


UFRR

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

ERONILDO CORNÉLIO DE CASTRO

# NOVA ABORDAGEM DA TEORIA DE CAMPO EFETIVO APLICADA AO MODELO DE ISING COM INTERAÇÕES COMPETITIVAS

Boa Vista - RR
2013

ERONILDO CORNÉLIO DE CASTRO

# NOVA ABORDAGEM DA TEORIA DE CAMPO EFETIVO APLICADA AO MODELO DE ISING COM INTERAÇÕES COMPETITIVAS

Dissertação apresentada como pré-requisito para a conclusão do Curso de Mestrado em Física pelo Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Roraima.
Orientadora: Dra. Josefa T. de M. Pacobahyba

Boa Vista - RR
2013

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

C355n Castro, Eronildo Cornélio de.
Nova abordagem da teoria de campo efetivo aplicada ao modelo de ising com interações competitivas / Eronildo Cornélio de Castro . – Boa Vista, 2013.
75 f.: il.
Orientador: Dra. Josefa T. de M. Pacobahyba.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal de Roraima, Programa de Pós-Graduação em Física, Área de Concentração física da matéria condensada e mecânica estatística.

1 – Criticalidade. 2 –Transição de fase. 3 – Supercondutores de altas temperaturas. I - Título. II – Pacobahyba, Josefa T. de M. (orientadora).

CDU – 530.1

ERONILDO CORNÉLIO DE CASTRO

**NOVA ABORDAGEM DA TEORIA DE CAMPO EFETIVO APLICADA AO MODELO DE ISING COM INTERAÇÕES COMPETITIVAS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Roraima como pré-requisito para a obtenção do título de Mestre em Física. Área de concentração: Física da Matéria Condensada e Mecânica Estatística. Defendida em 29 de julho de 2013 e avaliada pela seguinte banca examinadora:

---

Prof. Dra. Josefa Teixeira de Mendonça Pacobhayba
(Presidente) Departamento de Física-UFRR

---

Prof. Dr. Luiz Henrique Pacobahyba
(Membro) - UFRR

---

Prof. Dr. Ijanílio Gabriel de Araújo
(Membro) Departamento de Física - UFRR

Essa dissertação será dedicada em memória de
meu pai João Clímaco de Castro, à saúde da minha mãe
Teresinha Maria de Jesus Castro e à minha esposa Rose Maiara da
Rocha Costa pela compreensão, carinho e apoio nesses dois anos de trabalho.

## AGRADECIMENTO

Agradeço à natureza criadora do universo, da vida e da inteligência transformadora, por me possibilitar saúde e inspiração durante a realização desse trabalho.

Em memória de meu pai João Clímaco de Castro e a minha mãe Terezinha Maria de Jesus Castro, pela sabedoria ao conduzir minha formação educacional baseada na defesa do caráter e da ética, cuja eficiência, tem me proporcionado crescimento pessoal e profissional.

À todos meus familiares, com ênfase à minha irmã Rita de Cássia Castro, a meu sobrinho Luiz Arthur de Castro e excepcionalmente à minha querida esposa Rose Maiara da Rocha Costa pela compreensão, incentivo e carinho nesses dois anos de intenso trabalho científico.

Aos professores do departamento de Física, em particular, àqueles envolvidos diretamente no Programa de Pós-Graduação em Física da UFRR, Dr. José Carlos, Dr. Roberto Câmera, Dr. Ijanílio Araújo, Dr. Cássio Sérgio e ao Dr. Eliel Eleutério. Merecem destaque nesses agredecimentos os professores MsC. Renato Sá do Departamento de Física da UFRR, pela contribuição gráfica na confecção das figuras ilustrativas, o professor Dr. Linderval do Departamento de Matemática da UFRR, pela contribuição na formatação do texto em Latex e, specialmente, a professora Dra. Josefa Pacobahyba pela dedicação e compromisso na orientação desta pesquisa.

Aos meus colegas de trabalho Jucilene Oliveira, Melanie Turquete, Rochele Gomes, Emerson Lopes, Luiz Silveira e a meu amigo Kaylens Lee pela grande contribuição nas horas de dúvidas e manuseio das ferramentas computacionais.

À Coordenação do Programa de Pós-Graduação em Física pelo pronto atendimento.

À Universidade Federal de Roraima pelo apoio logístico oferecido.

À CAPES pela ajuda financeira.

## RESUMO

A pesquisa dos compostos supercondutores de altas temperaturas formados por planos de $CuO_2$, tem motivado o estudo teórico na proposição de um modelo capaz de descrever suas características. Em particular, esses compostos apresentam em comum um ordenamento antiferromagnético, que para pequena dopagem, a temperatura de Néel é reduzida drasticamente a zero quando uma concentração crítica $p_c$ é atingida. Neste trabalho, utilizou-se o modelo de Ising antiferromagnético, aleatoriamente decorado com spin $\frac{1}{2}$ e interações competitivas para descrever propriedades de estruuras formadas por planos de $CuO_2$. Este modelo consiste de planos, nos quais os spins nodais interagem antiferromagneticamente $J_1$ com seus vizinhos mais próximos (interações $Cu - Cu$) e ferromagneticamente $J_F$ com os spins decoradores (interações $Cu - O$), que são distribuídos aleatoriamente (*quenched*) sobre o plano. Usou-se a teoria de campo efetivo baseada na técnica do operador diferencial para estudar a transição de fase em um aglomerado formado por dois sítios em uma rede cúbica. O sistema foi analisado para as topologias quase-bidimensional e tridimensional com aplicação de uma transformação do tipo decoração-iteração sob a perspectiva da metodologia de desacoplamento de Zernike, usualmente utilizada na mecânica estatística, onde pode-se analisar o diagrama de fase e o comportamento da magnetização. Posteriormente, aplicou-se ao modelo uma nova abordagem metodológica de desacoplamento que associa uma função de correlação entre os spins dos sítios centrais, onde analisou-se o diagrama de fase e discutiu-se a variação da concentração crítica $p_c$ onde a temperatura de Néel tende a zero para vários valores do parâmetro de frustração $\alpha$. Para certos valores deste parâmetro observou-se um comportamento reentrante em baixas temperaturas, e comparou-se o resultado entre as duas metodologias usadas.



Palavras-chave: Criticalidade, transição de fase, supercondutores de altas temperaturas.

**ABSTRACT**

The research of high temperature superconducting compounds formed by plans $CuO_2$, has motivated the theoretical study in proposing a model able to describe their characteristics. In particular, these compounds have a common antiferromagnetic ordering, that for small doping, the Néel temperature is drastically reduced to zero when a critical concentration is reached $p_c$. In this work, was used the randomly antiferromagnetic Ising model decorated with spin $dfrac12$ and competitive interactions to describe properties $CuO_2$. This model consists of plans, in which the nodal spins interact antiferromagnetically $J_1$ with its nearest neighbors ($Cu - Cu$ interactions) and ferromagneticamente $J_F$ with the spins decorators ($Cu - Ointeractions$) that are randomly distributed ( textit quenched) over a three-dimensional network. It used the effective field theory based on operator technique for studying the differential phase transition in a cluster formed by two sites in a cubic lattice. The system was analyzed for the almost-two-dimensional topologies and three-dimensional, initially, from the perspective of methodology Zernike, usually used in statistical mechanics, where you can analyze the phase diagram and the behavior of the magnetization. posteriorly, was applied a new methodological approach decoupling the model, which was analyzed only the phase diagram. Discussed the variation of the critical concentration $p_c$ where the Néel temperature tends to zero for various values of the frustration parameter $\alpha$. For certain values of this parameter was observed reentrant behavior at low temperatures. Was calculated dependence of magnetization subnet as a function of temperature for analyzing the behavior observed in reentrant of phase diagrams.

Key-Words: Criticality, Phase transition, High temperature superconductors.

# LISTA DE ILUSTRAÇÕES


Figura 1 – Comportamento da magnetização espontânea experimental reduzida como uma função da temperatura reduzida $T = T_c$ para os materiais Níquel $(Ni)$, Ferro $(Fe)$ e Cobalto $(Co)$. As curvas contínuas são os resultados obtidos via teoria de Weiss para momento magnético total $J = \frac{1}{2}$, $J = 1$ e $J \to \infty$. . 16

Figura 2 – Representação de tipos de frustração geométrica num sistema antiferromagnético: a) rede quadrada, não há frustração; b) rede triangular, pode-se observar que o spin do vértice inferior à direita, fica frustrado pois sua ordem em relação aos seus vizinhos mais próximos é indeterminada. . . . . 21

Figura 3 – A rede Kagomé construída por uma transformação estrela-triângulos a partir da rede *honeycomb*. . . . . 22

Figura 4 – Rede quadrada original sem decoração. . . . . 23

Figura 5 – Rede quadrada decorada. . . . . 23

Figura 6 – Ditribuição de átomos em uma rede Linear, $d = 1$. . . . . 28

Figura 7 – Distribuição de uma rede quadrada, $d = 2$. . . . . 28

Figura 8 – Distribuição de átomos em uma rede cúbica, $d = 3$. . . . . 29

Figura 9 – Representação topológica de rede com um sítio central: $9 - a$ unidimensional; $9 - b$ bidimensional e $9 - c$ tridimensional. . . . . 29

Figura 10 – Representação esquemática de um sistema com $N$ partículas ($\Omega \cup \Omega'$). . . . 35

Figura 11 – Aglomerado representando um momento de dipolo central $S_a$ e seus vizinhos representados pelos dipolos ($S_1$, $S_2$, $S_3$ e $S_4$). . . . . 38

Figura 12 – Aglomerado formado por dois spins centrais ($S_a$ e $S_b$) em uma rede quadrada. 45

Figura 13 – Aglomerados com $N = 2$ spins representados em diferentes topologias: $(a)$ rede Kagomé $(z = 4, z' = 1)$, (b) quadrada ($z = 4$, $z' = 0$), (c) triangular $(z = 6, z' = 2)$ e (d) cúbica simples $(z = 6, z' = 0)$. . . . . 47

Figura 14 – Célula cúbica unitária formada por átomos de cobre e decorada com íons de oxigênio em seus planos. . . . . 52

Figura 15 – Representação esquemática de uma ligação decorada com íons de oxigênio na parte **a**. Uma transformação decoração-iteração para a exclusão do átomo de oxigênio na parte **b**. . . . . 54

Figura 16 – Análise por sítio: primeiros vizinhos dos sítios centrais $S_1$ e $S_2$, do ponto de vista dos átomos de cobre. . . . . 55

Figura 17 – Diagrama de fase no espaço $(T, p)$ para o modelo de Ising-$\frac{1}{2}$ aleatoriamente decorado com $\lambda = 10^{-5}$ para vários valores de $\alpha$. . . . . 59

Figura 18 – Diagrama de fase no espaço $(T, p)$ para o modelo de Ising aleatoriamente decorado com $\lambda = 1,0$ para diferentes valores do parâmetro de frustração $\alpha$. 59
Figura 19 – Gráfico da magnetização em função da temperatura para o modelo de Ising-$\frac{1}{2}$, quase-$2d$, para diversos valores da concentração *p* com $\alpha = 1,2$. . . . . 61
Figura 20 – Gráfico da magnetização em função da temperatura para o modelo de Ising-$\frac{1}{2}$, quase-$2d$, para diversos valores da concentração *p* com $\alpha = 1,4$. . . . . 61
Figura 21 – Gráfico da magnetização em função da temperatura para o modelo de Ising-$\frac{1}{2}$, quase-$2d$, para diversos valores da concentração $p$ com $\alpha = 1,8$. . . . . 62
Figura 22 – Gráfico da magnetização em função da temperatura para o modelo de Ising-$\frac{1}{2}$, quase-bidimensional, para diversos valores da concentração *p* com $\alpha = 2,0$. 62
Figura 23 – Gráfico da magnetização em função da temperatura para o modelo de Ising-$\frac{1}{2}$, tridimensional, para diversos valores da concentração *p* com $\alpha = 1,2$. . . 63
Figura 24 – Gráfico da magnetização em função da temperatura para o modelo de Ising-$\frac{1}{2}$, tridimensional, para diversos valores da concentração *p* com $\alpha = 1,7$. . . 63
Figura 25 – Gráfico da magnetização em função da temperatura para o modelo de Ising-$\frac{1}{2}$, tridimensional, para diversos valores da concentração *p* com $\alpha = 1,8$. . . 64
Figura 26 – Gráfico da magnetização em função da temperatura para o modelo de Ising-$\frac{1}{2}$, tridimensional, para diversos valores da concentração *p* com $\alpha = 2,0$. . . 64
Figura 27 – Rede cúbica simples representando a correlação entre pares de spins correlacionados: **a** $\langle S_4^z S_5^z \rangle$, **b** $\langle S_7^z S_8^z \rangle$, **c** $\langle S_9^z S_{10}^z \rangle$ e **d** $\langle S_{11}^z S_{12}^z \rangle$. . . . . 66
Figura 28 – Diagrama da fase ($\frac{K_B T_N}{J_1}$ *versus* $p$), para diversos valores do parâmetro de frustração $\alpha$. . . . . 71
Figura 29 – Diagrama de fase ($\frac{K_B T_N}{J_1}$ *versus* $p$), com parâmetro de frustração $\alpha = 1.8$ para as abordagens **EFT** e **NEFT**. . . . . 72
Figura 30 – Diagrama de fase ($\frac{K_B T_N}{J_1}$ *versus* $p$), com parâmetro de frustração $\alpha = 1.9$ para as abordagens **EFT** e **NEFT**. . . . . 72
Figura 31 – Diagrama de fase ($\frac{K_B T_N}{J_1}$ *versus* $p$), com parâmetro de frustração $\alpha = 2.1$ para as abordagens **EFT** e **NEFT**. . . . . 73

# LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Classificação dos materiais magnéticos por fase de acordo com a susceptibilidade. . . . . 16
Tabela 2 – Compostos supercondutores de altas temperaturas, com suas respectivas temperaturas críticas. . . . . 25
Tabela 3 – Laureados com o prêmio Nobel de Física por pesquisas realizadas no campo da supercondutividade. . . . . 26
Tabela 4 – Temperatura crítica $T_c$ obtidas a partir de uma rede quadrada com diferentes números de coordenação. . . . . 42
Tabela 5 – Valores da temperatura crítica $T_c$ para o modelo de Ising antiferromagnético de spin-$\frac{1}{2}$ obtidos através das teorias **EFT-1** e **EFT-2** em diversas topologias de rede. . . . . 48

# SUMÁRIO

**LISTA DE ILUSTRAÇÕES** . . . . . **9**

**SUMÁRIO** . . . . . **12**

**1 INTRODUÇÃO** . . . . . **13**
1.1 CONSIDERAÇÕES INICIAIS . . . . . 13
1.2 NOÇÃO DE ORDENAMENTO MAGNÉTICO . . . . . 17
1.3 SISTEMAS MAGNÉTICOS COM INTERAÇÕES COMPETITIVAS . . . . . 20
1.4 MODELO FRUSTRADO . . . . . 20
1.5 MODELO DECORADO . . . . . 22
1.6 BREVE REVISÃO HISTÓRICA ACERCA DA SUPERCONDUTIVIDADE . 23
1.7 MODELO DE ISING . . . . . 27
1.8 PROBLEMATIZAÇÃO E ORGANIZAÇÃO DA PESQUISA . . . . . 30

**2 TEORIA DE CAMPO EFETIVO** . . . . . **32**
2.1 CONSIDERAÇÕES GERAIS . . . . . 32
2.2 TÉCNICA DO OPERADOR DIFERENCIAL . . . . . 35
2.2.1 Aplicações da técnica do operador diferencial . . . . . 37
2.2.2 Outras aproximações . . . . . 42

**3 MODELO DE ISING, FRUSTRADO, ALEATORIAMENTE DECORADO COM INTERAÇÕES COMPETITIVAS** . . . . . **50**
3.1 CONSIDERAÇÕES GERAIS . . . . . 50
3.2 DESCRIÇÃO DO MODELO E DO FORMALISMO . . . . . 52
3.3 APROXIMAÇÃO DE ORDEM ZERO . . . . . 54
3.3.1 Limite de Estabilidade da Fase Antiferromagnética . . . . . 58
3.3.2 Curva da Magnetização . . . . . 60
3.4 NOVA ABORDAGEM DA TEORIA DE CAMPO EFETIVO . . . . . 63
3.4.1 Modelo de Ising aplicado à NEFT . . . . . 65
3.4.2 Limite da Estabilidade da Fase Antiferromagnética . . . . . 70
3.4.3 Análise dos resultados da . . . . . 71

**4 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS** . . . . . **74**

**REFERÊNCIAS** . . . . . **76**

# 1 INTRODUÇÃO

## 1.1 CONSIDERAÇÕES INICIAIS

Os avanços tecnológicos vivenciados na atualidade estão diretamente vinculados aos conhecimentos científicos adquiridos acerca do comportamento microscópico da matéria a partir do início do século XX. Na procura de entender a natureza desses fenômenos em escala microscópica e, consequentemente, fazer uma transposição desses conhecimentos para a escala macroscópica, é inevitável deparar-se com situações que envolvem sistemas constituídos por um número muito grande de elementos, independente do tamanho da amostra que constitui o aglomerado em estudo. Portanto, a analisar grandezas termodinâmicas como a temperatura, magnetização, sucepetibilidade nesses sistemas, é necessário lançar mão de teorias e técnicas de alto nível de complexidade matemática e computacional, para que se possa desenvolvê-los e obter os resultados físicos desejados.

As pesquisas acerca do comportamento magnético da matéria que são desenvolvidas na área da física da matéria condensada, são exemplos de atividades que requerem uma inovações metodológicas de forma contínua, na perspectiva de se obter resultados satisfatórios. Nesse contexto, é que dar-se a origem da utilização da mecânica estatística no estudo das propriedades magnéticas da matéria no início do século XX. Desde então, o aprimoramento de técnicas visando maior precisão nos resultados das pesquisas sobre estes materiais, tem despertado o interesse da comunidade científica em geral, culminando no notável progresso alcançado no entendimento dos fenômenos vinculados à física da matéria condensada da atualidade. Um dos aspectos mais importantes da motivação para o conhecimento dos fenômenos magnéticos, é a possibilidade de desenvolver tecnologias que possam ser úteis à sociedade, tanto nas aplicações que visam a melhoria da qualidade de vida, quanto naquelas voltadas para a sua manutenção.

A utilização dos fenômenos magnéticos, podem ser percebidos desde aplicações extremamente simples, como os ímãs colocados em porta de geladeira, até as mais complexas, como as memórias de computadores (HD-*hard disk*) e fitas para guardar informações (músicas, fotos). Apesar da notável presença desses fenômenos, como por exemplo, a atração dos ímãs por materiais magnéticos, inicialmente, pouco se sabia sobre sua origem, cuja explicação fenomenológica, encontrava-se na dependência da formulação de uma teoria que fundamentasse satisfatoriamente todo o conhecimento científico da eletrodinâmica.

No estudo das propriedades dos materiais magnéticos deve-se considerar aspectos como o processo de fabricação e sua dimensionalidade, pois, elas dependem de fatores intrínsicos que se comportam de acordo com a forma pela qual estes materiais se apresentam. Por exemplo,

pode-se ter uma amostra na forma de sólido em três dimensões macroscópicas, ou na forma de filme fino, onde uma ou mais dimensões podem ter ordem de grandeza nonométrica. Os efeitos de baixa dimensionalidade sobre as propriedades magnéticas surgem quando as dimensões dos materiais se aproximam do parâmetro de rede.

O suporte teórico utilizado atualmente no estudo dos materiais magnéticos está fundamentado na teoria do eletromagnetismo elaborado por Michael Faraday (1791 - 1867), precursor do termo campo magnético, e da relevante contribuição de James Cleck Maxwell (1831 - 1879), responsável pela formulação matemática das observações de Faraday (OLIVEIRA, 2005 *apud* LAPA, 2009). A partir da formulação das equações de Maxwell que embasam toda eletrodinâmica, tornou-se disponível uma teoria fenomenológica capaz de explicar os fenômenos eletromagnéticos, embora, ainda não fosse levado em conta as possíveis interferências dos efeitos térmicos sobre as propriedades físicas desses materiais. Porém, com os avanços em técnicas experimentais para estudar substâncias magnéticas, verificou-se que as propriedades dos materiais ferromagnéticos se alteram[1] quando estes são submetidos a uma temperatura superior a temperatura crítica, $T_c$[2], característica para cada tipo de material.

Pierre Curie deu o primeiro passo para o estudo das propriedades magnéticas da matéria. Ele verificou, que os materiais ferromagnéticos apresentam uma magnetização espontânea abaixo de uma determinada temperatura crítica, $T_c$, característica para cada tipo de material que leva seu nome como homenagem. O estudo das propriedades termodinâmicas das substâncias, realizado por Pierre Curie, iniciou com a análise da dependência da susceptibilidade com a temperatura, para a qual, ele formulou a Lei de Curie para os materiais paramagnéticos dada por,

$$\chi = \frac{C}{T}, \tag{1.1}$$

onde $\chi$ é a susceptibilidade e $T$ é a temperatura. No entanto, ela só foi explicada teoricamente por Langevin[3] utilizando modelos clássicos e a estatística de Maxwell-Boltzmann. Ele mostrou que acima de uma temperatura crítica (temperatura de Curie) os ferromagnetos perdiam a capacidade de atrair metais transformando-se, portanto, em materiais paramagnéticos caracterizados pela ausência de tais propriedades.

De acordo com Alzira (ALZIRA, 2004), nas primeiras décadas do século $XX$ essa importante característica dos ferromagnetos pôde ser melhor investigada com a aplicação da mecânica estatística ao estudo dos materiais que a apresentam. Um dos grandes destaques nesse estudo

[1] A magnetização dos materiais ferromagnéticos decrescem com o aumento da temperatura, anulando-se em uma temperatura crítica $T_c$.

[2] Essa temperatura foi descoberta por Pierre Curie. Ela é a temperatura na qual um material ferromagnético perde a sua propriedade de magnetizar-se com aplicação de um campo magnético, tornando-se paramagnético. Porém, esse efeito é reversível com a diminuição da agitação térmica.

[3] Langevin formulou uma equação diferencial usada para compreender processos de natureza estocástica, sendo originalmente usada para o estudo do movimento Browniano, que funcionou como um protótipo para outros sistemas estatísticos.

foi Pierre Weiss (1865 - 1940), por ter introduzido em 1907, uma teoria aproximativa conhecida com aproximação de campo médio (*mean field aproximation* - **MFA**)[4] para explicar o aparecimento da magnetização espontânea nos materiais ferromagnéticos (OLIVEIRA, 2005). Na sua aproximação de campo médio, Weiss propôs que cada domínio magnético num material está sujeito a um campo interno (campo molecular)[5] proporcional à magnetização da amostra representado pela equação,

$$H_W = \lambda M, \tag{1.2}$$

de forma que o campo total (campo médio) sobre um dipolo seria dado por,

$$H_{mW} = H + \lambda M, \tag{1.3}$$

com o parâmetro $\lambda > 0$ (NOVAK, 2005). Deve-se observar que, como a magnetização é obtida fazendo-se uma média sobre todos os spins da amostra, ao considerar a hipótese de Pierre Weiss, serão desprezadas as flutuações especiais desse campo. A interação de cada momento magnético com seus vizinhos é substituída por um campo médio de origem molecular, cujas causas, eram desconhecidas na sua época, e só foram descobertas vinte anos mais tarde com a teoria de Heisenberg (HEISENBERG, 1928) responsável por afirmar que esse campo deve-se às interações de troca entre os momentos magnéticos do material.

Na figura 1, apresenta-se o comportamento da magnetização de certos materiais que diminue à medida que a temperatura $T$ cresce ou conforme a energia térrmica aumenta em relação a energia responsável pelo ordenamento magnético, de modo a minimizar a magnetização do sistema, e anula-se quando $T = T_c$.

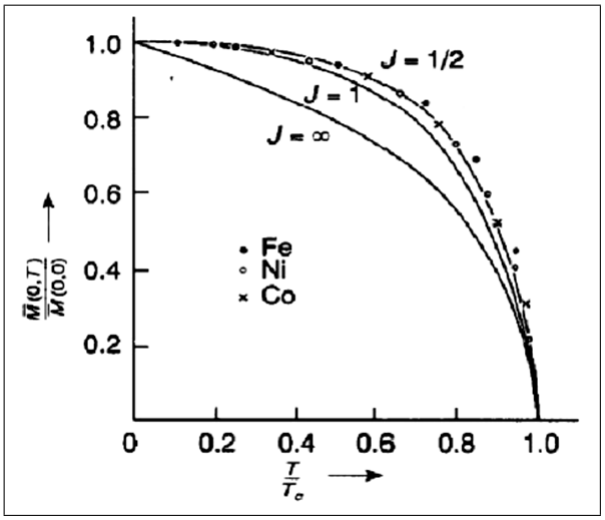
Somente com o surgimento da mecânica quântica tal energia de interação teve sua real natureza revelada. A energia que dá origem ao ordenamento magnético está, na verdade, relacionada com o momento magnético do spin dos elétrons do material, mas não através da interação dipolar. O spin é uma quantidade intrínseca do elétron e experiências mostraram que a interação entre os spins era mais intensa, comparada a interação entre íons, e capaz de explicar de forma correta o comportamento quantitativo dos materiais magnéticos com altas temperaturas críticas. A energia de interação entre os spins é chamada de energia de troca ($J$) e, ao contrário do que se pensava, possui origem eletrostática.

De acordo com o critério de dimensionalidade os materiais magnéticos são classificados em *granulares* - quase zero-dimensionais, *nanofios* (unidimensionais), filmes finos (bidimensionais

[4] MFA é a teoria que estuda problemas de muitos corpos interagentes substituindo a interação por um campo magnético apropriadamente escolhido. Desta maneira, toda a interação que um corpo sente devido aos outros é representada por um campo efetivo. Todas as flutuações são desprezadas, o que não permite que a teoria de campo médio seja mais do que uma aproximação de ordem zero.

[5] Weiss em 1907, postulou a existência do campo molecular formado por pequenas agulhas magnetizadas, arranjadas em linhas paralelas na direção do eixo fácil da magnetização.

Figura 1 – Comportamento da magnetização espontânea experimental reduzida como uma função da temperatura reduzida $T = T_c$ para os materiais Níquel $(Ni)$, Ferro $(Fe)$ e Cobalto $(Co)$. As curvas contínuas são os resultados obtidos via teoria de Weiss para momento magnético total $J = \frac{1}{2}$, $J = 1$ e $J \to \infty$.




**FONTE:** Adaptada de (WEEISS, 1907).

ou quase- bidimensionais) e *volumosos* ou *massivos* (tridimensionais).

Tabela 1 – Classificação dos materiais magnéticos por fase de acordo com a susceptibilidade.

| **Fase** | $(\frac{\chi}{\mu_0})$ | **Substância** |
|---|---|---|
| Ferromagnética | $10^2 - 10^7$ | $Ni$, $Fe$, $Co$, $NiFe$, $NdFeB$ |
| Ferrimagnética | $10^1 - 10^4$ | $Fe_3O_4$ e ferrites |
| Antiferromagnética | pequeno | $MnO$, $NiO$, $FeCO_3$ |
| Paramagnética | $10^{-6} - 10^{-3}$ | $Al$, $Cr$, $Mn$, $Pt$, $Ta$, $Ti$, $W$ |
| Diamagnética | $-10^{-6} - (-10^{-3})$ | $Al$, $Au$, $C$, $H$, $Cu$, $Si$, $Zn$ |
| Supercondutora | $-1$ | $YbBa_2Cu_3O_x$ |

**Fonte:** (NETO, 2004).

Os materiais magnéticos, também podem ser classificados pela forma que respondem a um campo magnético aplicado, de acordo com a susceptibilidade $\chi = \frac{M}{H}$ ($H$ é o campo externo), criando várias fases: ferromagnética e ferrimagnética ($\chi \gg 1$), diamagnética ($\chi < 1$), paramagnética ($\chi \geqslant 1$), antiferromagnética ($\chi$ pequeno) e a fase supercondutora, como mostra a tabela 1.

