campo magnético são dois aspectos importantes para se determinar a origem do magnetismo, sendo que o mesmo é caracterizado por uma pequena susceptibilidade positiva, podendo ter uma forte dependência com a temperatura, dependendo da origem do material.

Outra forma de paramagnetismo encontrada, é o paramagnetismo de Pauli que é presenciado em metais, e devido a banda de condução ser separada em duas ( $\uparrow$  e  $\downarrow$ ), uma vez que as energias destes spins são diferentes. Sabe-se que a ocupação dos elétrons nos metais é determinada pela regra Hund (condições de mínima energia), então a banda de menor energia, que é preenchida por spin para cima ( $\uparrow$ ), fica com um número de elétrons maior do que a banda de maior energia, também preenchida por spin para baixo ( $\downarrow$ ). Assim, a magnetização tem a direção do campo. Mas, se tivermos a susceptibilidade independente da temperatura, ocorrerá nos metais o paramagnetismo de Van Vleck, que se encontra em isolantes devido à mistura do estado fundamental com níveis excitados do campo cristalino próximo ao fundamental.

No paramagnetismo de Langevin é admitido que átomos e moléculas possuam momento magnético espacial e intrínseco, cuja distribuição espacial é determinada pela estatística de Maxwell-Boltzman, conforme figura (3). Os momentos magnéticos possuem alinhamento aleatório na ausência de campo externo, isto é, magnetização nula, conforme figura (2a). Então, na presença de um campo externo, os momentos de dipolos magnéticos tendem a se alinhar na direção do campo, apresentando magnetização não nula e com susceptibilidade positiva, de acordo com a figura (2b).

Figura 3 – Característica típica da susceptibilidade diamagnética e paramagnética.



Fonte: KITTEL (1978).

Os materiais paramagnéticos e diamagnéticos estão apresentados na tabela (1), onde o tipo de ligação, para as substâncias  $Mg$  e  $MgO$ , e as fases da substância  $H_2O$ , influenciou no valor da susceptibilidade e classificação destes materiais em diamagnéticos ou paramagnéticos

(RUFO, 2011). Se tivermos valores pequenos do campo aplicado  $\vec{H}$ , a magnetização  $\vec{m}$  de uma amostra no estado paramagnético é proporcional ao campo, ou seja,

$$\vec{m} = \chi_0 \vec{H}, \quad (1.9)$$

em que a susceptibilidade magnética é positiva,  $\chi_0$ . A magnetização de saturação atinge um valor máximo para o valor do campo elevado, pois  $m$ , deixa de ser linear para valores suficientemente altos. Em 1885, Pierre Curie verificou que a susceptibilidade magnética variava com o inverso da temperatura para os materiais paramagnéticos, independentemente da temperatura para as substâncias diamagnéticas.

Tabela 1 – Classificação de alguns elementos e compostos em paramagnéticos e diamagnéticos com seus respectivos valores de susceptibilidade.

Material	$\chi_m (x10^{-6})(SI)$	Classificação
Al	+16.5	paramagnético
Be	-9.0	diamagnético
BeO	-11.9	diamagnético
Ca	+40.0	paramagnético
CaO	-15.0	diamagnético
$CaF_2$	-28.0	diamagnético
C (diamante)	-5.9	diamagnético
C (grafite)	-6.0	diamagnético
Cu	-5.5	diamagnético
CuCl	-40.0	diamagnético
$C_rCl_2$	+1080.0	paramagnético
Au	-280.0	diamagnético
Pb	-23.0	diamagnético
Li	+14.2	paramagnético
LiF	-10.1	diamagnético
Mg	+13.1	paramagnético
MgO	-10.2	diamagnético
Ag	+19.5	paramagnético
Na	+16.0	paramagnético
$NaCl$	-30.3	diamagnético
$H_2O$ (gás)	-13.1	diamagnético
$H_2O$ (líquido)	-12.9	diamagnético
$H_2O$ (sólido)	-12.7	diamagnético

Fonte: WEAST (1981).

O trabalho de Curie ficou identificado como Lei de Curie. Então,

$$\chi_0 \propto \frac{1}{T}. \quad (1.10)$$

Em 1905, Paul Langevin, estudando o magnetismo, apresentou um modelo para tratar os materiais paramagnéticos e diamagnéticos (LANGEVIN, 1908). Langevin mostrou que a magnetização é dada por

$$\vec{M} = N\vec{\mu}L(x), \quad (1.11)$$

que  $N$  é o número de Avogadro, e a função de Langevin é dada por  $L(x) = \coth(x) - \frac{1}{x}$ , para  $x = \frac{\mu H}{k_B T}$ , em que  $H$  é a intensidade do campo magnético externo,  $T$  a temperatura,  $k_B$  é a constante de Boltzmann. Langevin observou que para temperaturas elevadas ou campo magnético de baixa intensidade, pode-se fazer uma expansão para  $x \ll 1$ , observando os termos de ordem mais baixa. Então, temos que

$$\vec{M} = \frac{N\mu^2\vec{H}}{3k_B T} = \chi_0\vec{H}. \quad (1.12)$$

Nos materiais diamagnéticos, Langevin levou em conta a frequência de Larmor, chegando à conclusão que para um único elétron, a variação da magnetização era do tipo

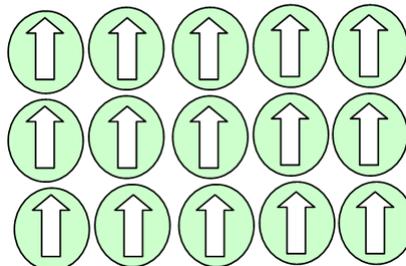
$$\Delta\vec{M} = -\frac{e^2}{4M_e}\varepsilon_0\mu_0\langle r^2\rangle\vec{H}, \quad (1.13)$$

em que  $\langle r^2\rangle$  é a distância entre o elétron e o núcleo ( $r$ ), sendo  $\varepsilon_0$  a constante de permissividade elétrica e  $\mu_0$  a constante de permeabilidade magnética. Nota-se, porém, que nos materiais magnéticos, a susceptibilidade independe da temperatura. Conseqüentemente, o modelo de Langevin consegue prever os resultados da Lei de Curie para estes materiais (RUFO, 2011).

### 1.3.3 Ferromagnetismo

Elementos que apresentam uma elevada magnetização espontânea abaixo da temperatura de Curie, tais como, o ferro, níquel, cobalto e alguns elementos de transição, são denominados de ferromagnéticos, pois contêm momentos magnéticos espontâneos, em que os spins dos elétrons estão alinhados paralelamente e são demasiadamente interagentes, mesmo num campo magnético nulo, conforme figura (4).

Figura 4 – Representação para o ordenamento ferromagnético em  $T = 0$ .

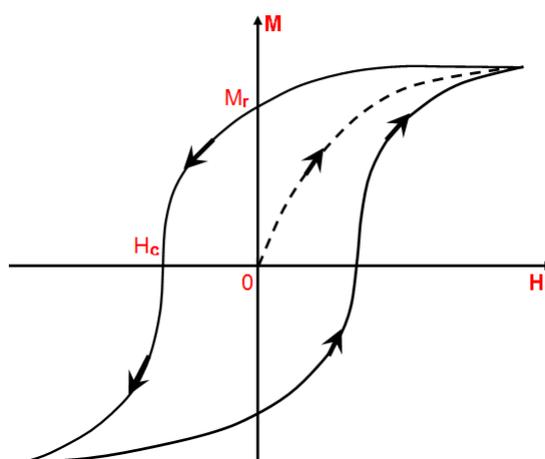


Em materiais ferromagnéticos, o módulo da magnetização é várias vezes maior do que a ordem de grandeza dos materiais paramagnéticos e ferromagnéticos, em que a relação com o

campo  $\vec{H}$  é não linear. Quando se tem um material magneticamente duro, como o aço temperado<sup>3</sup>, e se tem  $M$  em função de  $H$ , figura (5), a curva de magnetização formada não depende somente do material, mas do tratamento a que ele foi submetido, isto é, da sua história anterior ou memória  $\chi H$ .

Estando o material desmagnetizado, se aplicarmos um campo, este seguirá a curva pontilhada, conforme figura (5), até alcançar um nível constante, que é denominado de magnetização de saturação  $M_S$ . A partir deste valor, se optarmos por diminuir o campo,  $M$  decresce mais vagorosamente seguindo até um valor residual da magnetização para um campo nulo denominado de magnetização remanente  $M_r$ , em que sem campo aplicado, o material continua magnetizado. Fazendo a inversão, o sentido do campo segue no mesmo sentido da curva para valores de  $M$  menores que  $M_r$ , até que a magnetização se anule para uma determinada medida de campo denominado de campo coercitivo  $H_c$ . Para completar o ciclo, basta variar o módulo do campo, a fim de chegar novamente à região de saturação, onde o mesmo é denominado de ciclo de histerese, segundo figura (5).

Figura 5 – Ciclo de histerese.



Fonte: RIBEIRO (2000).

Em 1896, Weiss estudou a magnetita, alguns anos antes de apresentar a sua teoria para explicar o magnetismo, afirmando que os materiais só apresentavam magnetização não nula na presença de um campo magnético aplicado. Pierre Weiss, apresentou seus dados experimentais depois de dois anos, em que comprovava que materiais expostos a um campo magnético externo, onde a magnetização se apresentava apenas em um sentido ao longo do plano, que ele denominou de plano de magnetização. E a magnetização permanecia a mesma quando o campo

<sup>3</sup> Têmpera é um dos processos utilizados no tratamento térmico de metais para aumentar a dureza e consequentemente a resistência dos mesmos. O processo consiste em duas etapas: aquecimento e esfriamento rápido. O aquecimento visa obter a organização dos cristais do metal, numa fase chamada austenitização, que é o metal em solução sólida em ferro gama de carbono e às vezes outros solutos.

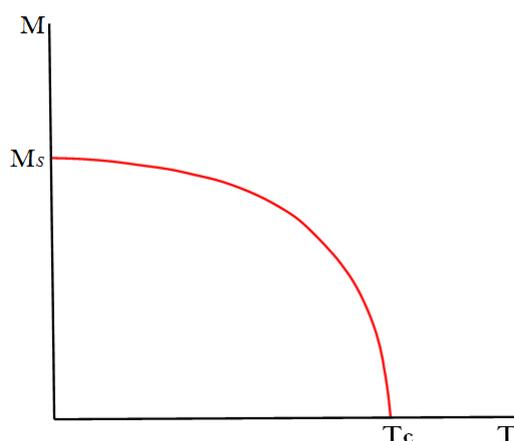
era desligado, isto é, os materiais apresentavam magnetização espontânea a campo nulo. A figura (6), mostra a variação da magnetização espontânea  $M$  com a temperatura.

Através do modelo de Langevin, em 1907, Weiss propôs uma explicação para o comportamento dos materiais, chamados de ferromagnéticos. Ele postulou que haveria num campo magnético interno e acentuado com pequenos momentos magnéticos, que foram denominados de campo molecular  $H_M$  (KITTEL, 1978). Então, o valor de  $x$  na Eq.(1.11) resultou em  $x = \frac{\mu H}{k_B T} + \frac{\mu H_M}{k_B T}$ , que ficou conhecido como Lei de Curie-Weiss, sendo expressa por

$$\chi_m = \frac{N\mu^2}{3k_B(T - T_c)}. \quad (1.14)$$

Sendo assim, de acordo com a Eq.(1.14), ocorre uma transição de fase de segunda ordem, quando a susceptibilidade diverge, ou seja, quando se tem  $T = T_c$ , sendo da fase ferromagnética para fase paramagnética. Apesar de haver uma incoerência para a o modelo de Weiss, pois este pensava que a estrutura interna do material era do tipo dipolo-dipolo, e não apresentava resultados satisfatórios quando se aumentava a temperatura acima de  $T_C$ . Ainda assim, a equação está de acordo com a os resultados da Lei de Curie para os materiais ferromagnéticos, em que prevê existência para temperatura crítica de transição. Entretanto, quando temos um material ferromagnético em que a temperatura está abaixo da temperatura  $T_C$ , na presença de um campo magnético, então teremos os alinhamentos dos dipolos magnéticos, de onde vem a magnetização espontânea.

Figura 6 – Magnetização em função da temperatura.

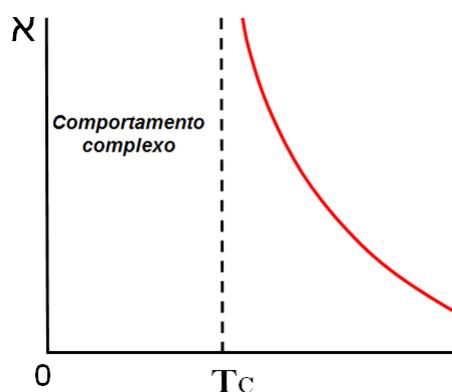


Fonte: RIBEIRO (2000).

Para o entendimento do ferromagnetismo é preciso que compreendamos alguns aspectos relevantes, visto que o mesmo apresenta, às vezes, uma situação que parece paradoxal. Na figura (6) mostra que a magnetização diminui com aumento da temperatura e anula-se acima de  $T_c$ . Weiss propôs a explicação desta hipótese que chamou de domínio magnético. Se ti-

veremos uma amostra de ferro, esperamos que esta deve apresentar magnetização espontânea abaixo da temperatura crítica. Então, uma amostra de ferro nem sempre exibe uma imantação permanente, conforme estamos esperando, e só será alcançada após ter sido submetida a um campo magnético. Isso se explica imaginando que a amostra seja composta por vários domínios magnéticos macroscópicos, cada um possuindo um dipolo magnético numa certa direção. Os dipolos dos domínios apontam para direções diversas o que resulta num dipolo total nulo. Para restabelecer a imantação natural da amostra, devemos submetê-la a um campo magnético, isto é, magnetizá-la.

Figura 7 – Dependência da susceptibilidade magnética com a temperatura para um material ferromagnético.



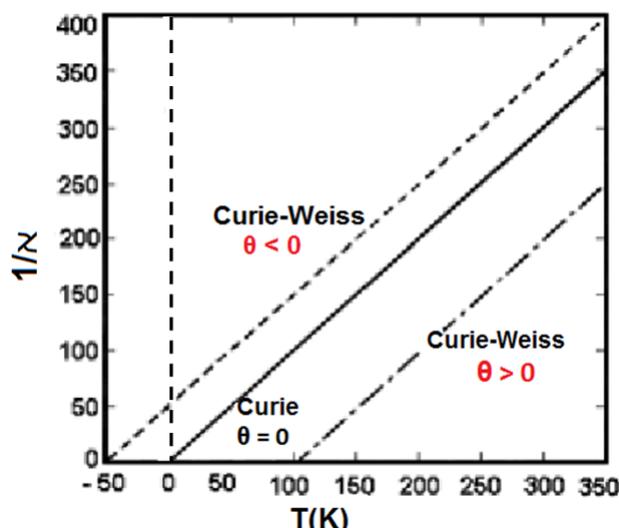
Fonte: KITTEL (1978).

No ferromagnetismo de Curie-Weiss há uma interação entre os momentos magnéticos de diferentes átomos, em virtude do campo magnético aplicado. Sabe-se que a interação de troca pode alinhar os momentos magnéticos vizinhos na mesma direção ou pode contribuir para o alinhamento da vizinhança em direção oposta. Na figura(7), tem-se a susceptibilidade de Curie-Weiss, e abaixo a equação é dada por

$$\chi_{cw} = \frac{C}{T - \Theta}, \quad (1.15)$$

sendo T a temperatura e  $\Theta$  a temperatura de Curie. Para o parâmetro  $\Theta$ , vê-se que o mesmo está relacionado com a intensidade de interação entre os dipolos, e seus comportamentos estão exibidos na figura (8). Então, se tivermos  $\Theta > 0$ , esta direção promove o ordenamento dos dipolos na mesma direção, e assim, temos uma interação magnética denominada de ferromagnética. Se  $\Theta < 0$ , tem-se o ordenamento dos dipolos em sentidos contrários, que chamamos de antiferromagnética e para  $T_c = 0$ , sendo  $T_c$  a temperatura de Curie, o sistema sofre uma transição de fase ferromagnética-paramagnética (RIBEIRO, 2000).

Figura 8 – Paramagnetismo de Curie-Weiss.

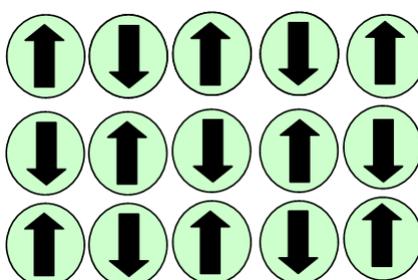


Fonte: RIBEIRO (2000).

### 1.3.4 Antiferromagnetismo

Este tipo de ordenamento magnético tende a alinhar os momentos de dipolos magnéticos de forma antiparalela, como na figura (9), que possui uma transição de fase anti-ferromagnética à temperatura crítica denominada de temperatura de Néel<sup>4</sup>. Acima desta temperatura, os dipolos apontam em todas as direções devido às agitações térmicas, gerando uma magnetização nula no estado paramagnético. Se a temperatura no antiferromagnetismo estiver abaixo da temperatura de Néel, a magnetização total é nula; pois, neste estado, haverá duas sub-redes equivalentes, onde cada uma das magnetizações espontâneas apontam em direções contrárias e a soma vetorial das magnetizações espontâneas das sub-redes é nula, e é isto que caracteriza o estado antiferromagnético (OLIVEIRA, 2005).

Figura 9 – Representação para o ordenamento antiferromagnético.

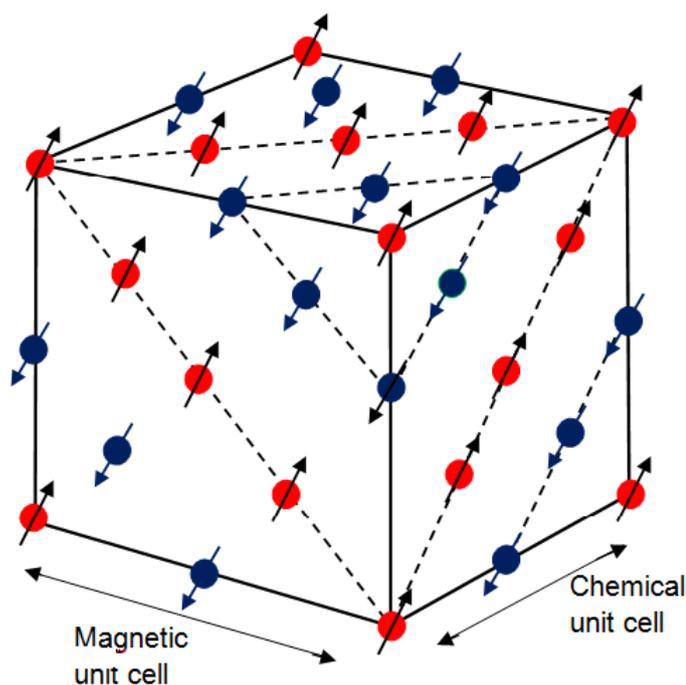


Em baixas temperaturas, os materiais antiferromagnéticos não possuem magnetização espontânea macroscópica. Se o material estiver abaixo de uma temperatura crítica de Néel  $T_N$ , a

<sup>4</sup> Físico francês nascido em Lyon, que na Universidade de Grenoble, França, destacou-se pesquisando ferromagnetismo, sendo um dos agraciados com o Prêmio Nobel de Física (1970), por suas pesquisas em magnetismo, com descobertas relativas ao antiferromagnetismo e ferromagnetismo

susceptibilidade e a magnetização diminuem com a temperatura tendendo a 0, quando  $T \rightarrow 0$ . Para temperaturas acima de  $T_N$ , o material exibe um comportamento de um paramagneto com temperatura de Curie-Weiss negativa, sendo prevista por Néel, tendo como consequência um acoplamento dos momentos magnéticos antiparalelos iguais a seus vizinhos, os quais foram demonstrados através de difração de nêutrons, que podemos exemplificar através do  $MnO$  que possui temperatura de Néel em  $120K$ . A figura (10) exemplifica a estrutura cristalina e a difração de nêutrons do  $MnO$ .

Figura 10 – Arranjos do ordenamento dos spins dos íons  $Mn^{+2}$  de óxido de magnésio  $MnO$ .

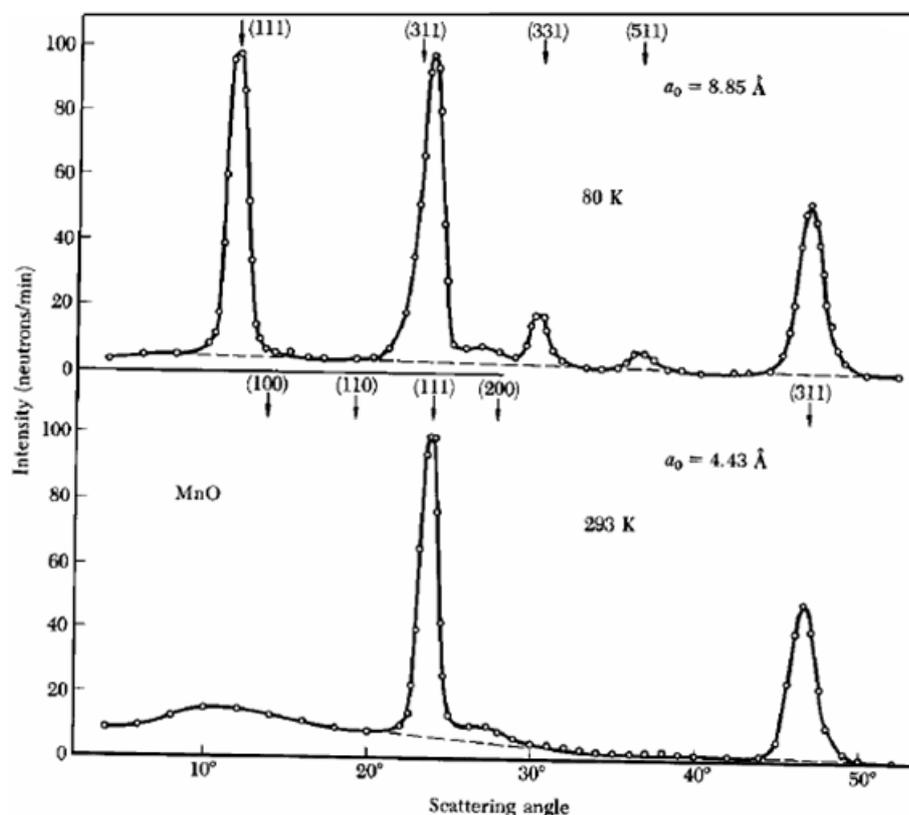


Fonte: KITTEL (1978).