A magnetização $\overrightarrow{M}$ é um efeito macroscópico, porém, de origem microscópica na matéria. Esta grandeza corresponde a soma vetorial dos constituintes microscópicos que são os momentos de dipolos magnéticos $\overrightarrow{\mu}$ associados a cada íon da rede, que foi compreendido fisicamente apenas após o advento da mecânica quântica (REITZ *et. al.*). O efeito da temperatura sobre os materiais ferromagnéticos é destruir essa magnetização e quando atingida a temperatura de

Curie $T_c$, dizemos que o material sofre uma transição de uma fase ferromagnética para uma fase paramagnética. Uma outra característica que os ferromagnetos apresentam é a divergência na grandeza susceptibilidade magnética em $T = T_c$.

A exploração microscópica das propriedades ferromagnéticas tornou-se possível com a formulação da mecânica quântica aliada ao desenvolvimento da mecânica estatística no início do século passado (séc. XX). Esse período foi marcado pelas descobertas de muitos fenômenos físicos, cujo entendimento, necessitava de uma teoria que desse o suporte necessário para seu estudo. Juntamente com o desenvolvimento da mecânica estatística a mecânica quântica possibilitou o entendimento do magnetismo moderno, e consequentemente a explicação da origem microscópica da magnetização nos ferromagnetos, que está associado aos momentos magnéticos intrínsecos dos elétrons (spin) localizados nos íons que compõem a rede cristalina do material (LAPA, 2009).

Dentre os aspectos que mostram a grande relevância do estudo dos materiais magnéticos, pode-se destacar a possibilidade de criar interface entre a física e outras ciências, por exemplo, a medicina. Medir os campos magnéticos produzidos por organismos vivos pode ser útil no entendimento de sistemas biofísicos, diagnósticos e terapias de humanos. Tais campos tem origem nas correntes que são produzidas pelas correntes de despolarização das células (cérebro, coração, nervos), de substâncias paramagnéticas (fígado), ferromagnéticas (pulmão) e marcadores magnéticos presentes no corpo. Os tecidos biológicos, em sua maioria, têm susceptibilidade magnética muito próxima à da água, ou seja, são compostos por moléculas diamagnéticas. Só alguns poucos orgãos como o fígado, o baço e o coração apresentam propriedades magnéticas devido à presença de compostos de ferritina em seus tecidos (BRUNO, 2001).

## 1.2 NOÇÃO DE ORDENAMENTO MAGNÉTICO

O estudo do magnetismo durante o século XX revelou alguns tipos de ordenamentos magnéticos de grande interesse científico, os quais puderam ser melhor compreendidos microscopicamente a partir da idéia do spin proveniente da mecânica quântica. Entre os ordenamentos mais estudados estão o ferromagnético (**F**), antiferromagnético (**AF**) e o ferrimagnético. Michael Faraday, em 1821, com base em suas experiências (GAROZZO, 1975), sugeriu que todas as substâncias respondiam a campos magnéticos aplicados, porém de formas diferentes, o que o levou a separar a matéria em duas categorias magnéticas: paramagnéticas e diamagnéticas.

Indiferente da escolha do modelo, aqui descrito, para representar o sistema magnético sua principal origem está na interação entre elétrons, ou mais exatamente, entre os spins de elétrons associada ao termo $J_{ij}$ . A forma como os spins interagem determina o comportamento magnético do material.

Se $J_{ij} > 0$, a configuração de energia mínima é a de spins alinhados paralelamente. Isso dá origem a um acoplamento ferromagnético (ex.: $MnSb$, $CrTe$, $CrO_2$, $CrBr_3$, $EuO$, $EuS$).

Num material ferromagnético, os spins estão completamente alinhados dentro de pequenas regiões conhecidas como domínios.

Se $J_{ij} < 0$, temos um material chamado antiferromagnético $(AF)$ cujo ordenamento é dado abaixo de uma dada temperatura característica, conhecida como temperatura de Néel $(TN)$. Para temperaturas altas $(T > T_N)$, os dipolos apontam em direções aleatórias destruindo assim a ordem magnética $AF$. No estado $AF$, os dipolos magnéticos na rede cristalina interagem de tal maneira a se orientarem (mínimo de energia) antiparalelamente. Os compostos antiferromagnéticos mais simples são os fluoretos $FeF2[T_N = 90K]$ e $MnF2[T_N = 75K]$ que apresentam uma estrutura cristalina de corpo centrado, e os compostos com $F3 : KMnF_3[T_N = 95K]$, $KNiF_3[T_N = 275K]$ e $RbMnF_3[T_N = 82K]$ com estrutura de peroskita numa rede cúbica simples.

A estrutura cristalina desses materiais é constituída por uma rede magnética que se divide em apenas duas subredes equivalentes ($A$ e $B$) e interpenetrantes. Na ausência de campo externo temos $m_B = -m_A$ ($m_A$ e $m_B$ são as magnetizações das subredes $A - up$ e $B - down$, respectivamente).

Muitos pesquisadores investigaram as propriedades magnéticas da matéria, antes mesmo de que uma teoria adequada tivesse sido desenvolvida. Essencialmente quântico, o magnetismo em materiais se deve muito ao spin. Para caracterizar o ordenamento magnético dos materiais é necessário atribuir-lhes algumas grandezas. Microscopicamente os cristais são formados por vários elétrons resultando no spin total[6] os quais são propriedades que podem assumir valores inteiros ou semi-inteiros, segundo as regras de Hund, e portanto, em função deles, define-se nos cristais, grandezas macroscópicas que os caracterizam mediante esse efeito coletivo dos momentos magnéticos. A magnetização na matéria é medida através dos momentos de dipolo ($\overrightarrow{\mu} = -g\mu_B \overrightarrow{J}$, onde $\overrightarrow{J} = \overrightarrow{L} + \overrightarrow{S}$[7] que os caracterizam, ou seja, a soma dos momentos de dipolo por unidade de volume caracteriza a magnetização, definida por:

$$\overrightarrow{M} = \frac{1}{V} \left\langle \sum_i \overrightarrow{\mu_i} \right\rangle, \tag{1.4}$$

onde $\langle ... \rangle$ representa a média térmica, que é disposição desses momentos magnéticos em um material que origina os diferentes tipos de magnetismos encontrados na natureza. Pela importância em nosso trabalho, pode-se destacar o ferromagnetismo ($F$), o antiferromagnetismo ($AF$) e o paramagnetismo ($P$), que apresentam-se em diversos tipos de materiais.

Os materiais magnéticos apresentam em geral uma determinada concentração de defeitos, que podem ser originados pela presença de impurezas, ou devido a falhas na rede cristalina, ca-

[6] O spin total corresponde a soma do spin com o momento angular.

[7] Sendo $g$ o fator de Landé, cuja representação matemática é: $g = \frac{1+J(J+1)+S(S+1)-L(L+1)}{2J(J+1)}$; $\mu_B$ é o magneton de Bohr: $\mu_B = \frac{e\hbar}{m} = 9,27x10^{-4}Am^2$; $\overrightarrow{J}$ é o momento magnético total, $\overrightarrow{L}$ é o momento angular e $\overrightarrow{S}$ é o momento intrínseco do spin.

racterizada pela presença do oxigênio. Esses tipos de impurezas ou imperfeições presentes nos sólidos reais, fazendo com que eles não apresentem a propriedade de invariância translacional. Esses defeitos podem ser pontuais, lineares ou de superfícies, dependendo se as regiões imperfeitas são limitadas na escala atômica em uma, duas ou três dimensões. Impurezas químicas, sítios vazios e átomos extras situados de forma regular na rede, constituem as principais impurezas pontuais.

Vários sólidos, encontrados na natureza, ou sintetizados em laboratório, sempre apresentam um certo grau de impureza ou imperfeições quando comparados com uma estrutura cristalina perfeita, ou seja, apresentam desordem na rede cristalina.

Nos sólidos, a desordem pode ser classificada em:

(*i*) **Desordem substitucional** - Quando numa estrutura cristalina perfeita átomos do tipo $X$ são substituídos por átomos do tipo $Y$ de maneira completamente aleatório sem alterar a estrutura da rede.

Neste tipo de desordem, átomos do elemento $A$ num cristal perfeito é substituído por um outro do tipo $B$, na hipótese de não haver nenhum distúrbio na rede cristalina, formando uma liga do tipo $A_pB_{1-p}$ (onde $p$ é a concentração de átomo $A$). Este fenômeno, o qual ocorre para muitos elementos diferentes em metais, semicondutores e cristais iônicos é de grande importância na metalurgia e em outros campos da ciência dos materiais. A mais simples suposição que se pode fazer quanto a distribuição dos átomos do tipo $B$ é que ela seja aleatória nos sítios da rede cristalina. No entanto, tal suposição da independência estatística da ocupação dos sítios é não realística, por causa dos termos de interação na energia coesiva, isto é, a energia livre do sistema depende da distribuição dos átomos do tipo $B$ em relação aos átomos do tipo $A$ e vice-versa. A impureza substitucional pode tambémm ser um ponto de defeito da rede, tal como uma vacância. Embora fisicamente não é possível colocar uma alta concentração de vacâncias ao acaso num sólido cristalino, tem-se usado isto como um modelo rudimentar de uma fase fluida.

(*ii*) **Desordem especial** - Quando o arranjo atômico ou molecular não é proveniente de uma rede ordenada, ocorrendo portanto, em sólidos amorfos.

Neste caso, o arranjo atômico não é uma rede ordenada, no entanto algumas propriedades do material, tais como a distribuição da carga em cada sítios, satisfazem a relação $\overrightarrow{F}(\overrightarrow{r} + \overrightarrow{R}_i) = \overrightarrow{F}(\overrightarrow{r})$ , onde $\overrightarrow{R}_i$ refere-se à posição do núcleo do átomo $i$ no espaço real.

(*iii*) **Desordem contínua** - Quando o sistema apresenta uma concentração completamente aleatória de potenciais atômicos.

A presença desses defeitos exercem forte influência sobre as propriedades magnéticas do sistema. Dessa forma, em qualquer um dos casos, é necessário analisar a resposta do sistema

decorrente da presença das impurezas.

## 1.3 SISTEMAS MAGNÉTICOS COM INTERAÇÕES COMPETITIVAS

A descoberta experimental[8] de estruturas magnéticas especialmente moduladas, cujo grau de complexidade supera os casos ferromagnético e antiferromagnético deu origem aos sistemas magnéticos com interações competitivas (PACOBAHYBA, 2006). Teoricamente, a origem dessas estruturas magnéticas moduladas está na combinação de dois efeitos contrários: o primeiro é o efeito cooperativo que tende a levar o sistema magnético no regime de baixas temperaturas a assumir uma configuração simples como a ferromagnética ou a antiferromagnética, o segundo, é o efeito competitivo, que pode surgir de várias maneiras, tais como: presença simultânea de interações ferromagnéticas $(J > 0)$ e antiferromagnéticas $(J < 0)$, aleatoriedade na distribuição espacial dos momentos magnéticos e/ou distribuição aleatória de interações de intercâmbio (em intensidade e em sinal), diluição, combinação simultânea destes mecanismos, etc, pode, em determinadas circunstâncias fazer com que as configurações magnéticas simples não minimizem mais a energia do sistema, havendo a necessidade do aparecimento de estruturas moduladas, as quais podem apresentar aspectos bastante complexo.

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

## 1.4 MODELO FRUSTRADO

O efeito de frustração antecede todas as manifestações já mencionadas anteriormente. Esse efeito foi primeiramente identificado por Toulouse (TOULOUSE, 1977). A frustração pode ser entendida como o conflito entre dois ou mais tipos de interações experimentadas simultaneamente por alguns spins do sistema. Tal conflito torna impossível a satisfação simultânea de todas as interações e o sistema desenvolve fases moduladas, nem sempre comensuráveis com a rede, para minimizar a energia.

Na proposta inicial de Toulouse, a frustração é uma propriedade espacial de uma distribuição aleatória de interações ferromagnéticas e antiferromagnéticas. Esse conceito de frustração foi mais tarde generalizado por Anderson (ANDERSON, 1979) para levar em conta a possibilidade de variação aleatória de intensidade, alcance e sinal das interações e natureza dos spins. Como um sistema frustrado não é capaz de atingir uma configuração que satisfaça inteiramente os seus vínculos, desenvolve uma multiplicidade de estados igualmente insatisfatórios. Por isso um sis-

[8] A descoberta das extruturas moduladas deram-se principalmente pelo espalhamento de nêutrons.

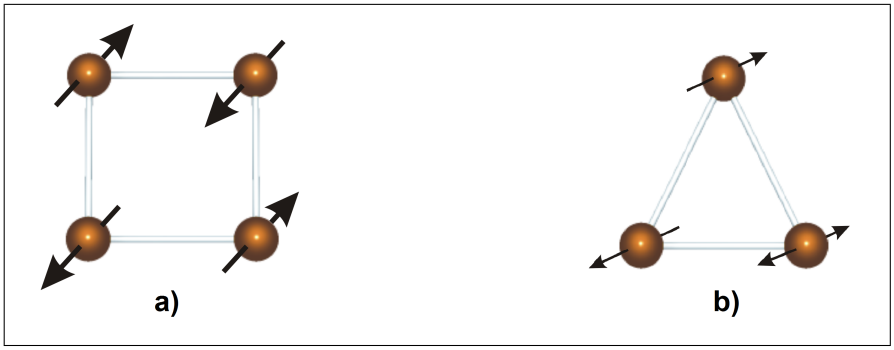
tema frustrado apresenta metaestabilidade, com efeitos de histerese e relaxação que dependem das características térmicas e magnéticas da amostra.

O efeito de frustração[9] é responsável pelo enorme interesse desenvolvido nos últimos anos pelos vidros de spin, sistemas que têm suas propriedades fundamentalmente explicadas pelos efeitos de competição e frustração, outros tipos de sistemas e modelos com interações competitivas têm despertado as atenções dos pesquisadores, principalmente pelos seus aspectos controversos.

A maior parte dos materiais magnéticos frustrados são conhecidos como magnetos geometricamente frustrados[10]. Nestes sistemas, a frustração surge do efeito de competição de interações de troca equivalentes e, o caso mais simples exibindo forte frustração é o antiferromagneto numa rede triangular $(z = 6)$. Existe ainda sistemas em que a competição de interações são equivalentes mas sua topologia e magnitude podem ser ajustadas de tal forma que as flutuações quânticas destruam a ordem de longo alcance, similar ao que ocorre nos magnetos geometricamente frustrados. Exemplos de sistemas que podem ser ajustados, mas balanceados pela competição de interações e, ainda assim, preservar as flutuações quânticas são os sistemas de spin-$\frac{1}{2}$ numa rede quadrada ferromagética ou antiferromagnética, onde a competição de segundos vizinhos antiferromagnética ao longo das diagonais induz forte frustração no sistema.

A definição de frustração geométrica é facilmente compreendida, analisando a figura 2 apresentada a seguir que ilustram redes de spin de Ising.

Figura 2 – Representação de tipos de frustração geométrica num sistema antiferromagnético: a) rede quadrada, não há frustração; b) rede triangular, pode-se observar que o spin do vértice inferior à direita, fica frustrado pois sua ordem em relação aos seus vizinhos mais próximos é indeterminada.




**FONTE:** Adaptadas de (MAIA, 2010).

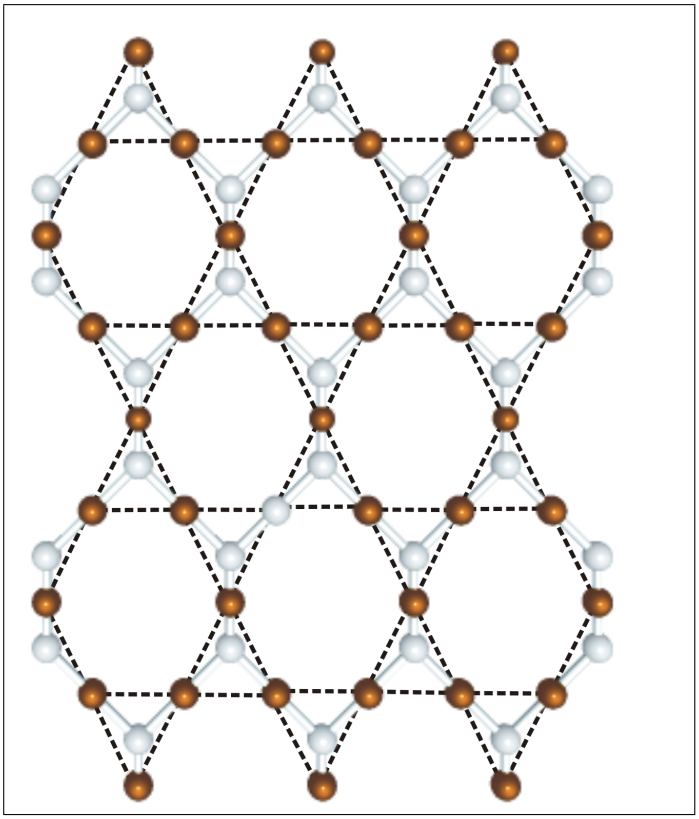
[9] A frustração é uma propriedade espacial de uma distribuição aleatória de interações ferromagnéticas e antiferromagnéticas.

[10] Existe ainda outros sistemas geometricamente frustrados como, por exemplo, o antiferromagnético numa rede kagomé e na rede triangular empilhada.

## 1.5 MODELO DECORADO

De acordo com Tavares (TAVARES, 2006), os modelos decorados de spins foram inicialmente introduzidos por Syozi (SYOZI, 1972) para determinar a temperatura de transição da rede Kagomé a partir do valor correspondente de $T_c$ para rede *honeycomb* como segue na figura 3. Uma relação entre as funções de partição das duas redes era obtida quando o traço parcial sobre os spins de vértices da rede *honeycomb* decorada era tomado, gerando uma interação efetiva entre os spins decoradores, o que transformava a rede *honeycomb* numa rede kagomé com interações efetivas.

Figura 3 – A rede Kagomé construída por uma transformação estrela-triângulos a partir da rede *honeycomb*.



**FONTE:** Adaptada de MAIA (2010).

Pode-se obter um modelo decorado a partir de uma rede original qualquer. A figura 4, representa a esquematização de uma rede quadrada constituída por um único tipo de átomo.

Para deocorar a rede original representada pela figura 4, basta introduzir novos sítios decoradores, de forma que eles ocupem os espaços das ligações efetivas entre os átomos originários da rede, dessa forma, obtém-se a rede decorada esquematizada pela figura 5 apresentada a seguir.

Em 1954 o método decorado foi extendido para incluir os efeitos de um campo magnético externo, onde obteve-se uma expressão para a magnetização espontânea da rede Kagomé a partir da expressão equivalente para a rede *honeycomb* (NAYA, 1954). Assim, os modelos

Figura 4 – Rede quadrada original sem decoração.

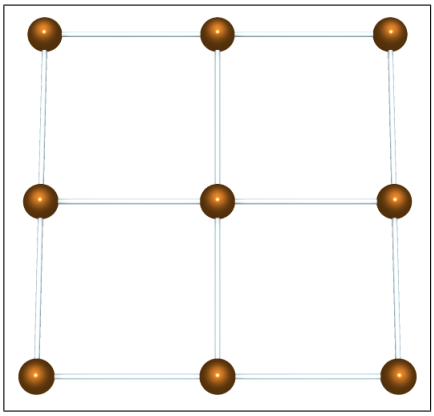
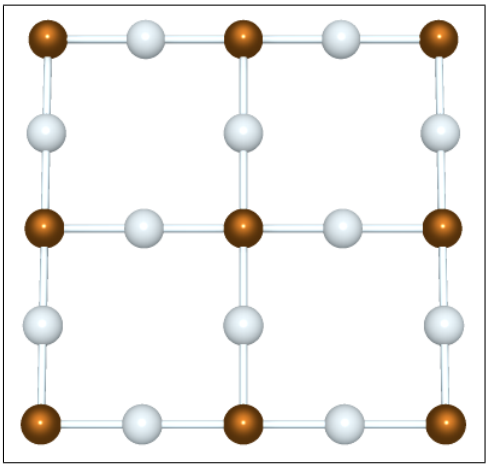


Figura 5 – Rede quadrada decorada.



decorados foram então largamente utilizados para estudar vários tipos de sistemas magnéticos, incluindo-se sistemas com interações competitivas.

Em 1959, Fisher generalizou o que ele chamou de transformação de decoração-iteração, para o caso em que o elemento decorador é um sistema físico qualquer, com alguns graus de liberdade internos, e aplicou o método ao estudo de um sistema antiferromagnético para o qual a magnetização pode ser calculada exatamente, mesmo em presença de um campo magnético finito (FISHER, 1959).

## 1.6 BREVE REVISÃO HISTÓRICA ACERCA DA SUPERCONDUTIVIDADE

A busca pela compreensão dos mecanismos que levam alguns materiais a se comportarem como supercondutores vem intrigando a comunidade científica há mais de um século. Essa inquietação científica, tem motivado estudos desses compostos, cuja principal característica, é a redução da resistência à corrente elétrica quando estão abaixo de uma certa temperatura. As investigações deste fenômeno tiveram início com o trabalho de Heike Kamerlingh-Onnes em

1911 (BENÍCIO, 2001), através do qual, ele descobriu que o mercúrio[11] ($Hg$) podia transportar corrente elétrica sem nenhuma resistência aparente. Além disso, esta corrente podia persistir por um tempo indefinido. Esse estranho fenômeno recebeu o nome de supercondutividade. A partir de então, o termo supercondutores vem sendo usado para denotar todos os materiais que, abaixo de uma certa temperatura crítica $T_c$, perdem a resistência à passagem de corrente elétrica, além de apresentar outras propriedades.

Um fato pioneiro que deve ser citado nesta breve revisão bibliográfica é a liquefação do hélio, obtida pela primeira vez em 1908 por Kamerlingh-Onnes. Essa descoberta possibilitou a realização de diversas pesquisas da chamada física de baixas temperaturas. Três anos mais tarde, em 1911, Kamerlingh-Onnes verificou que a resistividade do mercúrio caía repentinamente a zero quando a temperatura do mesmo era inferior a uma temperatura crítica $T_c$ (aproximadamente igual a $4,2K$), a este fenômeno deu-se o nome supercondutividade. Deve-se ser observado que a resistividade nula é apenas uma das propriedades fundamentais do estado supercondutor (MOYSES, 1992).

Esse feito de Kamerlingh Onnes foi seguido por outras descobertas de grande relevância. Em $1913$, verificou-se que o chumbo tornava-se supercondutor abaixo de uma temperatura crítica $T_c \simeq 7,2K$. Em $1914$, Kamerlingh-Onnes notou que a supercondutiviade podia ser destruída por um campo magnético $H$ superior ao campo magnético crítico $H_c$. Verificou também, que existia uma densidade de corrente crítica $J_c$ para a qual o material passa da fase supercondutora para a fase normal. Portanto, a supercondutividade é destruída quando qualquer um dos chamados parâmetros críticos[12] forem superados.

Desde a descoberta de Onnes até $1933$, nenhum desenvolvimento significativo foi alcançado no campo da supercondutividade. Metais e ligas supercondutoras foram sendo descobertas, mas sem grande impacto. Durante esse período acreditava-se que as previsões feitas sobre o comportamento magnético de um condutor perfeito eram verdadeiras para um supercondutor. Porém, em $1933$, os alemães Karl Walther Meissner[13] e Robert Ochsenfeld[14] verificaram que as propriedades reais de um supercondutor não são equivalentes as de um condutor perfeito (MEISSNER e OCHSENFELD, 1933). Eles descobriram que a distribuição do campo magnético no interior de um supercondutor era sempre nulo, independente das condições iniciais. O fenômeno passou a ser conhecido e denominado como efeito Meissner[15] (BUCKEL e KLEINER, 2004).

Seguindo a cronologia do avanço das descobertas sobre os supercondutores, muitas descobertas foram feitas com diversas combinações de metais, formando ligas metálicas. Em $1929$, a

[11] O mercúrio foi um dos metais selecionados por ser mais fácil de obtê-lo com elevado grau de pureza.

[12] Os parâmetros críticos que quando superados podem destruir a fase supercondutora são: a temperatura crítica $T_c$, o campo magnético crítico $H_c$ e a densidade de corrente crítica $J_c$.

[13] http://www.physik.tua-muenchen.de/einrichtungen/departament/history, acessado em 25 de junho de 2013.

[14] http://ib.ptb.de/de/org/IB/geschichte.htm, acessada 26 de junho 2013.

[15] Num condutor perfeito o fluxo magnético na amostra é constante, enquanto que no supercondutor é zero, caracterizando o efeito Meissner.

$T_c$ recorde estava com o Nióbio em $9,25K$; em $1941$ com a liga de Nióbio-Nitrogênio em $16K$; já em $1953$ com a liga de Vanádio-Silício em $17,5K$; e daí por diante. Até $1986$, o $T_c$ recorde estava coma liga de Nióbio e Germânio em $23.2K$, quando então os supercondutores de alta temperatura foram descobertos (BENÍCIO, 2001).

Os supercondutores são divididos em dois tipos, de acordo com suas propriedades específicas. Os supercondutores do Tipo $1$ são formados principalmente pelos metais e por algumas ligas e, em geral, são condutores de eletricidade à temperatura ambiente. Eles possuem uma $T_c$ extremamente baixa e, foram os pioneiros a serem descobertos. Já os supercondutores do Tipo $2$ são formados por ligas metálicas e outros compostos. As exceções são os metais puros, Vanádio ($V$), Tecnécio ($Tc$) e Nióbio ($Nb$). Em geral, as temperaturas críticas associadas a eles são muito mais altas e o mecanismo atômico que leva à supercondutividade neste tipo de supercondutor, até hoje não está completamente desvendado. O recordista atual, pertence a classe das cerâmicas baseadas em óxidos de cobre (cupretos). A tabela $2$ a seguir, serão apresentados alguns destes compostos com seu respectivo $T_c$ em Kelvin.

Tabela 2 – Compostos supercondutores de altas temperaturas, com suas respectivas temperaturas críticas.

| **Composto** | $T_c(K)$ |
|---|---|
| $Hg_{(0.8)}Ti_{(0,2)}Ba_2Ca_2Cu_3O_{(8.33)}$ | 138 |
| $Bi_2Sr_2Ca_2Cu_3O_{10}$ | 115 |
| $Ca_{(1-x)}Sr_xCuO_2$ | 110 |
| $TmBa_2Cu_3O_7$ | 101 |
| $YBa_2Cu_3O_{7+}$ | 93 |
| $La_{(1.85)}Ba_{(0.15)}CuO_4$ | 35 |
| $CsC_{60}$ | 40 |
| $MgB_2$ | 39.2 |
| $Nb_3Ge$ | 23.2 |
| $Nb$ | 9.25 |
| $Tc$ | 7.8 |
| $V$ | 5.4 |

**FONTE:** NETO (2004).

O primeiro material dessa classe foi descoberto no final da década de $(1986)$ por George Bednorz e Alex Müller (BENÍCIO, 2001), surpreendendo a comunidade científica, pois a supercondutividade havia sido descoberta em cerâmicas, um material que geralmente é isolante, e o mais impressionante, em torno de $(30K)$. A descoberta se tornou ainda mais surpreendente quando, em novembro de 1986, Paul Chu (Universidade de Houston) e Mang-Kang Wu (Universidade do Alabama), descobriram que o $(YBa_2Cu_3O_7)$, com sua estrutura de camadas, superconduzia a $(93K)$, ou seja, a temperatura superior à do nitrogênio líquido que é de $(77K)$, dando início a uma revolução na Física. Nos anos seguintes, várias outras cerâmicas supercondutoras foram descobertas, todas baseadas em óxido de cobre.

Os materiais supercondutores já são aplicados em diversas áreas, porém a maioria delas não faz parte do universo comum da população. Com o acelerado avanço na descoberta de novos materiais com $T_c$ cada vez maior, é esperado que a gama de aplicações destes sistemas torne-se maior e se aproxime do dia-dia do cidadão comum. Exemplos de aplicações dos materiais supercondutores são: SQUID em magnetoencefalógrafo e medidas de magnetização (CLARKE e BRAGINSKI, 2004), transformadores (LIPO, 1989), motores, geradores, transmissores, separação magnética, blindagem magnética, propulsores eletromagnéticos, armazenagem de energia, SQUID[16] em magnetocardiografia e ressonância magnética nuclear (RMN), (BUCKEL e KLEINER, 2004), imagem por ressonância magnética e aceleradores de partículas (MRI) (SHEAHEN, 2002), etc.

Um fator relevante e digno de ser mencionado é o elevado número de prêmios Nobel de Física distribuídos nessa área do conhecimento. Ao todo, 5 até o momento. A Tabela 3, apresenta os cientistas laureados na sequência em que o prêmio foi concedido. Com exceção de Anthony J. Leggett, todos os pesquisadores trabalharam no ramo da supercondutividade. Segundo Costa e Pavão (COSTA e PAVÂO, 2012), se incluíssemos as pesquisas no campo da criogenia, o número de laureados aumentaria para 10.

Tabela 3 – Laureados com o prêmio Nobel de Física por pesquisas realizadas no campo da supercondutividade.

| **Ano** | **Pesquisadores** | **Descobertas** |
|---|---|---|
| 1913 | Heike Kamerlingh Onnes | Descoberta da supercondutividade |
| 1972 | John Bardeen<br>Leon Neil Cooper<br>John Robert Schrieffer | Desenvolvimento da teoria BCS |
| 1973 | Brian David Josephson<br>Leo Esaki<br>Ivar Giaever | Previsão teórica e comprovação experimental do efeito Josephson |
| 1987 | Johannes Georg Bednorz<br>Karl Alexander Müller | Primeiro supercondutor de alta $T_c$: $Ba_X La_{(5-X)} Cu_5 O_{5(3-Y)}$ |
| 2003 | Alexei Alexeyevich Abrikosov<br>Vitaly Lazarevich Ginzburg<br>Anthony James Leggett | Contribuições pioneiras à teoria de supercondutores e superflúidos |

**FONTE:** (COSTA e PAVÃO, 2012).

Conjetura-se que mais prêmios serão entregues como resultado das pesquisas em supercon-

[16] Os SQUIDs são transdutores de fluxo magnético extremamente sensíveis, sendo alguns capazes de medir campos da intensidade da ordem de dez femton Tesla, ou seja, $10^{-15}$.

dutividade, em especial no desenvolvimento de materiais com $T_c$ igual ou superior à ambiente e na elaboração de uma teoria capaz de explicar o fenômeno em qualquer intervalo de temperatura.

A literatuta mostra que ao longo do século XX, muitos desafios desta sub-área da matéria condensada foram superados, mas, alguns permancem em aberto, como por exemplo, o desenvolvimento de uma teoria microscópica unificada, que seja capaz de explicar a supercondutividade em qualquer intervalo de temperatura, e a obtenção de um material que seja supercondutor a temperatura igual ou superior a do ambiente (COSTA e PAVÃO, 2012).

## 1.7 MODELO DE ISING

O modelo de Ising é uma ferramenta importante para o estudo de materiais com propriedades magnéticas, uma vez que, é capaz de descrever os fenômenos físicos próximos da criticalidade. Para tanto, é necessário que seja adotado um modelo a partir de um sistema real encontrado na natureza que obedeça a alguns aspectos como a dimensionalidade do sistema físico, do parâmetro de ordem e o alcance entre as interações microscópicas (SALINAS, 1999). Vários modelos já foram propostos para esse fim e alcançaram grande sucesso, dentre eles, pode-se destacar os modelos de (ISING, 1925) e (HEISENBERG, 1928). O modelo de Ising, é considerado o mais simples com capacidade de descrever a transição de fase em ferromagnetos. Portanto, nesta pesquisa será utilizado o modelo de Ising de spin-$\frac{1}{2}$ antiferromagnético, tanto pelo aspecto geral dos resultados, quanto pela perspectiva de ilustrar fenômenos ainda não compreendidos microscopicamente.

A aplicação do modelo de Ising na física de transições de fase, está voltado para a ocorrência de pequenas alterações que ocorrem em alguns parâmetros, como a temperatura e a magnetização que pode provocar uma variação qualitativa em larga escala no estado do sistema em estudo. As transições de fase são comuns na física e familiares na vida cotidiana. Por exemplo, pode-se observar esse fenômeno, sempre que a temperatura de uma quantidade de água cai abaixo de $32^{o}F$, ou quando submete-se essa amostra de água a um sistema de aquecimentto (fogão). Outros exemplos incluem a formação de ligas binárias e o fenômeno do ferromagnetismo. Historicamente, este último é também de grande interesse, pois, uma compreensão do ferromagnetismo e especialmente da magnetização espontânea era o propósito original de Ising em sua tese de doutorado.

O propósito do modelo de Ising é explicar como ocorrem as interações de curto alcance entre as moléculas de um cristal, através do comportamento das correlações de longo alcance e, prever em um certo sentido, o potencial para uma transição de fase. O modelo também tem sido aplicado a problemas em química, biologia molecular, e outras áreas onde pretende-se estudar o comportamento "$cooperativo$" de grandes sistemas. Em particular, veremos que o modelo de Ising tem uma interpretação combinatória que é poderoso o suficiente por si só para estabelecer

alguns dos resultados básicos para transições de fase. Para Barri A. Cipra (CIPRA, 1997) há muitos outros aspectos e abordagens para o modelo de Ising, mas a análise combinatória faz uma introdução especialmente apropriada. Estas aplicações são possíveis porque o modelo de Ising pode ser formulado como um problema matemático. Embora refira-se freqüentemente à física do ferromagnetismo, e use a linguagem da mecânica estatística, são os aspectos físicos do modelo que nos interessam na presente dissertação.

O ponto de partida para a aplicação do modelo de Ising é estabecer a simetria do sistema mediante a topologia da rede que representará o conjunto finito dos $N$[17] elementos do conjunto que deseja-se estudar. Geometricamente, a rede que representa o aglomerado podem ser de uma, duas ou três dimensões, como é mostrado nas figuras 6, 7 e 8.

Figura 6 – Ditribuição de átomos em uma rede Linear, $d = 1$.

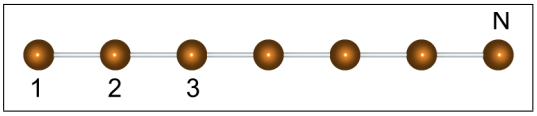
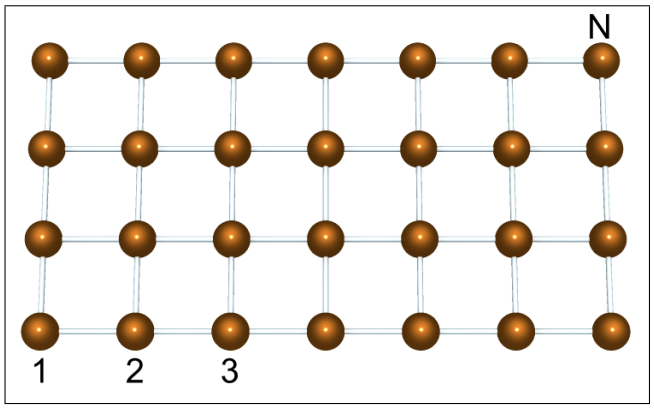



Figura 7 – Distribuição de uma rede quadrada, $d = 2$.




Nas figuras 1.6, 1.7 e 1.8, o espaço entre cada dois elementos representa uma ligação e, exceto para os sítos que estão no limite da rede, os demais possuirão $2d$ vizinhos mais próximos.

As figuras $9-a$, $9-b$ e $9-c$ ilustram melhor o número de primeiros vizinhos em um aglomerado formado por uma rede com topologia linear, quadrada ou cúbica com um sítio:

O modelo é definido pela Hamiltoniana:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle}^{z} S_i S_j, \tag{1.5}$$

[17] N sempre identifica o número de nós da rede cristalina, independentemente da dimensão.

Figura 8 – Distribuição de átomos em uma rede cúbica, $d = 3$.

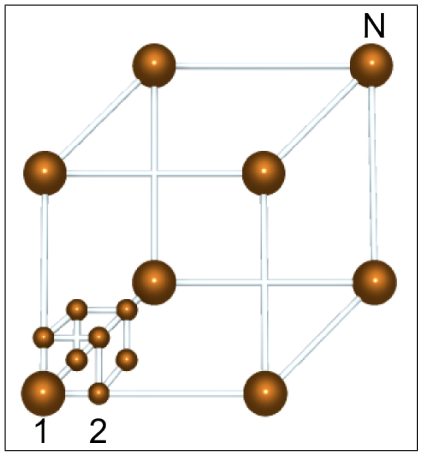
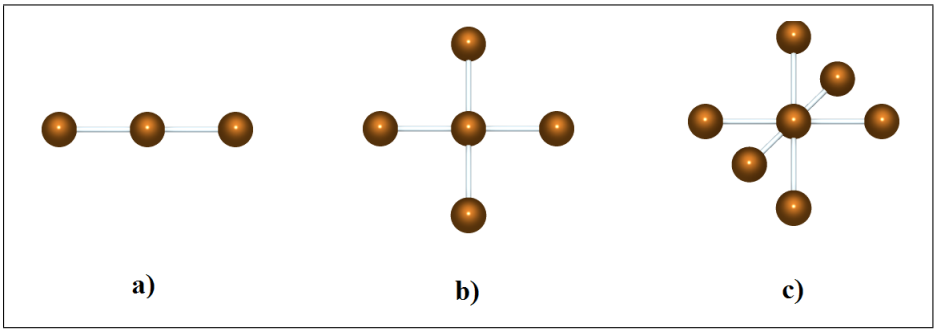



Figura 9 – Representação topológica de rede com um sítio central: $9 - a$ unidimensional; $9 - b$ bidimensional e $9 - c$ tridimensional.




onde $J$ indica o parâmetro de interação de troca[18], $S_i$ é chamado de spin de Ising, que pode ser inteiro ou semi-inteiro no intervalo $-S \leq S_i \leq S$, com $S$ também inteiro ou semi-inteiro. O índice $i$ ou $j$ rotulam os $N$ sítios de uma rede com número de coordenação $z$ e $\langle i, j \rangle$ representa a interação entre os primeiros vizinhos.

O Hamiltoniano $1.5$ é o sistema mais simples da mecânica estatística e apresenta solução exata em rede unidimensional e bidimensional sem campo externo. Ao Contrário do caso do modelo Heisenberg antiferromagnético, o estado de Néel, representado por spins dispostos em direções alternadas sobre a rede cristalina, é auto-estado do Hamiltoniano de Ising antiferromagnético.

O nome do modelo é uma homenagem a Ernest Ising que encontrou solução para uma rede unidimensional em $1925$, cuja conclusão, indicava a existência de uma transição de fase ferromagnética à temperatura zero e, a solução em duas dimensões foi obtida por Onsager em $1944$. Em sua forma original esse modelo tem sido aplicado em diversos campos, tais como, mecânica estatística (ZANGWILL, 1988) (BANDER, 1988), sistemas biológicos (STANLEY, 1971) e

[18] $J(J > 0$ e $J < 0)$ corresponde aos sistemas ferromagnético e antiferromagnético, respectivamente. No ferromagnetismo existe uma certa tendência de que os spins $S_i$ e $S_j$ se orientem paralelamente no mesmo sentido, enquanto no antiferromagnetismo, essa orientação é anti-paralela.

econofísica (HORVATH, 2006) e (KRAWIECKI, 2003), além de ser valiosamente utilizado no teste de métodos aproximativos diversos, uma vez que apresenta solução exata para os casos unidimensional (ISING, 1925) e bidimensional (BAXTER, 1982) sem campo externo. Atualmente, há conjecturas para uma possível solução exata para o caso tridimensional (ZHANG, 2007). No formato da equação $(1.5)$, este modelo é puro, no entanto, acrescentando outros termos esta equação pode ser utilizada para estudar uma variedade de compostos magnéticos. Muitas pesquisas tem sido realizada no sentido de entender as possíveis mudanças no comportamento dos sistemas magnéticos quando comparados com os resultados do modelo original.

Quando se adiciona ao modelo de Ising original outros termos de energia de interação, pode-se utilizá-lo para estudar uma grande variedade de compostos magéticos. Muitos destes compostos exibem diagramas de fases interessantes e muitas vezes bastante complexos. Do ponto de vista teórico, as pesquisas têm se concentrado em entender as possíveis mudanças no comportamento crítico destes sistemas quando comparamos com os sistemas modelados pelo Hamiltoniano de Ising original, equação $(1.5)$. Tem-se como exemplo, o modelo de Ising aleatoriamente decorado, que vem sendo utilizado para descrever qualitativamente as propriedades magnéticas dos compostos supercondutores de alta temperatura, tal como $La_{(2-x)}Ba_xCuO_4$, formados por planos de $CuO_2$, na fase isolante. Segundo (FISHER, 1959), (SYOZI, 1972), (FITTIPALDI *et. al.*,1992), (SOUSA *et. al.*, 2000), (TAVARES, 2006), (PACOBAHYBA, 2006), entre outros.

## 1.8 PROBLEMATIZAÇÃO E ORGANIZAÇÃO DA PESQUISA

A descrição de fenômenos como a criticalidade e as propriedades termodinâmica de modelos clássicos e quânticos com interações competitivas tem sido um campo de pesquisa motivador na área da física da matéria condensada. Neste contexto de estudo, outro campo de grande importância dentro desta grande área de pesquisa, é o relacionado a descoberta dos compostos supercondutores de altas temperaturas, como por exemplo, o $La_{(2-x)}Ba_xCuO_4$, formados por planos de $CuO_2$, na fase isolante. Aspectos como a descoberta de novos materiais com essas características e a formulação de um modelo capaz de descrever qualitativamente suas propriedades termodinâmicas, são exemplos de problemas que vem sendo objeto de investigação comumente apresentados na literatura.

A pesquisa apresentada nesta dissertação, se justifica por se encontrar inserida neste contexto científico, cujo objetivo, está voltado para o estudo do diagrama de fase do modelo de Ising antiferromagnético de spin-$\frac{1}{2}$, aleatoriamente decorado com interações competitivas entre os primeiros vizinhos em um aglomerado com dois sítios centrais, sobre a óptica de uma nova abordagem aplicada à teoria de campo efetivo. A principal motivação deste estudo é que este modelo simula qualitativamente algumas propriedades magnéticas dos compostos supercondutores de altas temperaturas formados por planos de $CuO_2$, tendo o $La_{(2-x)}(Ba;Sr)_xCuO_4$, como exemplo, (onde $Ba$ ou $Sr$ são dopantes). Os resultados obtidos para as propriedades ter-

modinâmicas encontrados serão comparados aos resultados obtidos com a técnica utilizada na mecânica estatísitca usual.

No capítulo 2, inicialmente serão abordados os aspectos gerais sobre a motivação para o estudo dos fenômenos magnéticos, sua importância para o desenvolvimento tecnológico, a aplicação da mecânica estatísitca na descrição das propriedades termodinâmicas de sistema físicos e algumas dificuldades que se encontra ao desenvolver pesquisas com sistemas de muitos corpos. Na seção 2.2 é desenvolvida a teoria do campo efetivo para sistemas finitos, seguida de aplicações da técnica do operador diferencial em aglomerado com um e dois sítios através do modelo de Ising.

No capítulo 3, é feita uma breve introdução ao capítulo e, em seguida, descreve-se o modelo e o formalismo do sistema a ser estudado. É desenvolvido o modelo de Ising de spin-$\frac{1}{2}$ antiferromagnético, aleatoriamente decorado com interações competitivas de primeiros vizinhos para uma rede quase-bidimensional e tridimensional com dois sítios centrais. O processo é desenvolvido no sistema com decoração. Na subseção (3.3.1) será apresentado os resultados encontrados para o diagrama de fasse e a magnetização do sistema. Os resultados serão discutidos, analisando a linha crítica de estabilidade entre as fases antiferromagnética ($AF$) e paramagnética ($P$), a qual apresenta-se como uma linha crítica de segunda ordem.

Na seção 3.4, aplica-se a nova metodologia à teoria de campo efetivo **NEFT**, no estudo do modelo mencionado no parágrafo anterior, e obteve-se o diagrama de transição de fase. Em seguida, confrontou-se os resultados obtidos da nova abordagem metodológica com a aplicação da teoria de campo efetivo usual.

No capítulo 4 será apresentadas algumas conclusões da análise dos resultados encontrados para o diagrama de fase mediante a aplicação da nova metodologia à **EFT**, seguida de perspectivas futuras sobre o tema discutido e analisado nesta dissertação.

# 2 TEORIA DE CAMPO EFETIVO

Neste capítulo, será apresentada uma breve revisão da literatura acerca da técnica conhecida como Teoria de Campo Efetivo -*Effective Field Theory-EFT*, que aliada à Técnica do Operador Diferencial-**TOD**, será utilizada como ferramenta de fundamental importância no tratamento das grandezas termodinâmicas relevantes para nossos objetivos .

## 2.1 CONSIDERAÇÕES GERAIS

A descoberta do mundo microscópico, há muito tempo despertou o interesse da comunidade científica para a busca de compreensão e aplicação de seus efeitos no mundo real. A importância de tais efeitos para o desenvolvimento tecnológico tem contribuído para a intensificação de estudos e pesquisas na área de Física da Matéria Condensada.

Nesse contexto, a mecânica estatística é amplamente utilizada na fundamentação de estudos teóricos, cujo objetivo, é descrever as propriedades termodinâmicas de sistemas físicos com elevado número de elementos constituintes, como por exemplo, o comportamento de aglomerados de spins em sistemas magnéticos. Vários estudos, dissertações e teses que apresentam pesquisas sobre as propriedades magnéticas da matéria, alertam para a existência de uma grande dificuldade no tratamento analítico desses sistemas, dependendo da sua topologia e do número de elementos considerados mostra Tavares(TAVARES, 2006). O grande número de graus de liberdade desses sistemas, da ordem do número de Avogrado, é o principal obstáculo, pois, impossibilita estabelecer suas condições iniciais uma vez que, eles possuem $N_A \simeq 6,0x10^{23}$ de moléculas.

A literatura indica que a dificuldade em encontrar soluções analíticas para esse tipo de sistema, pode ser contornada recorrendo a um conjunto (*ensemble*) de partículas, no qual, considera-se que estas apresentem as mesmas propriedades (RUFFO, 2011). Dessa forma, torna-se possível descrever as características das quantidades termodinâmicas desejadas, embora, de forma aproximada. É nesse contexto que se aplica técnicas aproximativas como a *MFA*, nas suas diversas abordagens, por exemplo, o campo molecular, a desigualdade de Bogoliubov, a interação de longo-alcance de Bragg-Williams (ANJOS, 2006). Outra dificuldade teórica reside no princípio de incerteza de Heisenberg, o qual mostra que é impossível conhecermos simultaneamente o momento e a posição de uma partícula, limitando ainda mais a análise teórica (FILHO, 2003). Dado um sistema constituído de muitos corpos interagentes, a técnica **MFA** consiste na substituição das interações por um campo apropriadamente escolhido. Desta maneira, toda a interação que um corpo sente devido aos outros é representada por um campo efetivo onde todas as flutuações são desprezadas. Portanto, a *MFA* é uma aproximação de ordem zero.

Os fenômenos físicos aos quais a mecânica estatística está relacionada, podem ser divididos em dois tipos (PACOBAHYBA, 2006). O primeiro, é formado pelos sistemas não interagentes, representado por componentes microscópicos que não apresentam interações entre si. Nesse caso, as funções termodinâmicas podem ser calculadas diretamente dos níveis de energia individual de cada um dos elementos que constitui o sistema, portanto, com relativa facilidade. Os calores específicos de gases e sólidos e a radiação do corpo negro representam exemplos desse tipo de sistema. Já o segundo, é caracterizado pela interação recíproca entre seus constituintes (sistemas interagentes). Essas interações, implicam na presença de convergência nas funções termodinâmicas responsáveis pela ocorrência de diferentes transições de fase. São exemplos de sistemas interagentes, a condensação dos gases, fenômenos associados a coexistência de fases, fenômenos do ferromagnetismo e do antiferromagnetismo dentre outros.

No segundo caso, o estudo de tais sistemas é pouco prático ou até mesmo inviável, devido o alto grau de complexidade. Para contornar essa dificuldade o que se faz é esboçar um conjunto de simplificações e atribuir uma série de vínculos matemáticos, como a hipótese ergódica[1]. Dessa forma, o tratamento teórico de modelos com essas características, consiste basicamente em calcular a função de partição (SANTOS-FILHO *et. all.*, 2007) e a partir dela determinar a soma de todos os estados acessíveis ao sistema. No formalismo do *ensemble* canônico, essa função é definida por $Z = Tr[e^{-\beta E_i}]$ onde $Tr$ representa o funcional traço, $E_i$ é a energia da partícula num estado $i$, $\beta = \frac{1}{k_B T}$, onde $k_B$ é a constante de Boltzmann e $T$ é a temperatura. O termo $e^{-\beta E_i}$ é proporcional ao peso estatístico do sistema para o estado correspondente.

Para calcular o número de estados acessíveis ao sistema através da mecânica estatística, é necessário fazer a soma,

$$Z = Tre^{-\beta\mathcal{H}} = \sum_{S_i} e^{E\{S_i\}}, \tag{2.1}$$

onde $\mathcal{H}$ é o hamiltoniano que representa o sistema físico em estudo e $E\{S_i\}$ são os autovalores da matriz $\mathcal{H}$. No caso de um sistema com $N$ partículas, a função de partição fornece $(2N+1)^N$ configurações de spin. Na mecânica estatística, esse tipo de sistema é analisado no limite termodinâmico quando $(N \mapsto \infty)$, dessa forma as flutuações $(\sim N^{-\frac{1}{2}})$ podem ser eliminadas .

Um aspecto relevante da função de partição, é que a partir dela, pode-se obter diversas propriedades termodinâmicas e magnéticas. Por exemplo, a energia livre, energia interna, o calor específico, a magnetização e a susceptibilidade magnética. Esta função permite ainda, a conexão entre a mecânica estatística e a termodinâmica através do cálculo da energia associada ao sistema estudado representada pela energia livre de Helmoltz (função canônica)[2], que é

[1] A hipótese ergódica estabelece que sobre um período prolongado de tempo, o tempo de permanência do espaço de fase de microestados com a mesma energia é proporcional ao volume da região, ou seja, todos os microestados são igualmente prováveis (LARANJEIRAS e CHIAPPIN, 2008)

[2] Diz-se que uma função está na forma canônica quando ela está escrita em sua forma mais simples, ou expõem algo de grande importância.

expressa por,

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z. \tag{2.2}$$

Como a soma deve ser feita sobre todas as possíveis configurações de estado $\{S_i\}$ de uma dada região do espaço, a equação $2.2$ transmite a ideia de volume ocupado. Da função canônica, é possível calcular grandezas termodinâmicas importantes para identificar a ordem magnética de um sistema, tanto do ponto de vista teórico como experimental. Uma dessas grandezas é a magnetização $M$, caracterizada pela soma de todos os momentos magnéticos elementares, dividido pelo volume que ocupa (grandeza intensiva), dada por:

$$\overrightarrow{M} = \frac{1}{V} \left\langle \sum_i \overrightarrow{\mu_i} \right\rangle, \tag{2.3}$$

de forma que, tmbém pode-se obter está grandeza por partícula através da relação da magnetização total pelo número de partícula, ou seja, $m = \frac{\overrightarrow{M}}{N}$.

Outra grandeza é a susceptibilidade magnética $\chi$, que é a grandeza que caracteriza o material magnético segundo sua resposta a um campo externo a ele submetido, dada por:

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H}. \tag{2.4}$$

Para um sistema com muitas partículas interagentes, o hamiltoniano assume um número infinito de configurações. Assim, o somatório sobre a função de partição é infinito (limite termodinâmico), portanto, são poucos os modelos estatísticos que fornece cálculos exatos de suas grandezas (BAXTER, 1982 *apud* MAIA, 2010). Na tentativa de obter os resultados experimentais no campo teórico, tem-se aplicado técnicas aproximativas no estudo da termodinâmica dos mais variados modelos. A *MFA* e a *EFT* são muito utilizadas para se ter uma primeira avaliação do comportamento de alguns sistemas. Pesquisas mostram, que essas técnicas apresentam bons resultados qualitativos em primeira análise, como por exemplo, o Modelo de Ising $1D$ na presença de campo externo e *2D* na ausência de campo.

Em sistemas nos quais pode ser aplicado o modelo de Insig, a alternativa apresentada em estudos e pesquisas é a busca de técnicas que reproduzam os resultados experimentais mantendo a qualidade dos resultados exatos para os modelos solúveis. Nas últimas décadas, os resultados da aplicação da Técnica de Campo Efetivo (*EFT*) para modelos estatísticos, por exemplo, tem sido amplamente aceitos pelos pesquisadores desta área. Um dos fatores que ressaltam a sua importância nestas aplicações, é a possibilidade de se obter uma descrição satisfatória para as propriedades das substâncias em que se possa aplicar os modelos. A *MFA* é a mais simples metodologia para estudar os fenômenos críticos, no entanto, ela apresenta certas inconsistências nas propriedades magnéticas quando confrontadas com os resultados experimentais, pelo fato de desprezar as funções de correlações entre os spins e as flutuações presentes no tratamento de muitos corpos interagentes. A seção 2.2 será reservada à exposição da Teoria de Campo Efetivo (*EFT*).

## 2.2 TÉCNICA DO OPERADOR DIFERENCIAL

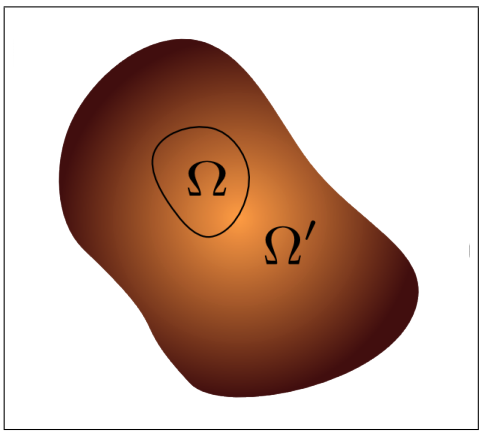
O estudo de qualquer fenômeno físico, no contexto da mecânica estatística de equilíbrio, cujo objetivo é conhecer as propriedades termodinâmicas de um determinado sistema, tem seu início no cálculo da função de partição (SANTOS-FILHO *et. all.*, 2007). No formalismo do *ensemble* canônico, essa função é definida pela equação 2.1. Segundo (SANTOS-FILHO *et. all.*, 2007), o fato de nem sempre ser possível calcular o traço da exponencial é um dos maiores obstáculos no tratamento teórico de sistemas de muitos corpos interagentes. Uma forma de calcular o traço da exponencial do hamiltoniano é diagonalizar a matriz $\mathcal{H}$, assim, a equação 2.1 pode ser reescrita na forma,

$$Z = \sum_{i=1}^{N} e^{-\lambda_i}, \tag{2.5}$$

em que $\lambda_i$ representa os autovalores do hamiltoniano $\mathcal{H}$. Mesmo assim, se assumirmos o limite termodinâmico com $N \to \infty$, surgirá uma outra dificuldade que é a necessidade do cálculo de infinitos autovalores. Devido as dificuldades apresentadas para o estudo de sistemas de partículas interagentes, são poucos métodos teóricos que apresentam soluções exatas, com isso, destaca-se a importância do desenvolvimento de métodos aproximados e computacionais que contornem o problema.

A Teoria de Campo Efetivo, aliada à Técnica do Operador Diferencial, tem destacado-se neste contexto como um método aproximativo que apresenta resultados satisfatórios em diversos modelos para os quais não exista resultados exatos. Admitindo que o sistema em estudo seja constituído por $N$ partículas interagentes, é possível dividi-lo em duas regiões: $\Omega$ que representa um aglomerado finito, *cluster*, com $n$ variáveis de spins que descreve as interações dentro do aglomerado e com sua vizinhança, e a outra representada por $\Omega'$, representada pelos demais spins não pertencentes ao aglomerado $\Omega$. Dessa forma, os hamiltonianos das regiões $\Omega$ e $\Omega'$ serão dados respectivamente por $\mathcal{H}_\Omega$ e $\mathcal{H}_{\Omega'}$, de acordo com a figura 10.

Figura 10 – Representação esquemática de um sistema com $N$ partículas ($\Omega \cup \Omega'$).