Na temperatura crítica, a susceptibilidade magnética não apresenta uma divergência como em ferromagnetos, mas uma cúspide. Entretanto, o calor específico apresenta uma divergência em  $T_N$ , caracterizando uma transição de fase de primeira ordem, como nos ferromagnetos. A difração de nêutrons acima da  $T_N$  exemplifica uma célula cúbica unitária, tipo  $NaCl$ , em que se tem os parâmetros de rede de  $4.43\text{\AA}$ , mesmo valor obtido com fração de raios-X, uma vez que abaixo deste parâmetro, com o aparecimento de outros picos, como o de Bragg, correspondendo a um parâmetro de rede de  $8.85\text{\AA}$ , figura (11), vê-se claramente que é o dobro da anterior (KITTEL, 1978).

Os compostos antiferromagnéticos mais simples, tais como os fluoretos,  $FeF_2$  e  $MnF_2$ , sendo as temperaturas apresentadas na tabela (2), exibem uma estrutura cristalina de corpo centrado e os compostos  $Fe_3$  com estrutura de perovskita numa rede cúbica simples, tais como os  $KMnF_3$ ,  $KNiF_3$  e  $RbMnF_3$ . Entretanto, há outros compostos antiferromagnéticos que apresentam estruturas mais complexas, tais como os compostos de face centrada  $MnO$ ,  $FeO$ ,  $CoO$

Figura 11 – Os índices de reflexão se baseiam em células de 8.85Å a 80K e de 4.43Å a 293K. A temperatura mais elevada dos íons  $Mn^{+2}$  ainda são magnéticos, mas eles não são mais ordenados.



Fonte: KITTEL (1978).

e  $NiO$  (temperaturas destes compostos na tabela (2)), cujas magnetizações das sub-redes são todas colineares. Além destes materiais compostos, ainda existem mais simples, uma vez que na ausência de campo externo, a hematita ( $Fe_2O_3$ ) e os óxidos ( $CoO$  e  $Cr_2O_3$ ), apresentam magnetização total zero. Os compostos antiferromagnéticos mais complexos exibem, em comum, a propriedade da susceptibilidade magnética total

$$\chi_o = \left( \frac{\partial M}{\partial H} \right)_{H=0}, \quad (1.16)$$

em que  $M$  é a magnetização das sub-redes  $M_A$  e  $M_B$ ,  $\chi_o$  é a susceptibilidade total e  $H$ , o campo magnético para  $H \rightarrow 0$ , possuindo um ponto de máximo em  $T_N$ , diferindo energeticamente dos materiais ferromagnéticos, que em  $T = T_c$ , possui uma divergência em  $\chi_o$ . Os resultados experimentais do composto magnético  $MnCl_2 \cdot 4H_2O$  são apresentados na figura (12), os quais foram obtidos por Lasher, van der Broek e Gorder (1958). As curvas c e b correspondem a  $\chi_o(T)$  de um nanocrystal obtidos ao longo de um campo aplicado paralelo e perpendicular ao eixo fácil de magnetização. Entretanto, a curva p corresponde à susceptibilidade do pó. Então, segundo Fisher,  $T_N$  não corresponde ao valor máximo de  $\chi_o$  mas, ao ponto de inflexão que

Tabela 2 – Tipo de ordenamento magnético de substância que passa para o estado antiferromagnético inferior à temperatura de Néel - (ff - magnetismo fraco).

Material	$T_N$	Tipo
$FeF_2$	90	simples
$MnF_2$	75	simples
$KMnF_3$	95	simples
$KNiF_3$	275	simples
$RbMnF_3$	82	simples
MnO	120	complexo
FeO	198	complexo
CoO	291	complexo
NiO	530	complexo
$NiF_2$	83	simples, ff
$Cr_2O_3$	318	alternante
$\alpha - Fe_2O_3$	948	alternante, ff
$MnCO_3$	32	alternante, ff
$CoCO_3$	20	alternante, ff
CrSb	723	metamagneto
MnTe	323	metamagneto
$CrCl_2$	20	metamagneto
$FeCl_2$	24	metamagneto
$CoCl_2$	25	metamagneto
$MnO_2$	84	espiral
$FeCl_3$	15	espiral
$MnAu_2$	363	espiral
Cr	312	
Mn	95	

Fonte: OLIVEIRA (2005).

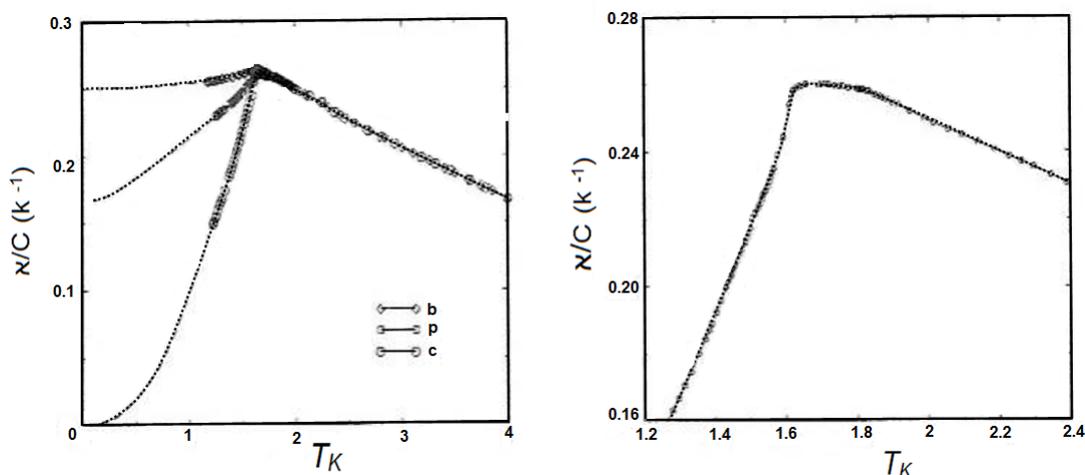
ocorre abaixo deste máximo, conforme figura (12), na curva da direita.

Os materiais antiferromagnéticos podem apresentar diversos tipos de ordenamentos magnéticos na presença de campo magnético externo, ao oposto do material ferromagnético, que na presença de campo magnético na direção do eixo de fácil magnetização, a transição de fase é destruída, não existindo  $T_c$ , por exemplo.

Néel (1932) foi um dos pioneiros a apresentar e desenvolver teorias e estudos das propriedades magnéticas em compostos antiferromagnéticos. Nesta teoria, Néel dividia o sistema antiferromagnético em duas ou mais sub-redes interpenetrantes, que podiam explicar qualitativamente os comportamentos da susceptibilidade que estão representadas na figura (12).

Uma característica comum entre os materiais antiferromagnéticos é a anisotropia das propriedades magnéticas. Em uma substância magneticamente anisotrópica, a magnetização responde de uma maneira diversa, em dada direção do que em outra. Isto é facilmente detectado

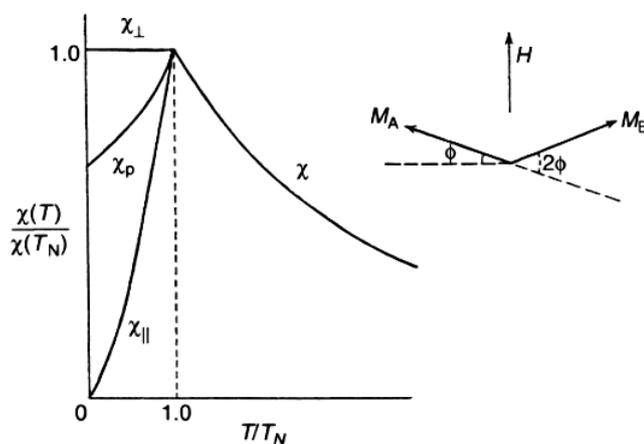
Figura 12 – Comportamento da susceptibilidade a campo nulo, em função da temperatura do composto antiferromagnético  $MnCl_2 \cdot 4H_2O$ .



Fonte: OLIVEIRA (2005).

quando o campo magnético é analisado em função da magnetização.

Figura 13 – Susceptibilidade magnética de um ordenamento antiferromagnético com campo aplicado paralelo e perpendicular à direção da magnetização de duas sub-redes, dependente da Temperatura.



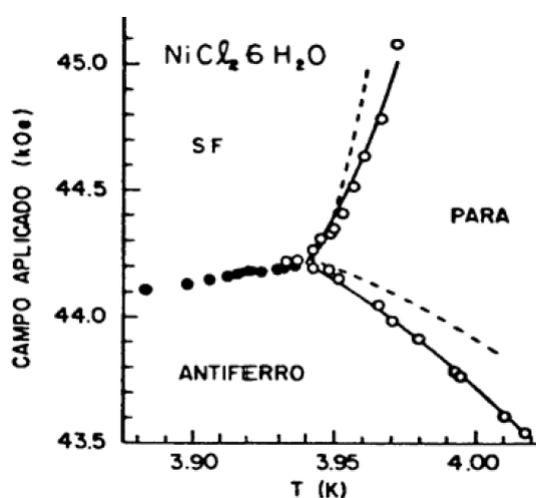
Fonte: BUSCHOW e BOER (2003).

Existem duas situações em que a susceptibilidade magnética da amostra de um monocristal, geralmente, demonstra anisotropia considerável abaixo de  $T_N$ , sendo o fenômeno da anisotropia magnética, o caso mais simples que é, essencialmente, a preferência em que as amostras apresentam por se magnetizarem numa determinada direção, as quais são: uma com o campo paralelo ao eixo dos spins e outra com o campo aplicado perpendicular, segundo a figura (13). A susceptibilidade magnética é menor, quando aplicamos o campo magnético na direção de uma das sub-redes, sendo esta paralela ao campo, uma vez que o momento magnético também será diminuído, entretanto a magnetização da outra sub-rede será aumentada. Mas, se tivermos

$T = 0K$ , as duas redes ficarão saturadas e a magnetização total será nula. Contudo, se aplicarmos o campo na direção perpendicular ao eixo da magnetização, este causará um desvio nos alinhamentos das sub-redes. Neste caso, mesmo em baixas temperaturas, o desvio contribui para que a magnetização seja diferente de zero.

Apesar da anisotropia ser uma característica comum entre os materiais ferromagnéticos, existem aqueles que são fracos anisotropicamente, permitindo o giro dos spins em torno do eixo de fácil magnetização. Como exemplos destes materiais compostos antiferromagnéticos podemos citar os seguintes:  $MnF_2$ ,  $FeF_2$ ,  $KCoF_3$ ,  $KNiF_3$ ,  $NiCl_2 \cdot 6H_2O$ , entre outros.

Figura 14 – Diagrama de fase no plano  $T - H$  para o sal antiferromagnético  $NiCl_2 \cdot 6H_2O$  obtido experimentalmente.



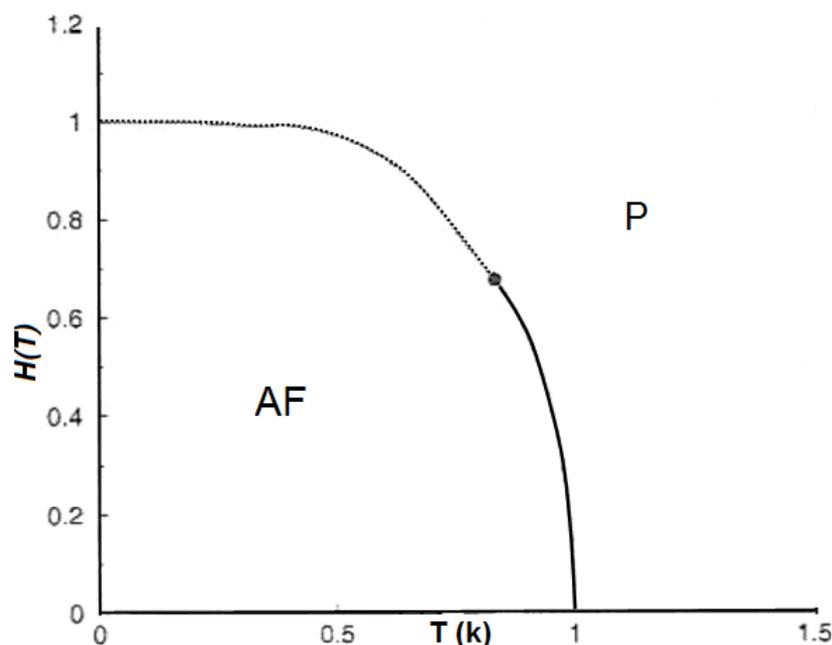
Fonte: OLIVEIRA, PADUAN-FILHO e SALINAS (1975).

Na figura (14), tem-se o diagrama de fase no plano  $T - H$ , onde são apresentadas três fases diferentes: Fase antiferromagnética, spin-flop e paramagnética. A fase antiferromagnética é caracterizada por uma temperatura abaixo da temperatura de Néel e pequenos campos, sendo que, quando a direção média dos spins é paralela a uma das redes, esta é antiparalela a outra sub-rede. Se o campo for aumentado acima de um valor crítico, ocorre transição de primeira ordem para a fase super-antiferromagnética, sendo os spins orientados de acordo com um ângulo flop com a direção do campo. Caso este campo seja aumentado ainda mais, ocorre outra transição de fase, só que desta vez, paramagnética de segunda ordem e o ângulo flop dos spins vai a zero.

O diagrama de fase do composto ferromagnético  $NiCl_2 \cdot 6H_2O$  foi obtido na década de setenta por Oliveira, Paduan-Filho e Salinas (1975), conforme figura (14). Fisher e Nelson (1974), denominaram de ponto bicrítico, o ponto das três fronteiras de fase. Por possuírem apenas uma transição da fase antiferromagnética diretamente para a fase paramagnética no espaço da temperatura, estes materiais são denominados como metamagnéticos.

Vê-se que no diagrama de fase do plano  $T - H$ , a anisotropia faz com que a fase super-antiferromagnética não apareça, dando ênfase apenas nas fases antiferromagnética e paramagnética.

Figura 15 – Diagrama de fase  $T - H$  para o composto metamagnético  $Dy_3Al_5O_{12}$ , obtido experimentalmente (LANDAU et al., 1970).



Fonte: OLIVEIRA (2005).

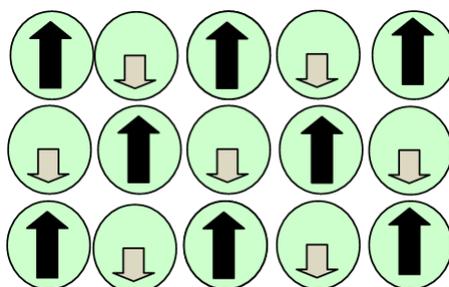
ca para o composto metamagnético, conforme se pode observar na figura (15). Os planos ou camadas destes compostos estão alternados em direções opostas e com ordenação ferromagnética, em que os spins possuem interação antiferromagnética  $J_1$  entre as camadas e ferromagnética  $J_2$ .

Observando a competição entre  $J_1$  e  $J_2$ , vê-se na figura (15), que o diagrama de fase apresenta uma transição contínua da fase antiferromagnética para a fase paramagnética, em altas temperaturas ou baixos campos magnéticos. Para a transição de primeira ordem, tem-se baixas temperaturas ou valores de campo elevados. O composto  $Dy_3Al_5O_{12}$  apresentado na figura (15) por Landau, Keen, Schneider e Wolf (1970), teve o ponto tricrítico conhecido após o trabalho de Griffiths (1973).

### 1.3.5 Ferrimagnetismo

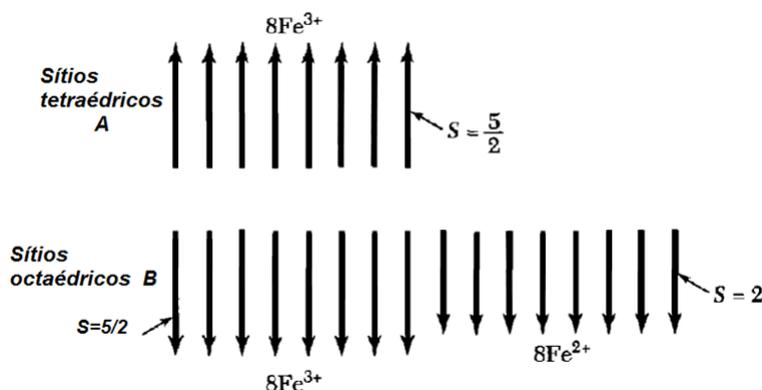
O ordenamento ferrimagnético é caracterizado por apresentar duas sub-redes antiparalelas que não são equivalentes, existindo momento magnético resultante não nulo, figura (16). Sendo as sub-redes desproporcionais, as mesmas podem ser originárias a partir da formação de sub-redes com diferentes espécies magnéticas. Estas sub-redes apresentam distintos comportamentos em relação à temperatura, em que um composto ferromagnético apresenta uma magnetização líquida com a evolução da temperatura complexa. Entretanto, em determinadas situações, as sub-redes dominam a magnetização em baixa temperatura, enquanto a outra domina a alta temperatura.

Figura 16 – Representação para o ordenamento ferrimagnético é equivalente a duas redes, diferentes das sub-redes ferromagnéticas.



Mas, em uma determinada temperatura, haverá intensidades iguais às duas sub-redes, proporcionando uma magnetização nula. Esta temperatura é denominada, na literatura, de temperatura de compensação. Nos cristais ferromagnéticos, a magnetização de saturação para  $T = 0K$  não condiz com o alinhamento paralelo dos momentos magnéticos, mesmo em íons paramagnéticos, onde existam forte evidência de que estes íons possuam momentos individuais normais. Como exemplo, tem-se a ferrite de ferro, ou magnetita, que é o ímã que se encontra na natureza, cuja equação química é  $Fe_3O_4$  e  $FeO.Fe_2O_3$ . A figura (17) apresenta um esquema de como são distribuídos os íons de  $Fe^{+2}$  e  $Fe^{+3}$ .

Figura 17 – Arranjos dos spins da magnetita  $FeO.Fe_2O_3$ .



Fonte: KITTEL (2004).

No modelo magnético com orbital nulo, temos os íons férricos ( $Fe^{+3}$ ) em estado de spin  $S = \frac{5}{2}$ , onde cada íon deveria colaborar com  $5\mu_B$  para o momento de saturação, enquanto para os íons ferrosos  $Fe^{+2}$ , que possuem spin 2, deveriam contribuir com  $4\mu_B$ , ficando de lado qualquer contribuição residual para o momento do orbital. Entretanto, caso todos os spins fossem paralelos para  $Fe_3O_4$ , deveríamos ter cerca de  $2(5\mu_B) + 4\mu_B = 14\mu_B$  para o magneton de Bohr, mas o valor observado é de  $4.1\mu_B$ . A fim de explicar esta incompatibilidade, faremos a seguinte hipótese: caso os momentos fossem antiparalelos, o momento total dos íons deveria ser somente procedente dos  $Fe^{+3}$ , que é de  $4\mu_B$ , segundo a figura (17). Esta diferença existe

devido à pequena contribuição do momento angular orbital.

Na estrutura cristalina, os íons ocupam duas posições de simetria distintas, isto é, a posição *A* tem simetria tetraédrica, ou seja, os oxigênios ocupam o espaço do íon metálico circundando-o, enquanto na posição *B* é a simetria octaédrica. Na célula do cristal há oito posições *A* e dezesseis posições *B*. Nos ferrites a interação entre os spins dos íons magnéticos que entram nas posições *A* e *B* são antiparalelas, ou seja, os spins, nesta posição, são antiparalelos (KITTEL, 2004). Na próxima seção faremos uma exposição sucinta sobre os principais modelos magnéticos.

## 1.4 ALGUNS MODELOS MAGNÉTICOS IMPORTANTES

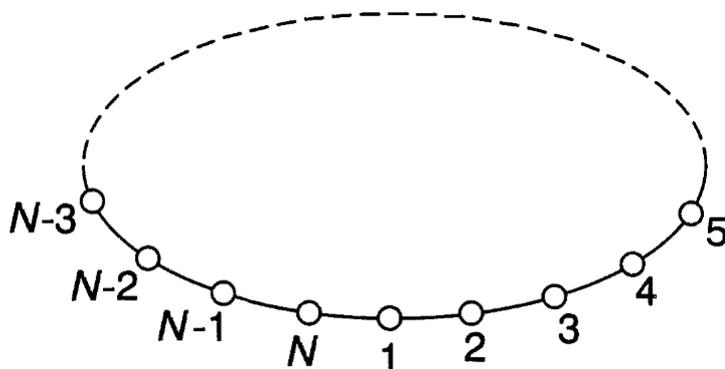
O principal objetivo da mecânica estatística é calcular a soma sobre todos os estados acessíveis do sistema, ou seja, a função de partição  $Z$ . Logicamente isto nem sempre é possível; pois, na maioria das vezes, tratamos de sistemas complexos e difícil solução. Para tratar destes sistemas é necessário recorrer a aproximações. Sabe-se que um modelo consiste de uma idealização simplificada de um sistema real, enquanto as aproximações fornecem explicações das propriedades magnéticas das correlações, entretanto algumas são equivocadas, caso o sistema se encontre com a temperatura próximo a  $T_c$ . Então, a grande vantagem é tentar achar, para determinadas simulações, o hamiltoniano que tenha solução exata. No entanto, existem poucos hamiltonianos que podem ser resolvidos exatamente, sendo que tais modelos podem ser unidimensional, bidimensional, dimensão infinita. Em nosso trabalho usaremos modelos de baixa dimensionalidade com baixo campo.