Então, um hamiltoniano que represente todo o sistema poderá ser representado por,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\Omega} + \mathcal{H}_{\Omega'}. \tag{2.6}$$

Da mecânica estatística, sabe-se que a média de uma quantidade termodinâmica $A$, no *ensemble* canônico é definida pela seguinte expressão,

$$\langle A \rangle = \frac{Tr\{Ae^{-\beta\mathcal{H}}\}}{Tr\{e^{-\beta\mathcal{H}}\}}, \tag{2.7}$$

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

Escolhendo uma função $A = \mathcal{O}(\Omega)$ para representar as variáveis de spins do aglomerado finito $\Omega$, o valor médio da equação $2.7$, pode ser reescrito na forma,

$$\langle \mathcal{O}(\Omega) \rangle = \frac{Tr\{\mathcal{O}(\Omega)e^{[-\beta(\mathcal{H}_{\Omega}+\mathcal{H}_{\Omega'})]}\}}{Tr\{e^{[-\beta(\mathcal{H}_{\Omega}+\mathcal{H}_{\Omega'})]}\}}. \tag{2.8}$$

Considerando que $\mathcal{H}_{\Omega}$ e $\mathcal{H}_{\Omega'}$ comutem, ou seja, $[\mathcal{H}_{\Omega}, \mathcal{H}_{\Omega'}] = 0$, a função traço presente na equação $2.8$ pode ser calculado seguindo dois passos (PACOBAHYBA, 2006): o primeiro é calcular o traço sobre o aglomerado finito $Tr_{\Omega}$ e o passo seguinte, é realizar a mesma operação sobre os spins da vizinhança não pertencentes a este aglomerado, representado por $Tr_{\Omega'}$. Fazendo a adequação algébrica necessária, esta equação pode ser reescrita na forma,

$$\langle \mathcal{O}(\Omega) \rangle = \frac{Tr_{\Omega'}\{e^{-\beta\mathcal{H}_{\Omega'}}\}Tr_{\Omega}\{\mathcal{O}(\Omega)e^{-\beta\mathcal{H}_{\Omega}}\}}{Tr_{\Omega'}\{e^{-\beta\mathcal{H}_{\Omega'}}\}Tr_{\Omega}\{e^{-\beta\mathcal{H}_{\Omega}}\}}, \tag{2.9}$$

que ao ser multiplicada por um fator de unidade $\frac{Tr_{\Omega}\{e^{-\beta\mathcal{H}_{\Omega}}\}}{Tr_{\Omega}\{e^{-\beta\mathcal{H}_{\Omega}}\}}$, levando em conta a combinação adequada das propriedades matemáticas do traço obtém-se a expressão,

$$\langle \mathcal{O}(\Omega) \rangle = \frac{1}{Tr\{e^{-\beta\mathcal{H}_{\Omega}}\}} Tr\left\{ \frac{Tr_{\Omega}[\mathcal{O}(\Omega)e^{-\beta\mathcal{H}_{\Omega}}]}{Tr_{\Omega}[e^{-\beta\mathcal{H}_{\Omega}}]} e^{-\beta\mathcal{H}_{\Omega}} \right\}. \tag{2.10}$$

A partir da combinação desta equação com a definição $2.7$, é possível expressar a média térmica do operador $\mathcal{O}(\Omega)$ no *ensemble* canônico como,

$$\langle \mathcal{O}(\Omega) \rangle = \left\langle \frac{Tr_{\Omega}\{\mathcal{O}_{\Omega}e^{-\beta\mathcal{H}_{\Omega}}\}}{Tr_{\Omega}\{e^{-\beta\mathcal{H}_{\Omega}}\}} \right\rangle, \tag{2.11}$$

em que $Tr_{\Omega}$ é o traço parcial tomado sobre as variáveis de spins pertencentes ao aglomerado, ou seja, especificamente pelo hamiltoniano $\mathcal{H}_{\Omega}$, e $\langle ... \rangle$ representa a média termodinâmica usual efetuada com o hamiltoniano total $\mathcal{H}$ do sistema. Dessa equação, é possível separar as regiões do sistema que pertence ou não ao aglomerado.

Considerando $A = \{n\}\mathcal{O}(\Omega)$, onde $\{n\}$ corresponde a qualquer variável de spin não pertencente ao aglomerado $\Omega$, pode-se generalizar a equação $2.11$ para a forma,

$$\langle \{n\}\mathcal{O}(\Omega) \rangle = \left\langle \{n\} \frac{Tr\{\mathcal{O}_{\Omega}e^{-\beta\mathcal{H}_{\Omega}}\}}{Tr\{e^{-\beta\mathcal{H}_{\Omega}}\}} \right\rangle. \tag{2.12}$$

Apesar da dificuldade de manipulação algébrica, a expressão $2.12$ é exata para sistemas clássicos, pois neste limite, as variáveis de spins presente no hamiltoniano comutam (PACOBAHYBA, 2006). Esta condição é satisfeita particularmente para sistemas clássicos de spin do tipo Ising, onde em substituição ao cálculo da média térmica para um sistema infinito, podemos fazê-lo para um sistema finito (aglomerado $\Omega$) fazendo um traço parcial interno $(Tr_{\Omega})$. Estudo realizado com sistemas quânticos (SÁ BARRETO e FITTIPALDI, 1985, *apud* PACOBAHYBA, 2006), mostra que a equação $2.12$ não é exata, pois, $[\mathcal{H}_{\Omega}, \mathcal{H}_{\Omega'}] \neq 0$. No entanto, é possível obter solução aproximada (ordem zero) para esta equação utilizando o modelo de Ising-$\frac{1}{2}$ submetido a um campo transverso.

No fim da década de 1970, Honmura e keneyoshi (HONMURA e KANEYOSHI, 1978) propuseram um novo método de teoria de campo efetivo (**EFT**) associado a técnica do operador diferencial que apresenta resultados satisfatórios do ponto de vista qualitativo. No entanto, dependendo da complexidade do sistema em estudo a aplicação desta técnica exige elevado esforço computacional. A técnica do operador diferencial consiste no seguinte:

Seja uma função $F(x)$ contínua e definida para qualquer valor de $x$ e $\hat{D}_x = \frac{d}{dx}$ o operador diferencial, então, a aplicação do operador $D_x$ na função $F(x)$ fornece a expressão:

$$e^{\alpha \hat{D}_x} F(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} \frac{d^n F(x)}{dx^n}, \tag{2.13}$$

que corresponde a definição da série de Taylor para $F(x+\alpha)$ em torno de $\alpha = 0$. Então, quando $x = 0$ tem-se,

$$e^{\alpha \hat{D}_x} F(x)|_{x=0} = F(\alpha). \tag{2.14}$$

A equação $2.14$ é bastante útil na aplicação da teoria de campo efetivo em aglomerados finitos de spins. Na próxima seção serão apresentados dois exemplos de suas aplicações em alguns modelos de spin, cuja finalidade é mostrar a simplicidade com que os cálculos são tratados.

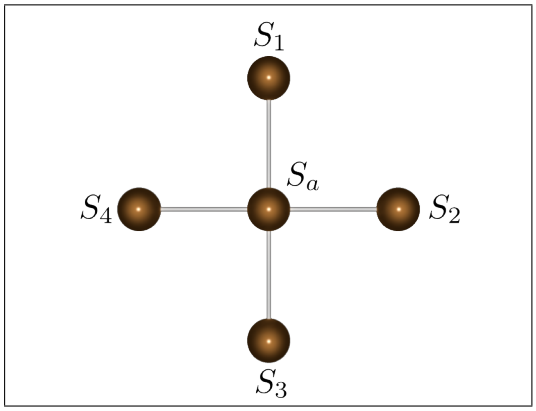
### 2.2.1 Aplicações da técnica do operador diferencial

A partir desta seção, serão aplicados os conceitos da teoria de campo efetivo baseada na técnica do operador diferencial no modelo de Ising de spin-$\frac{1}{2}$ sem campo, com interações ferromagnéticas $(J > 0)$ de primeiros vizinhos em dois casos distintos, de forma a ser observado, gradativamente, a elevação do grau de dificuldade apresentado por esta técnica, à medida em que aumenta-se o tamanho do aglomerado.

**Primeiro caso: Aglomerado com um sítio central** $(N = 1)$

Neste primeiro exemplo de aplicação da técnica do operador diferencial, será utilizado um aglomerado formado por uma rede quadrada com apenas um sítio central $S_a$, com primeiros vizinhos ($S_1$, $S_2$, $S_3$ e $S_4$) de acordo com o esquema representado pela figura $(2.2)$.

Figura 11 – Aglomerado representando um momento de dipolo central $S_a$ e seus vizinhos representados pelos dipolos ($S_1$, $S_2$, $S_3$ e $S_4$).




Uma vez conhecida a topologia da rede que representa o sistema em estudo, o próximo passo será aplicar uma técnica escolhida para o cálculo das grandezas termodinâmicas do sistema de spin. Neste caso, em particular, será utilizada a aproximação usual na mecânica estatística, onde é fundamental escrever o Hamiltoniano que envolva as interações do aglomerado com sua vizinhança. Portanto, o Hamiltoniano para este modelo com um aglomerado é expresso da seguinte forma:

$$\mathcal{H}_1 = -JS_a \sum_{\langle \overrightarrow{\delta} \rangle} S_{a+\overrightarrow{\delta}}, \tag{2.15}$$

onde $S_a$ representa o spin do aglomerado, $\overrightarrow{\delta}$ é o vetor primeiro vizinho e a soma é feita sobre todos os $z$ vizinhos (número de coordenação[3] do spin do aglomerado).

Pode-se obter a magnetização por sítio, fazendo

$$a_1 = K \sum_{\overrightarrow{\delta}} S_{a+\overrightarrow{\delta}}, \tag{2.16}$$

a partir da equação $(2.15)$ e aplicá-la à equação $2.11$ obtendo a seguinte expressão:

$$m = \left\langle \frac{Tr(S_a e^{a_1 S_a})}{Tre^{a_1 S_a}} \right\rangle, \tag{2.17}$$

onde $K = \beta J$, $\beta = \frac{1}{k_B T}$ em que $K_B$ é a constante de Boltzmann e $T$ é a temperatura. A função de partição $Z_1$ será expressa por,

$$Z_1 = Tre^{a_1 S_a} = 2cosh(a_1). \tag{2.18}$$

Fazendo $S_a = \pm 1$, a equação $2.17$ pode ser reescrita na seguinte forma,

$$m = \left\langle \frac{\partial ln Z_1}{\partial a_1} \right\rangle = \left\langle \frac{e^{a_1} - e^{-a_1}}{e^{a_1} + e^{-a_1}} \right\rangle, \tag{2.19}$$

[3] O número de coordenação define a topologia da rede. Neste modelo caracteriza-se o número de primeiro vizinhos de um sítio da rede.

que aplicando a identidade trigonométrica hiperbólica da tangente obtém-se,

$$m = \left\langle tanh\left(K \sum_{\overrightarrow{\delta}} S_{a+\overrightarrow{\delta}}\right)\right\rangle . \tag{2.20}$$

A equação $2.20$ é denominada na literatura como identidade de Callen-Suzuki (CALLEN, 1963) e (SUZUKI, 1965), obtida através da média termodinâmica. Essa equação é exata e envolve uma média da tangente hiperbólica com argumento contendo variáveis de spins vizinhos do aglomerado central.

A literatura registra que a primeira aplicação da identidade de Callen-Suzuki foi para obter funções de correlação e temperatura crítica no modelo de Ising bidimensional, através do método de expansão de altas temperaturas. Mas, outros autores como Matsudaira em (MATSUDAIRA, 1973), Frank e Mitran em (FRANK; MITRAN, 1978) fizeram uso dessa identidade para obter as propriedades críticas do modelo de Ising de spin-$\frac{1}{2}$.

Aplicando a propriedade do operador diferencial representada pela equação $2.14$ na equação $2.20$, tem-se que,

$$m = \langle S_a \rangle = \left\langle exp\left[K \sum_{\overrightarrow{\delta}} S_{a+\overrightarrow{\delta}} \hat{D}_x\right]\right\rangle tanh(x)|_{x=0}. \tag{2.21}$$

Expandindo o somatório, obtém-se:

$$m = \left\langle \prod_{\overrightarrow{\delta}} e^{KS_{a+\overrightarrow{\delta}}\hat{D}_x}\right\rangle tanh(x)|_{x=0}. \tag{2.22}$$

Para o modelo de Ising com dois estados, onde $S_a = \pm 1$, utiliza-se a identidade de van der Waerden para spin-$\frac{1}{2}$ descrita pela expressão:

$$e^{\varsigma S_a} = cosh(\varsigma) + S_a senh(\varsigma), \tag{2.23}$$

assim, a equação $2.22$ para a magnetização pode ser representada por:

$$m = \left\langle \prod_{\overrightarrow{\delta}} (\alpha_x + S_{a+\overrightarrow{\delta}}\beta_x)\right\rangle tanh(x)|_{x=0}, \tag{2.24}$$

onde os operadores $\alpha_x$ e $\beta_x$ são definidos como $\alpha_x = cosh(K\hat{D}_x)$ e $\beta_x = senh(K\hat{D}_x)$.

A equação $2.24$ é geral e exata, válida para rede de qualquer número de coordenação. No entanto, é difícil manipulação matemática, pois, envolve funções de correlação de muitos spins, gerando um acoplamento de infinitas equações. Para o caso do modelo de Ising-$\frac{1}{2}$ numa rede unidimensional, cujo número de coordenação é $z = 2$, é mostrado na literatura que não há necessidade de desacoplamento, tendo em vista que obtém-se apenas duas equações de correlação entre spins.

Para uma melhor ilustração das dificuldades envolvidas na equação $2.24$, ela será desenvolvida para uma rede quadrada, $z = 4$. Nesta topologia, o spin central pertence ao aglomerado com um spin representado, portanto, pelo índice $i = a$. A figura $2.2$ mostra o aglomerado $\Omega$ com o spin central $\{S_a\}$, e o conjunto de seus primeiros vizinhos, formado pelos spins externo $\{S_1, S_2, S_3$ e $S_4\}$.

Expandido a equação $2.24$ para este caso obtém-se:

$$m = [(\alpha_x + S_1\beta_x)(\alpha_x + S_2\beta_x)(\alpha_x + S_3\beta_x)(\alpha_x + S_4\beta_x)]tanh(x)|_{x=0}. \tag{2.25}$$

Como a função tangente hiperbólica é uma função ímpar, tem-se que a combinação de operadores diferenciais pares envolvida na expressão $2.25$ quando esta função for submetida ao limite $x = 0$, é nula, ou seja,

$$\hat{\varphi}_{par}(\hat{D}_x)tanh(x)|_{x=0} = 0. \tag{2.26}$$

Portanto, apenas contribuições de funções ímpares tem valores não nulos, então, a equação $2.25$ pode ser reescrita da seguinte forma:

$$m = A_1(K)\langle S_1 + S_2 + S_3 + S_4\rangle + A_3(K)\langle S_1S_2S_3 + S_1S_2S_4 + S_2S_3S_4 + S_1S_3S_4\rangle. \tag{2.27}$$

Aplicando a propriedade de invariância translacional, uma vez que o sistema apresenta essa característica, pode-se considerar que $\langle S_i\rangle = \langle S_j\rangle$ para $i \neq j$ e também para as correlações $\langle S_iS_jS_l\rangle$, onde $i \neq j \neq l$, assim, a magnetização pode ser escrita como:

$$m = A_1(K)\langle S_i\rangle + A_3(K)\langle S_iS_jS_l\rangle, \tag{2.28}$$

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

A presença de funções de correlação dificultam a obtenção da magnetização de forma exata por este método, devido ao conjunto de equações acopladas que é gerado. Portanto, deve-se usar algum método aproximativo para fazer o desacoplamento das funções de correlação, sendo que o mais simples consiste em desprezar as correlações entre os spins. Em primeira aproximação usa-se o desacoplamento de Zernike (ZERNIKE, 1940).

$$\langle S_iS_j...S_n\rangle \simeq \langle S_i\rangle\langle S_j\rangle...\langle S_n\rangle. \tag{2.29}$$

Usando esta aproximação e a condição de contorno $\langle S_i\rangle = m, \forall i$, obtém-se a equação autoconsistente para a magnetização:

$$m = A_1(K)m + A_3(K)m^3, \tag{2.30}$$

de onde obtém-se o seguinte resultado para a magnetização:

$$m = \sqrt{\frac{1 - A_1(K)}{A_3(K)}}. \tag{2.31}$$

A partir da equação 2.31, fazendo $m \to 0$ obtém-se, numericamente, a temperatura crítica $T_c$ para o modelo de Ising de spin-$\frac{1}{2}$ numa rede quadrada de um spin central com $z = 4$ primeiros vizinhos, utilizando a metodologia do operador diferencial. Para calcular $T_c$ basta resolver a seguinte igualdade:

$$A_1(T_c) = 1. \tag{2.32}$$

A temperatura crítica encontrada através do método numérico é $T_c = 3.089$. Quando este valor é comparado com o resultado calculado de forma exata, e usando a **MFA**, cujos valores são respectivamente $T_c = 2.269$ e $T_c = 4.0$, é possível observar que ele é visivelmente superior ao valor encontrado de forma exata.

De acordo com a literatura, espera-se que a magnetização se anule próximo da criticalidade segundo uma lei de potências com expoente crítico $\beta = \frac{1}{2}$, esse resultado é esperado pelo fato do sistema ter sido tratado através da teoria de campo efetivo, gerando sempre uma função autoconsistente do tipo $m = \Phi(m)$ para a magnetização.

Para uma rede com número de coordenação $z$ arbitrário o desacoplamento através da equação 2.29 corresponde na **EFT-1** aproximar a equação 2.24 por:

$$m = (\alpha_x + m\beta_x)^z tanh(x)|_{x=0}. \tag{2.33}$$

Utilizando a definição da equação 2.26 onde é mostrado que $\hat{\varphi}_{par}(\hat{D}_x)tanh(x)|_{x=0} = 0$, é possível escrever a equação 2.33 em sua forma reduzida como:

$$m = \sum_{p=0} A_{2p-1}(T) m^{2p-1}, \tag{2.34}$$

com

$$A_{2p-1}(T) = \frac{z!\theta_p(x)}{(z-1-2p)!(2p+1)!}\alpha_x^{z-1-2p}\beta_x^{2p-1}tanh(x)|_{x=0}, \tag{2.35}$$

onde $\theta_p(x) = 1$ quando $x \leq 0$, $\theta_p(x) = 0$ com $x > 0$ e $x = z - 1 - 2p$.

Próximo da região crítica $(T \sim T_c)$ no limite $m \to 0$, pode-se utilizar a equação $(2.34$ para calcular o expoente crítico $\beta = \frac{1}{2}$ e a temperatura crítica resolvendo a expressão:

$$A_1(T_c) = 1. \tag{2.36}$$

Alguns resultados de $T_c$ obtidos com a resolução da equação 2.36, apresentados na literatura, mostram avanços da teoria de campo efetivo, **EFT**, em relação à aproximação de campo médio, **MFA**. Para o caso da rede unidimensional (linear com $z = 2$), por exemplo, obtém-se o valor exato de $T_c = 0$, que é consideravelmente melhor que o obtido através da **MFA**, que é $T_c = 2.0$. Utilizando uma rede quadrada com um sítio central $(z = 4)$ o valor encontrado será $T_c = 3.089$, distante ainda do resultado exato que é $T_c = 2.269$. Aumentando ainda mais os aglomerados, como mostra a tabela 4, e mantendo a simetria da rede quadrada, Suzuki e Katori

(SUZUKI e KATORI, 1986) encontraram resultados que mostram uma pequena convergência em direção ao resultado exato $T_c = 2.269$, porém, com grande empecilho do aumento do tempo computacional. Já para uma rede cúbica, onde ($z = 6$), o valor da temperatura crítica fornecido por esta equação é $T_c = 5.073$, enquanto a **MFA-1** apresenta $T_c = 6.0$ e com simulação de Monte Carlo $T_c = 4.511$ (LANDAU; BINDER, 2000 *apud* MAIA, 2010). Esses resultados permitem afirmar que esse tipo de teoria de campo efetivo, com as devidas aproximações e simetrias apresentam um aumento gradativo da temperatura crítica $T_c$, na medida em que o número de coordenação aumenta, e no limite $z \to \infty$, obtém-se resultados de campo médio $\frac{T_c}{z} = 1$. Para (MAIA, 2010), fisicamente, é esperado uma diminuição do valor de $T_c$ com o aumento de $z$, pois, quanto maior o número de vizinhos, maior será o número de correlações tornando o sistema mais correlacionado e, consequentemente, necessita-se de mais energia térmica ($K_B T$) para destruir a ordem magnética. No limite de coordenação $z \to \infty$ tem-se que o íon $i$ interage (em média) com a mesma magnitude com todos os sítios da rede cristalina, introduzindo no sistema uma interação de longo alcance, apresentando os mesmos resultados de campo médio de Curie-Weiss.

Tabela 4 – Temperatura crítica $T_c$ obtidas a partir de uma rede quadrada com diferentes números de coordenação.

| **Temperatura** $T_c$ | **Coordenação** $z$ |
|---|---|
| 3.125 | 9 |
| 2.915 | 21 |
| 2.748 | 45 |
| 2.679 | 69 |
| 2.631 | 99 |
| 2.575 | 148 |

**FONTE:** Dissertação de Mestrado (RUFFO, 2011).

### 2.2.2 Outras aproximações

O propósito da implementação da teoria de campo efetivo **EFT** com base na técnica do operador diferencial em sistemas de spins, é obter valores cada vez melhores para a temperatura crítica. No entanto, a técnica do operador diferencial nos leva a médias acopladas dos operadores de spins, então, deve-se buscar auxilio em novas formas de desacoplamento que possibilitem a solução analítica das funções acopladas.

Nesse propósito, Keneyoshi e colaboradores (KENEYOSHI *et. all.*, 1981) consideraram a ideia já consolidada na literatura (SUZUKI, 1965), de que as flutuações em um sítio $S_i$ são proporcionais as flutuações em um sítio vizinho $S_j$. Sendo a flutuação em um sítio $S_i$ definida como $[S_i - \langle S_j \rangle]$, tem-se que

$$[S_i - \langle S_j \rangle] = \lambda (S_j - \langle S_i \rangle), \tag{2.37}$$

em que $\lambda$ é uma constante de proporcionalidade chamada de campo de Osanger (OSANGER, 1944) que deve depender da temperatura e representa a reação de um spin na presença de seu vizinho. Esta equação é também conhecida como teoria de campo efetivo correlacionado, pois ao utilizá-la nas equações do tipo $2.27$ depara-se com equações acopladas para os parâmetros $m$ (magnetização) e $\lambda$. De acordo com (RUFFO, 2011), essas equações acopladas podem ser desacopladas simultaneamente para uma temperatura fixa. Fazendo a magnetização ir a zero obtém-se a temperatura crítica reduzida o que equivale à aproximação de Bethe-Peierls (BETHE, 1931; PEIERLS, 1936). O campo de Osanger também possui um valor crítico nessas condições e para uma rede com número de coordenação $z$ esses valores são calculados pelas expressões:

$$\frac{k_B T}{J} = \frac{2}{ln(\frac{z}{z-2})}, \tag{2.38}$$

e

$$\lambda_c = \frac{1}{z-1}. \tag{2.39}$$

Uma nova tentativa de tratamento das funções de correlação entre os spins, foi realizada por Taggart e Fittipaldi (TAGGART; FITTIPALDI, 1982). Essa nova aproximação proposta é conhecida como aproximação do tripleto médio e considera que, seja a média do operador de um spin $S_a$ dada pela equação $2.20$ para um modelo de Ising unidimensional, então podemos definir a correlação entre o spin $S_i$ e uma função de variável de spin qualquer $\xi_i$ como

$$\langle \xi_i S_a \rangle = \left\langle \xi_i tanh\left( K \sum_{\overrightarrow{\delta}} S_{a+\overrightarrow{\delta}} \right) \right\rangle. \tag{2.40}$$

Na aproximação do tripleto médio considera-se que $\xi_i \equiv coth\left( K \sum_{\overrightarrow{\delta}} S_{a+\overrightarrow{\delta}} \right)$, e como $coth(x) = [tanh(x)]^{-1}$, o que torna a equação $2.40$ equivalente a unidade, para a função $\xi_i$ escolhida, e fazendo $\langle \xi_i S_a \rangle \equiv \langle S_a \xi_i \rangle$ chega-se a expressão

$$1 = \left\langle S_a coth\left( K \sum_{\overrightarrow{\delta}} S_{a+\overrightarrow{\delta}} \right) \right\rangle, \tag{2.41}$$

de forma que, ao ser aplicado a técnica do operador diferencial no lado direito da equação $2.41$, tem-se,

$$1 = 4\langle S_a S_1 \rangle A_1^*(K) + 4\langle S_a S_1 S_2 S_3 \rangle A_3^*(K) \tag{2.42}$$

onde $S_i = S_a$ é o sítio central da rede esquematizada na figura $2.2$ e os spins $(S_1, S_2, S_3, S_4)$ correspondem aos seus primeiros vizinhos. Os coeficientes $A_1^*(K)$ e $A_3^*(K)$ são semelhantes aos $A_1(K)$ e $A_3(K)$ da equação $2.30$. Fazendo $\Gamma = \langle S_a S_1 \rangle$ e $\varphi = \langle S_a S_1 S_2 S_3 \rangle$ a partir da equação $2.42$, tem-se que a média de spin $\langle S_a \rangle = m$ pode ser escrita como

$$m = 4A_1^*(K)\Gamma + 4A_3^*(K)\varphi. \tag{2.43}$$

Sendo assim, pode-se também, substituir a expressão encontrada para $m$ na equação $2.43$ na equação $2.30$ obtém-se,

$$4A_1(K)\Gamma = (1 - 4A_1(K))[3A_1^*(K)\Gamma + A_3^*(K)\varphi]. \tag{2.44}$$

No método da aproximação do tripleto médio, Taggart e Fittipaldi usaram $\varphi = 0$ para $T_c = K_c^{-1}$, ou seja, na temperatura crítica a correlação de quatro spins deve ser nula. Chega-se, portanto a relação:

$$4A_1(K) = 3A_1^*(K)(1 - 4A_1(K)). \tag{2.45}$$

O resultado numérico dessa equação para a temperatura crítica é $T_c = 2.680$. Taggart (TAGGART, 1982) usou também a ideia do campo de reação de Osanger e obteve uma temperatura crítica $T_c = 2.490$ para o modelo de Ising em uma rede quadrada. Quando comparado com o valor exato que é $T_c = 2.269$, sua técnica se mostra eficiente.

Neste sentido, será desenvolvido neste trabalho um novo tipo de desacoplamento dentro do formalismo de campo efetivo, cujo objetivo, é alcançar resultados melhores para a temperatura crítica sem desprezar todas as informações contidas nas correlações entre os spins e, consequentemente, mostrar a eficiência da técnica utilizada ao comparar os resultados obtidos com os resultados exatos indicados na literatura.

Deve ser observado que a implantação do termo "novo" presente no título à teoria de campo efetivo deve-se ao fato de que o tratamento das funções de correlação será de forma exata, apenas para determinados pares de spins dentro do aglomerado, escolhidos estrategicamente, com intuito de tirar vantagens de possíveis simetrias do sistema. O método utilizado neste trabalho será aplicado ao modelo de Ising, e será estudado o modelo antiferromagnético em uma rede cúbica com dois sítios centrais e seus vizinhos.

**Segundo caso: Aglomerado com dois sítios centrais (N=2)**

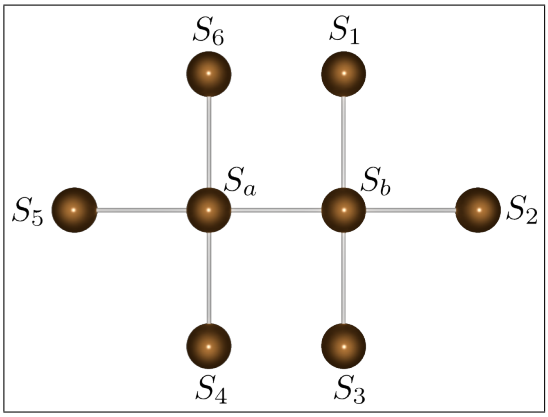
Agora será desenvolvido um exemplo com grau de dificuldade imediatamente superior ao demonstrado no primeiro exemplo desta seção. Para ilustrar o sistema em estudo, considera-se a figura $2.3$ que apresenta novamente uma rede quadrada, porém, desta vez constituída por um aglomerado com dois spins centrais $S_1$ e $S_2$ e seus primeiros vizinhos.

Seguindo os passos da mecânica estatística usual, será apresentado o hamiltoniano de Ising que descreverá as interações entre os sítios centrais do aglomerado e seus respectivos primeiros vizinhos pela seguinte equação:

$$\mathcal{H}_{ab} = -JS_aS_b - JS_a\sum_{\overrightarrow{\delta_1}}^{z-1} S_{a+\overrightarrow{\delta_1}} - JS_b\sum_{\overrightarrow{\delta_1}}^{z-1} S_{b+\overrightarrow{\delta_1}}. \tag{2.46}$$

O primeiro termo do lado direito da equação $2.46$ representa as ligações ferromagnéticas onde $J > 0$ denota as interações de troca entre os sítios centrais $S_a$ e $S_b$, o segundo representa

Figura 12 – Aglomerado formado por dois spins centrais ($S_a$ e $S_b$) em uma rede quadrada.




a soma sobre todos os primeiros vizinhos do sítio $(S_a)$ excluindo a interação com o sítio $S_b$ e, o terceiro a soma é feita sobre os vizinhos do sítio $S_b$ excluindo a interação com o sítio $S_a$.

Para o cálculo da magnetização por sítio, pode-se escolher uma das médias, $\langle S_a \rangle$ ou $\langle S_b \rangle$, uma vez que a magnetização total é dada por,

$$m = \langle \frac{1}{2}(S_a + S_b) \rangle. \tag{2.47}$$

Escolhendo o sítio $S_a$, a magnetização será calculada pela expressão,

$$m = \langle S_a \rangle = \left\langle \frac{Tr S_a [e^{K S_a S_b + a S_a + b S_b}]}{Tr [e^{K S_a S_b + a S_a + b S_b}]} \right\rangle, \tag{2.48}$$

onde $a = K \sum_{\overrightarrow{\delta_1}} S_{a+\overrightarrow{\delta_1}}$ e $b = K \sum_{\overrightarrow{\delta_1}} S_{b+\overrightarrow{\delta_1}}$. A equação $2.48$ para a magnetização, pode ser simplificada se o cálculo for feito através da definição abaixo,

$$m = \left\langle \frac{\partial ln Z}{\partial a} \right\rangle, \tag{2.49}$$

onde $Z$ é a função de partição definida por,

$$Z = \sum_{(S_a, S_b)} e^{K S_a S_b + a S_a + b S_b}, \tag{2.50}$$

e $S_a$ e $S_b$ podendo assumir os valores $\pm 1$. Assim, o cálculo de $m$ a partir da definição $2.50$ fica:

$$m = \left\langle \frac{senh(a+b) + e^{-2K} senh(a-b)}{cosh(a+b) + e^{-2K} cosh(a-b)} \right\rangle. \tag{2.51}$$

A presença de variáveis de spins nos argumentos das funções hiperbólicas torna a equação $2.51$ de difícil manipulação algébrica. Assim, faz-se necessário a utilização da técnica do operador diferencial, nesta ocasião, definida para duas variáveis, como segue,

$$e^{a\hat{D}_x + b\hat{D}_y} F(x,y)|_{x,y=0} = F(x+a, y+b), \tag{2.52}$$

em que $\hat{D}_x = \frac{\partial}{\partial x}$, $\hat{D}_y = \frac{\partial}{\partial y}$ são os operadores diferenciais e $F(x,y)$ é uma função analítica. Dessa forma, pode-se reescrever a equação $2.51$ da seguinte forma,

$$m = \left\langle e^{a\hat{D}_x + b\hat{D}_y} \right\rangle F(x,y)|_{x,y=0}, \tag{2.53}$$

onde $F(x,y)$[4] é representada pela equação:

$$F(x,y) = \frac{sinh(x+y) + e^{-2K} sinh(x-y)}{cosh(x+y) + e^{-2K} cosh(x-y)}. \tag{2.54}$$

Expandindo os termos $a$ e $b$ da equação $(2.53)$ obtém-se,

$$m = \left\langle exp\left( K \sum_{\delta_1} S_{a+\vec{\delta_1}} \hat{D}_x + K \sum_{\delta_1} S_{b+\vec{\delta_1}} \hat{D}_y \right) \right\rangle F(x,y)|_{x,y=0}. \tag{2.55}$$

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

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}_1}^{z-1} e^{KS_{a+\vec{\delta}_1}\hat{D}_x} \prod_{\vec{\delta}_1}^{z-1} e^{KS_{b+\vec{\delta}_1}\hat{D}_y} \right\rangle F(x,y)|_{x,y=0}. \tag{2.56}$$

O número de primeiros vizinhos comuns aos sítios $S_a$ e $S_b$ presentes em um aglomerado, dependendo de sua topologia, será representados por $z'$. A figura $2.4$ é uma ilustração das principais formas de agrupamento de spins em aglomerados com dois sítios centrais representados comumente na literatura.

Fazendo uma generalização para os vizinhos comuns nos aglomerados ilustrados na figura $2.4$, obtém-se:

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}_1}^{z-z'-1} e^{KS_{a+\vec{\delta}_1}\hat{D}_x} \prod_{\vec{\delta_1}}^{z-z'-1} e^{KS_{b+\vec{\delta}_1}\hat{D}_y} \prod_{\vec{\delta_1}}^{z'} e^{K(\hat{D}_x+\hat{D}_y)S_{\vec{\delta}_1}} \right\rangle F(x,y)|_{x,y=0}. \tag{2.57}$$

Utilizando a identidade de van der Warden e fazendo uso da aproximação $2.29$, obtém-se uma equação autoconsistente para a magnetização, uma vez que esta equação envolve funções de correlações de muitos spins, dada por:

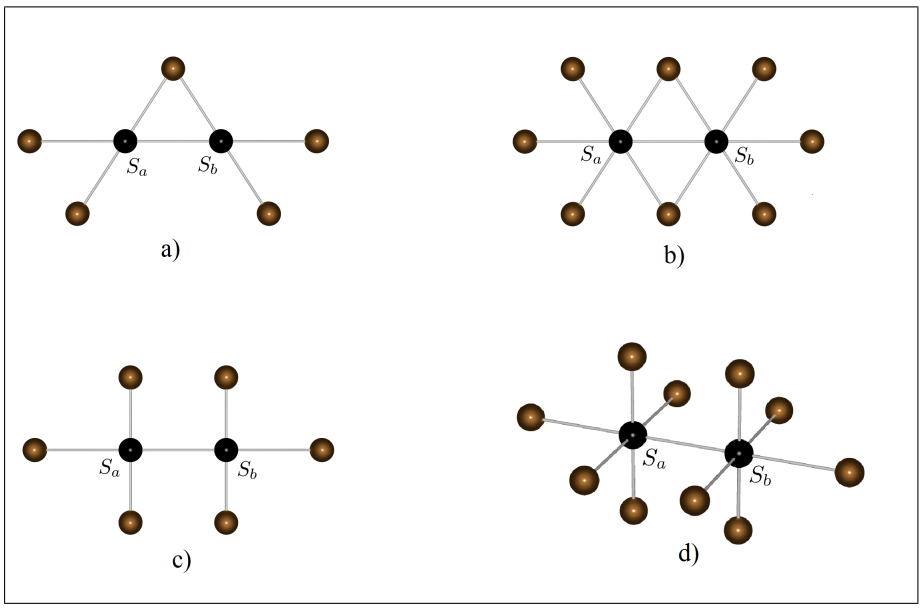
$$m = (\alpha_x + m\beta_x)^{z-z'-1}(\alpha_y + m\beta_y)^{z-z'-1}(\alpha_{xy} + m\beta_{xy})^{z'}, \tag{2.58}$$

onde $\alpha_\nu = cosh(K\hat{D}_\nu)$, $\beta_\nu = senh(K\hat{D}_\nu)$ com $(\nu = x,y)$, $\alpha_{x,y} = cosh[K(\hat{D}_x + \hat{D}_y)]$ e $\beta_{x,y} = senh[K(\hat{D}_x + \hat{D}_y)]$.

Como já foi mencionado a função $F(x,y)$ é uma função ímpar, isso significa que a aplicação do operador $\hat{\varphi}_{par}(\hat{D}_x, \hat{D}_y)$ nesta função é zero no limite $(x,y \to 0)$. Usando esta propriedade de

[4] $F(x,y)$ é também uma função ímpar por causa da presença dos senos hiperbólicos no numerador. Portanto, quando operadores diferenciais pares de $\hat{D}_x$ e $\hat{D}_y$, $\hat{\varphi}_{par}(\hat{D}_\nu)$ com $(\nu = x,y)$ atuarem sobre a função $F(x,y)$ também satisfarão a propriedade $\hat{\varphi}_{par}(\hat{D}_\nu)F(x,y)_{x,y=0} = 0$.

Figura 13 – Aglomerados com $N = 2$ spins representados em diferentes topologias: $(a)$ rede Kagomé $(z = 4, z' = 1)$, (b) quadrada $(z = 4,\ z' = 0)$, (c) triangular $(z = 6, z' = 2)$ e (d) cúbica simples $(z = 6, z' = 0)$.




paridade para função $F(x, y)$, a equação $2.58$ pode ser expandida em série de potências ímpares de $m$. Fisicamente isto é esperado, pois esta equação de estado é invariante para a mudança de $m$ por $-m$, ou seja, não existe direção axial privilegiada. Assim, a equação de primeira ordem para a magnetização é dada por:

$$m = A_1^{z,z'}(T), \tag{2.59}$$

em que:

$$A_1^{z,z'}(T) = [2(z - z' - 1)\alpha_x^{z-z'-1}\alpha_y^{z-z'-1}\beta_x + z'\alpha_y^{z-z'-1}\alpha_x^{z-z'-1}\alpha_{xy}^{z'-1}\beta_{xy}]F(x, y)|_{x,y=0}. \tag{2.60}$$

O cálculo da temperatura crítica em aglomerados com dois spins utilizando a abordagem da teoria de campo efetivo **(EFT-2)**, segue o procedimento que é feito para o tratamento de aglomerados com apenas um spin, ou seja, faz-se o limite de $m \to 0$ e executa a resolução numérica da equação anterior, obtendo-se:

$$A_1^{z,z'}(T_c) = 1. \tag{2.61}$$

Na tabela $5$ apresenta-se valores para temperatura crítica obtidos através da teoria do campo efetivo em aglomerados com $1$ e $2$ spins (NETO, 2004). Analisando esses números, verifica-se que os resultados obtidos utilizando dois spins **EFT-2** são qualitativamente superiores aos provenientes de apenas um spin **EFT-1**, contudo, não satisfatoriamente com os valores exatos obtidos por simulação de Monte Carlo.

De acordo com a literatura, os valores da temperatura crítica $T_c$ obtidos usando a teoria de campo efetivo **(EFT)** podem ser melhorados aumentando-se o tamanho do aglomerado, no

Tabela 5 – Valores da temperatura crítica $T_c$ para o modelo de Ising antiferromagnético de spin-$\frac{1}{2}$ obtidos através das teorias **EFT-1** e **EFT-2** em diversas topologias de rede.

| **Topologia de Rede** | **z** | **z'** | $EFT-1$ | $EFT-2$ | **Monte Carlo/Exato** |
|---|---|---|---|---|---|
| Kagomé | 4 | 1 | 3.089 | 2.923 | 2.143 |
| Quadrada | 4 | 0 | 3.089 | 3.025 | 2.269 |
| Triangular | 6 | 2 | 5.073 | 4.950 | 4.641 |
| Cúbica Simples | 6 | 0 | 5.073 | 5.039 | 4.511 |

**FONTE:** NETO, 2004.

entanto, a dificuldade inerente ao método está associada aos critérios de escolha dos aglomerados de forma que garanta sua convergência (NETO, 2004 *apud* MAIA, 2010). Como regra geral, procura-se escolher a geometria dos aglomerados, de modo a refletir a simetria da rede em questão. Mas, a princípio a escolha da geometria dos aglomerados não garante a convergência do método (MAIA, 2010). Contudo, visando simplificar a aplicação para aglomerados maiores, bem como exibir um teste de convergência, (NETO, 2004) aplicou a técnica do operador diferencial via **EFT** numa rede quadrada, contendo nos seus vértices as variáveis de spin ($S_1, S_2, S_3, S_4$). Na generalização do formalismo para este aglomerado com $N = 4$ spins, (MAIA, 2010; RUFFO, 2011) escolheram um $\mathcal{O}(\Omega) = \frac{1}{4}(S_1 + S_2 + S_3 + S_4)$, como grandeza para caracterizar o parâmetro de ordem $m = \langle\mathcal{O}\rangle$ e, realizando os mesmos procedimentos anteriores para os casos de aglomerados de um dos spins encontra-se $T_c = 2.904$, esse resultado mostra uma certa convergência quando comparado à solução exata $T_c = 2.269$.

A principal diferença entre **MFA** e a **EFT** é o tratamento matemático dado às correlações, ou seja, na aproximação **EFT**, as correlações entre diferentes spins são tratados de forma exata, resultando assim, na identidade de Van de Waerdan, enquanto que a **MFA** trata essas correlações de forma aproximada induzindo erros nos resultados.

Na literatura, dispõe-se de uma variedade de modelos estudados através da **MFA**, uma vez que esta aproximação é o método mais utilizado para resolução de problemas de muitos corpos na mecânica estatística para sistemas superiores a dois, tais como: metamagneto (RUNEHR e FIGUEREDO,1998), modelo de Heisenberg-**AF** (TRUDEAU e PLUMER, 1998); vidro de spin (LI,WALASEK e CIEPLAK, 1997); modelo de Heisenberg com interação Dzyaloshinski-Moriya (SOUSA e FITTIPALDI, 1994), entre outros. Em contrapartida, **EFT** apresenta melhorias nos processos qualitativos com relação à **MFA**, como por exemplo, numa rede unidimensional, onde obtém-se resultados exatos para as propriedades termodinâmicas do modelo de Ising-$\frac{1}{2}$ com $T_c = 0$ (SÁ BARRETO E FITTIPALDI, 1985). Metodologicamente, **EFT** trata exatamente a cinemática de spin fazendo com que o modelo com interação de curto alcance não apresente ordem de longo alcance em uma dimensão. É preciso mencionar que na medida em que se cresce os sistemas de aglomerados, utilizando também o desacoplamento, tem-se melho-

rias na parte qualitativa para estas grandezas críticas, com uma relativa convergência em direção ao resultado exato (SOUSA, 1998). Pode-se ressaltar ainda, que apenas aumentar o aglomerado não é suficiente para garantir um resultado melhor, há que se considerar a aproximação.

As teorias de campo efetivo, como por exemplo **MFA, EFT**, têm em comum uma expressão autoconsistente para o parâmetro de ordem do tipo $m = F(m, T)$, e que ao redor da criticalidade, os expoentes críticos são universais (clássicos), independentes da dimensão espacial $d$ e da simetria do Hamiltoniano, contradizendo assim, as experiências em compostos magnéticos (classe de universalidade).

# 3 MODELO DE ISING, FRUSTRADO, ALEATORIAMENTE DECORADO COM INTERAÇÕES COMPETITIVAS

## 3.1 CONSIDERAÇÕES GERAIS

O referencial que marca o início do estudo sistematizado do modelo antiferromagnético, é o trabalho fenomenológico realizado por Néel (NÉEL, 1932). Através do modelo de Ising, Néel determinou a temperatura crítica $T_N$[1], na qual, a magnetização das sub-redes se anulam para interações de primeiros vizinhos. O fato dos modelos antiferromagnéticos apresentarem transição de fase induzida por campos externos e pontos multicríticos no diagrama de fase, tem sido objeto de grande motivação para estudos na área de mecânica estatística (GALAM *et al*, 1988); (MOREIRA, FIGUEIREDO e HENRIQUES, 2002 *apud* MAIA, 2010).

Na literatura encontra-se muitas investigações que apresentam soluções exatas para o modelo de Ising em diversas formas para modelos unidimensionais e, em certas classes de modelos bidimensionais (SMART, 1966). Já em redes tridimensionais, o método mais rigoroso tem sido a simulação de Monte Carlo (LANDAU e BINDER, 2000). Mas, já é possível obter descrições qualitativas razoáveis deste modelo utilizando técnicas mais simples, como por exemplo, as fundamentadas em (HONMURA e KANEYOSHI, 1979) e (BOMFIM e FITTIPALDI, 1983), cujas descrições apresentam-se de forma satisfatória, quando comparadas com os resultados experimentais.

De acordo com (MAIA, 2010), o modelo de Ising-$\frac{1}{2}$, quando aplicado a uma rede quadrada com interações de primeiros vizinhos $J_1$, fornece resultados exatos para suas propriedades. Porém, este modelo é incapaz de explicar diversos fenômenos reais[2], ocorridos sobretudo em sistemas $2d$ e quase-$2d$ (MORÁN-LOPES, AGUILERA-GRAJA e SANCHES, 1993). Estudos mostram que algumas propriedades físicas desses sistemas só serão explicadas se for considerado interações de longo alcance, no entanto, a inclusão desse tipo de interação, bem como, à aplicação de um campo magnético ao sistema, significa um aumento considerável nas dificuldades de solução do hamiltoniano. Isso implica, que deve ser usado algum tipo de aproximação para que os resultados reproduzidos tenham confiabilidade ao serem comparados aos resultados experimentais.

As investigações de compostos supercondutores de altas temperaturas foram introduzidas na literatura por Bednorz e Müler (BEDNORZ e MULER, 1986). As descobertas nessa nova

[1] A Temperatura de Néel é a temperatura acima da qual desaparece o efeito antiferromagnético dos materiais, passando estes a comportar-se como materiais paramagnéticos (KITTEL, 1986). Recebe este nome em honra a Louis Eugène Félix Néel (1904-2000), que em 1970 recebeu prêmio por seus trabalhos sobre o ferromagnetismo.

[2] Um exemplo de sua limitação do uso do hamiltoniano de Ising na sua forma simplificada com interações de primeiros vizinhos é a disposição do oxigênio na base do plano $XBa_2Cu_3O_\delta$, onde $X$ é um átomo de terra rara e $0 \leq \delta \leq 1$ (MORÁN-LOPES, AGUILERA-GRAJA e SANCHES, 1993).

sub-área da matéria condensada impulsionaram o surgimento de novos modelos fenomenológicos, na tentativa de descrever suas propriedades magnéticas e de transporte. Na proposição de uma possível teoria microscópica para compostos supercondutores formados por planos de $CuO_2$, por exemplo, o magnetismo é um elemento fundamental. É fato, que nos compostos $La_2CuO_4(2-1-4)$ e $YBa_2Cu_3O_6(1-2-3)$ na fase pura, os íons de cobre interagem antiferromagneticamente com um acoplamento $J_1$ no plano e $\lambda J_1$ nos interplanos (EMERY, 1987), (EMERY e REITER, 1988). Experimentos de espalhamento de nêutrons realizados por vários pesquisadores (SHIRANE *et. al.*, 1987), (VAKNIN, 1987) e (TRANCADA, 1988) mostram que o sistema formado por esses compostos são descritos teoricamente pelo modelo de Heisenberg antiferromagnético quase-$2d$ de spin-$\frac{1}{2}$. Dopando-se o composto $La_2CuO_4$ com elementos alcalinos $Ba$ e $Sr$, os íons de oxigênio situados entre os átomos de cobre $Cu$ dispostos no plano apresentam um desbalanceamento de carga, induzindo assim, um spin $\overrightarrow{\sigma}$ efetivo $\frac{1}{2}$, que interage ferromagneticamente, de forma aleatória, com estes átomos, provocando o fenômeno de frustração. É observado que este efeito de interações competitivas nos planos formados por compostos de $CuO_2$, causa uma redução drástica na ordem **AF** do sistema, e consequentemente, a temperatura crítica de Néel $(T_N)$ diminui à medida que a concentração de buracos aumenta, se anulando no valor crítico $x_C$. Então, para $x > x_C$, surge a fase supercondutora, e assim, as correntes supercondutoras nos planos de $CuO_2$ acoplam os pares de Cooper[3] via energia de *exchange*.

O modelo de Ising aleatoriamente decorado é usado com sucesso para descrever as propriedades críticas dos compostos supercondutores de altas temperaturas formados por planos de $CuO_2$, na fase isolante, embora seja fortemente veiculada a ideia que sistemas com spins sejam melhores descritos pelo modelo de Heisenberg. A presença de ligações decoradas causam frustrações no sistema (DINGER, 1987), (LYRA, 1993), (OLIVEIRA, 1990), (SANTOS e COUTINHO, 1987) e (PAUL e MATTIS, 1991).

A utilização da transformação do tipo decoração-iteração (SYOZI, 1972) e (SANTOS e FITTIPALDI, 1989), motivou vários autores a estudarem o modelo de Ising decorado, onde suas propriedades termodinâmicas e diagrama de fase foram analisados com interações entre primeiros vizinhos (SANTOS, 1987), (PAUL e MATTIS, 1991), (JASCUR,*et. all.*, 2004), (KANEYOSHI e SHIN, 1999).

Neste capítulo, será utilizado o modelo de Ising de spin-$\frac{1}{2}$, frustrado, aleatoriamente decorado, com interações competitivas de primeiros vizinhos para simular qualitativamente as propriedades e o comportamento crítico da fase isolante de compostos supercondutores de altas temperaturas, formados por planos de $CuO_2$. O estudo será realizado com base na técnica do operador diferencial em um modelo magnético que será descrito inicialmente por um hamilto-

[3] Um par de Cooper é o nome dado a elétrons que estão ligados juntos de uma certa maneira descrita pela primeira vez por Leon Cooper. Cooper mostrou que uma atração pequena arbitrária entre elétrons em um metal pode causar um estado de paridade de elétrons que tenham uma energia mais baixa que a energia de Fermi, a qual implica que o par está ligado.

niano Ising aleatoriamente decorado, temperado $(quenched)$[4] através da teoria de campo efetivo - **EFT-2**, aplicada a um aglomerado com dois sítios centrais.

## 3.2 DESCRIÇÃO DO MODELO E DO FORMALISMO

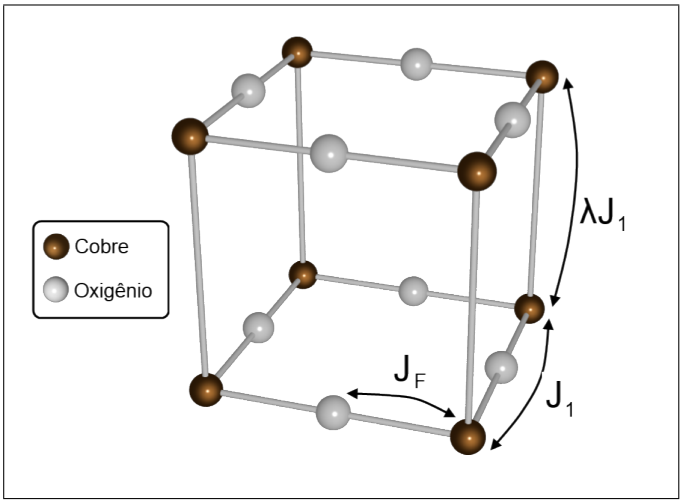



Figura 14 – Célula cúbica unitária formada por átomos de cobre e decorada com íons de oxigênio em seus planos.

A estrutura topológica do sistema considerado neste trabalho, está ilustrada na figura 14, que expressa uma célula cúbica unitária de cobre decorada com íons de oxigênio, na qual, as esferas pretas, representam os átomos de cobre $Cu$ com spin-$\frac{1}{2}$, (denotados por $S_i^{\nu}$, onde $\nu$ representa as sub-redes $A$ ou $B$) e as esferas brancas representam os íons de oxigênio $O^{-}$ de spin-$\frac{1}{2}$ no plano, (denotados por $\sigma_i$).

As interações entre os átomos de cobre $(Cu-Cu)$ ocorrem com acoplamento $J_1$ e $\lambda J_1$, entre os primeiros vizinhos, quando estão no plano e inter-plano, respectivamente, de modo que, $J_1 < 0$ representa a interação de troca antiferromagnética formado pelos spins dispostos nos vértices da célula (nodais), e $\lambda$ é o parâmetro de anisotropia[5] que simula a fraca interação entre os planos. Os átomos de oxigênio localizados no plano entre os átomos de cobre, interagem de forma aleatória com interação efetiva ferromagnética, causando assim o efeito de frustração no sistema, ou seja, $J_F$ é o acoplamento de troca aleatório entre o spin decorador e o spin nodal (simulando a interação $Cu-O$). Dessa forma este modelo pode ser descrito pelo hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = J_1 \sum_{\langle i,j\rangle \in x,y} S_i^A S_j^B + \lambda J_1 \sum_{\langle i,j\rangle \in z} S_i^A S_j^B - J_F \sum_{\langle i,j\rangle \in x,y} \sigma_i (S_i^A + S_j^B), \tag{3.1}$$

[4] Temperado (*quenched*), onde os átomos magnéticos e não magnéticos situam-se ao acaso nos sítios de uma rede cristalina, isto é, a probabilidade que um dado sítio esteja ocupado por um spin é independente de outras ocupações e permanece constante (TAVARES, 2006).

[5] Parâmetro que define a topologia da rede. Neste trabalho $\lambda$ assumirá os valores $\lambda = 0$ para o caso bidimensional, $\lambda = 1$ para o caso tridimensional e $\lambda = 10^{-5}$ para o caso quase-bidimensional.

onde $\langle i,j\rangle \in xy$ representa o somatório sobre os quatro primeiros vizinhos ao plano formado por $CuO_2$, $\langle i,j\rangle \in z$ é a soma sobre os dois primeiros vizinhos do interplano, $S_i^\nu$ $(\nu = A, B)$ é o spin-$\frac{1}{2}$ nodal da sub-rede $\nu$ no sítio $i$ e $\sigma_i$ é o spin-$\frac{1}{2}$ decorador.

As interações $Cu - O$, no plano com acoplamento $J_F$ obedece a seguinte distribuição (*quenched*) de probabilidade:

$$P(J_{ij}) = p\delta(J_{ij} - J_F) + (1-p)\delta(J_{ij}), \tag{3.2}$$

onde $p \in [0,1]$ representando a concentração de ligações decoradas e, os operadores $S_i^\nu$ e $\sigma_i$ restringem-se aos valores $\pm 1$. A concentração de buracos de oxigênio devido a frustração pode variar no intervalo $0 \leq x \leq 2$. A literatura mostra que a supercondutividade substitui o antiferromagnetismo para os seguintes valores de $x$. Por exemplo, em $x \simeq 0,05 - 1$ para os compostos $La_{2-x}(Sr,Ba)_xCuO_4$ com temperatura $T_c \simeq 40K$ (BEDNORZ e MÜLER, 1986) ou para $x \geq 0,30$ no compostos $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ com temperatura $T_c \simeq 90K$ (SHIRANE *et. al.*, 1987), e a concentração *p* de ligações decoradas é um número que varia de 0 à 1. Então, existe uma correspondência de um para um entre a densidade de buracos *p*, do tipo $x = 2p$, que permite que seja feita uma inferência entre a teoria e a experiência. Portanto, o presente modelo poderá simular o comportamento de algumas propriedades magnéticas dos compostos supercondutores de altas temperaturas na sua fase (isolante) antiferromagnética, com parâmetro de frustração definido como:

$$\alpha = \frac{J_F}{J_1}. \tag{3.3}$$

Através do Hamiltoniano descrito pela equação 3.1 pode ser obtido outros tipos de sistemas. Para diversificá-lo, basta alterar o parâmetro de anisotropia, por exemplo, com $\lambda = 0$ obtém-se o caso bidimensional e para $\lambda = 1$ o caso tridimensional. Estudos já realizados rereferentes a esses casos podem ser encontrados nas referências (HONMURA e KANEYOSHI, 1978), (PAUL e MATTIS, 1991) e (FITTIPALDI *et. al. 1992*), onde foi utilizado a técnica do operador diferencial considerando-se apenas interações de primeiros vizinhos. No entanto, dar-se-à maior ênfase ao caso quase-bidimensional em que $\lambda = 10^{-5}$ retratado em (PACOBAHYBA, 2006) para primeiros vizinhos e em (MAIA, 2010) para segundos vizinhos usando **EFT-1**.

Com intuito de estudar a criticalidade do modelo através de sua análise matemática, será utilizado a técnica do operador diferencial num aglomerado com dois spins **EFT-2**, considerando apenas seus primeiros vizinhos. Dessa forma, pretende-se descrever qualitativamente o limite de estabilidade das fases antiferromagnética **AF** e paramagnética **P**. Nesse estudo, será utilizado a transformação do tipo decoração-iteração no modelo representado pelo Hamiltoniano da equação 3.1.