### 1.4.1 Modelo de Ising

Proposto por Wilhelm Lenz, no ano de 1920, ao seu aluno de doutorado Ernst Ising (1925), este modelo foi solucionado pelo próprio Ising que tinha por objetivo estudar um dos fenômenos mais importantes da matéria condensada, que é a origem do ferromagnetismo de momentos localizados. O modelo que Ising se propôs a estudar era bem simples, sendo constituído de uma cadeia linear de momentos magnéticos  $S_i$  interagindo com seus vizinhos  $S_{i+1}$  e  $S_{i-1}$  na forma  $-JS_i(S_{i+1} + S_{i-1})$ , sendo  $J$  a interação de troca e  $S_{i\pm 1}$ , as variáveis de spin. Para  $J > 0$ , o alinhamento paralelo dos momentos magnéticos seria favorecido, competindo com a desordem, determinada pela temperatura, em que desta competição seria esperada uma temperatura crítica abaixo da qual haveria ordenamento de toda a cadeia, ou acima, onde não haveria ordenamento da cadeia inteira.

Diferentemente da teoria de Weiss (1907), que previa transição de fase em temperatura não nula independente da dimensão do sistema, o modelo de Ising não apresentou transição para uma fase ordenada em qualquer temperatura  $T$  diferente de zero, por esta razão Ising ficou desapontado. Nos dias atuais sabemos que em uma dimensão a cadeia de spins é instável em

Figura 18 – Cadeia de Ising com uma estrutura infinita fechada.



Fonte: PATHRIA (1996).

qualquer temperatura não nula, ordenando apenas em  $T$  igual a zero. O equívoco cometido por Ising de que em duas ou mais dimensões não haveria transições de fases foi o seu erro. O modelo de Ising em duas ou mais dimensões foi demonstrado por Peiers, em 1936, sendo que apresentava transição de fase em temperatura não nula, mas Peiers não especificou qual era a temperatura e mostrou que se aumentássemos a temperatura, o ordenamento dos spins persistiria, até uma certa temperatura. Heisenberg, apresentou um modelo parecido ao de Ising em 1928, só que substituindo os  $S_i$  por operadores de spins  $\vec{S}_i$ , e com isso, o caráter quântico dos momentos magnéticos passou a ser importante (LÍBERO, 2000).

Constantemente se afirma que a cadeia de Ising realmente sofre uma transição de fase em  $T = 0$ , desde que o sistema suporte ordenamento de longo-alcance, conforme figura (18). O modelo de Ising especifica a interação entre  $N$  spins fixos numa malha, onde as variáveis de spins são clássicas, sendo descrito pelo hamiltoniano abaixo

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j, \quad (1.17)$$

sendo  $J$  o termo de interação de troca,  $S_i$  e  $S_j$  são os spins de Ising, e os índices  $i$  e  $j$  localizam os  $N$  sítios de uma rede. Vê-se que este modelo pode assumir somente dois estados possíveis, para cima ou para baixo. Consideremos o modelo de Ising de curto alcance numa rede  $n$ -dimensional, a qual pode ser definido pelo seguinte hamiltoniano

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - H \sum_{i=1}^N S_i. \quad (1.18)$$

Na equação acima,  $S_i$  é igual a  $\pm 1$ , ou seja,  $S_i$  só pode assumir dois estados possíveis, que são spin-up (para cima) e spin-down (para baixo). A interação de troca entre os spins é representada pela constante  $J$  e  $H$  é um eventual campo magnético externo aplicado. As contribuições associadas à interação entre um dado átomo e seus vizinhos imediatos deverão ser computados

ao somatório duplo do primeiro termo da equação. Para  $J > 0$ , o alinhamento dos momentos magnéticos é paralelo, então a energia é mínima, e se espera uma temperatura crítica abaixo da qual não haveria ordenamento magnético e para o caso em que  $J < 0$ , temos o alinhamento dos momentos magnéticos antiparalelos, caso em que a energia é máxima, e é esperada uma temperatura crítica acima, sem a qual não haveria ordenamento da cadeia. A descrição que aparece no segundo termo de  $H$  são os fenômenos de diamagnetismo e paramagnetismo. Caso se tenha  $H < 0$ , utiliza-se o primeiro caso e para  $H > 0$ , utiliza-se o segundo caso.

#### 1.4.2 Modelo de Heisenberg

A fim de explicar o intenso magnetismo do ponto de vista microscópico, Heisenberg (1928) propôs que o alinhamento dos spins reproduzia os casos ferromagnético e antiferromagnético, decorrendo de seus vizinhos mais próximos. Então, pode-se estabelecer o hamiltoniano de Heisenberg, dado por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (1.19)$$

sendo que este hamiltoniano é isotrópico, pois não existe dependência com a orientação angular do spin, e  $J$  pode assumir valores negativos e positivos, para os casos de serem antiferromagnético e ferromagnético, respectivamente. Contudo, para se entender a altas temperaturas críticas e representar a origem elétrica, é necessário fazer uso da mecânica quântica para o comportamento de  $J$ , definindo a função de onda, sendo que esta deve conter toda a informação do sistema físico; tem-se

$$\psi = \varphi_n \Phi_n, \quad (1.20)$$

denominando de  $\psi$ , a função de onda, sendo que o termo  $\Phi_n$  representa a parte da função de onda que transporta as informações dos spins, multiplicada por  $\varphi_n$  para termos independentes. As funções de ondas antissimétricas estão associadas a partículas de spin semi-inteiro e são denominadas de férmions, obedecendo à estatística de Fermi-Dirac, que podemos citar como exemplo elétrons, prótons, nêutrons e átomos de  $He^3$ . Para as funções de onda simétricas, estas estão associadas a partículas de spin inteiro e são chamadas de bósons, obedecendo à estatística de Bose-Einstein, sendo exemplificados pelos fótons, fônons, mágnons e átomos de  $He^4$  (SALINAS; 2005) e (GRIFFITH, 1994). Entretanto, através do princípio da exclusão de Pauli <sup>5</sup>, a natureza afirma que duas partículas não podem ocupar o mesmo orbital simultaneamente, ou seja, um átomo não pode conter dois elétrons com o mesmo conjunto de números quânticos. Então, para os férmions temos que certificar que a função de onda total do sistema é antissimétrica, enquanto que para os bósons é simétrica, podendo ocupar o mesmo estado

<sup>5</sup> O princípio de exclusão de Pauli, formulado por Wolfgang Pauli em 1925, é um princípio da mecânica quântica, onde dois férmions idênticos não podem ocupar o mesmo estado quântico simultaneamente.

quântico devido às baixas temperaturas do sistema, caracterizando o fenômeno da condensação de Bose-Einstein.

Quando se tem dois elétrons com spin  $\frac{1}{2}$  alinhados para cima  $|\uparrow\rangle$  ou para baixo  $|\downarrow\rangle$ , através de determinada direção, tem-se a função de onda quando o spin total é 1, onde  $S = -1, 0, 1$ , e são as projeções na direção  $z$ , assumindo as formas

$$\Phi_T = \begin{cases} |\uparrow\uparrow\rangle, & S = 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle), & S = 0 \\ |\downarrow\downarrow\rangle, & S = -1, \end{cases}$$

e quando o spin total é nulo, onde  $S = 0$ , tem-se

$$\Phi_S = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle). \quad (1.21)$$

O estado tripleto é representado pelo estado de spin simétrico, ou seja, pela função  $\Phi_T$ , enquanto o estado singlete corresponde a função antissimétrica de spin, ou  $\Phi_S$ , a fim de que se assegure o princípio de exclusão de Pauli. Sabendo que a função de onda  $\psi$ , deve ser antissimétrica para os férmions, tem-se que

$$\psi = (\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1), \quad (1.22)$$

onde temos que,  $\psi = \varphi_A \Phi_T$  e  $\psi = \varphi_S \Phi_S$  ou para ser mais exato

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_A \Phi_T - \varphi_S \Phi_S). \quad (1.23)$$

Através da Eq.(1.20), obtemos a função de onda espacial, por meio da técnica da teoria de perturbação independente do tempo (SAKURAI, 1994).

$$\varphi_S = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_\alpha(\vec{r}_1)\varphi_\beta(\vec{r}_2) + \varphi_\beta(\vec{r}_1)\varphi_\alpha(\vec{r}_2)], \quad (1.24)$$

e

$$\varphi_A = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_\alpha(\vec{r}_1)\varphi_\beta(\vec{r}_2) - \varphi_\beta(\vec{r}_1)\varphi_\alpha(\vec{r}_2)], \quad (1.25)$$

sendo as funções de onda espaciais  $\varphi_S$  e  $\varphi_A$  simétrica e anti-simétrica, respectivamente e  $\alpha$  e  $\beta$ , são os estados arbitrários ocupados pelos spins nas posições  $\vec{r}_1$  e  $\vec{r}_2$ .

A interação eletrostática das camadas dos íons adjacentes entre os elétrons, fornece uma separação dos níveis de energia eletrônica, em que pode ser compreendida como a quantidade de energia para trocar os elétrons dos átomos, sendo analisada com a teoria de perturbação.

Exemplificando e utilizando um sistema de dois elétrons (MALTTIS, 1985), em que pelo princípio da exclusão de Pauli obriga que, as funções de onda sejam antissimétricas, somado à teoria da perturbação, alcançou-se as auto-energias dadas por

$$E_{\pm} = E_0 \pm J_{1,2}, \quad (1.26)$$

sendo

$$J_{1,2} = \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \psi_1^*(\vec{r}_2) \psi_2^*(\vec{r}_1) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \psi_1(\vec{r}_1) \psi_2(\vec{r}_2), \quad (1.27)$$

sendo  $\psi_i(\vec{r}_i)$  a auto-função da partícula  $i = 1, 2$  no estado 1 do sistema não perturbado e  $E_0$  a auto-energia na ausência da perturbação coulombiana. Proposta independentemente por Frenkel (1928) e Dorfman (1928), as energias de troca (*exchange*), são as auto energias dos estados de sigleto e tripleto, como já foi demonstrado nesta seção. Quando  $J_{1,2} > 0$ , tem-se o estado de mínima energia, que é o tripleto, cujos spins estão alinhados paralelamente e, no mesmo sentido, sendo este o caso ferromagnético e para  $J_{1,2} < 0$ , tem-se o estado de menor energia, que é o singlete, cujos spins se encontram alinhados de forma anti-paralela, caracterizando o estado antiferromagnético. A interação coulombiana decresce mais lentamente a distância entre os íons, que é aproximadamente ( $\simeq \frac{1}{r}$ ) em comparação com a energia *exchange* que tem a propriedade de decrescer exponencialmente. A ocorrência deste tipo de interação é que o produto de  $J_{1,2}$ , na Eq.(1.27) contém a multiplicação de funções de onda de elétrons ligados a diferentes núcleos, que provocam um overlap nas funções que possuem um rápido decréscimo; sendo assim, as interações de troca são de curto alcance, diferentemente da interação dipolar que é de longo alcance, ou seja, decai com ( $\simeq \frac{1}{r^3}$ ). Considerando um sistema com  $N$  partículas interagentes, em que as funções de onda apresentam propriedades de simetria bem definidas, podemos generalizar o hamiltoniano, pois há uma combinação de pares de ligações coulombianas, então

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (1.28)$$

onde  $J_{i,j}$  é a interação entre spins e o somatório é feito sobre todos os pares  $i, j$  da rede cristalina. Os primeiros e segundos vizinhos e  $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ , especifica o operador de spin de sítio  $i$ . A maior parte dos materiais antiferromagnéticos encontrados na natureza são isolantes (JONGH; MIEDEMA, 1974). O hamiltoniano de Heisenberg ferromagnético Eq.(1.29) no estado fundamental, corresponde a todos os spins alinhados paralelamente, mas o mesmo não acontece com este mesmo hamiltoniano para materiais antiferromagnéticos Eq.(1.30), onde os spins estão alinhados antiparalelamente, estado de Néel, visto que este não é auto-estado do hamiltoniano,

apesar das configurações serem diferentes, pois existem vários tipos de configurações de spins, os quais decorrem de um spin total nulo.

$$|\psi_0\rangle_F = |\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow \dots\rangle, \quad (1.29)$$

$$|\psi_0\rangle_{AF} = |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \dots\rangle. \quad (1.30)$$

Para que  $J_{i,j}$  seja independente da orientação dos spins, a interação spin-órbita tem que ser levada em consideração, já que fornecia certa tendência para os spins se alinharem em direção ao eixo e plano de fácil magnetização. Obviamente, vê-se que o hamiltoniano deixa de ser isotrópico, isto é, a interação não será mais a mesma em todas as direções. Sendo assim, o hamiltoniano passa a ser anisotrópico, em que as interações não são as mesmas para cada componente  $J_{i,j}$ . Escrevendo o modelo para o hamiltoniano com anisotropia  $\eta_x$  e  $\eta_y$ , tem-se

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} [\eta_x S_i^x S_j^x + \eta_y S_i^y S_j^y + \eta_z S_i^z S_j^z]. \quad (1.31)$$

Portanto na Eq.(1.31), se  $\eta_x$  e  $\eta_y$  é igual a zero, fica somente o eixo da componente  $z$ , que é o modelo de Ising. Se  $\eta_x = 1, \eta_y = 0$  ou ao contrário,  $\eta_x = 0, \eta_y = 1$ , tem-se o plano  $xy$  ou  $yz$  como o plano de fácil magnetização, e se adquire o modelo XY, que será visto na próxima seção. Caso se tenha  $\eta_x = 1, \eta_y = 1$ , volta-se ao hamiltoniano isotrópico de Heisenberg.

Um modo clássico encontrado na literatura para a escrita do hamiltoniano de Heisenberg anisotrópico, é adicionar  $(1 - \Delta)$  na frente da equação

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} [(1 - \Delta)(\eta_x S_i^x S_j^x + \eta_y S_i^y S_j^y) + \eta_z S_i^z S_j^z], \quad (1.32)$$

onde se tivermos  $\Delta = 1$ , teremos o modelo de Ising isotrópico e caso tenhamos  $\Delta = 0$ , teremos o modelo de Heisenberg. A variação do sinal de  $J$  vai informar se o modelo é ferromagnético ou antiferromagnético. Em nosso estudo sobre plátos, abordaremos o caso do modelo de Ising com interações competitivas entre o caso ferromagnético e antiferromagnético.

### 1.4.3 Modelo XY ou Planar

Introduzido na literatura por Matsubara e Matsuda (1956), no estudo da superfluidez do Hélio  $He^4$ , o modelo XY ou planar tem solução exata também em uma dimensão. Para o caso em que  $\eta_x = 1$  e  $\eta_y = 0$  ou  $\eta_x = 0$  e  $\eta_y = 1$ , onde se pode deixar de lado o eixo em  $z$  que

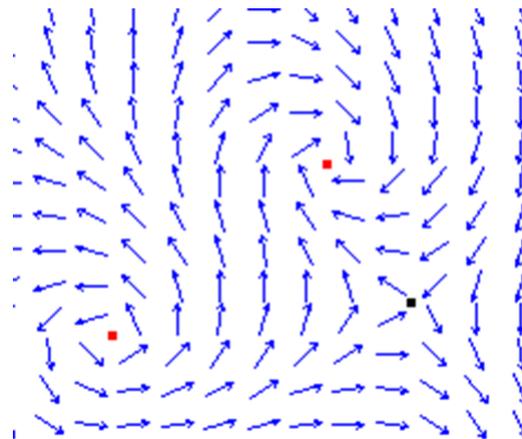
foi escolhido de forma arbitrária, tem-se na Eq.(1.32), este modelo, que é um caso particular do modelo de Heisenberg, que pode ser representado por

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} [J_{i,j}^x \eta_x S_i^x S_j^x + J_{i,j}^y \eta_y S_i^y S_j^y]. \quad (1.33)$$

Considerado um caso especial do hamiltoniano de Heisenberg, o modelo XY, Eq.(1.33), pode ser o caso em que  $J_{i,j}^x = J_{i,j}^y = J$ , isto é, um sistema que não depende de rotações de spins, então

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} [\eta_x S_i^x S_j^x + \eta_y S_i^y S_j^y]. \quad (1.34)$$

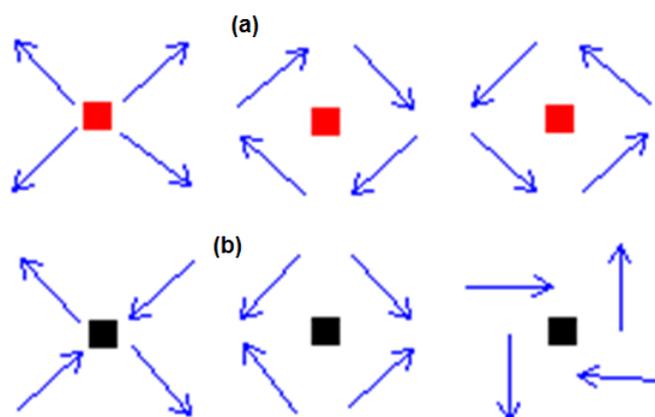
Figura 19 – Vórtice devido à periodicidade no modelo XY, em que há excitações interessantes com topologia não trivial - vórtices e anti-vórtices marcados para a esquerda por quadrados vermelhos e verdes. Em caminho de rastreamento em torno de um vórtice ou anti-vórtice gira revolução completa em  $\pm 2\pi$ .



Fonte: [www.ibiblio.org/e-notes/Perc/xy.htm](http://www.ibiblio.org/e-notes/Perc/xy.htm)

De acordo com o teorema de Mermin-Wagner (1966), o sistema possui uma ou duas dimensões com interações de curto alcance ou ordem de longo alcance apenas para temperaturas nula, de modo que a magnetização associada é sempre zero para qualquer temperatura finita (LIEB, 1967). Para o modelo em duas dimensões, nota-se que o modelo XY possui uma transição de fase topológica a uma temperatura finita, sendo esta transição do tipo Berezinsky-Kortelitz-Thouless (2006). Há, no modelo XY, uma transição de fase entre as fases planar e paramagnética, caracterizada pela transição Berezinsky-Kortelitz-Thouless (BKT), organizado na dinâmica de vórtice-antivórtice, pois os spins rotacionam no plano XY, conforme figuras (19 e 20). Os vórtices ou antivórtices modificam a estrutura dos spins, pois são excitações topológicas, em que os spins em um caminho fechado ao redor do centro de excitação, gira de  $2\pi$  a  $-2\pi$ , onde surge de acordo com a excitação térmica (FRÖHLICH; SPENCER, 1981).

Figura 20 – Ilustrações para os vórtices (a) e anti-vórtices (b). O giro dos spins depende da diferença de sentido de rotação ao longo de um caminho, por isso, não é alterado, caso todos os spins juntos possuam mesmo ângulo.



Fonte: [www.ibiblio.org/e-notes/Perc/xy.htm](http://www.ibiblio.org/e-notes/Perc/xy.htm)

Com o surgimento da dinâmica dos vórtices, fica perceptível que a função de correlação deve mudar, tendo em vista que esta depende da distância entre os spins  $\vec{r}$ . A temperatura de transição para o modelo XY é denominada de  $T_{BKT}$ . Se a temperatura de transição for maior, ou seja,  $T > T_{BKT}$ , há um decaimento exponencial da função de correlação spin-spin entre os pares e caso se tenha uma temperatura de transição menor  $T < T_{BKT}$ , a função de correlação decai conforme uma lei de potência.

#### 1.4.4 Modelo Hubbard

O modelo de Hubbard é considerado um problema difícil para a física estatística na determinação das propriedades magnéticas dos metais de transição. A fim de descrever a estrutura eletrônica dos sólidos, dois caminhos teóricos contrastantes têm orientado a construção dos modelos, sendo que uma delas adota a aproximação de orbitais moleculares de Hund e Mulliken, que é a teoria aceita de um elétron que conduz ao modelo de banda de Bloch. As interações entre elétron-elétron são levadas em conta apenas através de um campo auto consistente e correlações entre os movimentos de diferentes elétrons são desprezadas. O outro caminho é o modelo de Heitler-London, ou o modelo de elétron puramente localizado, que é uma descrição puramente atômica do sólido, sendo esta descrição a melhor parte dos isolantes e para os elétrons  $f$  dos metais de terras raras. Entretanto, nenhum dos dois segmentos conseguem esclarecer de forma convincente as propriedades dos materiais de transição, pois os elétrons da camada  $d$  são incompletos para ambos (GOMES; MACEDO, 2005).

No modelo de Hubbard simples os elétrons estão localizados em orbitais  $s$  e, portanto, cada spin é reduzido a um único nível orbital. Os estados do modelo são dados especificando as 4 possíveis configurações de cada íon, onde os níveis podem ser ambos vazios, contendo um elétron com qualquer dos dois spins, ou elétrons de spins opostos. O hamiltoniano de Hubbard

em sua forma mais simples é dado por

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (1.35)$$

No hamiltoniano para o modelo simples de Hubbard, há dois tipos de termos, Eq.(1.35), em que se tem um termo não-diagonal que possuem elementos não-nulos de uma matriz  $t$  (saltos) entre sítios vizinhos em que um único elétron seja movimentado, sem troca de spin, para um de seus vizinhos,  $c_{i\sigma}^\dagger$  e  $c_{j\sigma}$  os quais são os operadores de criação e destruição para um elétron com spin  $\sigma$  nos sítios  $i$  e  $j$  e outro termo diagonal, que é a energia repulsiva  $U$  que opera quando dois elétrons ocupam o mesmo orbital e  $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$  que é o operador número para os elétrons no sítio  $i$ . Caso se tenha ausência do conjunto do segundo termo, então irá prevalecer o primeiro termo, que poderá ser mostrado um elétron no nível de Bloch onde cada elétron é distribuído por todas as partes do cristal. Na privação do primeiro termo, tem-se o segundo conjunto de termos, que favorece os momentos magnéticos locais, uma vez que ele reprime a possibilidade de um segundo elétron, com spin oposto, em sítios ocupados individualmente (SAMUEL, 2003).