Usando a transformação decoração-iteração de Fisher (FISHER, 1959), na rede matriz, obtém-se o hamiltoniano efetivo dado pela equação:

$$\mathcal{H}_{eff} = \sum_{\langle i,j\rangle \in x,y} J_{i,j} S_i^A S_j^B + \lambda J_1 \sum_{\langle i,j\rangle \in z} S_i^A S_j^B. \tag{3.4}$$

A figura 15 apresenta esquematicamente a transformação decoração-iteração. Essa transformação consiste na obtenção de parâmetros efetivos de interação para os spins da rede matriz, a partir da realização do traço parcial sobre as variáveis decoradoras no modelo em estudo.

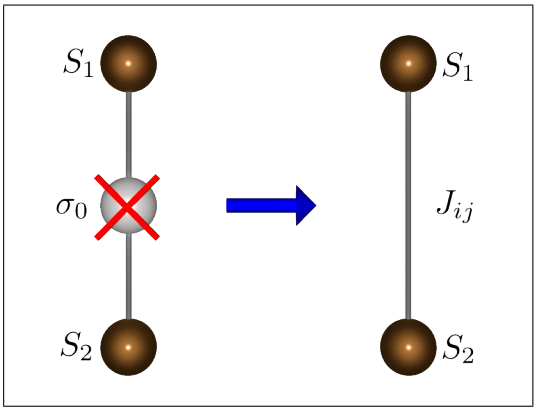



Figura 15 – Representação esquemática de uma ligação decorada com íons de oxigênio na parte **a**. Uma transformação decoração-iteração para a exclusão do átomo de oxigênio na parte **b**.

Neste procedimento ocorre a exclusão do íon decorador (oxigênio), obtendo uma interação efetiva $(J_{eff})$, cuja obtenção, é feita impondo a igualdade representada na equação abaixo:

$$Ae^{(-\beta J_{eff} S_1 S_2)} = Tr_{\sigma_o} e^{(-\beta J_1 S_1^A S_2^B)} e^{[\beta J_F \sigma_o (S_1^A + S_2^B)]}. \tag{3.5}$$

Desenvolvendo a equação 16, obtém-se a seguinte expressão para o $k_{eff}$:

$$k_{eff} = k_1 - \frac{1}{2}\ln(cosh 2k_F), \tag{3.6}$$

onde considerou-se que $k_{eff} = \beta J_{eff}$, $k_1 = \beta J_1$ e $k_F = \beta J_F$.

As interações entre os spins nodais, no plano $xy$, são descritas por uma distribuição de probabilidade (*quenched*) do tipo,

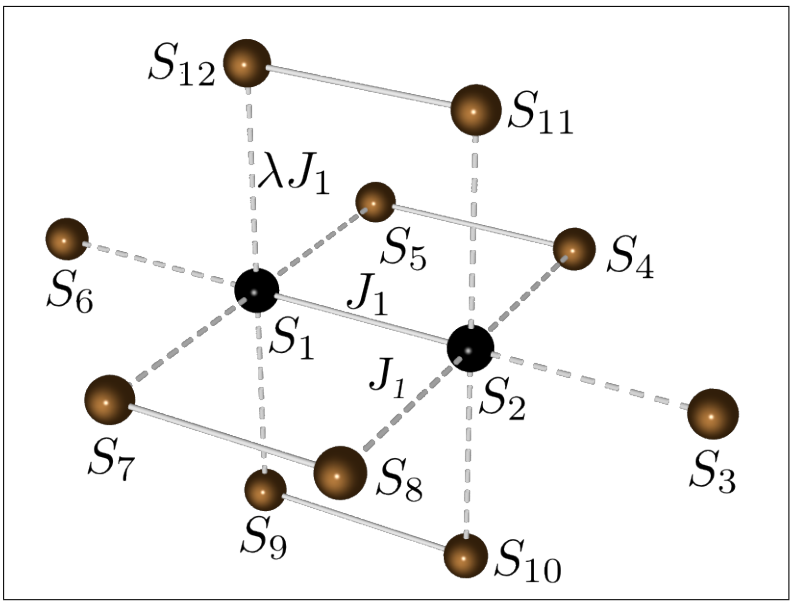
$$P(J_{ij}) = p\delta(J_{ij} - J_{eff}) + (1-p)\delta(J_{ij} - J_1). \tag{3.7}$$

Na distribuição de probabilidade da equação 3.7, $p \in [0,1]$ é a concentração de ligações decoradoras e os operadores $S_i^\nu$, $\sigma_i$ são restritos aos valores $\pm 1$.

## 3.3 APROXIMAÇÃO DE ORDEM ZERO

Na seção anterior, foi realizada uma transformação decoração-iteração para eliminar os átomos de oxigênio da célula cúbica unitária da figura 3.1. Agora, será apresentado um aglomerado formado por um rede cúbica simples, porém, com dois sítios centrais como mostra a figura 3.3.

Figura 16 – Análise por sítio: primeiros vizinhos dos sítios centrais $S_1$ e $S_2$, do ponto de vista dos átomos de cobre.




Escrevendo o Hamiltoniano da equação 3.4 para o aglomerado com dois spins centrais $N = 2$ com seus respectivos primeiros vizinhos, como mostra a figura 3.3 e considerando as sub-redes $\nu = A(B)$ obtém-se a equação:

$$\mathcal{H}_{12}^{\nu} = J_{12}S_1^A S_2^B + S_1^A \sum_{\vec{\delta}_{x,y}} J_{ij} S^B_{1+\vec{\delta}_{x,y}} + \lambda S_1^A \sum_{\vec{\delta}_z} J_1 S^B_{1+\vec{\delta}_z} + S_2^B \sum_{\vec{\delta}_{x,y}} J_{ij} S^A_{2+\vec{\delta}_{x,y}} + \lambda S_2^B \sum_{\vec{\delta}_z} J_1 S^A_{2+\vec{\delta}_z}. \tag{3.8}$$

Rearrumando a equação 3.8 para os primeiros vizinhos nas sub-redes $A$ e $B$ obtém-se a equação:

$$-\beta\mathcal{H}_{12} = -k_{12}S_1^A S_2^B - S_1^A a_{1B} - S_2^B a_{2A}, \tag{3.9}$$

onde $k_{12} = \beta J_{12}$, $k_{ij} = \beta J_{ij}$, $k_1 = \beta J_1$. Devido a grande extensão da equação 3.8, tornou-se necessário escrevê-la de forma reduzida, onde além das mudanças de variáveis para $\beta J$ foi realizada a seguinte substituição:

$$a_{1B} = \sum_{\vec{\delta}_{x,y}} k_{ij} S^B_{1+\vec{\delta}_{xy}} + \lambda \sum_{\vec{\delta}_z} k_1 S^B_{1+\vec{\delta}_z}, \tag{3.10}$$

e

$$a_{2A} = \sum_{\vec{\delta}_{x,y}} k_{ij} S^A_{2+\vec{\delta}_{xy}} + \lambda \sum_{\vec{\delta}_z} k_1 S^A_{2+\vec{\delta}_z}. \tag{3.11}$$

A magnetização da sub-rede $\nu$ é obtida através da média térmica do sistema, expressa pela equação 2.7, descrita como $\langle \mathbb{A} \rangle = \frac{Tr\{\mathbb{A}e^{-\beta\mathcal{H}}\}}{Tr\{e^{-\beta\mathcal{H}}\}}$, que deve ser tomada sobre todas as possíveis configurações do sistema através da equação:

$$m_\nu = \langle\langle S_i^\nu \rangle\rangle_c, \tag{3.12}$$

de modo que $\langle ... \rangle$ representa a média térmica e $\langle ... \rangle_c$ a média configuracional, calculada sobre a probabilidade expressa na equação 3.7. Assim, a magnetização da sub-rede $\nu$ pode ser expressa por:

$$m_\nu = \langle \langle S_i^\nu \rangle \rangle_c = \left\langle \left\langle \frac{Tr\left[S_i^\nu e^{-\beta \mathcal{H}_{12}^\nu}\right]}{Tr e^{-\beta \mathcal{H}_{12}^\nu}} \right\rangle \right\rangle_c = \left\langle \left\langle \frac{\partial ln Z_i}{\partial a_{i\mu}} \right\rangle \right\rangle_c , \tag{3.13}$$

sendo $i = 1, 2$ e $Z_i^\nu$ a função de partição que por definição é expressa por:

$$Z_i^\nu = Tr[e^{\beta \mathcal{H}_{12}^\nu}] = e^{k_{12}} 2cosh(a_{1B} + a_{2A}) e^{-k_{12}} 2cosh(a_{1B} - a_{2A}). \tag{3.14}$$

Substituindo a equação 3.14 na 3.13 e desenvolvendo os cálculos para uma sub-rede escolhida $A$, encontra-se a expressão para a magnetização dada por:

$$m_A = \left\langle \left\langle \frac{senh(x+y) + e^{-2k_{12}} senh(x-y)}{cosh(x+y) + e^{-2k_{12}} cosh(x-y)} \right\rangle \right\rangle_c , \tag{3.15}$$

com $x = a_{1B}$ e $y = a_{2A}$.

Aplicando a técnica do operador diferencial na equação 3.15, definida na equação 2.52 pela expressão $e^{a\hat{D}_x b\hat{D}_y} F(x,y)|_{x=y=0} = F(x+a, y+b)$, onde

$$F(x,y) = \frac{senh(x+y) + e^{-2k_{12}} senh(x-y)}{cosh(x+y) + e^{-2k_{12}} cosh(x-y)}, \tag{3.16}$$

a expressão para a magnetização da sub-rede $A$, pode ser reescrita como:

$$m_A = \langle \langle e^{x\hat{D}_x} . e^{y\hat{D}_y} \rangle \rangle_c F(x,y)|_{x=y=0}. \tag{3.17}$$

Agora, será utilizada a identidade de Van der Waerden, cuja expressão matemática é:

$$e^{\pm \lambda S_i} = cos(\lambda) \pm S_i sen(\lambda), \tag{3.18}$$

a identidade da equação 3.18 será muito útil para o estudo do sistema de spin-$\frac{1}{2}$, com dois estados, proposto neste trabalho. Ela será aplicada para se obter a magnetização da sub-rede $A$ em termos das múltiplas funções de correlação de spins presentes nos produtórios da equação que segue:

$$\begin{aligned} m_A \;=\; & \left\langle \left\langle \prod_{\delta_{x,y}}^{4} [\alpha_x + S^B_{1+\delta_{x,y}} \beta_x] \prod_{\delta_z}^{2} [\alpha'_x + S^B_{1+\delta_z} \beta_{x\lambda}] \prod_{\delta_{x,y}}^{4} [\alpha_y + S^A_{2+\delta_{x,y}} \beta_y] \prod_{\delta_z}^{2} [\alpha'_y + S^A_{2+\delta_z} \beta_{y\lambda}] \right\rangle \right\rangle_c \\ & F(x,y)|_{x=y=0}. \end{aligned} \tag{3.19}$$

Com intuito de reduzir os termos da equação 3.19, foi inserido algumas variáveis para substituir as funções hiperbólicas, onde passou a ser considerado $\alpha_x = cosh(K_{ij}\hat{D}_x)$, $\beta_x = senh(K_{ij}\hat{D}_x)$, $\alpha'_x = cosh(\lambda K_1 \hat{D}_x)$, $\beta_{x_\lambda} = senh(\lambda K_1 \hat{D}_x)$, $\alpha_y = cosh(K_{ij}\hat{D}_y)$, $\beta_y = senh(K_{ij}\hat{D}_y)$, $\alpha'_y = cosh(\lambda K_1 \hat{D}_y)$ e $\beta_{y_\lambda} = senh(\lambda K_1 \hat{D}_y)$.

A equação 3.19 é de difícil tratamento algébrico devido ao infinito número de funções de correlação. Uma vez que as médias térmicas e as configuracionais presentes nesta equação se resumem apenas aos spins ligados, foi realizada uma aproximação de modo que sejam consideradas apenas as correlações de primeira ordem. Para desacoplar os termos da equação 3.19, será utilizado a aproximação de desacoplamento[6] de Zernike (ZERNIKE, 1940), expressa pela equação:

$$\left\langle\left\langle S_i^A \cdot S_j^A \cdot S_p^B \cdots S_p^A \cdot S_q^B \right\rangle\right\rangle_c \cong \left\langle\left\langle S_i^A \right\rangle\right\rangle_c \cdot \left\langle\left\langle S_j^A \right\rangle\right\rangle_c \cdot \left\langle\left\langle S_p^B \right\rangle\right\rangle_c \cdots \left\langle\left\langle S_p^A \right\rangle\right\rangle_c \cdot \left\langle\left\langle S_q^B \right\rangle\right\rangle_c , \quad (3.20)$$

onde $i \neq j \neq p \cdots \neq q$, $m_\nu = \left\langle\left\langle S_i^\nu \right\rangle\right\rangle_c$, $m_\mu = \left\langle\left\langle S_i^\mu \right\rangle\right\rangle_c$. A aproximação expressa pela equação $(3.20)$ desconsidera a correlação entre diferentes spins, porém as relações do tipo $\langle (S_i^\nu)^2 \rangle \cong 1$ são tomadas exatamente na contagem, enquanto a aproximação de campo médio usual despreza todo tipo de correlação.

Aplicando a equação 3.20 na 3.19 e calculando a média configuracional obtém-se a magnetização expressa como:

$$m_A = (X + m_B Y)^4 (X_1 + m_B Y_1)^2 (X_2 + m_A Y_2)^4 (X_3 + m_A Y_3)^2 F(x,y)|_{x=y=0}, \quad (3.21)$$

cujas médias são dadas pelas equações:

$$X = \langle \alpha_x \rangle_c = p cosh(K_{eff} \hat{D}_x) + (1-p) cosh(K_1 \hat{D}_x), \quad (3.22)$$

$$Y = \langle \beta_x \rangle_c = p senh(K_{eff} \hat{D}_x) + (1-p) senh(K_1 \hat{D}_x), \quad (3.23)$$

$$X_1 = \langle \alpha_x^{'} \rangle_c = cosh(\lambda K_1 \hat{D}_x), \quad (3.24)$$

$$Y_1 = \langle \beta_{x_\lambda} \rangle_c = senh(\lambda K_1 \hat{D}_x), \quad (3.25)$$

$$X_2 = \langle \alpha_y \rangle_c = p cosh(K_{eff} \hat{D}_y) + (1-p) cosh(K_1 \hat{D}_y), \quad (3.26)$$

$$Y_2 = \langle \beta_y \rangle_c = p senh(K_{eff} \hat{D}_y) + (1-p) cosh(K_1 \hat{D}_y), \quad (3.27)$$

$$X_3 = \langle \alpha_y^{'} \rangle_c = cosh(\lambda K_1 \hat{D}_y), \quad (3.28)$$

$$Y_3 = \langle \beta_{y_\lambda} \rangle_c = senh(\lambda K_1 \hat{D}_y). \quad (3.29)$$

[6] O desacoplamento de Zernike consiste em uma aproximação que desconsidera as correlações multi-spins.

Como a função $F(x,y)$ é uma função ímpar, a combinação de operadores diferenciais pares $\hat{\varphi}_{par}[(\hat{D}_x).(\hat{D}_y)]$, envolvidas na expansão quando se aplica o limite $x = y = 0$, é nula, isso significa que $\hat{\varphi}_{par}[(\hat{D}_x)(\hat{D}_y)]F(x,y)|_{x=y=0} = 0$.

Pode-se ainda reescrever a equação 3.21 utilizando a condição de contorno $m = m_\nu = -m_\mu$ que descreve a condição de ligação antiferromagnética, assim tem-se que:

$$m = (X - mY)^4 (X_1 - mY_1)^2 (X_2 + mY_2)^4 (X_3 + mY_3)^2 F(x,y)|_{x=y=0}. \tag{3.30}$$

Agora, escrevendo a equação 3.30 em termos dos coeficientes $A_n$ onde $n$ é ímpar, obtém-se a equação:

$$m = A_1 m + A_3 m^3 + A_5 m^5 + A_7 m^7 + A_9 m^9. \tag{3.31}$$

### 3.3.1 Limite de Estabilidade da Fase Antiferromagnética

Para estudar o diagrama de fase do sistema nas proximidades do ponto para o qual a temperatura é crítica, deve-se fazer o limite de $m \to 0$ na equação 3.3. Com esse procedimento obtém-se a temperatura de Néel $T_N$ como função dos parâmetros $\lambda, p, \alpha$ através da equação:

$$A_1(T, \lambda, p, \alpha) = 1. \tag{3.32}$$

Fazendo uso da equação 3.32, apresenta-se a seguir, uma análise dos resultados encontrados para o diagrama de transição de fase e para as curvas de magnetização, obtidos mediante a teoria de campo efetivo **EFT-2**. Obteve-se resultados para três valores do parâmetro de anisotropia, ou seja, $\lambda = 10^{-5}$, $\lambda = 0$ e $\lambda = 1$, de forma que para $\lambda = 10^{-5}$ e $\lambda = 0$ o comportamento das grandezas analizadas coincidiram, portanto, optou-se por apresentar apenas os resultados para os casos quase-bidimensional e tridimensional, ou seja, $\lambda = 10^{-5}$ e $\lambda = 1$.

A resolução numérica da equação 3.32, fornece as curvas críticas da temperatura de Néel $T_N$ através do diagrama de fase no plano $\frac{K_B T_N}{J_1}$ *versus* $p$. Os resultados encontrados para $T_N$, foram obtidos usando a metodologia **EFT-2**, com o parâmetro de frustração $\alpha$ assumindo diversos valores, da anisotropia $\lambda$ restrito aos valores ($10^{-5}$ e 1), correspondendo respectivamente as topologias quase-bidimensional e tridimensional. Foi observado que as linhas da temperatura crítica são coincidentes para as topologias bidimensional e quase-bidimensional, portanto, optou-se pela segunda ser representada neste texto.

Alguns aspectos podem ser observados de forma geral para ambos os valores assumidos por $\lambda$. Dentre os mais relevantes, destacam-se o surgimento de linhas críticas de transição de fase de segunda ordem, que separam as fases antiferromagnética (**AF**) e paramagnética (**P**), o decrescimento da temperatura crítica $T_N$ com o aumento da concentração $p$, atingindo valor nulo em diferentes valores de $p_c$ e formando uma sequência não linear decrescente conforme o parâmetro de frustração aumenta, bem como, o surgimento de reentrâncias[7] para quase todas

[7] O fenômeno de reentrância é caracterizado pela presença de mais de uma temperatura crítica $T_N$ para um mesmo valor de $p$.

as linhas críticas dos diagramas, onde o grau de intensidade decresce conforme é aumentado o valor de $\alpha$. A influência do parâmetro $\alpha$ é enfraquecer a ordem **AF**, justificando, portanto, o decréscimo da temperatura.

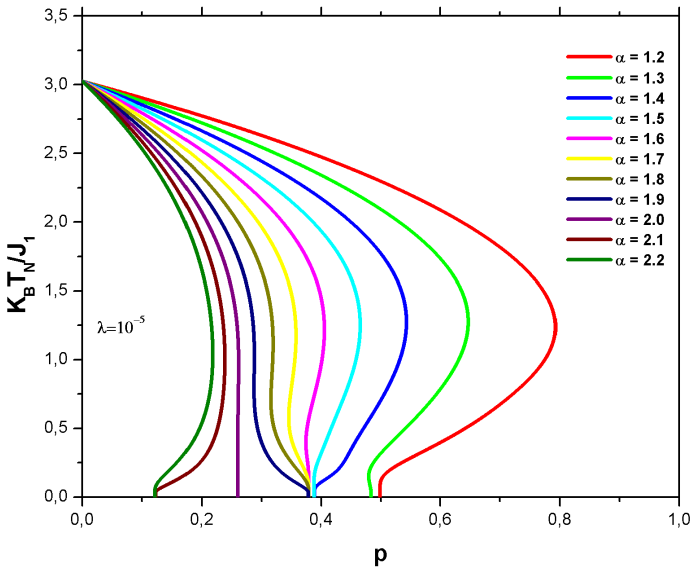



Figura 17 – Diagrama de fase no espaço $(T, p)$ para o modelo de Ising-$\frac{1}{2}$ aleatoriamente decorado com $\lambda = 10^{-5}$ para vários valores de $\alpha$.

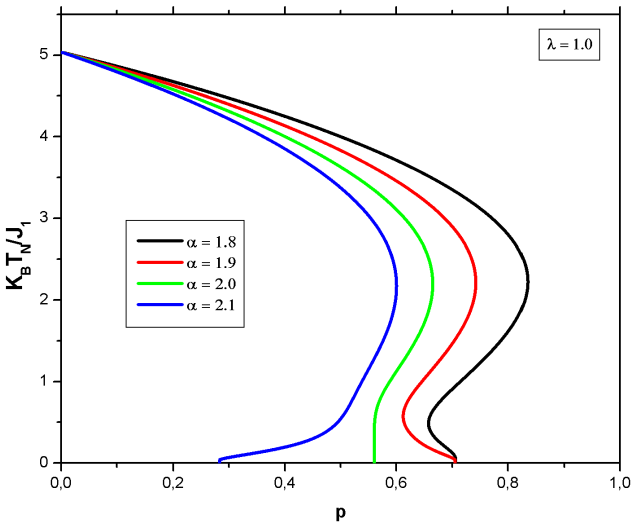



Figura 18 – Diagrama de fase no espaço $(T, p)$ para o modelo de Ising aleatoriamente decorado com $\lambda = 1,0$ para diferentes valores do parâmetro de frustração $\alpha$.

O fenômeno de reentrância, cujas características dependem da razão $\alpha = \frac{J_F}{J_1}$, provoca o efeito competitivo das interações. Sua origem está relacionada com as flutuações térmicas na frustração e nas funções de correlações spin-spin e buraco-buraco. Esta ideia é baseada no fato de que o comportamento reentrante foi experimentalmente observado em supercondutores de alta temperaturas, como o $YBa_2Cu_3O_{(6+x)}$ em baixas temperaturas (FITTIPALDI *et. al.*,1992).

Na figura $3.4$ é apresentado o diagrama de fase no plano ($\frac{K_B T_N}{J_1}$ *versus* $p$) com parâmetro de anisotropia $\lambda = 10^{-5}$ para diferentes valores de $\alpha$. O resultado foi obtido através da **EFT-2**, mediante a aplicação da transformação decoração-iteração na rede original. Em relação ao eixo $\frac{K_B T_N}{J_1}$, verifica-se que as linhas críticas convergem para uma única temperatura, cujo valor é $T_N = 3,023$. Já no caso fundamental, em ($T = 0$), nota-se que conforme o parâmetro de frustração é gradativamente elevado de $1,2$ até $2,2$, algumas linhas críticas convergem para diferentes valores de concentração crítica $p_c$, formando uma sequência decrescente. É observado também, que o fenômeno reentrante se apresenta de forma mais acentuada conforme a concentração aumenta. O resultado obtido para a temperatura $T_N$, é sensivelmente inferior ao apresentado na literatura (PACOBAHYBA, 2006) encontrado utilizando-se o mesmo modelo, porém, para aglomerado com um sítio **EFT-1** em primeiros vizinhos, cujo valor é ($T_N = 3,025$).

No diagrama de fase apresentado na figura $3.5$, onde considerou-se a simetria tridimensional, $\lambda = 1$. Algumas caracterísitcas neste diagrama, apresentam certas semelhanças com o comportamento apresentado pelas linhas para volares de $\alpha$ correspondentes na figura $3.4$, tais como, a convergência das linhas críticas para um única temperatura cujo valor é $T_N = 5,039$, que de acordo com a literatura é condizente com a topologia da rede e, a convergência destas linhas para diferentes concentração crítica $p_c$ e a presença do fenômeno reentrante que se distingue do caso anterior para $\alpha = 1,8$ e $\alpha = 1,9$, pelo fato de apresentar mais de uma reentrância para uma única linha crítica.

### 3.3.2 Curva da Magnetização

Resolvendo a equação $3.31$ para diferentes valores de $T$, $p$, $\lambda$, $\alpha$, pode-se descrever também, o comportamento da magnetização em função da temperatura. Fisicamente, é esperado que as magnetizações de sub-rede sejam opostas, ou seja, $m_A = -m_B$ e diferente de zero para $T < T_N$, em virtude da condição de ligação para a fase antiferromagnética $AF$ que se apresenta fortemente dependente da razão entre as interações de primeiros vizinhos e também de $p$ e $\alpha$.

A magnetização é uma grandeza de extrema importância neste estudo, uma vez que representa o parâmetro de ordem que limita as fases ordenada (antiferromagnética) e desordenada (paramagnética) do sistema. As figuras de $3.6$ à $3.13$ mostram os resultados obtidos para $m$ *versus* $\frac{K_B T_N}{J_1}$.

Por razões didáticas, a análise dos resultados dessa primeira aproximação será feita separadamente para as duas formas de topologias que constituem o modelo em estudo. Inicialmente serão analisados os gráficos para os quais considerou-se a topologia quase-bidimensional.

Em cada uma das figuras de $3.6$ à $3.9$, adotou-se um valor fixo para o parâmetro de frustração $\alpha$ mantendo-se $\lambda = 10^{-5}$. Nota-se que algumas características são comuns nessas figuras, por exemplo, o comportamento contínuo das linhas que representam o parâmetro de ordem $m$, in-

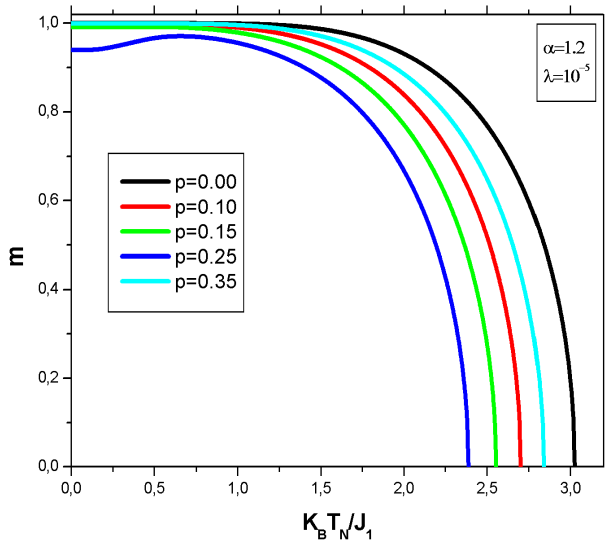



Figura 19 – Gráfico da magnetização em função da temperatura para o modelo de Ising-$\frac{1}{2}$, quase-$2d$, para diversos valores da concentração $p$ com $\alpha = 1, 2$.

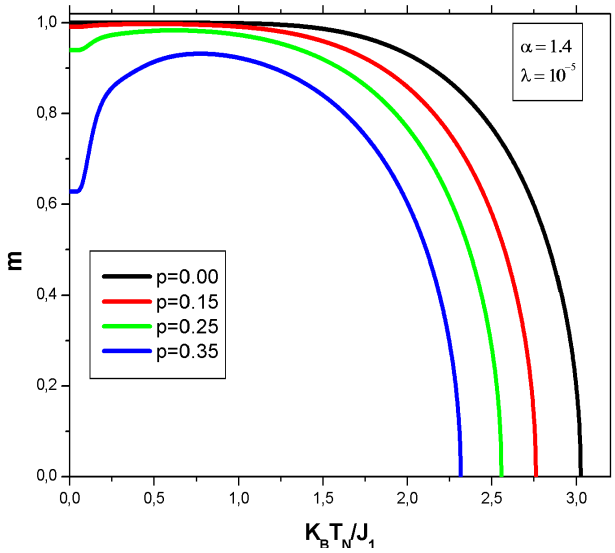



Figura 20 – Gráfico da magnetização em função da temperatura para o modelo de Ising-$\frac{1}{2}$, quase-$2d$, para diversos valores da concentração $p$ com $\alpha = 1, 4$.

dicando a ocorrência de uma transição de segunda ordem da fase ordenada **AF** para a desordenada **P**, o decrescimento do parâmetro $m$ com o aumento da temperatura, de forma que $m \to 0$ anulando-se em $T = T_c$ e uma redução gradativa de $T_c$ conforme é aumentada a concetração $p$. Outro aspecto relevante, observado neste primeiro conjunto de figuras, é o decréscimo apresentado pela magnetização no estado fundamental, ou seja, em $T = 0$. A medida que $\alpha$ cresce o parâmetro $m$ apresenta um decréscimo mais acentuado, principalmente, nos gráficos para os quais tem-se as maiores concentrações $p$.