A fim de obter uma análise exata, quando ambos os termos estão presentes, até este simples modelo apresentado, têm-se encontrado obstáculos. Contudo, se o número total de sítios for igual ao número total de elétrons, então no limite de repulsão intrasítio desprezível  $t \gg U$ , têm-se uma banda ordinária metálica semi-cheia. No limite oposto  $U \gg t$ , há um elétron localizado em cada sítio (ASHCROFT, 1976), entretanto, devido ao princípio de Pauli, o processo de saltos de elétrons entre sítios vizinhos acontece apenas se os elétrons de sítios vizinhos têm os spins opostos, encontrando uma hamiltoniana de Heisenberg antiferromagnética (MATTIS, 1988). Teoria de perturbação aplicada neste limite  $U \gg t$  mostra que a constante de troca  $J$  do hamiltoniano de Heisenberg tem relação com os parâmetros do modelo de Hubbard da forma  $|J| = \frac{2t^2}{U}$  (FRADKIN, 1991).

## 1.5 APRESENTAÇÃO DA DISSERTAÇÃO

As propriedades dos sistemas magnéticos de baixa dimensão, tornaram-se interessantes nos últimos anos para a compreensão do comportamento de sistemas magnéticos de spins em uma dimensão. Alguns sistemas são conhecidos como spin-Peierls, sistemas de Haldane, e escadas de spins. Muitos destes sistemas apresentam características interessantes, a baixa temperatura. A característica mais fascinante desses sistemas é que eles mostram surgimento de magnetização de platô em baixas temperaturas.

No capítulo 2, faremos uma revisão da Teoria de Campo Efetivo (*Effective Field Theory-EFT*), que combinada com a Técnica do Operador Diferencial (**TOD**), será utilizada como suporte fundamental para o cálculo das grandezas termodinâmicas relevantes.

No capítulo 3, descreveremos uma ideia simples do modelo de Ising unidimensional que

fornece a magnetização de platô, sendo o campo cristalino de imensa importância na formação dos mesmos, por causa da forte anisotropia. Nesta parte, veremos que a metodologia de estudo é analítica, em que resolvemos a equação de estado, dada pela magnetização ( $m$ ) de forma exata.

No capítulo 4, usaremos a Teoria de Campo Efetivo, combinada a Técnica do Operador Diferencial, para a identificação de platô com baixa dimensionalidade de spins e a temperatura zero, partindo de  $m$  analítica e autoconsistente, cuja solução será obtida por método numérico. Verificaremos se haverá formação de platô na magnetização para o modelo de Ising competitivo unidimensional com parâmetro de competição para  $\alpha = \frac{J_2}{J_1}$ , introduzido no modelo como a razão entre as interações de troca entre spins de primeiros e segundos vizinhos, respectivamente,  $J_1 < 0$  antiferromagnética e  $J_2 > 0$  ferromagnética. Em seguida, trataremos o caso do modelo de Ising unidimensional em aglomerados de dois spins com interações competitivas entre primeiros e segundos vizinhos, tendo em vista o aumento do aglomerado, onde esperamos encontrar a formação de platô. Estudaremos o modelo para  $\alpha$  variando de 0 a até 0.5, em que vamos variar a temperatura, próximo de  $T = 0$ , afim de se obter platô. Não consideraremos  $\alpha > 0.5$ ,<sup>6</sup> por que não vamos explorar o surgimento de outras fases magnéticas que aparecem neste sistema em baixa dimensionalidade, como exemplo, a fase colinear antiferromagnética (ANJOS, 2012). O estudo de platoes na magnetização tem sido objeto de intensas pesquisas, visando a sua aplicabilidade, dentre os quais, destacamos: a difração por raios-x ou ressonância magnética nuclear, onde a difração por raios-x é capaz de fornecer informações sobre a natureza dos spins e orientação dos cristais.

E por último, no capítulo 5, abordaremos os aspectos gerais, as considerações finais e algumas perspectivas de trabalho que surgiram ao longo desta dissertação.

---

<sup>6</sup> Rosana em sua tese (ANJOS, 2012) e utilizando o mesmo método deste trabalho, encontrou vários platoes para o modelo de Ising numa rede quadrada com  $N = 4$  spins.

## 2 TEORIA DE CAMPO EFETIVO

Neste capítulo, apresentaremos uma revisão sucinta da literatura sobre a Teoria de Campo Efetivo (*Effective Field Theory-EFT*), que combinada com a Técnica do Operador Diferencial (**TOD**), será utilizada como suporte fundamental para o cálculo das grandezas termodinâmicas relevantes, para expor o desenvolvimento da metodologia de estudo.

### 2.1 CONSIDERAÇÕES INICIAIS

Na mecânica estatística, os fenômenos físicos podem ser divididos em duas categorias. Na primeira, não há interação dos componentes microscópicos, e como resultado, as funções termodinâmicas do sistema seguem diretamente do cálculo dos níveis de energia desses constituintes individuais. São exemplos desta categoria: a distribuição espectral da radiação do corpo negro, calores específicos dos gases e sólidos, entre outros.

Na segunda categoria, as funções termodinâmicas do sistema apresentam singularidades, a quais levam à ocorrência de várias espécies de transições de fase. Podemos citar como exemplo, a condensação dos gases, fenômenos associados com a coexistência de fases, fenômenos do ferromagnetismo e antiferromagnetismo, transição no fenômeno de superfluidez do Hélio líquido I para o Hélio líquido II. Nas interações entre as partículas, vemos que a característica destes casos surgem nos níveis de energia do sistema total conforme citado por Josefa Teixeira (PACOBAYHA, 2006).

Em trabalhos recentes, o comportamento magnético dos sólidos teve destaque, onde se pode observar que a mecânica estatística tem representação significativa, principalmente através de pesquisas para desenvolvimento de novas tecnologias. Todavia, para se tratar sistemas com altos graus de liberdade da ordem do número de Avogadro, seria preciso tratar o sistema, considerando as propriedades comuns ao conjunto das partículas, esquecendo do que acontece à partícula única. Uma quantidade importante, obtida no tratamento dado ao modelo magnético estatístico, é a função de partição do sistema no ensemble canônico, calculada com auxílio do peso de Boltzmann dado pela soma da expressão  $e^{-\beta E_i}$ , sendo  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ , onde  $E_i$  representará a energia total do estado  $i$ , como sendo proporcional ao peso estatístico para este estado sobre todos os estados acessíveis ao sistema. O objetivo principal da mecânica estatística é calcular a soma sobre todos os estados acessíveis ao sistema, o qual é denominada na literatura de função de partição (em alemão *Zustandssumme*), então,

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

em que  $\mathcal{H}$  é o hamiltoniano representante do sistema físico em estudo,  $E\{\sigma_i\}$  são os auto-

valores da matriz  $\mathcal{H}$  e  $Tr$  representa o funcional traço de  $-\beta\mathcal{H}$ . A fim de se obter a função de partição para um sistema com  $N$  partículas, tem-se configurações de spins:  $(2N + 1)^N$ . Neste propósito, para fins de cálculos aproximativos, é estabelecido que, no limite termodinâmico, o tratamento do sistema será analisado pelo comportamento deste, quando  $(N \rightarrow \infty)$ , e de forma a eliminar as flutuações ( $\sim N^{-\frac{1}{2}}$ ). Sabe-se que poucos modelos estatísticos tem solução exata. Pode-se citar como exemplo o modelo de Ising em uma dimensão. Se a função de partição for conhecida, pode-se calcular as diversas propriedades termodinâmicas e magnéticas do sistema, tais como: a energia livre, calor específico, energia interna, magnetização, susceptibilidade magnética, etc. Fazendo uso da Eq. (2.1), é possível calcular a energia livre de Helmholtz, que representa a conexão entre a termodinâmica e a mecânica estatística, dada pela equação:

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z. \quad (2.2)$$

Poucos modelos estatísticos possuem soluções exatas. A fim de obtermos solução exata para os diversos modelos, precisamos calcular a soma sobre todas as configurações do sistema  $\sigma_i$  da função de partição, Eq.(2.1). Temos como exemplo de modelo que possui solução exata, o modelo de Ising em uma dimensão, a qual podemos utilizar a matriz de transferência como ferramenta, sem a necessidade de aplicação de um cálculo de maior dificuldade. Partindo para o mesmo sistema de Ising bidimensional, já notamos uma possível complicação, por causa das condições de contorno que estarão em duas direções, aumentando os cálculos da matriz a ser diagonalizada, pois a mesma será de ordem elevada. Onsager (1944), chegou à solução exata para o modelo de Ising bidimensional a campo nulo, e se apoiou na ideia de que esta poderia ser expressa em termos do maior auto valor para uma matriz. Muitos métodos aproximativos são encontrados na literatura, onde o teste principal era a reprodução dos valores do modelo de Ising  $\frac{1}{2}$ , pois eram resultados exatos como dissemos acima. Vejamos alguns dos métodos aproximativos que surgiram:

a) Aproximação de aglomerados - Este tipo de método é tratado de forma, em que as interações com os vizinhos sofrem aproximações. É também chamado de campo médio. Os métodos que se destacaram foram os métodos de Bragg (1934), Williams (1934), Bethe (1935), Guggenheim (1935) e Kikuchi (1951), os quais possuem a vantagem de soluções simples e sem grande esforço matemático.

b) Método das Equações Integrais - para sistemas de fluidos simples, fornecem bons resultados (KIRKWOOD, 1935; VAN LEEUWEN, 1959).

c) Simulações Numéricas - A Técnica Numérica de Monte Carlo tem sido utilizada há bastante tempo como forma de obter soluções numéricas para a conclusão de problemas complexos. Do ponto de vista microscópico, tem-se um grande número de átomos, e este número é pequeno macroscopicamente (LANDAU, 2000).

d) Expansão em Série - Foi a que mais contribuiu para o estudo da criticalidade. Como

exemplo, citaremos o modelo de Ising, onde a temperatura é sempre expandida em séries de potências em ordens elevadas.

e) Aproximação Perturbativa - (Grupo de Renormalização) - Trabalha sobre um sistema modificando sua escala de comprimento, diminuindo os graus de liberdade do sistema. Através do hamiltoniano original, é realizada a soma dos estágios sucessivos do grupo de normalização. Apesar de ser considerado com melhor aproximação (próximo de "exatas"), há algumas soluções aproximativas para modelos mais simples, tais como: Curie-Weiss (WEISS, 1907), Bragg-Williams (BRAGG; WILLIAMS, 1934a , 1935b), desigualdade de Bogoliubov na sua forma mais simples (FALK, 1970a , 1964b) e na aproximação de pares (FERREIRA; SALINAS; OLIVEIRA, 1977), são os métodos mais variados e aproximativos, mas iremos nos ater, na próxima seção, à técnica do operador diferencial para aglomerados (*clusters*) com um spin (EFT) (FISHMAN; VIGNALE, 1991) e (CALLEN ; STRIEB, 1963).

## 2.2 TÉCNICA DO OPERADOR DIFERENCIAL

A fim de saber o que acontece no tratamento microscópico da matéria, faz-se uso de técnicas de teoria de campo. De posse destas informações, consegue-se obter a média das grandezas do sistema de interesse, em que a média térmica no ensemble canônico é dada por:

$$\langle A \rangle = \frac{Tr\{Ae^{-\beta\mathcal{H}}\}}{Tr\{e^{-\beta\mathcal{H}}\}}, \quad (2.3)$$

onde  $\mathcal{H}$  é o hamiltoniano do sistema,  $Tr$  é o funcional traço no espaço de todos os spins e  $Z = Tr\{e^{-\beta\mathcal{H}}\}$  é a função de partição, ou seja, a soma sobre todos os possíveis estados de configuração de spins. Para o tratamento do campo efetivo de um sistema com  $N$  partículas interagentes, sempre é possível dividi-lo em duas partes: a primeira contendo um aglomerado (*cluster*) finito  $\Omega$  com  $n < N$  sítios centrais e seus respectivos vizinhos e a segunda,  $\Omega'$  representando a parte restante fora da vizinhança, não contendo spins do aglomerado  $\Omega$  (ver figura 21).

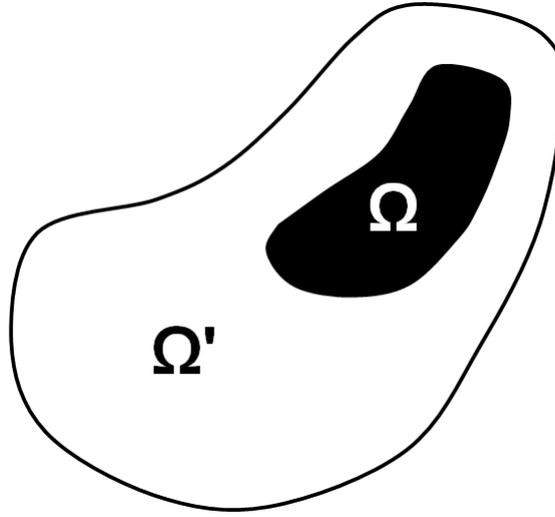
Todo o sistema foi tomado para o limite termodinâmico, sendo uma parte infinita e outra finita. Sendo assim, pode-se reescrever o hamiltoniano na seguinte forma

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\Omega} + \mathcal{H}_{\Omega'}, \quad (2.4)$$

onde  $\mathcal{H}_{\Omega}$  representa o hamiltoniano do aglomerado  $\Omega$  finito e  $\mathcal{H}_{\Omega'}$  a parte infinita, sendo o restante que não possui spins do aglomerado  $\Omega$ . A comutação é uma propriedade importante para que os hamiltonianos comutem, visto que estamos tratando de sistemas clássicos.

$$[\mathcal{H}_{\Omega}, \mathcal{H}_{\Omega'}] = 0. \quad (2.5)$$

Figura 21 – Ilustração de um sistema com  $N$  partículas interagentes do aglomerado  $\Omega$  e sua vizinhança e  $\Omega'$  fora da vizinhança.



Pode-se efetuar o traço da Eq.(2.3) em dois passos: primeiramente sobre o aglomerado finito  $Tr(\Omega)$  e por último sobre os spins que não pertencem à vizinhança que é  $Tr(\Omega')$ .

A Eq.(2.5) é equivalente à igualdade  $e^{-\beta\mathcal{H}} = e^{-\beta\mathcal{H}_\Omega} e^{-\beta\mathcal{H}'_\Omega}$ , e levando em conta as propriedades do traço de uma matriz temos

$$Tr \{ e^{-\beta\mathcal{H}} \} = Tr_\Omega \{ e^{-\beta\mathcal{H}_\Omega} \} Tr_{\Omega'} \{ e^{-\beta\mathcal{H}'_\Omega} \}. \quad (2.6)$$

O sistema infinito não pode ser tratado analiticamente, então será avaliada a média de um operador com variáveis do aglomerado finito, o qual possui parte das informações do sistema. Sendo assim, a média deste operador ficará reescrita na forma:

$$\langle \mathcal{A}(\Omega) \rangle = \frac{Tr_{\Omega'} \{ e^{-\beta\mathcal{H}'_\Omega} \} Tr_\Omega \{ \mathcal{A}(\Omega) e^{-\beta\mathcal{H}_\Omega} \}}{Tr_{\Omega'} \{ e^{-\beta\mathcal{H}'_\Omega} \} Tr_\Omega \{ e^{-\beta\mathcal{H}_\Omega} \}}. \quad (2.7)$$

Multiplicando a Eq.(2.7) por um fator de unidade  $\frac{Tr_\Omega \{ e^{-\beta\mathcal{H}_\Omega} \}}{Tr_\Omega \{ e^{-\beta\mathcal{H}_\Omega} \}} = 1$ , e fazendo uma combinação adequada das propriedades do traço de um operador diagonal, no exemplo aplicando na Hamiltoniana, obtém-se a expressão:

$$\langle \mathcal{A}(\Omega) \rangle = \frac{1}{Tr \{ e^{-\beta\mathcal{H}_\Omega} \}} Tr \left\{ \frac{Tr_\Omega [\mathcal{A}(\Omega) e^{-\beta\mathcal{H}_\Omega}]}{Tr_\Omega [e^{-\beta\mathcal{H}_\Omega}]} e^{-\beta\mathcal{H}_\Omega} \right\}. \quad (2.8)$$

Fazendo a comparação da Eq.(2.8) com a Eq.(2.3), tem-se que o valor médio de  $\langle \mathcal{A}(\Omega) \rangle$  fica reduzido ao cálculo do traço parcial relacionado ao aglomerado finito, conforme ilustrado

na figura 21, ou seja,

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

Para sistemas clássicos a Eq.(2.9) é exata, uma vez que neste limite as variáveis de spin presentes no hamiltoniano comutam. Se tivermos modelos descritos por hamiltonianos quânticos, a Eq.(2.9) não é exata, pois não comutam, ou seja,  $[\mathcal{H}_{\Omega}, \mathcal{H}_{\Omega'}] \neq 0$ . Sá Barreto e Fittipaldi (1981) aplicaram a Eq.(2.9) para descrever modelos quânticos, partindo do modelo de Ising- $\frac{1}{2}$  com campo transverso, e obtiveram valores satisfatórios comparados com método, como por exemplo, expansão em série. Honmura e Kaneyoshi (1978), no fim da década de 1970, propuseram um novo método de teoria de campo efetivo (**EFT**) associado a técnica do operador diferencial que apresenta resultado satisfatório do ponto de vista qualitativo. Entretanto, dependendo da complexidade do sistema em estudo, a aplicação desta técnica exige um nível complexo computacional.

### 2.2.1 IDENTIDADE DE CALLEN-SUZUKI

Para demonstração da identidade de Callen-Suzuki na Eq.(2.9), será aplicado o hamiltoniano de Ising com dois estados (spin  $\frac{1}{2}$ ) descrito por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad (2.10)$$

onde  $J$  é o parâmetro de interação de troca  $J > 0$  e  $J < 0$  correspondem os sistemas ferromagnético e antiferromagnético, respectivamente,  $\langle i, J \rangle$  representa a soma sobre os primeiros vizinhos  $z$  e  $\sigma = \pm 1$  é a variável de spin  $\frac{1}{2}$ . Vamos considerar um aglomerado com apenas um spin, assim o hamiltoniano (2.10) ficará

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

sendo  $\vec{\delta}$  o vetor de primeiros vizinhos e  $z$  o número de coordenação da rede. A fim de obter a expressão  $m = \langle \sigma_1 \rangle$  para a magnetização, substituímos a Eq.(2.11) na identidade Eq.(2.9), obtendo

$$m = \left\langle \frac{\text{Tr}_{\sigma_1} [\sigma_1 \exp(K \sigma_1 \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}})]}{\text{Tr}_{\sigma_1} [\exp(K \sigma_1 \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}})]} \right\rangle, \quad (2.12)$$

em que  $K \equiv \beta J$ ,  $\beta = \frac{1}{k_B T}$  e  $k_B$  é a constante de Boltzmann. Como os possíveis valores da variável spin são  $\sigma_1 = \pm 1$ , efetuando o traço, temos a magnetização  $m = \langle \sigma_1 \rangle$  é dada por

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

onde se obterá a magnetização por spin, somando o funcional traço sobre todo aglomerado.

A Eq.(2.12) representa a identidade de Callen (1963) e Suzuki (1965), desenvolvida através da média termodinâmica. A parte direita desta equação envolve cálculos com alta complexidade, em relação aos argumentos da função hiperbólica dos operadores de spins. Para se obter as funções de correlação e temperatura crítica no modelo de Ising bidimensional, a identidade de Callen-Suzuki foi primeiramente utilizada para se calcular as propriedades críticas do sistema de Ising de Spin- $\frac{1}{2}$ . Entretanto, outros autores fizeram uso da identidade para obter as propriedades críticas do modelo de Ising de spin- $\frac{1}{2}$ , como por exemplo: Matsudaira (1973), Frank e Mitran (1977a, 1978b). Sabendo que a identidade de Callen-Suzuki é de difícil manipulação, será introduzido o operador diferencial que tem por objetivo transportar as médias, que antes era tomada sobre as exponenciais, diretamente sobre os operadores de spin. Esta técnica será dividida em duas partes, na primeira será usado o operador diferencial para uma variável definido por:

$$e^{\lambda \hat{D}_x} F(x) |_{x=0} = F(\lambda), \quad (2.14)$$

onde o termo  $\hat{D}_x = \frac{\partial}{\partial x}$  é o operador diferencial e  $F(x)$  é uma função diferenciável em todo o espaço, que é um resultado bastante útil para aglomerados com spins finitos. Na segunda parte será feito o uso da identidade de van der Waerden para spin- $\frac{1}{2}$ , com dois estados,

$$e^{\pm \lambda \sigma_i} = \cosh(\lambda) \pm \sigma_i \sinh(\lambda). \quad (2.15)$$

A expansão da função  $e^{\lambda \hat{D}_x}$  é a prova da Eq.(2.14) em Série de Taylor, ou seja,

$$e^{\lambda \hat{D}_x} = 1 + \lambda \hat{D}_x + \frac{\lambda^2 \hat{D}_x^2}{2!} + \frac{\lambda^3 \hat{D}_x^3}{3!} + \dots \quad (2.16)$$

Ao multiplicar ambos os lados da Eq.(2.16) por  $F(x)$ , tem-se:

$$e^{\lambda \hat{D}_x} F(x) = F(x) + \lambda \hat{D}_x F(x) + \frac{\lambda^2 \hat{D}_x^2 F(x)}{2!} + \frac{\lambda^3 \hat{D}_x^3 F(x)}{3!} + \dots \quad (2.17)$$

Percebe-se que o lado direito da equação  $F(x + \lambda)$  é igual à expansão da série de Taylor em torno de  $x = 0$

$$F(x + \lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \hat{D}_n F(x) \lambda^n \quad (2.18)$$

Comparando as equações (2.16) e (2.17), tem-se

$$e^{\lambda \hat{D}_x} F(x) = F(x + \lambda), \quad (2.19)$$

sendo que a Eq.(2.13) pode ser verificada. Fazendo uso da propriedade do operador diferencial na identidade de Callen-Suzuki para o modelo de Ising, obtem-se  $e^{\lambda \hat{D}_x} F(x) |_{x=0} = F(\lambda)$ , onde  $D_x = \frac{\partial}{\partial x}$ , a Eq.(2.12) será

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^z e^{(K\sigma_{(1+\vec{\delta})} \hat{D}_x)} \right\rangle \tanh(x) |_{x=0}, \quad (2.20)$$

e se fará uso da identidade de Van der Waerden para spin- $\frac{1}{2}$ , tem-se:

$$e^{(K\sigma_{(1+\vec{\delta})} \hat{D}_x)} = \cosh(K \hat{D}_x) + \sigma_{(1+\vec{\delta})} \sinh(K \hat{D}_x), \quad (2.21)$$

Aplicando na Eq.(2.19), será obtido,

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^z [M_x + \sigma_{(1+\vec{\delta})} N_x] \right\rangle \tanh(x) |_{x=0}, \quad (2.22)$$

onde:  $M_x = \cosh(K D_x)$  e  $N_x = \sinh(K D_x)$ . Note que a Eq.(2.22) é exata envolvendo cálculos matemáticos complexos em seu segundo membro, uma vez que há várias correlações de spins, em que se forma um conjunto infinito de funções acopladas de correlação. Sá Barreto e Fittipaldi (1985) mostraram que não é preciso nenhum desacoplamento no modelo de Ising- $\frac{1}{2}$  numa rede de uma dimensão (com número de coordenação  $z = 2$ ), pois se consegue um número finito (duas) de equações de funções de correlações entre spins. A fim de elucidar EFT combinada com a Técnica do Operador Diferencial, será desenvolvido, neste exemplo uma rede quadrada com o número de coordenação igual a quatro, figura (22). Dados:  $i = 1$ , o spin central com um aglomerado e os spins externos sendo representados por  $\{\sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \sigma_5\}$ , então a Eq.(2.22) expandida ficará:

$$m = \langle (M_x + \sigma_2 N_x)(M_x + \sigma_3 N_x)(M_x + \sigma_4 N_x)(M_x + \sigma_5 N_x) \rangle \tanh(x) |_{x=0}. \quad (2.23)$$

Para o modelo sem campo ( $h = 0$ ) dado pela Eq.(2.10), pode-se ver que a função hiperbólica  $F(x) = \tanh(x)$  é ímpar, ou seja,  $F(-x) = -F(x)$ , sendo assim, fica fácil mostrar que a combinação de operadores diferenciais pares envolvidos na expansão da Eq.(2.21) é nula quando aplicada nesta função e fazendo o limite de  $x \rightarrow 0$ , ou seja:

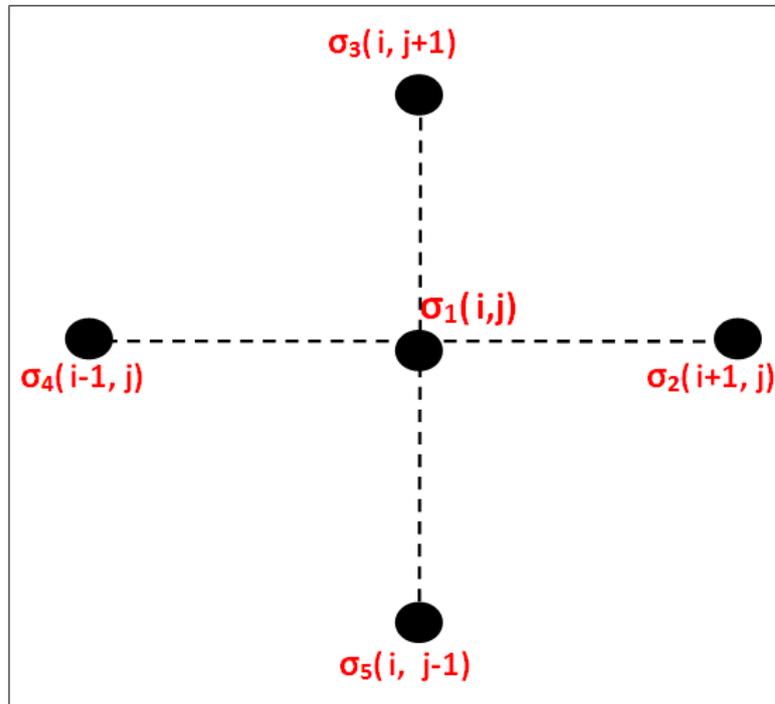
$$\hat{\Phi}_{par}(\hat{D}_x)\tanh(x)|_{x=0} = 0. \quad (2.24)$$

Portanto, apenas contribuições de funções ímpares tem valores não nulos, então, a eq.(2.22) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$m = A_1(K)\langle\sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4 + \sigma_5\rangle + A_3(K)\langle\sigma_2\sigma_3\sigma_4 + \sigma_2\sigma_3\sigma_5 + \sigma_3\sigma_4\sigma_5 + \sigma_2\sigma_4\sigma_5\rangle, \quad (2.25)$$

onde  $A_1(K)$  e  $A_3(K)$  são coeficientes a serem obtidos. O sistema apresenta a característica da invariância translacional, então se aplica a propriedade considerando que  $\langle\sigma_i\rangle = \langle\sigma_j\rangle$  para  $i \neq j$  e também para as correlações  $\langle\sigma_i\sigma_j\sigma_l\rangle$ , onde  $i \neq j \neq l$ . Assim, a magnetização pode ser escrita como:

Figura 22 – Ilustração de um aglomerado de  $N = 1$  spin representado pelo spin central  $\sigma_1$  e seus primeiros vizinhos representado ( $\sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \sigma_5$ ).



$$m = A_1(K)\langle\sigma_i\rangle + A_3(K)\langle\sigma_i\sigma_j\sigma_l\rangle, \quad (2.26)$$

onde

$$A_1(K) = 4M_x^3 N_x \tanh(x)|_{x=0} = \frac{4F_4+8F_2}{8}, A_3(K) = M_x N_x^3 \tanh(x)|_{x=0} = \frac{4F_4-8F_2}{8}$$

e  $F_n = \tanh(nK)$ .

Expressões semelhantes a Eq.(2.26) podem ser obtidas para as funções de correlações, e são conhecidas na bibliografia pelas equações de Dobrushin-Lanford-Ruelle (DOBRUSHIN, 1969) e (LANFORD, 1969), e utilizadas na teoria de campo para descrever a distribuição de probabilidade no limite de certo erro de volume finito de forma severa (PARISI, 1988).

Existe certa dificuldade para se obter de forma exata a magnetização através deste método, pois há na função de correlação a presença de três spins no segundo membro da Eq.(2.26). Para resolver esta situação, será feito um desacoplamento, onde numa primeira aproximação os spins da função de correlação modificarão a função para a forma:

$$\langle \sigma_i \sigma_j \dots \sigma_p \rangle \simeq \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \dots \langle \sigma_p \rangle, \quad (2.27)$$

onde  $i \neq j \neq \dots \neq p$ , sendo conhecida na bibliografia como aproximação de Zernike (1940). Pode-se usar essa aproximação para a condição de contorno  $\langle \sigma_i \rangle = m, \forall i$ , escrevendo a equação autoconsistente para a magnetização na forma

$$m = A_1(K)m + A_3(K)m^3, \quad (2.28)$$

de onde se obtém o seguinte resultado para a magnetização:

$$m = \sqrt{\frac{1 - A_1(K)}{A_3(K)}}. \quad (2.29)$$

A solução aproximada da Eq.(2.29) representa a teoria de campo efetivo com um aglomerado de spin (**EFT-1**), tendo como resultado direto valores clássicos para os expoentes analisados. Então, faz-se  $m \rightarrow 0$ , com a temperatura crítica  $T_c$ , para o modelo de Ising de spin- $\frac{1}{2}$  numa rede quadrada de um spin central, com  $z = 4$  para primeiros vizinhos. Para calcular  $T_c$  basta resolver a seguinte igualdade:

$$A_1(K_c) = 1, \quad (2.30)$$

onde  $T_c = \frac{1}{k_B T}$ . Para o modelo de Ising- $\frac{1}{2}$  numa rede quadrada, que é nosso exemplo,  $T_c = \frac{1}{k_c} = 3.089$ , que pode ser comparada com  $\bar{T}_c = 2.269$ , a qual é a solução exata. Observando a Eq.(2.29), pode-se notar que para o expoente crítico  $\beta = \frac{1}{2}$ , a magnetização se anula conforme lei de potência.

A Eq.(2.27), pode ser desacoplada para um número de coordenação  $z$ , a fim de se equiparar o que diz na **EFT-1** a se aproximar da Eq.(2.22) através da equação

$$m \simeq (M_x + mN_x)^z \tanh(x)|_{x=0}. \quad (2.31)$$

Partindo do princípio em que  $\langle \sigma_i \rangle = m \forall i$ . Escrevendo a Eq.(2.31) num somatório e expandindo em primeira ordem, temos

$$m = \sum_{q=0}^z \binom{z}{q} m^q M_x^{z-q} N_x^q f(x)|_{x=0}, \quad (2.32)$$

sendo  $\binom{z}{q} = \frac{z!}{q!(z-q)!}$ , então, próximo da região crítica ( $T \simeq T_c$ ), para  $m \rightarrow 0$ , pode-se obter a partir da Eq.(2.32) o expoente clássico  $\beta = \frac{1}{2}$ , onde a temperatura crítica pode ser calculada numericamente por meio da seguinte equação

$$A_1^z(k) = 1. \quad (2.33)$$

Tem-se que para uma rede linear, onde  $z = 2$ , uma solução exata  $T_c = 0$ . Se o número de coordenação aumenta, a temperatura  $T_c$  vai aumentando gradativamente, onde podemos citar como exemplo, a rede quadrada ( $z = 4$ ), em que  $K_c^{-1} = 3.089$  e a rede cúbica simples  $T_c(z = 6) = 5.073$ , e quando atinge o limite termodinâmico  $z \rightarrow \infty$ , chega-se ao valor de campo médio  $\frac{T_c}{z} = 1$ . Espera-se que o sistema cresça fisicamente, com o aumento de  $z$  no valor de  $T_c$ , isto acontece por que o sistema fica mais correlacionado precisando de mais energia térmica ( $k_B T_c$ ), a fim de acabar com a ordem magnética. Quando o íon  $i$  interage em média com a mesma magnitude com todos os sítios da rede cristalina, no limite de coordenação em que  $z \rightarrow \infty$ , temos no sistema uma interação de longo alcance, que apresenta os mesmos resultados da aproximação de campo médio de Curie-Weiss.

### 2.3 CONSIDERAÇÕES

A média da função de uma grandeza na aproximação de campo médio (*mean field approximation*, **MFA-1**) em aglomerado com um spin, no caso tratado, pela função trigonométrica hiperbólica, dado pela Eq.(2.13), para cálculo da magnetização, esta média é tomada direto sobre o argumento, e não sobre a função. Então, pode-se escrever a Eq.(2.13) na forma

$$m = \left\langle \tanh K \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}} \right\rangle \simeq \tanh K \left\langle \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}} \right\rangle, \quad (2.34)$$

ou simplificando

$$m = \tanh(zKm), \quad (2.35)$$

que descreve o valor da magnetização em **MFA**, levando a um resultado equivocado em uma dimensão, ou seja,  $T_c(z = 2) \neq 0$ . O desacoplamento da Eq.( 2.27), que é o resultado usado pela **EFT-1** Eq.(2.32), onde as funções de correlação entre spins diferentes são tratados com aproximação, tratando de forma exata a relação de cinemática de spins  $\sigma_i^{2n} = 1$  ( $\sigma_i = \pm 1$ ) através da identidade de van der Waerden, enquanto que **MFA** trata aproximadamente tanto as correlações como as auto-correlações  $\sigma_i^{2n}$ . Na literatura, para a resolução de problemas com muitos corpos na mecânica estatística, encontramos vários modelos de dimensão maior que dois, sendo aplicado o **MFA**, para a resolução, tais como: metamagneto (RUNEHR; FIGUEIREDO, 1998), vidro de spin (LI; WALASEK; CIEPLAK, 1997), modelo de Heisenberg com interação Dzyaloshinski-Moriya (SOUSA; FITTIPALDI, 1994), etc.

Para o modelo de Ising- $\frac{1}{2}$ , numa rede unidimensional, tem-se melhores resultados qualitativos e quantitativos utilizando o **EFT** a **MFA**, pois há solução exata para o modelo com  $T_c = 0$ . Na teoria **EFT** trata de forma exata a cinemática de spin fazendo com que o modelo de interação de curto alcance não apresente ordem de longo alcance em uma dimensão. Então, à medida que o sistema de aglomerado cresce e utilizando o desacoplamento, obtém-se melhorias na parte quantitativa para grandezas críticas, com relativas melhorias em relação ao resultado exato.

Suzuki e Katori (1986) realizaram um estudo minucioso do aumento dos aglomerados no esquema **MFA**, a fim de calcular a temperatura crítica do modelo de Ising numa rede quadrada, onde sugeriu que o limite do tamanho do aglomerado ( $N$ ) infinito, a temperatura converge para o resultado de Onsager. A fim de compreendermos melhor, faremos uma exposição para a convergência de  $T_c$ , onde desenvolveremos **MFA** em aglomerado de dois spins, conhecida na literatura por aproximação de Oguchi (1966). Então, o hamiltoniano de Ising Eq.(2.10) é para aglomerados de  $N = 2$  spins por

$$\mathcal{H}_2^{MFA} = -J\sigma_1\sigma_2 - J(z-1)m(\sigma_1 + \sigma_2). \quad (2.36)$$

Na Eq.(2.36),  $m = \langle \frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2) \rangle$  é a magnetização por spins e o último termo representa a soma das médias realizadas em torno dos spins  $\sigma_1$  e  $\sigma_2$  pertencentes ao aglomerado, então a aproximação por spins nesta soma é dada por

$$m = \frac{\sinh[2K(z-1)m]}{\cosh[2K(z-1)m] + e^{-2K}}, \quad (2.37)$$

com  $K = \beta J$ .

Obtemos a temperatura crítica da Eq.(2.37) no limite, quando  $m \rightarrow 0$ , com resultado equivocado  $T_c \neq 0$  para a cadeia linear ( $z = 2$ ). Para a rede quadrada, temos  $\frac{k_B T_c}{J} = 3.893$ . Suzuki e Katori (1986) aumentou o aglomerado e manteve a simetria da rede quadrada, encontrando os

seguintes valores para  $\frac{k_B T_c}{J}$  : 3.125, 2.915, 2.748, 2.679 e 2.631 para aglomerados com  $N = 9, 21, 45, 87$  e  $177$  spins, respectivamente.

Todos os valores acima, apesar do tempo computacional, mostrou uma pequena convergência em direção ao resultado exato  $\frac{k_B T}{J} = 2.269$ . Para o parâmetro de ordem do tipo  $m = \varphi(m, T)$ , tem-se as teorias de campo efetivo (**MFA** e **EFT**), que apresentam expressões autoconsistentes, onde ao redor da criticalidade os expoentes críticos são universais (clássicos) independente da dimensão ( $d$ ) e da simetria do hamiltoniano, em contradição com as experiências dos compostos magnéticos.

### 3 MAGNETIZAÇÃO DE PLATÔ NO MODELO DE ISING SIMPLES

O trabalho teórico de Hida foi um dos primeiros a apresentar a magnetização de platô. Em seguida, vários autores usaram o modelo de Ising (BAI; CHEN, 2012) em vez do modelo de Heisenberg para explorar a magnetização de platô. Através dessa ideia simples, serão exploradas as características do modelo, sendo demonstrado exemplo do sistema de spins do modelo de Ising que fornece a magnetização de platô.

#### 3.1 ESTRUTURA DE PLATÔ

Em sistemas de baixa energia e baixa dimensionalidade ou quase unidimensional, podemos observar um gap de spin, quando se aplica um campo magnético externo. Então, pode-se notar como exemplo, cadeias de spins, as quais tem despertado a atenção desde a conjectura de Haldane, até o sistema antiferromagnético de Heisenberg unidimensional  $1D$ . A conjectura de Haldane é exemplificada pela afirmação de que em uma cadeia de spin inteiro isotrópica, há um intervalo entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado, refletindo a curva de magnetização em um vale, que é denominada na literatura de platô (LITAIFF, 2013). Experimentalmente, a estrutura de magnetização de platô pode ser encontrada em compostos como exemplo,  $SrCu_2O_3$  (ASUMA, et al.1994) e (BARTLETT; NOCERA, 2005),  $Y_2BaNiO_5$  (WILLS, 2000) e (DARRIET; REGNAUT, 1993),  $Cu(NO_3)_2 \cdot 2.5H_2O$  (BONNER, 1983).

Existem vários estudos de sistemas de spins, em que platoes são analisados, dentre os quais são incluídos ingredientes no hamiltoniano que deixam o modelo robusto, tais como: dimerização, anisotropia, frustração, anisotropia de um íon único, acoplamento de spin-fônon (CHEN *et al.* 2003). Deve-se notar que a quantização da magnetização foi derivada do teorema de Lieb-Schultz-Mattis (LIEB, 1961), em que a condição necessária para a existência de platô é descrita como

$$Q(S - m) = \text{inteiro},$$

sendo  $Q$  é o número de sítios na célula unitária ou número de sítios para os quais a simetria translacional é espontaneamente quebrada ou explícita,  $S$  é o número quântico total do spin e  $m$  a magnetização por célula unitária. Vários métodos se destacam para o cálculo da curva da magnetização como, por exemplo, simulação de Monte Carlo, diagonalização numérica, bosonização, forte expansão de acoplamento, etc.

### 3.2 EXISTÊNCIA DE MAGNETIZAÇÃO DE PLATÔ

Considere o modelo de Ising de um sistema interagente antiferromagnético, descrito pelo seguinte hamiltoniano

$$\mathcal{H} = J \sum_{i=1}^N S_i^z S_{i+1}^z + D \sum_{i=1}^N (S_i^z)^2 + h \sum_{i=1}^N S_i^z, \quad (3.1)$$

onde  $D$  descreve a forte anisotropia de íon único, sendo que a variável de spin  $S^z$  assume os valores  $S^z = 0, \pm 1$ ,  $J$  é o acoplamento de interação de troca (*exchange*), sendo  $J > 0$ ,  $h$  é o campo magnético externo, e  $N$  é o número total de sítios do sistema. De acordo com (BAI; CHEN, 2012), encontramos três platôes, sob condições de contorno no sistema, são eles:  $m = 0, \frac{1}{2}$  e  $1$ .

O resultado do diagrama de fase no plano  $(d, h)$  e magnetização  $(h, m)$  foi obtido analítico e exato, e também na literatura, com o uso da técnica de simulação de Monte Carlo (CHEN *et al.* 2003). Neste caso, ocorrerá três platôes, devido à coexistência de interação antiferromagnética  $(S_i^z S_{i+1}^z)$  com termo de anisotropia de íon único positivo  $(S_i^z)^2$  e  $N$  igual a 2 sítios, sendo que o sistema é submetido à mesma condição de contorno periódica que o modelo original.

A construção de um sistema para o modelo simples, quando  $N$  é igual a 2, sendo o sistema submetido às mesmas condições de fronteira, é dado pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H} = JS_1^z S_2^z + D[(S_1^z)^2 + (S_2^z)^2] + h[(S_1^z) + (S_2^z)], \quad (3.2)$$

onde  $S^z = 0, \pm 1$  para o modelo é dado pela Eq.(3.1). A função de partição é calculada analítica e exata pela Eq.(2.1), dada por:

$$Z = 1 + e^{-\beta(2J+2D+2h)} + 2e^{-\beta(D+h)} + 2e^{-\beta(-2J+2D)} + 2e^{-\beta(D-h)} + 2e^{-\beta(2J+2D-2h)}. \quad (3.3)$$

A energia Livre de Helmholtz é dada por:

$$F = -k_B T \ln Z, \quad (3.4)$$

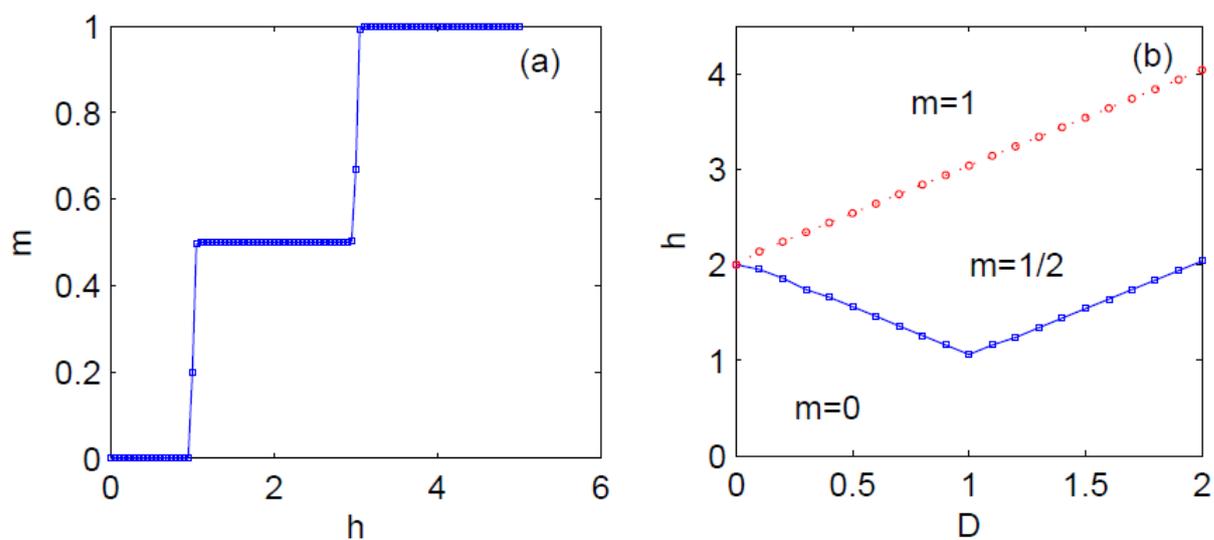
e a magnetização  $m$  por sítio será

$$m = -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial F}{\partial h} \right)_{\beta} = \frac{1}{2Z} \left\{ -2e^{-\beta(2J+2D+2h)} - 2e^{-\beta(D+h)} + 2e^{-\beta(D-h)} + 2e^{-\beta(2J+2D-2h)} \right\}, \quad (3.5)$$

onde  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ ,  $k_B T$  é a constante de Boltzmann,  $T$  é a temperatura. Foi adotado a constante de Boltzmann  $k_B = 1$  e  $h$  o campo magnético.