Na figura 3.6 surge o fenômeno reentrante em baixas temperaturas de forma bem sensível para a concentração $p = 0, 45$. Esse fenômeno aparece de forma bem acentuada para $p = 0, 35$

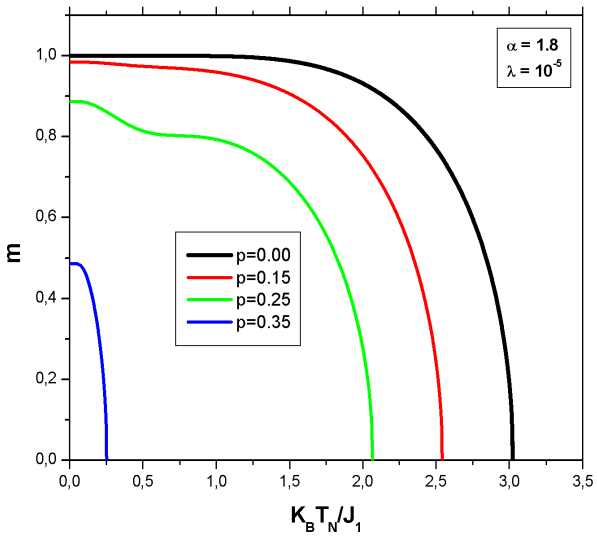



Figura 21 – Gráfico da magnetização em função da temperatura para o modelo de Ising-$\frac{1}{2}$, quase-$2d$, para diversos valores da concentração $p$ com $\alpha = 1,8$.

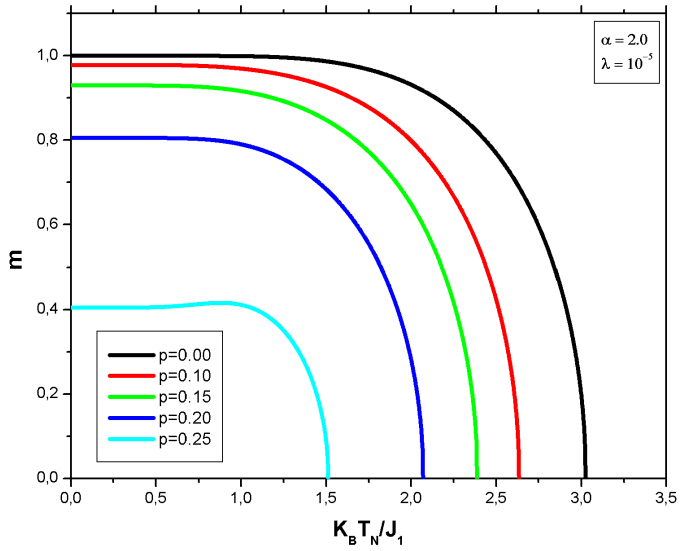



Figura 22 – Gráfico da magnetização em função da temperatura para o modelo de Ising-$\frac{1}{2}$, quase-bidimensional, para diversos valores da concentração $p$ com $\alpha = 2,0$.

na figura 3.7. Já na figura 3.8 tem-se o registro do menor valor obtido para $T_c$, e na figura 3.9 o menor valor alcançado para a magnetização na análise desse primeiro conjunto de figuras.

Agora será analisado o segundo conjunto de figuras de 3.10 à 3.13. Esse conjunto de gráficos apresenta os resultados obtidos para topologia tridimensional, $\lambda = 1.0$, com $\alpha$ fixo em cada caso para vários valores de concentração $p$.

Variando a topologia do sistema para $\lambda = 1.0$, nota-se através das figuras 3.10 à 3.13 um comportamento similar aos do caso anterior $\lambda = 10^{-5}$, porém, de forma menos intensa. Na figura 3.10 observa-se que todos os gráficos convergem para o valor máximo da magnetização

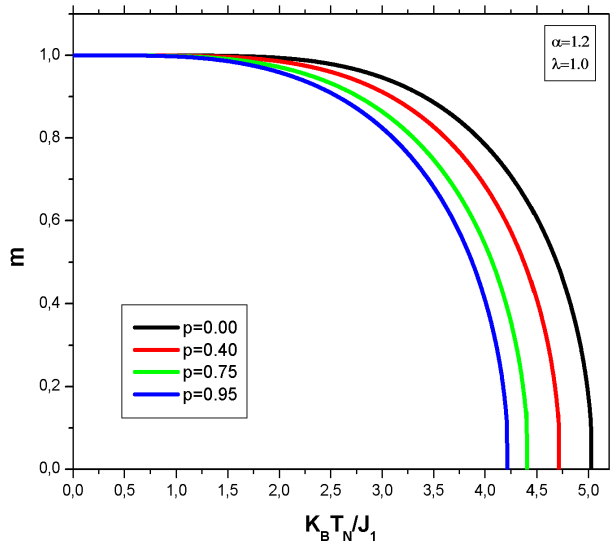



Figura 23 – Gráfico da magnetização em função da temperatura para o modelo de Ising-$\frac{1}{2}$, tridimensional, para diversos valores da concentração $p$ com $\alpha = 1,2$.

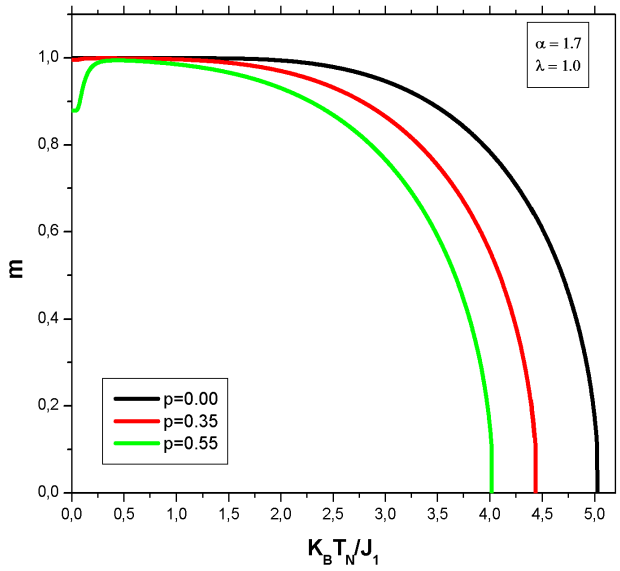



Figura 24 – Gráfico da magnetização em função da temperatura para o modelo de Ising-$\frac{1}{2}$, tridimensional, para diversos valores da concentração $p$ com $\alpha = 1,7$.

$m = 1$ em $T = 0$, ou seja, para $\alpha = 1.2$ a magnetização não sofre influência da concentração $p$. Já nas demais figuras, observa-se reentrâncias em baixas temperaturas e decréscimos no parâmetro $m$ e $T_N$, porém, com valores menos intensos.

## 3.4 NOVA ABORDAGEM DA TEORIA DE CAMPO EFETIVO

Nesta seção, será desenvolvido o procedimento pelo qual pretende-se obter melhores resultados para a temperatura crítica $T_N$ do sistema magnético em estudo. Muitas são as formas alternativas que visam melhorar a temperatura crítica neste tipo de sistema com a implementação

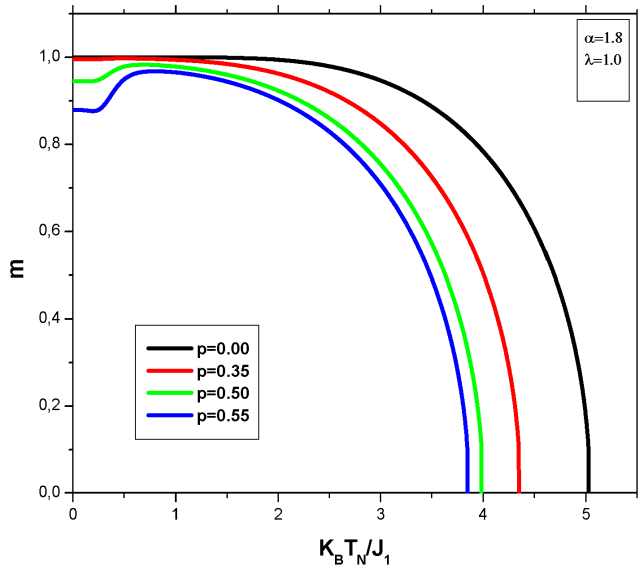



Figura 25 – Gráfico da magnetização em função da temperatura para o modelo de Ising-$\frac{1}{2}$, tridimensional, para diversos valores da concentração $p$ com $\alpha = 1,8$.

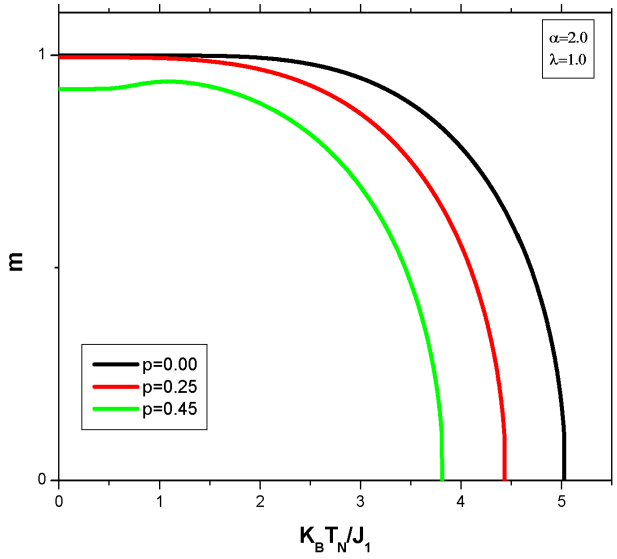



Figura 26 – Gráfico da magnetização em função da temperatura para o modelo de Ising-$\frac{1}{2}$, tridimensional, para diversos valores da concentração $p$ com $\alpha = 2,0$.

da técnica do operador diferencial. De acordo com a literatura, os caminhos mais utilizados para este fim tem sido o aumento do aglomerado e a aplicação de diferentes maneiras de desacoplamento das funções de correlação. Neste trabalho, será utilizado essas duas variantes metodológicas, onde o aglomerado passará a ter dois sítios centrais, e será utilizada uma nova forma de desacoplamento das funções entre os pares de spins ligados.

Seguindo o modelo e o formalismo da seção 3.2, será utilizada a rede cúbica da figura 3.1, porém, com parâmetro de anisotropia $\lambda = 1.0$. O Hamiltoniano do sistema será representado pela equação 3.1 que passará a ter características efetivas a partir da transformação decoração-iteração realizada na rede matriz. A partir da aproximação apresentada na subseção

2.2.2, será aplicada uma nova abordagem metodológica à *EFT* utilizada usualmente na mecânica estatística. Na intervenção metodológica, que será referenciada neste trabalho por *NEFT*, serão consideradas as correlações entre pares de spins previamente estabelecidos (ligados) considerando-se a simetria da rede. A eficácia deste procedimento, será analisada de forma qualitativa através da comparação dos dados obtidos com sua aplicação e aqueles apresentados na seção 3.3, obtidos através da metodologia usual **EFT**.

### 3.4.1 Modelo de Ising aplicado à NEFT

A intervenção metodológica que será aplicada à teoria de campo efetivo neste trabalho, será chamada de nova teoria de campo efetivo **NEFT**. No seu desenvolvimento, será considerado a estrutura representada pela rede cúbica esquematizada na figura 3.3. No entanto, passa a ser considerada a correlação $F$ entre os sítios centrais $S_1$ e $S_2$ de forma que, em primeira aproximação, os spins de suas vizinhanças serão alinhados ao longo do eixo $z$, que em resposta ao restante do sistema infinito será chamada de aproximação axial. Será utilizado o modelo de Ising puro, uma vez que os spins centrais interagem apenas em uma única coordenada (eixo $z$) e, portanto, a função de correlação entre eles será representada matematicamente por,

$$F_z = \langle S_1^z S_2^z \rangle. \tag{3.33}$$

As correlações representadas pela equação 3.33 serão equivalentes a que ocorre entre os pares de spins, primeiros vizinhos destacados nas figuras $3.14a$, $3.14b$, $3.14c$ e $3.14d$, que devido a simetria translacional do sistema, os pares de spins correlacionam-se mediante a função 3.33 como:

$$F = \langle S_4^z S_5^z \rangle = \langle S_7^z S_8^z \rangle = \langle S_9^z S_{10}^z \rangle = \langle S_{11}^z S_{12}^z \rangle. \tag{3.34}$$

Por definição a função de correlação $F$ deve ser escrita na forma,

$$F \equiv \langle \overrightarrow{S}_1 \cdot \overrightarrow{S}_2 \rangle. \tag{3.35}$$

Utilizando a média do operador $\mathcal{O}$ definida pela equação 2.7 para as grandezas magnetização e função de correlação obtém-se,

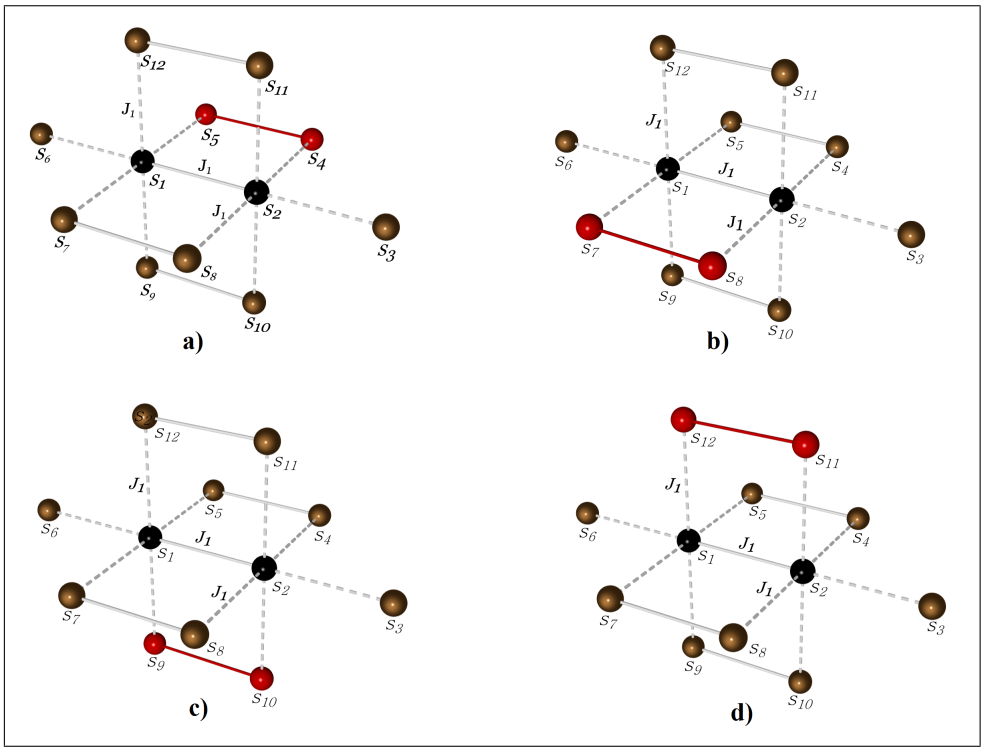
$$m_\nu = \left\langle \frac{Tr S_1^\nu e^{-\beta\mathcal{H}}}{Tr e^{-\beta\mathcal{H}}} \right\rangle, \tag{3.36}$$

e

$$F = \left\langle \frac{Tr S_1^A S_2^B e^{-\beta\mathcal{H}}}{Tr e^{-\beta\mathcal{H}}} \right\rangle. \tag{3.37}$$

O modelo cujo tratamento constitui o principal objetivo deste trabalho, seguirá os moldes da seção 3.3, onde a partir da uma transformação decoração-iteração realizada no sistema, afim

Figura 27 – Rede cúbica simples representando a correlação entre pares de spins correlacionados: **a** $\langle S_4^z S_5^z \rangle$, **b** $\langle S_7^z S_8^z \rangle$, **c** $\langle S_9^z S_{10}^z \rangle$ e **d** $\langle S_{11}^z S_{12}^z \rangle$.




de excluir os átomos decoradores, obtendo-se portanto, apenas interações efetivas, como mostra a figura 3.2. O sistema é formado por uma rede cúbica simples, com dois sítios centrais. A topologia da rede é tridimensional, ou seja, $\lambda = 1$, portanto, para a sua representação matemática será utilizada o hamiltoniano da equação 3.1 que ao substituir o parâmetro de anisotropia tridimensional pode ser reescrito da seguinte forma,

$$\mathcal{H} = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^A S_j^B - J_F \sum_{\langle i,j \rangle \in x,y} \sigma_i (S_i^A + S_j^B), \tag{3.38}$$

Fazendo uma transformação decoração-iteração na rede matriz, como é mostrado na figura 3.2, obtém-se o hamiltoniano efetivo, que corresponde a reescrever a equação 3.38 na forma:

$$\mathcal{H}_{eff} = \sum_{\langle i,j \rangle} \in x, y J_{i,j} S_i^A S_j^B + J_1 \sum_{\langle i,j \rangle \in z} S_i^A S_j^B. \tag{3.39}$$

Desenvolvendo a equação 3.39 para os primeiros vizinhos dos sítios $S_1$ e $S_2$ nas sub-redes $A$ e $B$ obtém-se a equação:

$$\mathcal{H}_{12}^{\nu} = J_{12} S_1^A S_2^B + S_1^A \left( \sum_{\vec{\delta}_{x,y}} J_{ij} S^B_{1+\vec{\delta}_{x,y}} + \sum_{\vec{\delta}_z} J_1 S^B_{1+\vec{\delta}_z} \right) + S_2^B \left( \sum_{\vec{\delta}_{x,y}} J_{ij} S^A_{2+\vec{\delta}_{x,y}} + \sum_{\vec{\delta}_z} J_1 S^A_{2+\vec{\delta}_z} \right). \tag{3.40}$$

Devido a equação $3.40$ ser muito extensa, será feita uma substituição de variáveis, de forma que ela pode ser escrita em sua forma reduzida, as variáveis são:

$$a_{1B} = \sum_{\overrightarrow{\delta}_{x,y}} k_{ij} S^{B}_{1+\overrightarrow{\delta}_{xy}} + \sum_{\overrightarrow{\delta}_{z}} k_1 S^{B}_{1+\overrightarrow{\delta}_{z}}, \tag{3.41}$$

e

$$a_{2A} = \sum_{\overrightarrow{\delta}_{x,y}} k_{ij} S^{A}_{2+\overrightarrow{\delta}_{xy}} + \sum_{\overrightarrow{\delta}_{z}} k_1 S^{A}_{2+\overrightarrow{\delta}_{z}}. \tag{3.42}$$

Substituindo as variáveis $a_{1B}$ e $a_{2A}$ na equação $3.40$, o hamiltoniano do sistema pode ser expresso em sua forma reduzida como:

$$-\beta\mathcal{H}_{12} = -k_{12} S^{A}_{1} S^{B}_{2} - S^{A}_{1} a_{1B} - S^{B}_{2} a_{2A}, \tag{3.43}$$

onde $k_{12} = \beta J_{12}$, $k_{ij} = \beta J_{ij}$, $k_1 = \beta J_1$.

No estudo de sistemas de spins dar-se ênfase, inicialmente, a obtenção da função de partição, pois, uma vez definida, ela possibilita a obtenção das grandezas termodinâmicas que se pretende estudar. A função de partição do modelo em análise é representada pela definição $3.14$ de onde obtém-se,

$$Z^{\nu}_{i} = e^{k_{12}} 2cosh(a_{1B} + a_{2A}) + e^{-k_{12}} 2cosh(a_{1B} - a_{2A}). \tag{3.44}$$

Para se obter a função de correlação e a magnetização da sub-rede $A$ ou $B$ deve-se utilizar a função de partição representada pela equação $3.44$. Assim, fazendo uso da aproximação axial mencionada anteriormente, onde considera-se $F = F_z$, não haverá tratamento para as componentes $F_x$ e $F_y$ do sistema.

No sistema magnético objeto de estudo desta dissertação, será considerado que a desordem magnética é do tipo *quenched*, ou seja, a média configuracional é independente da média térmica que pode ser simulada pela distribuição de probabilidade $P(J_{ij})$ utilizada usualmente para sistemas magnéticos reais como,

$$P(J_{ij}) = p\delta(J_{ij} - J_{eff}) + (1 - p)\delta(J_{ij} - J_1). \tag{3.45}$$

Então, para obter uma quantidade termodinâmica representada pelas propriedades de um operador $\mathcal{O}$, deve-se calcular as médias térmicas e configuracionais do sistema a partir da equação,

$$\langle\langle\mathcal{O}\rangle\rangle_c = \int \mathcal{O} P(J_{ij}) dJ_{ij}, \tag{3.46}$$

de modo que, por definição, a propriedade representada pelo operador $\mathcal{O}$ é obtida através de equação,

$$\langle\langle\mathcal{O}\rangle\rangle_c = \left\langle \left\langle \frac{Tr[\mathcal{O}e^{-\beta\mathcal{H}_{12}}]}{Z} \right\rangle \right\rangle_c. \tag{3.47}$$

Definindo a magnetização da subrede $m_\nu$ como,

$$m_\nu = \left\langle \left\langle S_\mu^z \right\rangle \right\rangle_c \tag{3.48}$$

Então, tem-se que,

$$m_\nu = \left\langle \left\langle \frac{1}{Z_i^\nu} \frac{\partial Z_i^\nu}{\partial a_{i\mu}} \right\rangle \right\rangle_c . \tag{3.49}$$

Substituindo $Z_i^\nu$ pela equação $3.44$, obtém-se como resultado,

$$m_\nu = \left\langle \left\langle \frac{senh(a_{1B}+a_{2A}) + e^{-2K_{12}} senh(a_{1B}-a_{2A})}{cosh(a_{1B}+a_{2A}) + e^{-2K_{12}} cosh(a_{1B}-a_{2A})} \right\rangle \right\rangle_c . \tag{3.50}$$

De forma semelhante, obtém-se a função de correlação $F$ resolvendo a equação,

$$F = \left\langle \left\langle \frac{\partial ln Z_i^\nu}{\partial K} \right\rangle \right\rangle_c , \tag{3.51}$$

obtendo-se como resposta,

$$F = \left\langle \left\langle \frac{cosh(a_{1B}+a_{2A}) - e^{-2K_{12}} cosh(a_{1B}-a_{2A})}{cosh(a_{1B}+a_{2A}) + e^{-2K_{12}} cosh(a_{1B}-a_{2A})} \right\rangle \right\rangle_c . \tag{3.52}$$

Chamando $x = a_{1B}$ e $y = a_{2A}$ com intuito de amenizar a sobrecarga de variáveis, as equações $3.50$ e $3.52$ podem ser reescritas como,

$$m_\nu = \left\langle \left\langle \frac{senh(x+y) + e^{-2k_{12}} senh(x-y)}{cosh(x+y) + e^{-2k_{12}} cosh(x-y)} \right\rangle \right\rangle_c , \tag{3.53}$$

e

$$F = \left\langle \left\langle \frac{cosh(x+y) - e^{-2k_{12}} cosh(x-y)}{cosh(x+y) + e^{-2k_{12}} cosh(x-y)} \right\rangle \right\rangle_c . \tag{3.54}$$

O grande número de funções acopladas que são encontradas ao se tentar resolver as equações $3.53$ e $3.54$ constituem o principal obstáculo para a obtenção de soluções exatas. A solução apresentada na literatura para este problema, tem sido a aplicação de técnicas que viabilize o tratamento dessas funções. Neste trabalho, essa dificuldade é contornada mediante a utilização da técnica do operador diferencial, pela qual, é possível desenvolver expressões que, preservando a natureza exata dos resultados obtidos nas Equações $3.53$ e $3.54$, removem as variáveis de spins dos argumentos daquelas funções. A técnica do operador diferencial para uma variável é representada na seguinte forma,

$$e^{a\hat{D}_x b\hat{D}_y} \mathcal{F}(x,y)|_{x=y=0} = \mathcal{F}(a+b), \tag{3.55}$$

que ao ser aplicada às equações $3.53$ e $3.54$, obtém-se as grandezas $m_\nu$ e $F$ em função dos operadores diferenciais $\hat{D}_x$ e $\hat{D}_y$, representadas por,

$$m_\nu = \langle\langle e^{x\hat{D}_x} e^{y\hat{D}_y} \rangle\rangle_c \langle\langle g(x,y)|_{x=y=0} \rangle\rangle_c, \tag{3.56}$$

e

$$F = \langle\langle e^{x\hat{D}_x} e^{y\hat{D}_y}\rangle\rangle_c \langle\langle h(x,y)|_{x=y=0}\rangle\rangle_c. \tag{3.57}$$

Aplicando a identidade de van der Warden às equações 3.56 e 3.57, pode-se reescrevê-las na forma,

$$m_\nu = \left\langle\left\langle \prod_{\overrightarrow{\delta}_{x,y}}^{4} \left(\alpha_x + \Lambda_x^B \beta_x\right) \prod_{\overrightarrow{\delta}_z}^{2} \left(\alpha_{x'} + \Lambda_z^B \beta_{x'}\right) \prod_{\overrightarrow{\delta}_{x,y}}^{4} \left(\alpha_y + \Upsilon_x^A \beta_y\right) \prod_{\overrightarrow{\delta}_z}^{2} \left(\alpha_{y'} + \Upsilon_z^A \beta_{y'}\right) \right\rangle\right\rangle_c \langle\langle g(x,y)|_{x=y=0}\rangle\rangle_c , \tag{3.58}$$

e

$$F = \left\langle\left\langle \prod_{\overrightarrow{\delta}_{x,y}}^{4} \left(\alpha_x + \Lambda_x^B \beta_x\right) \prod_{\overrightarrow{\delta}_z}^{2} \left(\alpha_{x'} + \Lambda_z^B \beta_{x'}\right) \prod_{\overrightarrow{\delta}_{x,y}}^{4} \left(\alpha_y + \Upsilon_x^A \beta_y\right) \prod_{\overrightarrow{\delta}_z^2}^{} \left(\alpha_{y'} + \Upsilon_z^A \beta_{y'}\right) \right\rangle\right\rangle_c \langle\langle h(x,y)|_{x=y=0}\rangle\rangle_c , \tag{3.59}$$

onde $\Lambda_x = S_{1+\overrightarrow{\delta}_{x,y}}$, $\Lambda_z = S_{1+\overrightarrow{\delta}_z}$, $\Upsilon_x = S_{1+\overrightarrow{\delta}_{x,y}}$ e $\Upsilon_z = S_{1+\overrightarrow{\delta}_z}$. As funções $g(x,y)$ e $h(x,y)$ são dadas por,

$$g(x,y) = \left\langle\left\langle \frac{senh(x+y) + e^{-2K_{12}} senh(x-y)}{cosh(x+y) + e^{-2K_{12}} cosh(x-y)} \right\rangle\right\rangle_c , \tag{3.60}$$

e

$$h(x,y) = \left\langle\left\langle \frac{cosh(x+y) - e^{-2K_{12}} cosh(x-y)}{cosh(x+y) + e^{-2K_{12}} cosh(x-y)} \right\rangle\right\rangle_c . \tag{3.61}$$

As equações encontradas a partir da resolução das equações 3.58 e 3.59 são muito extensas, então, para reduzí-las foi inserido algumas variáveis para substituir as funções hiperbólicas, que passaram a ser chamadas de $\alpha_x = cosh(K_{ij}\hat{D}_x)$, $\beta_x = senh(K_{ij}\hat{D}_x)$, $\alpha_{x'} = cosh(K_1\hat{D}_x)$, $\beta_{x'} = senh(K_1\hat{D}_x)$, $\alpha_y = cosh(K_{ij}\hat{D}_y)$ e $\beta_y = senh(K_{ij}\hat{D}_y)$ $\alpha_{y'} = cosh(K_1\hat{D}_y)$e $\beta_{y'} = senh(K_1\hat{D}_x)$.