O diagrama de fase  $h$  versus  $D$  no estado fundamental é demonstrado na figura (23b). Na figura (23a) é observado que os platôs para  $m = 0$  e  $m = 1$ , são provenientes da ordem antiferromagnética e da ordem ferromagnética, enquanto que o aparecimento de platô para  $m = \frac{1}{2}$  é sinalizado devido ao efeito provocado pelo termo  $(S_i^z)^2$  de anisotropia de íon único no hamiltoniano da Eq.(3.1) correspondente ao parâmetro  $D$ .

Figura 23 – (a) Magnetização  $m$  como uma função do campo magnético  $h$ .  $D = 1$ ,  $T = 0.01$  (por unidade de  $J$ ).  $h_c$  é o ponto inicial do campo magnético para a magnetização diferente de zero e  $h_s$  é o campo de saturação correspondente a magnetização de saturação. (b) Diagrama de fase da magnetização do estado fundamental, em que os símbolos quadrados pequenos representam o campo inicial do platô em  $m = \frac{1}{2}$ , e os círculos pequenos, o campo saturado.



Fonte: BAI; FEI CHEN (2012).

### 3.3 CONSIDERAÇÕES

O modelo de Ising simples unidimensional pode gerar resultados analíticos exatos para o espaço de parâmetros do modelo e estudo do comportamento crítico de sistemas, observado sem a necessidade de qualquer aproximação através dos métodos ou técnicas disponíveis na literatura, e neste caso, serviu para análise de existência e comportamento crítico de platô. A quantização é um fenômeno de relevância para a observação de platô, em que se nota a curva da magnetização a baixas temperaturas, cuja energia do núcleo depende da orientação do seu spin em relação ao campo elétrico local.

## 4 MODELO E FORMALISMO

A Teoria de Campo Efetivo junto com o auxílio da Técnica do Operador Diferencial tem mostrado como uma alternativa bem elaborada para estudo e identificação de platoes com baixa dimensionalidade de spins e baixa temperatura. Dessa forma, o estudo de platoes na magnetização ainda é alvo de muitas pesquisas, e que vários trabalhos têm surgido ao longo destes últimos anos, no qual os modelos de Ising ou Heisenberg em redes cúbica, quadrada e unidimensional, no tratamento clássico ou quântico, é explorado na formação de platoes. Alguns trabalhos já foram publicados sobre o modelo de Ising na rede quadrada e cúbica (ANJOS, 2012), em que se verificou a presença da formação de platoes em sistemas bidimensionais e tridimensionais, despertando interesse para o estudo do modelo de Ising competitivo unidimensional.

Pode-se notar a aplicabilidade dos resultados teóricos experimentais comprovadas através de técnicas, os quais incluem a difração por raios-x ou ressonância magnética nuclear, sendo a difração por raios-x capaz de fornecer informações sobre a natureza dos spins e orientação dos cristais, conforme mencionado por Rosana Aparecida (ANJOS, 2012). Para a realização deste experimento, utiliza-se o magnetômetro<sup>1</sup> em sistemas magnéticos, que é formado por um conjunto de equipamentos usados para medir o momento magnético de uma amostra em determinado valor de campo aplicado.

### 4.1 DESCRIÇÃO DO MODELO PARA AGLOMERADO DE $N = 1$ SPIN

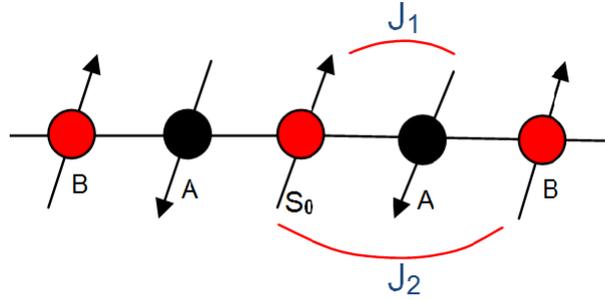
Considere o modelo de Ising competitivo unidimensional com interações de primeiros vizinhos antiferromagnéticas e interações de segundos vizinhos ferromagnéticas em rede linear com aglomerado de  $N = 1$  spin, conforme ilustrado na figura (24), cujo hamiltoniano é dado por,

$$\mathcal{H} = J_1 \sum_{\langle i \rangle} S_i S_{i+1} - J_2 \sum_{\langle\langle i \rangle\rangle} S_i S_{i+1} - h \sum_i S_i, \quad (4.1)$$

onde os acoplamentos de interações de troca entre spins (*exchange*) são considerados para o caso de interação de primeiros vizinhos antiferromagnética  $J_1 < 0$ , e interação de segundos vizinhos  $J_2 > 0$  ferromagnética, sendo  $h$  o campo magnético externo,  $\langle i \rangle$  a soma sobre todos os primeiros vizinhos e  $\langle\langle i \rangle\rangle$  a soma sobre os pares de segundos vizinhos.

<sup>1</sup> Os magnetômetros existentes exploram vários conceitos físicos, a maioria baseada na conexão entre os fenômenos elétricos e magnéticos, ou seja, converte o campo magnético em um sinal elétrico.

Figura 24 – Ilustração no aglomerado de  $N = 1$  spin para o modelo de Ising competitivo unidimensional com interações de primeiros e segundos vizinhos, respectivamente, antiferromagnética e ferromagnética.



O parâmetro de competição  $\alpha = \frac{J_2}{J_1}$  neste modelo será considerado  $\alpha \leq 0.5$ , pois neste trabalho não serão tratadas outras fases magnéticas observadas para  $\alpha > 0.5$ , além das fases paramagnética e antiferromagnética que surgem nos diagramas de fase no estado fundamental, conforme estudado na versão do modelo para as dimensões bidimensional e tridimensional tratadas por Rosana Aparecida (ANJOS, 2012). Nesta dissertação será analisada o diagrama de fase  $\frac{h}{J_1}$  versus  $\alpha$  no estado fundamental, em que se espera encontrar as fases paramagnética (**P**) e antiferromagnética (**AF**).

A fim de preparar o hamiltoniano para o cálculo da média de uma grandeza física para o sistema, por exemplo, o parâmetro de ordem do sistema, a magnetização por spin, vamos multiplicar a Eq.(4.1) por  $-\beta$  e colocar a soma dos  $S_i$  em evidência, então

$$-\beta\mathcal{H}_1 = S_i \left[ -K_1 \sum_{\langle i \rangle} S_{i+1} + K_2 \sum_{\langle\langle i \rangle\rangle} S_{i+1} + L \right], \quad (4.2)$$

sendo  $K_1 = \beta J_1$ ,  $K_2 = \beta J_2$  e  $L = \beta h$ ,

onde,

$$a = -K_1 \sum_{\langle i \rangle} S_{i+1} + K_2 \sum_{\langle\langle i \rangle\rangle} S_{i+1} + L. \quad (4.3)$$

Fazendo a substituição da Eq.(4.3) na Eq.(4.2), tem-se o hamiltoniano na forma reduzida

$$-\beta\mathcal{H}_1 = S_i(a). \quad (4.4)$$

A seguir, aplicaremos a Técnica do Operador Diferencial no cálculo da magnetização para o modelo da Eq.(4.1). A abordagem de estudo do modelo para obter a equação de estado autoconsistente que surge com o cálculo da magnetização, esta é realizada primeiro em uma parte analítica, e depois, no final, outra numérica.

## 4.2 TÉCNICA DO OPERADOR DIFERENCIAL

No capítulo 2 foi visto que no ensemble canônico, a média térmica de uma grandeza  $\mathcal{A}(\Omega)$ , é dada pela Eq.(2.9), e reescrevendo esta equação para uma grandeza particular  $\mathcal{A}$ , temos que

$$\langle \mathcal{A} \rangle = \frac{Tr[\mathcal{A}e^{-\beta\mathcal{H}}]}{Z}, \quad (4.5)$$

ou que, para  $\mathcal{A}(n)$ ,

$$\langle \mathcal{A}(n) \rangle = \left\langle \frac{Tr_n\{\mathcal{A}(n)e^{-\beta\mathcal{H}_n}\}}{Tr_n\{e^{-\beta\mathcal{H}_n}\}} \right\rangle. \quad (4.6)$$

Substituindo  $\mathcal{A}(n)$  por  $S_i$ , tem-se que

$$\langle S_i \rangle = \left\langle \frac{Tr\{S_i e^{-\beta\mathcal{H}_n}\}}{Tr_n\{e^{-\beta\mathcal{H}_n}\}} \right\rangle. \quad (4.7)$$

Aplicando a Eq.(4.4) na Eq.(4.7), tem-se que

$$\langle S_i \rangle = \left\langle \frac{Tr\{S_i e^{S_i a}\}}{Tr_n\{e^{S_i a}\}} \right\rangle. \quad (4.8)$$

Sabe-se que o ponto inicial para o cálculo das grandezas termodinâmicas, no ensemble canônico, é dado pela função de partição  $Z = Tr[e^{-\beta\mathcal{H}}]$ , onde  $Tr$  representa o funcional traço da expansão do hamiltoniano diagonal, ou seja, a soma da diagonal principal da matriz diagonalizada, em que  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ ,  $k_B$  é a constante de Boltzmann, e  $T$  a temperatura absoluta. Então, efetuando a soma do traço para os valores de  $S_i \pm 1$  da variável de spin na Eq.(4.4), tem-se que,

$$Z = Tr[e^{-\beta\mathcal{H}}] = e^{(a)} + e^{-(a)}. \quad (4.9)$$

Portanto,

$$Z = 2\cosh(a). \quad (4.10)$$

A magnetização da sub-rede A,  $m_A$ , é dada por:

$$m_A = \langle S_1 \rangle = \left\langle \frac{\partial \ln Z}{\partial a} \right\rangle = \langle \tanh(a_A) \rangle. \quad (4.11)$$

Através de um procedimento análogo, partindo de  $\langle S_2 \rangle$  com a troca dos índices A e B, obtemos a magnetização da sub-rede  $m_B$ ,

$$m_B = \langle S_2 \rangle = \left\langle \frac{\partial \ln Z}{\partial a} \right\rangle = \langle \tanh(a_B) \rangle. \quad (4.12)$$

Calculando,  $m_A$ , usando a Eq.(4.11) e substituindo na Eq.(4.3), tem-se que:

$$m_A = \left\langle \tanh\left(-K_1 \sum_{\langle i \rangle} S_{i+1} + K_2 \sum_{\langle\langle i \rangle\rangle} S_{i+1} + L\right) \right\rangle. \quad (4.13)$$

Esta equação é conhecida como identidade de Callen-Suzuki para o modelo de Ising, pois esta foi deduzida primeiramente para spin- $\frac{1}{2}$  por Callen, e depois generalizada por Suzuki para um valor de spin geral. Para extrair o argumento da Eq.(4.13), faz-se uso de identidades matemáticas, as quais auxiliarão no desenvolvimento da equação Eq.(4.13). Então, faremos uso da Técnica do Operador Diferencial, em que a ação do operador diferencial aplicado para o caso de uma função de uma variável pode ser representada como:

$$e^{\lambda \hat{D}_x} F(x) |_{x=0} = F(\lambda), \quad (4.14)$$

onde o termo  $\hat{D}_x = \frac{\partial}{\partial x}$  representa o operador diferencial e  $F(x)$  é uma função diferenciável em todo o espaço  $x$  (este pode ser generalizado ao espaço vetorial e a técnica é aplicada).

$$m_A = \left\langle \prod e^{[-K_1 \sum_{\langle i \rangle} S_{i+1} + K_2 \sum_{\langle\langle i \rangle\rangle} S_{i+1}]} D_x \right\rangle F(x) |_{x=0}, \quad (4.15)$$

onde

$$F(x) = \tanh(x + L).$$

Usando a identidade de van der Waerden para spin- $\frac{1}{2}$ , com dois estados de energia para configurações do spin ( $\sigma = \pm 1$ ), temos

$$e^{\pm \lambda \sigma_i} = \cosh(\lambda) \pm \sigma_i \sinh(\lambda). \quad (4.16)$$

Para o desenvolvimento da Eq.(4.14), por um procedimento análogo, como foi visto no capítulo 2, a Eq.(2.23) possuía correlações de spins de todas as ordens de grandeza na função de correlação ficando acopladas. Então, fez-se uso de técnica de aproximação de desacoplamento, que desconsiderou as correlações de multi-spins. Será aplicada a aproximação, chamada também de desacoplamento de Zernike (1940), de ordem zero, dada pela equação Eq.(2.27) na equação da magnetização  $m_A$ , Eq.(4.15), e considerando  $m_{A(B)} = \langle S_{iA(B)} \rangle$  conforme visto na Eq.(2.26), temos

$$m_A = \langle (\alpha_x - m_B \beta_x)^2 (\alpha_y + m_A \beta_y)^2 \rangle F(x) |_{x=0}, \quad (4.17)$$

onde  $\alpha_\nu = \cosh(K_i D_\nu)$ ,  $\beta_\nu = \sinh(K_i D_\nu)$  com  $\nu = x, y$  e  $i = 1, 2$ .

O cálculo para a sub-rede B é análogo ao da sub-rede A, permutando-se os índices A e B, desta maneira a magnetização da sub-rede B é dada por,

$$m_B = \langle (\alpha_x - m_A \beta_x)^2 (\alpha_y + m_B \beta_y)^2 \rangle F(x) |_{x=0}. \quad (4.18)$$

Com o auxílio das Eq.(4.17) e (4.18) definimos duas novas magnetizações, a magnetização total

$$m = \frac{1}{2}(m_A + m_B), \quad (4.19)$$

e a magnetização residual (*staggered*)

$$m_s = \frac{1}{2}(m_A - m_B), \quad (4.20)$$

tem-se uma equação para os termos ímpares de  $m_s$ ,

$$m_s = A_1(m)m_s + A_3(m)m_s^3, \quad (4.21)$$

e outra equação para  $m$ , relacionada com os termos pares de  $m_s$ , isto é,

$$m = A_0(m) + A_2(m)m_s^2 + A_4(m)m_s^4, \quad (4.22)$$

sendo os coeficientes  $A_i(m) = A_i(m, T, \frac{h}{J_1}, \alpha)$ ,  $i = 1, 2, 3, 4$ , dados por

$$\begin{aligned} A_0(m) = & \{ \alpha_x^2 \alpha_y^2 + 2(\alpha_x \beta_x \alpha_y^2 - \alpha_y \beta_y \alpha_x^2) m + (\alpha_x^2 \beta_y^2 + \alpha_y^2 \beta_x^2 - \alpha_x \beta_x \alpha_y \beta_y) m^2 \\ & + 2(\alpha_x \beta_x \alpha_y^2 - \alpha_y \beta_y \alpha_x^2) m^3 + \beta_x^2 \beta_y^2 m^4 \} F(x) |_{(x=0)}, \end{aligned} \quad (4.23)$$

$$A_1(m) = 2\{ (\alpha_x \beta_x \alpha_y^2 + \alpha_y \beta_y \alpha_x^2) - (\alpha_x \beta_x \beta_y^2 + \alpha_y \beta_y \beta_x^2) m \} F(x) |_{x=0}, \quad (4.24)$$

$$A_2(m) = \{ (\alpha_x^2 \beta_y^2 + \alpha_y^2 \beta_x^2) + 4\alpha_x \alpha_y \beta_x \beta_y + 2(\alpha_x \beta_x \beta_y^2 - \alpha_y \beta_y \beta_x^2) m - 2\beta_x^2 \beta_y^2 m^2 \} F(x) |_{x=0}, \quad (4.25)$$

$$A_3(m) = 2\{ (\alpha_x \beta_y^2 \beta_x + (\alpha_y \beta_y \beta_x^2)) \} F(x) |_{x=0}, \quad (4.26)$$

e

$$A_4(m) = \beta_x^2 \beta_y^2 F(x) |_{x=0}. \quad (4.27)$$

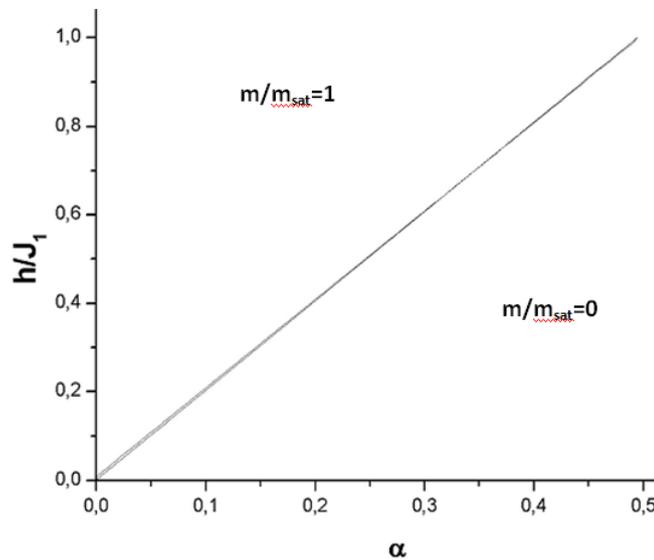
Para a obtenção das expressões dos coeficientes  $A_i(m)$ ,  $i = 0, 1, 2, 3, 4$ , dados pelas Eqs. (4.23), (4.24), (4.25), (4.25), (4.26) e (4.27), foi utilizado o software **MAPLE**, expandindo as

expressões das Eqs.(4.17) e (4.18), combinada com as Eqs. (4.21) e (4.20). Em seguida, transportamos os coeficientes obtidos para as equações autoconsistentes, Eqs.(4.21) e (4.22), que foram resolvidas numericamente com o auxílio do código **FORTRAN**.

Como resultado obtido do sistema formado pelas Eqs. (4.21) e (4.22), obtemos a magnetização total e também, no estado fundamental, a temperatura nula<sup>2</sup> ( $T = 0$ ), o diagrama de fase  $\frac{h}{J_1}$  como função do parâmetro de competição de interações  $\alpha$ , representado pela figura (25) para vários valores de  $\alpha$ . Podemos notar que só aparecem duas regiões distintas para o valor da magnetização total. Foi considerado o parâmetro  $\alpha$  variando de 0 até 0.5 ( $\alpha \leq 0.5$ ), haja vista que acima deste valor ( $\alpha > 0.5$ ) surgem outras fases magnéticas tratadas na literatura que não exploramos nesta dissertação, como exemplo a fase colinear, super-antiferromagnética, na versão do modelo em estudo, conforme a Eq.(4.1), a partir de duas dimensões tratado por Rosana Aparecida (2012), Zhan Bai e Zhou Chen (2012), Fabian Litaiff (2013).

No capítulo 1 foi comentado uma das fases que surgem, a fase super-antiferromagnética. O modelo em estudo, Eq.(4.1), na ausência de campo magnético externo não apresenta transição de fase (CAN, 1970), este fato é observado na figura (25), levando a ocorrência dos resultados encontrados para a magnetização total com valores  $m = 0$  e  $m = 1$ .

Figura 25 – Diagrama de fase  $\frac{h}{J_1}$  versus  $\alpha$



Para valores de temperaturas baixas, e considerando aglomerado de  $N = 1$  spin, sabe-se da dificuldade de tratar o comportamento crítico do sistema em baixa dimensionalidade, e também causar ambiguidade no tratamento de sub-rede no formalismo considerado da Teoria de Campo Efetivo, levando a resultados insatisfatórios. Este fato é observado na figura (26), influenciando no valor da magnetização para  $m = 0$  em baixo campo magnético  $h < 2$ , que não está bem

<sup>2</sup> onde representamos  $\mathbf{T} = \frac{k_B T}{J}$

definido, contrariando este valor que foi determinado na figura (25). Por outro lado, o platô da magnetização  $m = 1$  é formado para altos valores do campo magnético externo  $h$  ( $h > 2$ ).

Figura 26 – Início de formação de platô no modelo de Ising  $J_1 - J_2$  numa rede linear unidimensional, para um aglomerado de tamanho  $N = 1$  spin.

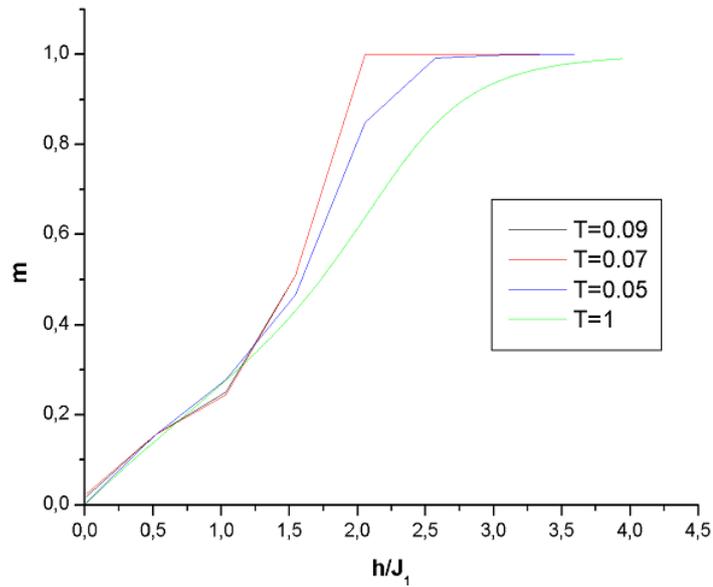
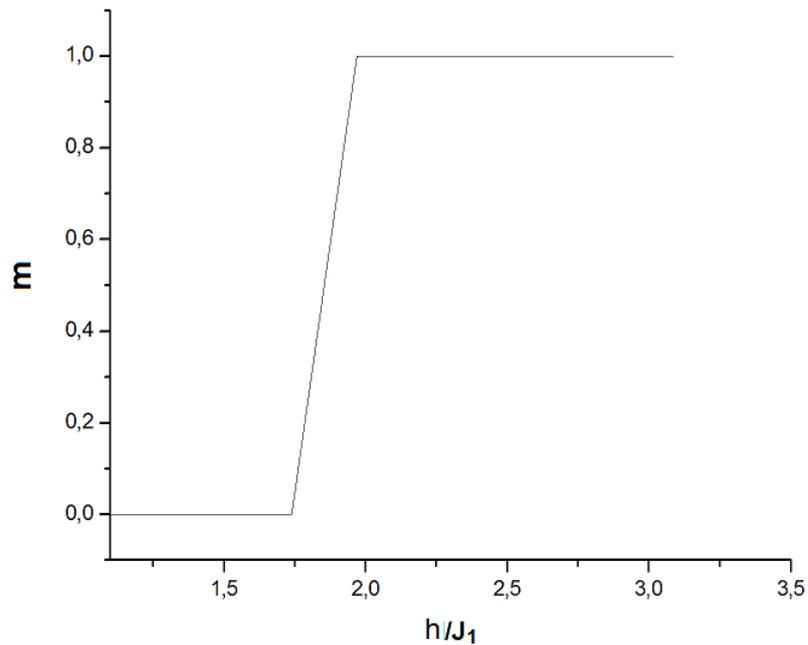


Figura 27 – Magnetização total, exibindo a formação de platô em  $m = 0$  e  $m = 1$  no modelo de Ising  $J_1 - J_2$  numa rede linear unidimensional, para um aglomerado de tamanho  $N = 1$  spin.



Na figura (27), observamos a formação de platô para o comportamento da magnetização total como função do campo magnético, assim sendo, um platô definido em  $m = 0$ , correspondendo ao campo crítico  $h_c/J_1 = 0$ , e o platô  $m = 1$  relativo a  $h_c/J_1 = 2$ . A partir do valor do campo magnético crítico  $h_c/J_1 = 2$  surge o campo magnético de saturação  $h_s/J_1 > 2$  determinado pelo platô  $m = 1$ , ou seja, neste caso, a magnetização de saturação.

Para um estudo mais elaborado, isto é, evitando a limitação de abordagem do modelo em aglomerado de  $N = 1$  spin, em que pode causar ambiguidade na distinção das sub-redes  $m_A$  e  $m_B$ , correspondentes as equações de estado, trataremos na próxima seção, o modelo em aglomerado de tamanho  $N = 2$  spins, a fim de distinguir a abordagem de sub-rede de maneira correta, descrevendo a topologia da rede linear.

### 4.3 MODELO DE ISING COMPETITIVO UNIDIMENSIONAL EM AGLOMERADOS DE $N = 2$ SPINS

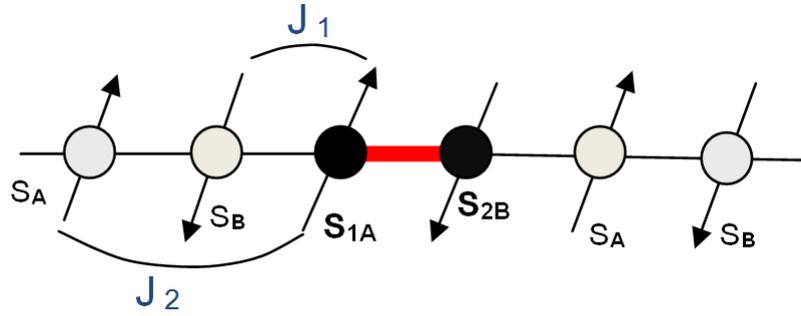
Na seção 4.2 tratamos o modelo competitivo unidimensional para aglomerado de um spin. À medida que aumentamos o tamanho do aglomerado, e como consequência, aumentando também a competitividade de interações no modelo, esperamos encontrar resultados satisfatórios. Então, será apresentado o hamiltoniano do modelo de Ising unidimensional competitivo em rede linear para aglomerados de dois spins, assim temos,

$$\mathcal{H} = J_1 S_{1A} S_{2B} + J_1 \sum_{\langle i \rangle} S_{1A} S_{2B} - J_2 \sum_{\langle\langle i \rangle\rangle} S_{1A} S_{2B} - h \left[ \sum_i S_{1A} + \sum_i S_{2B} \right], \quad (4.28)$$

onde  $J_1$  e  $J_2$  são acoplamentos de interação de troca entre spins (*exchange*), em que  $J_1$  e  $J_2$  estão em conformidade com a escolha do aglomerado de dois spins (conforme a ilustração da figura (28)), em que não exploramos o fenômeno de frustração do spin, considerando o caso de interações  $J_1 < 0$  antiferromagnética e  $J_2 > 0$  ferromagnética, sendo  $h$  o campo magnético externo,  $\langle i \rangle$  denota a soma sobre todos os primeiros vizinhos e  $\langle\langle i \rangle\rangle$  a soma sobre os pares de segundos vizinhos, de acordo com a ilustração da figura (28).

Reescrevendo o hamiltoniano, dado pela Eq.(4.28), para o aglomerado central formado pelos sítios  $S_1$  e  $S_2$  nas sub-redes, respectivamente, A e B, obtém-se a equação:

Figura 28 – Ilustração do modelo de Ising unidimensional com interações de primeiros e segundos vizinhos, no aglomerado de dois spins em rede linear.



$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & J_1 S_{1A} S_{2B} + S_{1A} \left( \sum J_1 S_{1+\vec{\delta}_B}^B - \sum J_2 S_{1+\vec{\delta}_A}^A - h \right) \\ & + S_{2B} \left( \sum J_1 S_{2+\vec{\delta}_A}^A - \sum J_2 S_{2+\vec{\delta}_B}^B - h \right). \end{aligned} \quad (4.29)$$

Para simplificar o hamiltoniano da Eq.(4.29), reduzimos o número de variáveis, utilizando as seguintes Eqs.(4.30) e (4.31),

$$X_1 = \sum J_1 S_{1+\vec{\delta}_B}^B - \sum J_2 S_{1+\vec{\delta}_A}^A - h \quad (4.30)$$

e

$$X_2 = \sum J_1 S_{2+\vec{\delta}_A}^A - \sum J_2 S_{2+\vec{\delta}_B}^B - h, \quad (4.31)$$

obtendo o hamiltoniano Eq.(4.29) na forma reduzida,

$$\mathcal{H} = J_1 S_{1A} S_{2B} + S_{1A} X_1 + S_{2B} X_2. \quad (4.32)$$

A fim de calcular a função de partição, faremos outras substituições no hamiltoniano. Então, multiplicando a Eq. (4.32) por  $(-\beta)$ , chamaremos  $K_1 = -\beta J_1$ ,  $K_2 = -\beta J_2$ ,  $\zeta_1 = X_1 \beta$ ,  $\zeta_2 = X_2 \beta$ , em que o hamiltoniano pode ser reescrito na forma,

$$-\beta \mathcal{H} = K_1 S_{1A} S_{2B} + S_{1A} \zeta_1 + S_{2B} \zeta_2. \quad (4.33)$$

A função de partição é calculada substituindo a Eq.(4.33) na Eq.(2.1), obtendo,

$$Z = \sum_{S_{1A}, S_{2B}} e^{K_1 S_{1A} S_{2B} + S_{1A} \zeta_1 + S_{2B} \zeta_2}. \quad (4.34)$$

Efetuada a soma para os valores  $\pm 1$  das variáveis de spins, tem-se o desenvolvimento da função de partição da Eq.(4.34) para o modelo descrito pela Eq.(4.28) em aglomerado de  $N = 2$  spins, dado por:

$$Z = 2e^{K_1} \cosh(\zeta_1 + \zeta_2) + 2e^{-K_1} \cosh(\zeta_1 - \zeta_2). \quad (4.35)$$

Para o cálculo da magnetização por sítio, calculamos as médias,  $\langle S_{1A} \rangle$  e  $\langle S_{2B} \rangle$ , correspondentes, respectivamente a magnetização da sub-rede A e a magnetização da sub-rede B. Assim, para a sub-rede  $m_A$ ,

$$m_A = \langle S_{1A} \rangle = \left\langle \frac{\text{Tr} S_{1A} [e^{K_1 S_{1A} S_{2B} + S_{1A} \zeta_1 + S_{2B} \zeta_2}]}{\text{Tr} [e^{K_1 S_{1A} S_{2B} + S_{1A} \zeta_1 + S_{2B} \zeta_2}]} \right\rangle, \quad (4.36)$$

em que  $\zeta_1 = -K_1 \sum_{\vec{\delta}_1} S_{\zeta_1 + \vec{\delta}_1}$  e  $\zeta_2 = -K_2 \sum_{\vec{\delta}_2} S_{\zeta_2 + \vec{\delta}_2}$ . A equação Eq.(4.36) para a magnetização  $m_{A(B)}$ , pode ser simplificada se o cálculo for feito através do resultado abaixo,

$$m_{A(B)} = \left\langle \frac{\partial \ln Z}{\partial \zeta_{B(A)}} \right\rangle, \quad (4.37)$$

onde  $Z$  é a função de partição definida pela Eq.(4.34), sendo que as variáveis de spins  $S_{1A}$  e  $S_{2B}$  podem assumir os valores  $\pm 1$ . Assim, o cálculo da magnetização de sub-rede para  $m_A$  será escrita a partir do resultado das Eqs.(4.35) e (4.36), por:

$$m_A = \left\langle \frac{\sinh(\zeta_A + \zeta_B) + e^{-2K_1} \sinh(\zeta_A - \zeta_B)}{\cosh(\zeta_A + \zeta_B) + e^{-2K_1} \cosh(\zeta_A - \zeta_B)} \right\rangle, \quad (4.38)$$

ou reescrevendo esta Eq.(4.38) em termos de  $x_1$  e  $x_2$ , onde  $x_1 = \zeta_A$  e  $x_2 = \zeta_B$ , temos que:

$$m_A = \left\langle \frac{\sinh(x_1 + x_2) + e^{-2K_1} \sinh(x_1 - x_2)}{\cosh(x_1 + x_2) + e^{-2K_1} \cosh(x_1 - x_2)} \right\rangle. \quad (4.39)$$

De forma semelhante ao cálculo da magnetização de sub-rede  $m_A$  para o aglomerado de  $N = 1$  spin, Eq.(4.13), teremos a função  $g(x_1, x_2)$ , que é a função obtida da aplicação do operador diferencial, conforme a Eq.(4.15). Portanto, para  $N = 2$  spins, a partir da Eq.(4.39), temos

$$g(x_1, x_2) = \frac{\sinh(x_1 + x_2) + e^{-2K_1} \sinh(x_1 - x_2)}{\cosh(x_1 + x_2) + e^{-2K_1} \cosh(x_1 - x_2)}. \quad (4.40)$$

A presença de variáveis de spins nos argumentos das funções hiperbólicas torna a equação Eq.(4.39) e (4.40) de difícil manipulação algébrica. Assim, faz-se necessário a utilização da técnica do operador diferencial, definida para duas variáveis, como segue,

$$e^{\zeta_1 \hat{D}_{x_1} + \zeta_2 \hat{D}_{x_2}} g(x_1, x_2)|_{x_1, x_2=0} = g(x_1 + \zeta_1, x_2 + \zeta_2), \quad (4.41)$$

em que  $\hat{D}_{x_1} = \frac{\partial}{\partial x_1}$ ,  $\hat{D}_{x_2} = \frac{\partial}{\partial x_2}$  são os operadores diferenciais e  $g(x_1, x_2)$  é uma função analítica. Dessa forma, pode-se reescrever a equação Eq.(4.39), utilizando a Eq.(4.41) da seguinte forma,

$$m_A = \left\langle e^{\zeta_1 \hat{D}_{x_1} + \zeta_2 \hat{D}_{x_2}} \right\rangle g(x_1, x_2)|_{x_1, x_2=0}. \quad (4.42)$$

Substituindo os termos  $\zeta_1$  e  $\zeta_2$  da Eq.(4.36) na Eq.(4.42) obtém-se,

$$m_A = \left\langle \exp \left( -K_1 \sum_{\vec{\delta}_1} S_{\zeta_1 + \vec{\delta}_1} \hat{D}_{x_1} + K_2 \sum_{\vec{\delta}_2} S_{\zeta_2 + \vec{\delta}_2} \hat{D}_{x_2} - K_1 \sum_{\vec{\delta}_1} S_{\zeta_1 + \vec{\delta}_1} \hat{D}_{x_1} + K_2 \sum_{\vec{\delta}_2} S_{\zeta_2 + \vec{\delta}_2} \hat{D}_{x_2} \right) \right\rangle g(x_1, x_2)|_{x_1, x_2=0}. \quad (4.43)$$

Expandindo o somatório, a magnetização passará a ser representada pela equação,

$$m_A = \left\langle \prod_{\vec{\delta}_1}^2 e^{-K_1 S_{\zeta_1 + \vec{\delta}_1} \hat{D}_{x_1}} \prod_{\vec{\delta}_2}^1 e^{K_2 S_{\zeta_2 + \vec{\delta}_2} \hat{D}_{x_2}} \prod_{\vec{\delta}_1}^2 e^{-K_1 S_{\zeta_1 + \vec{\delta}_1} \hat{D}_{x_1}} \prod_{\vec{\delta}_2}^1 e^{K_2 S_{\zeta_2 + \vec{\delta}_2} \hat{D}_{x_2}} \right\rangle \times g(x_1, x_2)|_{x_1, x_2=0}. \quad (4.44)$$

A Eq.(4.44) não possui um tratamento algébrico fácil, devido o número infinito de correlações. Então, é feita uma aproximação de modo que é considerado apenas as correlações de primeira ordem, onde utilizamos a aproximação de Zernike (ZERNIKE, 1940), expressa pela equação

$$\langle S_i^A \cdot S_j^A \cdot S_k^B \cdots S_k^A \cdot S_q^B \rangle \cong \langle S_i^A \rangle \cdot \langle S_j^A \rangle \cdot \langle S_k^B \rangle \cdots \langle S_k^A \rangle \cdot \langle S_q^B \rangle, \quad (4.45)$$

sendo  $i \neq j \neq k \cdots \neq q$ ,  $m_\nu = \langle S_i^\nu \rangle$ ,  $m_\mu = \langle S_i^\mu \rangle$ . Esta aproximação é dada pela equação Eq.(4.45) que desconsidera a correlação entre diferentes spins. Aplicando a Eq.(4.45) na (4.44) e utilizando a identidade de Van der Waerden, Eq.(4.16), obtém-se a magnetização expressa como:

$$m_A = (\alpha_x - m_B \beta_x) (\alpha_y + m_A \beta_y)^2 (\alpha'_x - m_A \beta'_x) (\alpha'_y + m_B \beta'_y)^2 g(x, y)|_{x=y=0}, \quad (4.46)$$

onde,

$$\left\{ \begin{array}{ll} \alpha_x = \cosh(K_1 \hat{D}_{x_1}), & \beta_x = \sinh(K_1 \hat{D}_{x_1}), \\ \alpha_y = \cosh(K_2 \hat{D}_{x_2}), & \beta_y = \sinh(K_2 \hat{D}_{x_2}), \\ \alpha'_x = \cosh(K_1 \hat{D}_{x_1}), & \beta'_x = \sinh(K_1 \hat{D}_{x_1}), \\ \alpha'_y = \cosh(K_2 \hat{D}_{x_2}), & \beta'_y = \sinh(K_2 \hat{D}_{x_2}). \end{array} \right.$$

Com o objetivo de encontrar a expressão para a sub-rede  $m_B$ , o procedimento é semelhante ao que foi desenvolvido na sub-rede  $m_A$ , encontrando uma equação análoga a Eq.(4.46) para  $m_B = \langle S_{2B} \rangle$ , permutando os índices  $A$  e  $B$ , assim sendo,

$$m_B = (\alpha_x - m_A \beta_x) (\alpha_y + m_B \beta_y)^2 (\alpha'_x - m_B \beta'_x) (\alpha'_y + m_A \beta'_y)^2 g(x, y)|_{x=y=0}. \quad (4.47)$$

Com o auxílio do software **MAPLE**, pode-se expandir as Eqs. (4.46) e (4.47), obtendo-se as seguintes equações equivalentes, sendo cada uma separadamente autoconsistente, em termos de potências de  $m_A$  e  $m_B$ , temos

$$m_{A(B)} = \sum_{p=0}^1 \sum_{q=0}^2 \sum_{r=0}^1 \sum_{s=0}^2 C_{p,q,r,s} m_{A(B)}^p m_{B(A)}^q m_{A(B)}^r m_{B(A)}^s, \quad (4.48)$$

com

$$C_{p,q,r,s} = \binom{1}{p=0} \binom{2}{q=0} \binom{1}{r=0} \binom{2}{s=0} \alpha_x^{1-p} \beta_x^p \alpha_y^{2-q} \beta_y^q \alpha_x'^{1-r} \beta_x'^r \times$$

$\alpha_y'^{2-s} \beta_y'^s g(x, y)|_{x,y=0}$ , onde os coeficientes  $C_{p,q,r,s}$  são obtidos a partir da utilização da relação dada pela Eq.(4.41).

Definindo duas novas magnetizações, as quais são: a magnetização total  $m = \frac{1}{2}(m_A + m_B)$  e a magnetização residual (*staggered*)  $m_s = \frac{1}{2}(m_A - m_B)$ , tem-se uma equação para os termos ímpares de  $m_s$ ,

$$m_s = A_1(m)m_s + A_3(m)m_s^3 + A_5(m)m_s^5, \quad (4.49)$$

e outra equação para  $m$ , relacionada com os termos pares de  $m_s$ , isto é,

$$m = A_0(m) + A_2(m)m_s^2 + A_4(m)m_s^4 + A_6(m)m_s^6, \quad (4.50)$$

sendo os coeficientes  $A_i(m) = A_i(m, T, \frac{h}{J_1}, \alpha)$ ,  $i = 1, 2, 3, 4, 5, 6$ , sendo  $\alpha = \frac{J_2}{J_1}$  o parâmetro de competição.

No desenvolvimento do cálculo dos coeficientes das expressões das equações de estado  $m$ , Eq.(4.49), e  $m_s$ , Eq.(4.50), também foi utilizado o software **MAPLE**, de modo análogo ao cálculo realizado para  $N = 1$  spin, obtido na seção anterior, e os coeficientes, por serem muito extensos não foram exibidos, para que não ocupasse muito espaço. A fim de evoluir as expressões das magnetizações  $m$  e  $m_s$ , em que ambas são equações de estado separadamente, e autoconsistentes (equações transcendentais), em seguida, as equações de  $m$  e  $m_s$  foram transportadas e implementadas no código **FORTTRAN**, a fim de serem resolvidas numericamente.

Figura 29 – Diagrama de fase  $\frac{h}{J_1}$  versus  $\alpha$  para  $N = 2$  spins

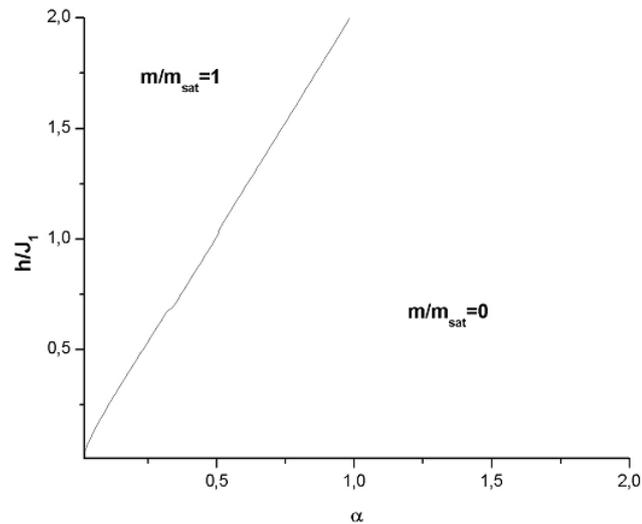
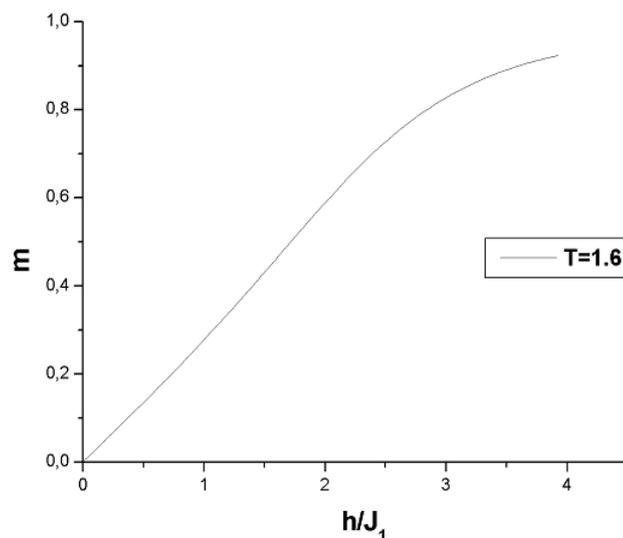
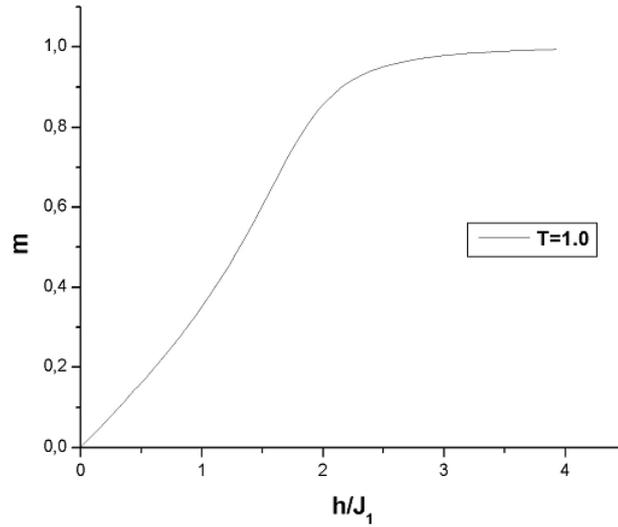
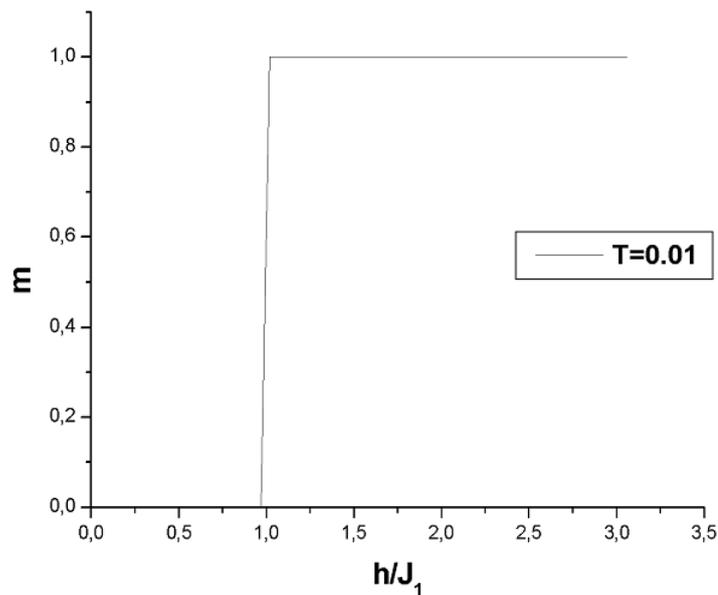


Figura 30 – Gráfico  $m$  versus  $\frac{h}{J_1}$  para  $T = 1.6$ .