Ao expandir os produtórios das equações 3.58 e 3.59 será levado em consideração as correlações que envolvem os spins, primeiros vizinhos, dos sítios centrais $\{S_4$, $S_5$, $S_7$, $S_8$, $S_9$, $S_{10}$, $S_{11}$ e $S_{12}\}$ de forma que, sempre que houver pares destes spins, o desacoplamento será feito através da função de correlação $F = \langle S_1 S_2\rangle$. Por exemplo, seja a correlação de um grupo de spins dada por $\langle S_3 S_4 S_5 S_6\rangle$, o desacoplamento das correlações existente neste grupo particular de spins será $\langle S_3 S_4 S_5 S_6\rangle \simeq \langle S_3\rangle\langle S_4 S_5\rangle\langle S_6\rangle = F m_A m_B$. Nota-se que os spins primeiros vizinhos de $S_1$ correspondem a $m_B = \langle S_i^B\rangle$ onde ($i = 5$, 6, 7, 9 e 12), e os primeiros vizinhos de $S_2$ são $m_A = \langle S_j^A\rangle$ onde ($j = 3$, 4, 8, 10 e 11).

Na seção 3.3 utilizou-se a aproximação de ordem zero, onde tomou-se uma média das flutuações entre os spins centrais e seus primeiros vizinhos, nesta seção, serão calculadas as correlações dos pares de spins primeiros vizinhos que encontram-se simetricamente ligados.

Dessa forma, para que se possa calcular as médias térmicas e configuracionais presentes nas equações $3.58$ e $3.59$, é necessário fazer o desacoplamento das variáveis de spin correlacionadas presentes nessas equações, para tanto, será feito o uso da técnica de desacoplamento representada pela equação:

$$\left\langle S_i^z S_j^z S_k^z \cdots \right\rangle \simeq \left\langle S_i^z S_j^z \right\rangle \left\langle S_k^z \right\rangle \cdots , \tag{3.62}$$

com $i \neq j \neq k, \cdots$, $S_i^z$ e $S_j^z$ pertencem repectivamente aos aglomerados $S_1$ e $S_2$, de modo que $\langle S_i^z S_j^z \rangle = F$ é a função de correlação.

O fato de apenas funcionais ímpares atuarem na função $g(x, y)$, implica na anulação dos coeficientes pares da equação $3.58$, restando apenas os coeficientes ímpares. De forma análoga, tem-se que na função $h(x, y)$ da equação $3.59$, atuam apenas funcionais pares, desta vez são os coeficientes ímpares que se anulam.

Aplicando a condição de contorno para o sistema antiferromagnético, onde $m_A = -m_B = m$, tem-se que,

$$m = A_1(K, F_z, p)m + A_3(K, F_z, p)m^3 + A_5(K, F_z, p)m^5, \tag{3.63}$$

e

$$F = B_0(K, F_z, p) + B_2(K, F_z, p)m^2 + B_4(K, F_z, p)m^4 + B_6(K, F_z, p)m^6. \tag{3.64}$$

Fazendo $m \to 0$ nas equações $3.63$ e $3.64$ obtém-se o sistema de equações,

$$\begin{aligned} A_1(K, F_z, p) &= 1 \\ F - B_0(K, F_z, p) &= 0, \end{aligned} \tag{3.65}$$

que fornece o diagrama de fase $\frac{K_B T_N}{J_1}$ *versus* $p$.

### 3.4.2 Limite da Estabilidade da Fase Antiferromagnética

A introdução da variável $m = -m_B = m_A$, permite-nos obter, de forma auto-consistente, a magnetização $m$ em função da temperatura. Porém, como o interesse neste trabalho está voltado para o estudo da criticalidade do sistema, ou seja, estudá-lo próximo à temperatura crítica, a magneização vai a zero com a aproximação da temperatura crítica, permitindo considerar apenas os termos lineares de $m$ na equações $3.63$ e $3.64$, formando portanto, o sistema de equações $3.65$, cuja solução, fornece o diagrama de fase do sistema.

O diagrama de fase do sistema em estudo foi obtido mediante a resolução do sistema de equações $3.65$ para as varíáveis ($T$, $p$ e $\alpha$). A figura que será analisada a seguir, representa o diagrama de fase obtido através da metodologia **NEFT-2** aplicada ao sistema aleatoriamente decorado com interações competitivas de primeiros vizinhos submetido a análise neste trabalho.

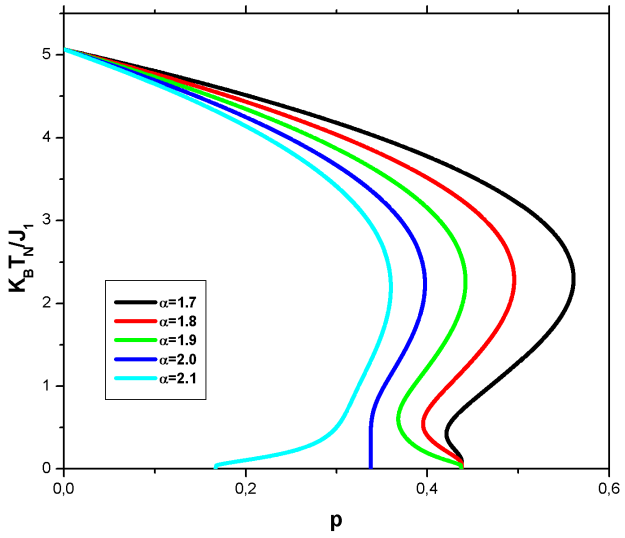



Figura 28 – Diagrama da fase ($\frac{K_B T_N}{J_1}$ *versus* $p$), para diversos valores do parâmetro de frustração $\alpha$.

O diagrama da figura (3.15) apresenta resultados semelhantes aos mostrados pela figura (3.5) da seção (3.3), onde foi aplicada a aproximação de ordem zero ao sistema em estudo. As características do diagrama da aproximação de ordem zero são observadas, tais como, a presença de transição de fase de segunda ordem, através de linhas críticas contínuas que levam a magnetização a zero, quando $T$ aumenta e atinge uma temperatura $T_c$, a formação de reentrância, que se apresentam gradativamente com menor intensidade, conforme é aumentado o valor do parâmetro $\alpha$. Observa-se também, que todas as linhas críticas convergem para uma única temperatura $T_c = 5,034$ que, qualitativamente, é melhor do que o resultado $T_c = 5,039$ fornecido pela **EFT**. A melhoria dos resultados para a temperatura, observada nesta nova abordagem, deve-se a nova forma de desacoplamento utilizada.

### 3.4.3 Análise dos resultados da

Nesta subseção será realizado uma análise comparativa dos resultados obtidos para o diagrama de fase no plano ($\frac{K_B T}{J_1}$ *versus* $p$) para o modelo proposto neste trabalho mediante a aplicação da teoria de campo efetivo, sob a óptica do método convencionalmente utilizado na mecânica estatística **EFT-2** *versus* a intervenção metodológica proposta **NEFT-2**.

Os diagramas apresentados nas figuras 3.16, 3.17 e 3.18, foram obtidos para os seguintes valores do parâmetro de frustração: $\alpha = 1.8$, $\alpha = 1.9$ e $\alpha = 2.1$ respectivamente, para uma estrutura de rede tridimensional, ou seja, $\lambda = 1,0$.

Analisando o conjunto de figuras nota-se algumas características comuns tanto às metodologias adotadas, quanto aos valores de $\alpha$ utilizados. Dentre as características observadas, destacam-se: a formação de linhas críticas contínuas que demonstram a existência de uma transição de fase de segunda ordem, a discrepância nos valores encontrados para as concen-

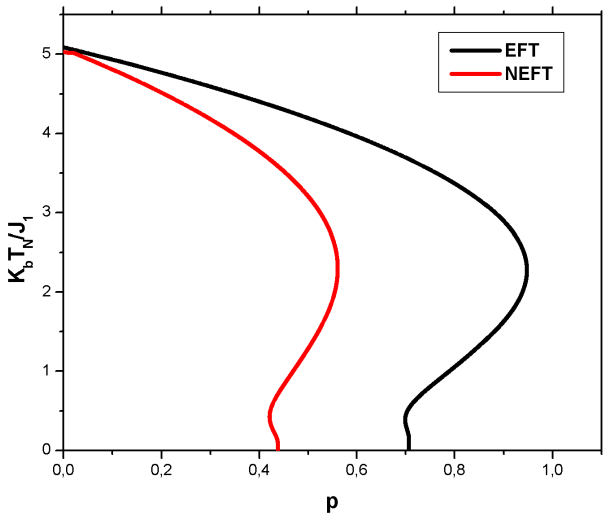



Figura 29 – Diagrama de fase ($\frac{K_B T_N}{J_1}$ *versus* $p$), com parâmetro de frustração $\alpha = 1.8$ para as abordagens **EFT** e **NEFT**.

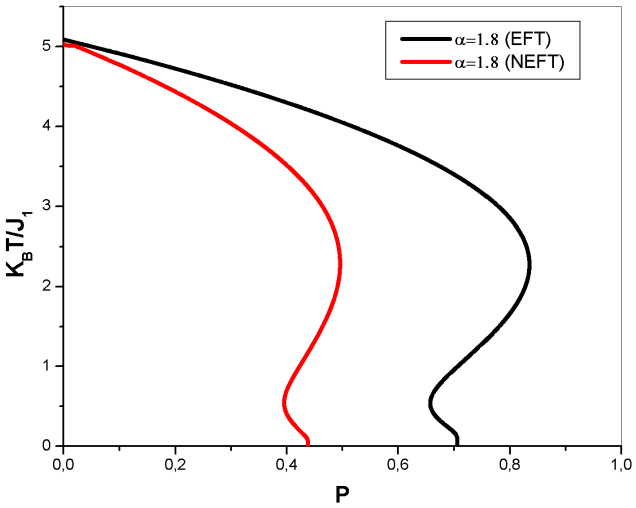



Figura 30 – Diagrama de fase ($\frac{K_B T_N}{J_1}$ *versus* $p$), com parâmetro de frustração $\alpha = 1.9$ para as abordagens **EFT** e **NEFT**.

trações críticas $p_c$ para o caso fundamental, em $T = 0$, sendo que em todos os diagramas, as concentrações da nova abordagem **NEFT** são significativamente inferior aos valores apresentados pela abordagem convencional, ou seja, ($p_c^{NEFT} < p_c^{EFT}$). Nota-se ainda, que os valores encontrados para a temperatura crítica $T_c$ também são diferentes, de modo que, a temperatura obtida com a nova metodologia é levemente inferior a obtida pela metodologia tradicional, ($T_c^{NEFT} < T_c^{EFT}$).

Apesar da diferença entre os valores encontrados para as temperaturas críticas $T_{C_{NEFT}} = 5,034$ e $T_{C_{EFT}} = 5,039$ ser muito pequena, do ponto de vista qualitativo, esse resultado é interessante, pois mostra que se alguns parâmetros como o número de sítios do aglomerado, a

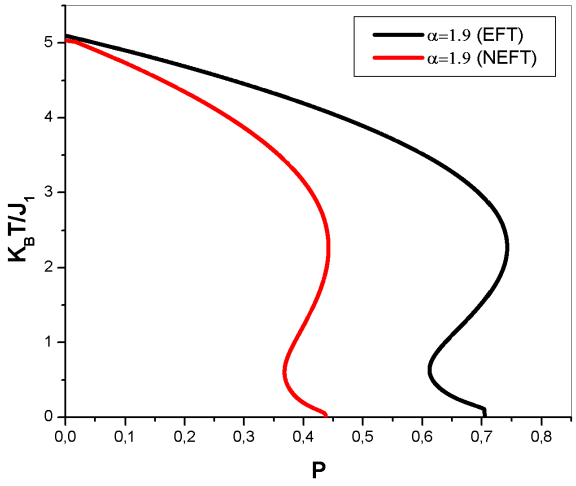



Figura 31 – Diagrama de fase ($\frac{K_B T_N}{J_1}$ *versus* $p$), com parâmetro de frustração $\alpha = 2.1$ para as abordagens **EFT** e **NEFT**.

topologia do sistema e a precisão das correlações entre os spins ligados forem ajustados, pode-se obter resultados mais interessantes, tanto para este parâmetro, quanto para a concentração crítica $p_c$, que já mostra uma diferença significativa. Portanto, de certa forma esses resultados validam a nova metodologia adotada.

# 4 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Este trabalho teve como objetivo principal estudar os diagramas de fase do modelo de Ising-$\frac{1}{2}$ antiferromagnético, frustrado, aleatoriamente decorado com interações competitivas de primeiros vizinhos utilizando a teoria do campo efetivo aliada a técnica do operador diferencial em aglomerados finitos, especificamente, numa rede cúbica com dois sítios centrais.

Na primeira parte da pesquisa, a técnica do operador diferencial foi desenvolvida e aplicada ao modelo como revisão bibliográfica, inicialmente, na versão de aglomerado com um spin **(EFT-1)** e posteriormente com dois spins **(EFT-2)**. Utilizou-se o desacoplamento de Zernike, onde aproximou-se as funções de correlação por produtos dos operadores em diferentes sítios, cujo tratamento, das auto-correlações (cinemática de spin$\frac{1}{2}$; $\sigma_i^2 = 1$) deu-se de forma exata. Esta aproximação é capaz de reproduzir o resultado exato para a temperatura crítica em uma dimensão, i.e., $T_c = 0$, o que não condiz com os resultados da aproximação de campo médio usual (ou aproximação de interação de longo alcance). Deve-se ressaltar que os resultados desta primeira parte da pesquisa foram desenvolvidos por outros autores, no entanto, nosso objetivo foi apresentar uma visão inicial do método para ser utilizado posteriormente.

Na segunda etapa da pesquisa, a técnica do operador diferencial foi desenvolvida na versão de aglomerado com dois spins no modelo de Ising-$\frac{1}{2}$, antiferromagnético, frustrado, aleatoriamente decorado e com interações de primeiros vizinhos para as topologias quase-bidimensional e tridimensional. Uma transformação do tipo decoração-iteração foi aplicada ao modelo para excluir os átomos decoradores (Oxigênio). Utilizou-se duas técnicas aproximativas para desenvolver o modelo, na tentativa de encontrar uma metodologia que forneça melhores resultados para a temperatura crítica $T_N$.

Na primeira, chamada de aproximação de ordem zero, utilizou-se o desacoplamento de Zernike, na qual desconsiderou-se as correlações multi-spins e, obteve-se os diagramas de fase nos planos ($\frac{K_B T_N}{J_1}$ *versus* $p$) para diferentes valores do parâmetro de frustração $(\alpha)$, e a magnetização em função da temperatura para o modelo considerado. Pode-se observar que, o efeito da temperatura é de produzir desordem no sistema. Na região de altas temperaturas, nota-se, onde o ordenamento (**AF**) é destruído, a magnetização $m(T)$ decresce com o aumento da temperatura, tornando-se zero próximo da criticalidade, em $T = T_N$. Observa-se ainda, o surgimento de reentrâncias em baixas temperaturas para as linhas críticas do diagrama de fase e a presença de transição de fase de segunda ordem, caracterizada pelas linhas críticas contínuas da magnetização.

Para a segunda aproximação, que chamamos de nova abordagem da teoria de campo efetivo aplicada ao modelo de Ising com interações competitivas, na qual considera-se as correlações entre os spins ligados, obteve-se os diagramas de fase no plano considerado e supracitado.

Assim como na primeira aproximação, na segunda também, nota-se que a influência da temperatura é desordenar o sistema, o que era de se esperar. O fenômeno de reentrância foi observado nos diagramas de fase, à medida que varia-se o parâmetro de frustração e a concentração $p$. Este fenômeno, fisicamente está relacionado com as flutuações térmicas na frustração e nas funções de correlações spin-spin, como consequência, apresenta característica de duas temperaturas para o sistema. Observou-se que, a variação da concentração crítica $p_c$, onde a temperatura de Néel tende a zero, para vários valores dos parâmetros de frustração. Verificou-se que os valores de $p_c$ menores que os valores apresentados no primeiro método aproximativo. Um aspecto relevante observado, é a redução da temperatura crítica de $T_c = 5,039$ obtido na aproximação de ordem zero para $T_c = 5,034$ obtida com a nova abordagem metodológica.

Este modelo resgata qualitativamente algumas propriedades magnéticas dos compostos supercondutores de altas temperaturas formados por planos de $CuO_2$. O formalismo aplicado neste estudo teórico, encontra relações exatas para as funções termodinâmicas, porém com o empecilho de envolver sistemas (infinitos) de equações acopladas, onde funções de correlação de diversas ordens estão presentes. Para se obter resultados quantitativos através desta técnica, faz-se uso de algum desacoplamento nas funções de correlação e usa-se desacoplamente de outras ordens. Assim, acredita-se que a medida que for aumentado o número de sítios do aglomerado, o sistema fornecerá melhores resultados para $T_N$, e torna-se capaz de descrever as caracterísitcas do composto supercondutor de altas temperaturas proposto neste treabalho.

Na perspectiva proposta inicialmente para este trabalho, acredita-se ter atingido seus objetivos, uma vez que a intervenção metodológica realizada mostra que, ao utilizar métodos de desacoplamento onde se considera as correlações multi-spins, é possível obter melhores resultados para a temperatura crítica $T_N$ do sistema. Este trabalho dissertativo deixa alguns variantes para futuras investigações no tema tratado, tais como:

1. Estudar outras grandezas termodinâmicas como o calor específico e energia interna;
2. Fazer a descrição do problema através do Hamiltoniano de Heisemberg, a fim de confirmar os resultados obtidos através deste método (**EFT-2**);
3. Aumentar o aglomerado analisado, buscando desta forma um resultado mais refinado e analisá-lo por métodos mais rigorosos como simulação de Monte Carlo e expansão em em série.

# REFERÊNCIAS


ALZIRA, C. M., et. al. A aproxima de Campo Médio de Bethe-Peirrlsl. **Revista Brasileira do Ensino de Física**, v. 26, n. 4, p. 385 à 393, (2004).

ANDERSON, P. W. **Basics Notions of Condensed Matter Physics** - (Amsterdam North Holland) (1979).

BEDNORZ, J. G., MULLER, K. A., ***Z. Phys. B* 64,189** (1986)

BAXTER, J. Exactly Solved Models in Statistical Mechanics. **Academic Press**. London, (1932).

BANDER, D. L. Mills Statistical Machanics, ***Phys. Rev. B* 38**, 12015, (1988).

BEDNORZ, J. G., MULLER, K. A., ***Z. Phys. B* 64, 185** (1986).

BETHE, H. A., **Proc. Roy. Soc. London Ser. A 150, 552** (1935).

BONFIM, O. F. de A., FITTIPALDI, I. F. ***Phys. Lett. A* 98, 119** (1983).

BRUNO, P., ***Phys. Rev. Lett.* 87, 1372031** (2001).

BUCKEL, W., e BUCKEL, R. **Superconductivity. Fundamentals and Applications**. **WILEY-VCH Verlag GmbH Co. KGaA**, Weinheim, 2ª ed (2004).

CALLEN, H. B., ***Phys. Rev.* 4, 161** (1963).

CLARKE, J., e BRAGINSKI, A.I. **The SQUID Handbook Vol. I.** Fundamentals and Technology of SQUIDs and SQUID Systems (WILEY-VCH Verlag GmbH Co. KGaA, Weinheim, 2004).

CIPRA, B. A., **The American Mathematical Monthly**, Vol. 94, No. 10. (Dec. 1987), p. 937 à 959.

COSTA, M. B. S., PAVÃO, A. C. Supercondutividade: um século de desafíos e superação. **Revista Brasileira de Ensino de Física, v. 34, n. 2**, 2602 (2012).

DINGER, T. R., *et. all.*, ***Phys. Rev. Lett.*** 58, 2687 (1987).

EMERY, V. J., Phys. Rev. Lett. 58, 2794 (1987); EMERY, V. J., REITER, G., ***Phys. Rev. B* 38, 4547** (1988).

FISHER, M. E. ***Phys. Rev.*** 11, 4 969 (1959).

FILHO, E. B., SOUSA, J. R. de, ***Phys. Lett. A* 323, 9** (2004).

FITTIPALDI, I. P., SOUSA, J. R., SANTOS, R. J. V., ***MAGN,* J. M., Mater 104 à 107**, 279 (1992).

FRANK, B., MITRAN, O. J. ***Phys. C.* 10,2641 (1977)**; 11,2087(1978).

GALAM, S., YOKOI, C. S. O., SALINAS, S. R. ***Phys. Rev. B* 57, 8370** (1988).

bibitemGarozzo GAROZZO, F. in Michael Faraday (Editora Três, 1975).

HEISENBERG, W. K. Z., ***Phys*. 49, 619** (1928).

HONMURA, R., KANEYOSHI, T. ***Progr. Theor. Phys*. 60, 635** (1978).

HONMURA, R., KANEYOSHI, T. J. ***Phys. C* 12, 3970** (1979).

HORVATH, M. G., KUSCSIK, Z. ***Physica A* 361 589**(2006).

ISING, E. Z. ***Physik* 31, 253** (1925).

ASCUR, M. *et. all.* **Mater 272-276, 984** (2004).

KLARKE, J., BRANGINSKI, I. **The SQUID Handbook Vol. II**. Applications of SQUIDs and SQUID Systems (WILEY-VCH Verlag GmbH Co. KGaA, Weinheim, 2006).

KANEYOSHI, T. *et. all.*, ***Phys. Stat. Solidi B* 105, 629** (1981).

KANEYOSHI, T., SHIN, S., and Maeno, ***Physica A* 262, 441** (1999).

KITTEL, C., **Introduction to Solid State Physics. 6 ed**. Ney York, 1986. 597 p.

KRAWIECKI, J. A. Hoyst, ***Physica A* 317** (2003) 597.

LANDAU, D. P., BINDER, K. A. **Guide to Monte Carlo simulations in Statistical Physics**, Cambridg University Press, 2000.

LAPA, S. R. **Modelo de Heisenberg Quântico Frustrado numa Rede Quadrada anisotrópica**. Dissertação de Mestrado, UFAM-Universidaden Federal do Amazonas, 2009.

LARANGEIRAS, C. C., CHIAPIN, J. R. N. A Construção de uma Teoria de Ensembles: antecedentes em Maxwell e Boltzman. **Revista Brasileira do Ensino de Física**, v. 30. n. 1, 1601 (2008).

LIPO, T.A. Applied Superconductivity (Noyes Data Corporation, New Jersey, (1989).

LI, M. S., WALASEK, K. e CIEPLAK. M. ***Phys. Rev. B* 56, 11715** (1997).

LYRA, M. L., SILVA, C. R. da, ***Phys. Rev. B* 47, 526** (1993).

MAIA, I. P. **Estudo do Comportamento Críticco do Modelo de Ising, Frustrado, Aleatoriamente decorado com interações de primeiro e segundo vizinhos**. Dissertação (Mestrado em Física). Universidade Federal de Roraima, Boa Vista-RR, 2010.

MATSUDAIRA, N. J. ***Phys. Soc. Jpn*. 35, 1493** (1973).

MEISSNER, W. OCHSENFELD, R. Naturwissenschaften 21, 787 (1933).

MOYSES, A. L., **Aplicações da Supercondutividade**. São Paulo: Edgard Blucher Ltda, 1992. p. 1-69.

MOREIRA, A. F. S. FIGUEIREDO, W., HENRIQUES, V. B. ***Phys. Rev. B* 57, 8370** (1988).

MORÁN-LOPES, J. L., AGILEIRA-GRANJA, F., SANCHES, J. M. ***Phys. Rev. B* 48, 5** (1993).

NAYA, S., ***Prog. Theor. Phys.* 11, 53** (1954).

NEEL, L. ***Ann. Physique* 18, 5** (1932).

NETO, M. A., DE SOUSA, J. R. ***Phys. Lett. A* 330, 322, Phys. Rev. B**(2004).

NETO, M. A. **Modelo de Ising Antiferromagnético com Campo Transverso: Criticalidade e Termodinâmica**. Dissertação de Mestrado em Física, UFAM-Universidade Federal do Amazonas, 2004.

NOVAK, M. A. IF UFRJ. II Escola Brasileira de Magnetismo.

OLIVEIRA, M. J., **Termodinâmica**. 2ª. ed. Editora Livraria da Física. São Paulo-SP, (2005).

OSANGER, L. ***Phys. Rev.* 65, 117** (1944).

OLIVEIRA, P. M. C. de, PENNA, T. J. P. ***Physica A* 163**, 458 (1990).

PACOBAHYBA, J. T. M. **Modelos Magneticos com Frustração e Diluição**. Tese de de Doutorado em Fisica, UFScar-Universidade Federal de São Carlos, 2006.

PAUL, P., MATTIS, D. C. ***Phys. Rev. B* 44, 2384** (1991).

PEIERLS, R. E. Proc. Cambridge Philos. Soc. 32, 477 (1936).

REZENDE, S. M. **Materiais e dispositivos eletrônicos**. 2ª. ed. São Paulo-SP: Editora Livraria da Fisica, 2004.

REITZ, J. R. **Fundamentos da Teoria do Eletromagnetismo**.x ed. Editora Capus.

RUNEHR, E. E., FIGUEIREDO, W. ***Phys. Lett.* A 244, 165** (1998).

RUFFO, S. A. **Nova Abordagem de Grupo de Renormalização no Espaçoo Real Aplicada em Modelos de Spins**. 2011. 96p. Dissertação (Mestrado em Física). Instuto de Física. Universidade Federal do Amazonas, Manaus-AM, 2011.

SÁ BARRETO, F. C., FITTIPALDI, I. P. ***Physica A* 126, 360** (1985).

SÁ BARRETO, F. C., FITTIPALDI, I. P. ***Rev. Bras*. Física 11, 745** (1981).

SALINAS, S. R. A. **Introdução à Física Estatística**. Editora Universidade de São Paulo. São Paulo-SP, (1999).

SANTOS-FILHO, J. B., MORENO, N. O., ALBUQUERQUE, D. F. **Cientia Plena**: Estudo do comportamento do modelo de Ising com interações mistas através de técnica analítica e computacionais.)

SANTOS, R. J. V., FITTIPALDI, I. F., *Phys. Rev. B* 40, 4527 (1989).

SANTOS, R. J. V. dos, COUTINHO, S., *J. Phys. A* 20, 5667 (1987).

. SANTOS-FILHO, *et. all.*. Monte carlo studies of the cubic lattice mixed-bond ising model. ***Phys. B*, n. 398**, p. 294 a 296, 2007.

SOUSA, J. R. de, FITTIPALDI, I. P. J. ***Appl. Phys.* 75**, 5835 (1994).

SOUSA, J. R. de, ***Physica A* 256**, 383 (1998).

SHEAHEN, T. P. Introduction to High-Temperature Superconductivity. Kluwer Academic Publishers, New York (2002).

SHIRANE, G., ENDOH, Y., BIRGENEAU, R. J., KASTNER, M. A., HIDAKA, Y., ODA, M., SUZUKI, M., MURAKAMI, T., ***Phys. Rev. Lett.* 59**, 1613 (1987).

SOUSA, J. R. de, ARAÚJO, I. G., MAGN, **J. Mater 219**, 355 (2000).

SYOZI, I. **Phase Transition and critical phenomena** Academic Press, New York. v. I (1972).

SHIRANE, G., ENDOH, Y., BIRGENEAU, R. J., KASTNER, M. A., HIDAKA, Y., ODA, M., SUZUKI, M., MURAKAMI, T. ***Phys. Rev. Lett.* 59**, 1613 (1987).

SMART, J. S. Effective Field Theories of Magnetism, Saunders, Philadelphia, 1996.

SUZUKI, M. ***Phys. Lett.* 19**, 267 (1965).

SUZUKI, M. KATORI, M. J. ***Phys. Soc. Jpn.* 55**, 1 (1986).

STANLEY, H. E., Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena. Oxford University Press, New York, 1971.

TAGGART, G. B., FITTIPALDI, I. P. ***Phys. Rev. B* 25**, 7026 (1982).

TAVARES, I. P., Estudo das Propriedades Termodinâmicas no modelo de Ising aleatoriamente decorado com interações competitivas. Tese de doutorado. Universidade Federal do Amazonas-UFAM, (2006).

TOULOUSE, G., Comm. ***Phys.* 2**, 115 (1977).

TRANQUADA, J. M., *et. all.*, ***Phys. Rev.* 60**, 156 (1988).

TRUDEAU, Y., PLUMER, M. L., Preprint. (1998).

VAKNIN, D. *et. al.*, ***Phys. Rev. Lett.* 58**, 2802 (1987).

ZANGWILL, **Physics at Surfaces**, Cambridge University Press. Cambridger, 1988.

ZHANG, D. **Philosophical Magazine**, Vol. 87, n. 34, 1 December, 5309 à 5419, (2007).

ZERNIKE, F., ***Physics 1***, 565 (1940).