Na figura (29) podemos observar o resultado esperado da não ocorrência de transição de fase, conforme observado na literatura (Can, 1970), também observado para o caso de aglomerado de  $N = 1$  spin (seção 4.1), pois, de acordo com o aumento do tamanho do aglomerado

Figura 31 – Representação do Gráfico  $m$  versus  $\frac{h}{J_1}$  para  $T = 1.0$ .Figura 32 – Formação de platô em  $m = 0$  e  $m = 1$  no modelo de Ising para  $N = 2$  spins com  $m$  versus  $\frac{h}{J_1}$  em uma rede linear unidimensional.

de  $N = 1$  spin para o aglomerados de  $N = 2$  spins neste gráfico, comparado com o gráfico da figura (25). Isto é, o modelo em estudo naquela seção (4.1)( $N = 1$ ), agora aplicado em aglomerados de  $N = 2$  spins, dado na Eq. (4.28), com campo magnético externo não apresenta transição de fase. Este fato é observado na figura (29), levando a ocorrência dos resultados encontrados para a magnetização total com valores  $m = 0$  e  $m = 1$ . Nota-se que no caso  $N = 2$ , temos dois sítios centrais que é uma forma mais adequada de tratar distintamente as sub-redes representadas pelas sub-redes  $m_A$  e  $m_B$ , e conseqüentemente, refletindo na magnetização total  $m$ , de acordo com a Eq.(4.50).

Figura 33 – Magnetização total *versus*  $\frac{h}{J_1}$ , exibindo a formação de platô em  $m = 0$  e  $m = 1$  no modelo de Ising  $J_1 - J_2$  numa rede linear unidimensional, para um aglomerado de tamanho  $N = 2$  spins.

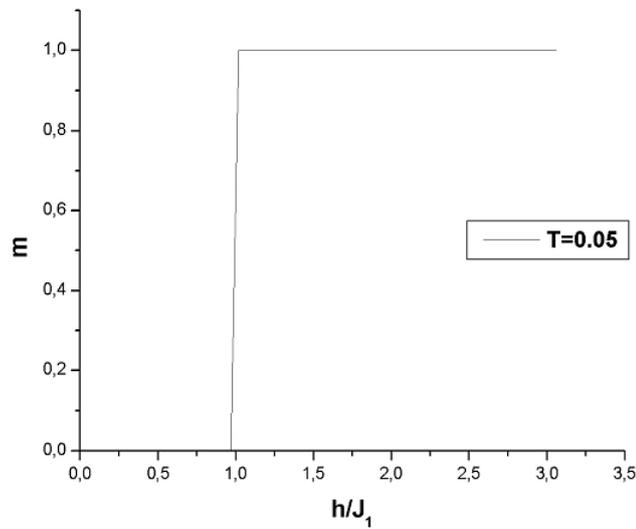
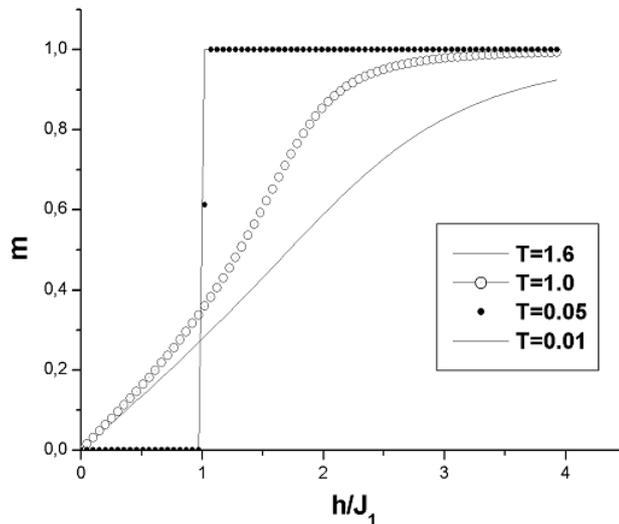


Figura 34 – Magnetização total para  $m$  *versus*  $\frac{h}{J_1}$ , para a formação dos platôes para  $m = 0$  e  $m = 1$  com variação de  $T$ .



Na figura (30), mostra-se o início de formação de platô no modelo de Ising unidimensional competitivo, com aglomerados de  $N = 2$  spins, em rede linear, em que diminuindo a temperatura a partir de  $T = 1.6$  até  $T = 1$  na figura (31), e para  $T = 0.01$  na figura (32) observamos a formação de platôes  $m = 0$  e  $m = 1$  em concordância com a figura (29). Por outro lado, este fato é notado, a medida que o valor do campo magnético é considerado  $h < 2$ , correspondendo a valores de baixo campo, temos a magnetização  $m = 0$ , e para o valor do campo magnético  $h > 1$ , relacionado ao aumento do campo, temos a magnetização  $m = 1$ .

Na figura (32), em que a temperatura é baixa à  $T = 0.01$ , observamos a formação de platô definido por  $m = 0$  e  $m = 1$ . No comportamento da magnetização total  $m$  como função do

campo magnético (figura (32)), também observamos o campo crítico  $h_c/J_1 \simeq 1$ , conforme visto na figura (27) para o caso de aglomerado e  $N = 1$  spin. Para o platô  $m = 0$  é observado o campo magnético crítico  $h_c/J_1$ , e no valor inicial do campo magnético de saturação,  $h_s/J_1 > 1$  para início (formação) da magnetização do platô  $m = 1$  (diferente de zero), em que o valor da magnetização deste platô é correspondente a magnetização de saturação.

Nota-se com ênfase neste modelo para  $N = 2$  spins, que não há transição de fase, uma vez que tal fato é observado nas figuras (29), (32), (33) e (34) para  $m = 0$  e  $m = 1$ .

Na figura (34), mostra-se a formação de platôes no modelo de Ising unidimensional competitivo, com aglomerados de  $N = 2$  spins, em rede linear, em que é mais evidente, quando utilizamos temperatura baixa no intervalo de 0.01 até 0.05. Observa-se no gráfico desta figura que não há mudança na formação dos platôes exibidos, sendo os gráficos encontrados no mesmo intervalo de  $\alpha$  para formação dos platôes  $m = 0$  e  $m = 1$ . Isto é, à medida que a temperatura vai sendo elevada, para um valor fixo de  $\alpha$ , observa-se a deformação do platô até a sua completa destruição, ou seja, acima do valor da temperatura  $T = 0.05$  os platôes na magnetização deixam de existirem.

Podemos notar que o modelo aplicado em aglomerados de tamanho  $N = 2$  spins, com o aumento do tamanho dos aglomerados, este fato contribui também para aumento da competição de interações entre spins e para um tratamento mais adequado de abordar a distinção das sub-redes representadas pelas sub-redes  $m_A$  e  $m_B$ , e conseqüentemente, refletindo em melhores resultados na magnetização total  $m$ .

## 5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Nesta dissertação os capítulos foram organizados, apresentados e desenvolvidos de forma específica, e deixamos para este capítulo final algumas considerações gerais da dissertação e propostas de trabalho. O presente trabalho teve como objetivo principal discutir a formação de platoes no modelo de Ising unidimensional com interações competitivas em aglomerados de um spin e de dois spins, através do uso da teoria do campo efetivo, utilizando a técnica do operador diferencial como recurso operacional para obter soluções do problema abordado de investigar a formação de platô.

No capítulo 2, foi feita uma revisão para a teoria do campo efetivo combinada com a técnica do operador diferencial, desenvolvida e aplicada em aglomerado de um spin no modelo de Ising- $\frac{1}{2}$ . Este método encontra relações exatas para as funções termodinâmicas, porém com a dificuldade de envolver sistemas de equações (infinitas) e acopladas, onde funções de correlações de spins de diversas ordens estão presentes. Para se obter resultados quantitativos através deste método, fez-se uso de desacoplamento de Zernike nas funções de correlações.

No capítulo 3, foi apresentado um modelo de Ising simples para um sistema interagente, com campo cristalino, e anisotropia de íon-único ( $D$ ), descrito pela intensa anisotropia provocada por este campo ( $D$ ), visto que se deu a formação de platoes bem definida, em virtude do aumento da forte anisotropia. Este modelo é inteiramente exato com resultados analíticos.

No penúltimo capítulo foi aplicado a técnica do operador diferencial ao modelo de Ising unidimensional com interações competitivas antiferromagnéticas  $J_1$  e ferromagnéticas  $J_2$  em rede linear para aglomerados com  $N = 1$  spin e  $N = 2$  spins, na presença de um campo magnético externo. Foi utilizado o parâmetro  $\alpha = \frac{J_2}{J_1}$ , onde a figura (34) mostra o aparecimento de platoes  $m/m_{sat} = 0$  e  $m/m_{sat} = 1$  e campo de saturação  $\frac{h_s}{J_1} > 1$ , a magnetização de saturação é observada para o platô  $m = 1$ . Finalmente, foi encontrado a existência de platô  $m = 0$  e  $m = 1$  para o modelo estudado.

Muitos trabalhos tem sido publicados na investigação de formação de platoes. Futuras investigações poderão ser feitas, tendo por base este trabalho de dissertação, tais como:

1. Fazer a descrição do problema no hamiltoniano, explorando as interações ferromagnéticas e antiferromagnéticas, levando o problema a ser tratado com o fenômeno de frustração.
2. Reformular e investigar a influência do hamiltoniano para explorar dímeros no modelo estudado nesta dissertação, e analisar o efeito nos diagramas de fase no espaço de parâmetros do modelo, assim como, explorar o surgimento de outras fases magnéticas, de acordo com a sensibilidade do parâmetro de competição de interações  $\alpha$ .

3. Estudar o problema com outros formalismos, por exemplo, expansão em séries, para melhor exploração do comportamento crítico do sistema físico.

## REFERÊNCIAS

- ANJOS, R. A. **Estrutura de Platô na Magnetização em Modelos de Spins Frustrados**, 2012, 120p. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal de São Carlos, Centro de Ciências Exatas e Tecnologia - Programa de Pós-Graduação em Física - Convênio UFAM / UFSCar - Amazonas, Manaus, 2012.
- ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. **Solid State Physics**, Philadelphia, 1976.
- ASUMA, M; et al. **Phys. Rev. Lett.**, 73, 2626, 1994.
- BARTLETT, B. M.; NOCERA, G.D. **J.Am. Chem. Soc.**, 127, 8985, 2005.
- BAI, Z.W; CHEN, Z. F. **Modern Physics Letters B** Vol. 26, 18, 2012.
- BETHE, H. A. **Proc. Roy. Soc. London A**, 150, 552 1935.
- BONNER, J. C., et al. **Phys. Rev. B**, 27, 248, 1983.
- BUSCHOW, K. H. J.; BOER, F. R. **Physics of Magnetism and Magnetic Materials**, Van der Waals-Zeeman Instituut, Universiteit van Amsterdam, Amsterdam, The Netherlands, 2003.
- BRAGG, W. L.; WILLIAMS, E. J. **Proc. Roy. Soc. London A** 151, 540; A 152, 231, 1935.
- BRAGG, W. L.; WILLIAMS, E. J. **Proc. Roy. Soc. London A** 145, 699, 1934.
- CABRA, D.C.; HONECKER, A.; PUJOL, P. **Phys. Rev. Lett.** 79, 5126, 1997.
- CALLEN, H. B. **Phys. Lett.** 4, 161, 1963.
- CAN,J.S. **Phys.** 48, 1724, 1970.
- CHEN, X. Y. et al. **Magn. Mater.** 262, 258, 2003.
- CHAKRABORTY, K. G. **Phys. Lett. A** 177, 263, 1993.
- CRAIK, D. **Magnetism-Principles and applications**, Wiley, 1995.
- DARRIET, J.; REGNAUT, P. **Solid State Comm.**, 89, 409, 1993.
- DOBRUSHIN, R. L. **Theor. Prob. Appl.** 13, 197, 1969.
- DORFMAN, Y. **Nature**, 119, 353, 1928.
- FALK, H. **Phys. Rev.** 133, 1382, 1964.

- FALK, H. A. **J. Phys.** 38, 858, 1970.
- FERREIRA, L. G.; SALINAS, S. R.; OLIVEIRA, M. J. **Phys. Stat. Sol. B** 83, 229, 1977.
- FISHMAN, R. S.; VIGNALE, G. **Phys. Rev. B** 44, 1991.
- FISHER, M. E.; NELSON, D. R. **Phys. Rev. Letters** 32, 1350, 1974.
- FROHLICH, J.; SPENCER, T. The Kosterlitz-Thouless transition in twodimensional abelian spin systems and the Coulomb gas. **Comm. Math. Phys.** 81, no. 4, 527602, 1981.
- FRANK, B.; MITRAN, O. **J. Phys. C** 10, 2641, 1977; 11, 2087, 1978.
- FRADKIN, E. **Fields Theories of Condensed Matter Systems**, Addison-Wesley, 1991.
- FRENKEL, Y. **Z. Phys.** 49, 619, 1928.
- GOMES, R.F.; MACEDO, C.A, [www.scienciaplena.org.br](http://www.scienciaplena.org.br), Magnetic Susceptibility of the One-dimensional Two Bands Hubbard Model, Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe, vol 1, número 1, 2005.
- GRIFFITHS, R. B., **Phys. Rev. B** 7, 545, 1973.
- GRIFFITHS, D.J., **Introduction to Quantum Mechanics**, Prentice-Hall, 1994.
- HADZIBABIC, Z. et al. **Nature**, 441, 1118, 2006.
- HEISENBEG, W. K. **Z. Phys.** 49, 619, 1928.
- HIDA, K. **J. Phys. Soc. Jpn.** 63, 2359, 1994.
- HONMURA, R.; KANEYOSHI, T. **Progr. Theor. Phys.** 60, 635, 1978.
- IDOGAKI, T.; URYŪ, N. **Physica A** 181, 173, 1992.
- ISING, E. **Z. Physik** 31, 253, 1925.
- JONGH, L. J.; MIEDEMA, A.R. **Experiments on simple magnetic model systems**, Taylor and Francis Ltd., London, 133 p., 1974.
- JIANG, X. W.; FISHMAN, R. S. **Phys. Rev. B** 47, 8273, 1993.
- KITTEL, C., **Introdução à Física do Estado Sólido**, 5ª edição, Rio de Janeiro, Ed. Guanabara Dois S.A., 1978.
- KOSTERLITZ, J. M. THOULESS, D. J., **J. Phys. C** 6, 1181, 1973.

- KUBO, K.; MOMOI, T. **Z. Phys. B** 103, 485, 1997.
- LANDAU, D. P.; BINDER, K. **A Guide to Monte Carlo Simulation in Statistical Physics**, Cambridge University Press, 2000.
- LANDAU, D. P.; KEEN, B. E.; SCHNEIDER, B.; WOLF, W.P. **Phys. Rev. B** 3, 2310, 1970.
- LANFORD, O. E.; RUELLE, D. **Comm. Math. Phys.**, 13, 194, 1969.
- LANGEVIN, P. **On the Theory of Brownian Motion** C. R. Acad. Sci. (Paris), 146: 530-533, 1908.
- LITAIFF, F.C. **Modelos de spins geometricamente frustrados: Transição de Fase e Estruturas de Platoes**, 2013, 160p. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal de São Carlos, Centro de Ciências Exatas e Tecnologia - Programa de Pós-Graduação em Física - Convênio UFAM / UFSCar - Amazonas, Manaus, 2013.
- LASHER, M. A.; BROEK, J.; GARTER, C. J. **Physica** 24, 1061, 1076, 1958.
- LI, M. S.; WALASEK, K.; CIEPLAK, M. **Phys. Rev. B** 56, 11715, 1997.
- LIBERO, V.L., **Revista Brasileira de Ensino de Física**, vol. 22, n.3, 2000.
- LIEB, E.H. **Phys. Rev. Lett.** 18, 1046, 1967; ibi 19, 108, 1967.
- LIEB, E.; SCHULTZ, T. D.; MATTIS, D. C. **Ann. Phys. NY**, 16, 407, 1961.
- LIU, S. H.; FISHMAN, R. S. **Phys. Rev. B** 45, 5414, 1992.
- MALTTIS, D. C. **The Theory of Magnetism I**, Springer-Verlag, New York, 1985.
- MATSUBARA, T.; MATSUDA, H. **Progr. Theor. Phys.** 16, 416, 1956.
- MATSUDAIRA, N. **J. Phys. Soc. Jpn.** 35, 1493, 1973.
- MERMIM, N.; WAGNER, H. **Phys. Rev. Lett.**, v. 17, p. 1133, 1966.
- NEEL, L. **Ann. Physique** 18, 5, 1932.
- OLIVEIRA, M.J. **Termodinâmica - Editora Livraria da Física**, São Paulo, março de 2005.
- ONSAGER, L. **Phys. Rev.** 65, 117, 1944.
- PARISI, G. **Statistical Field Theory**, Addison-Wesley, 1988.
- PATHRIA, R.K. **Statistical Mechanics**, Second Edition, Department of Physics, University of Waterloo, Waterloo, Ontario, Canada, 1996.

- PACOBAYHA, J.T.M. **Modelos Magnéticos com Frustração e Diluição**, 2012, 196p. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal de São Carlos, Centro de Ciências Exatas e Tecnologia - Programa de Pós-Graduação em Física - Convênio UFAM / UFSCar - Amazonas, Manaus, 2006.
- PEIERLS, R. E. **Proc. Camb.Phil. Soc.** 32, 471, 477, 1936.
- REITZ, J.R. **Fundamentos da Teoria Eletromagnética**, Rio de Janeiro, Ed. Campus, 1982.
- REZENDE, S.M. **Física de Materiais e Dispositivos Eletrônicos**, Ed.UFPE, 1996, 530p.
- RIBEIRO, G. A. P. **As Propriedades Magnéticas da Matéria: um Primeiro Contato** Revista Brasileira de Ensino de Física, vol. 22, no. 3, 2000.
- RUFO, S. A. **Nova Abordagem de Grupo de Renormalização no Espaço Real Aplicada em Modelos de Spins**, 2011, 94p. Dissertação (Mestrado em Física - Universidade Federal do Amazonas, Instituto de Ciências Exatas - Programa de Pós-Graduação em Física - Amazonas, Manaus, 2011.
- RUNEHR, E. E.; FIGUEIREDO, W. **Phys. Lett. A** 244, 165 1998.
- SAMUEL, N.O.R, **Propriedades Magnéticas de Sistemas Unidimensionais**, 2003, 87p. Dissertação de Mestrado em Física, Universidade Federal de Sergipe - Cidade Universitária Prof. José Aloísio de Campos - São Cristóvão - SE - Brasil, 2003.
- SÁ BARRETO, F. C.; FITTIPALDI, I. P. **Physica A**, 129, 360, 1985.
- SCOTT, G. G. **Phys. Rev.**, 82, 542, 1951.
- SALINAS, R. A. **Introdução a Física Estatística**, 2ed., SP, 2005.
- SAKURAI, J.J. **Modern Quantum Mechanics**, Revised Edition. Springer-Verlag, 1994.
- SOUSA, J. R.; FITTIPALDI, I. P. **J. Appl. Phys.** 75, 5835 1994.
- SMART, J. S. **Efective Field Theories of Magnetism**, Saunders, Philadelphia, 1966.
- SUZUKI, N. **Phys. Lett.** 19, 267, 1965, 1973.
- SUZUKI, N. **Coherent Anomaly Method: Mean Field, Fluctuation and Systematics**, Word Scientific, 1995.
- SUZUKI, M.; KATORI, M.J. **Phys. Soc. Jpn.** 55, 1, 1986.
- STRIEB, B.; Callen, H. B. **Phys. Rev.** 130, 1798, 1963.

THE UNIVERSITY OF NORTH CAROLINA. Disponível em [www.ibiblio.org/e-notes/Perc/xy.htm](http://www.ibiblio.org/e-notes/Perc/xy.htm), acesso em: 16 jul 2013.

WEISS, P. J. *de Phys.* 6, 661, 1907.

WEAST, R.C. **Handbook of Chemistry and Physics**, 61st ed. Boca Raton,FL: CRC Press, 1981.

WILLS, A.S. et al. **Phys. Rev. B**, 61, 6156, 2000.

ZERNIKE, F. **Physica** 1, 565, 1940.