



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

JONAS MENEZES DE AZEVEDO

MODELO DE ISING FRUSTRADO E ALEATORIAMENTE DECORADO COM
INTERAÇÕES DE PRIMEIROS E SEGUNDOS VIZINHOS COM CAMPO MAGNÉTICO

Boa Vista

2012

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

JONAS MENEZES DE AZEVEDO

**MODELO DE ISING FRUSTRADO E ALEATORIAMENTE DECORADO COM
INTERAÇÕES DE PRIMEIROS E SEGUNDOS VIZINHOS COM CAMPO
MAGNÉTICO**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física da Universidade Federal de Roraima como parte dos pré-requisitos para obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Ijanílio Gabriel de Araújo

Co-orientadora: Profa. Dra. Josefa
Teixeira de Mendonça Pacobahyba

Boa Vista

2012

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

A994m Azevedo, Jonas Menezes de
Modelo de Ising frustrado e aleatoriamente decorado
com interações de primeiros e segundos vizinhos com
campo magnético / Jonas Menezes de Azevedo. -- Boa
Vista, 2012.
92 p. : il.

Orientador: Prof. Dr. Ijanílio Gabriel de Araújo.
Co-orientador: Prof^a. Dr^a. Josefa Teixeira de Mendonça
Pacobahyba
Dissertação (mestrado) – Universidade Federal de
Roraima, Programa de Pós-Graduação em Física.

1 – Modelo de Ising. 2 – Interações competitivas. 3 –
Campo efetivo. 4 – Operador diferencial. 5 – Transição de
fase. 6 – Campo magnético. I - Título. II – Araújo, Ijanílio
Gabriel de (orientador).

CDU 537.6

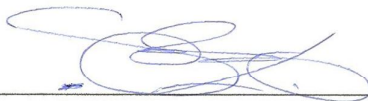
JONAS MENEZES DE AZEVEDO

**MODELO DE ISING FRUSTRADO E ALEATORIAMENTE DECORADO COM
INTERAÇÕES DE PRIMEIROS E SEGUNDOS VIZINHOS COM CAMPO
MAGNÉTICO**

Dissertação apresentada como pré-requisito para a conclusão do Curso de Mestrado em Física da Universidade Federal de Roraima, defendida em 29 de junho de 2012 e avaliada pela seguinte banca examinadora:



Prof. Dr. Ijanílio Gabriel de Araújo.
Orientador /(Departamento de Física–UFRR)



Prof. Dr. Sergio Benites Legoas
(Departamento de Física–UFRR)



Prof. Dr. Octavio Daniel Rodriguez Salmon
(Departamento de Física–UFAM)

Dedico esta dissertação a todos os meus familiares em especial aos meus pais Joel Pereira de Azevedo e Lucimar Menezes de Azevedo, e que deus continue nos abençoando grandemente e iluminando nossas vidas.

À minha esposa Cláudia e minha filha querida Júlia Letícia que também são estímulos que me dão forças para seguir caminhando e superando os obstáculos da vida.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus que sempre me deu força e sabedoria para superar os obstáculos sempre tão freqüentes nessa nova fase de minha vida.

A meu orientador Ijanílio, por ter dedicado parte do seu tempo a me orientar e pela paciência, e confiança em mim depositado. Sua orientação foi de fundamental importância para a conclusão deste trabalho.

À professora Josefa Pacobahyba por ter disponibilizado seu tempo durante as aulas das disciplinas iniciais do curso e pela colaboração na co-orientação, contribuindo para o alcance desse sucesso.

Aos meus amigos de curso: Pedro, Renato, Welington, Albanira que também contribuíram para que eu pudesse alcançar o objetivo que é o de concluir esse curso.

RESUMO

Estudos recentes em sistemas magnéticos com baixa dimensionalidade têm despertado muito interesse da comunidade científica na área da Física da Matéria Condensada, tanto do ponto de vista teórico como experimental. Com a descoberta dos compostos supercondutores de altas temperaturas, formados por planos de CuO_2 , o efeito de dopagem (concentração de íons de oxigênio com distribuição de probabilidade p) passa a ser investigado nas suas propriedades magnéticas. Em particular, esses compostos apresentam em comum um ordenamento antiferromagnético para pequenas dopagens, e nestes, a temperatura de Néel é reduzida drasticamente a zero quando uma concentração crítica p_c é atingida. O modelo de Ising aleatoriamente decorado (íons de oxigênio) com spin $1/2$ e interações competitivas (ferromagnética e antiferromagnética) é utilizado para descrever qualitativamente as propriedades dos compostos supercondutores de altas temperaturas, considerando que estes apresentam uma característica em comum na formação de suas estruturas, que são os planos de óxido de cobre. O modelo estudado nesta dissertação consiste de planos, nos quais os spins nodais (vértices de uma rede quadrada) têm interações (J_1 e J_2) antiferromagnéticas com os spins primeiros ($J_1 < 0$) e segundos ($J_2 < 0$) vizinhos (representando as interações na ligação entre os íons de cobre $\text{Cu} - \text{Cu}$ no plano de CuO_2) e com interação ferromagnética ($J_F > 0$) com os spins decoradores (simulando as interações $\text{Cu} - \text{O}$) distribuídos aleatoriamente *quenched* (temperado) sobre uma rede bidimensional, e por fim, os spins nodais entre planos têm interação antiferromagnética fraca ($\lambda J_1 < 0, \lambda = 10^{-5}$). Neste modelo, considera-se a ação de um campo magnético e a interação efetiva J_{ef} entre os spins nodais, determinada com a contribuição do spin decorador, através da técnica de transformação decoração-iteração. Estudou-se a transição de fase do modelo através da teoria de campo efetivo para um aglomerado com um spin, combinada com a técnica do operador diferencial. Em seguida, discutiu-se a concentração crítica p_c na qual a temperatura de Néel tende a zero para vários valores dos parâmetros de frustração do spin α_1 e α_2 ($\alpha_1 = J_F/J_1$, $\alpha_2 = J_2/J_1$) sob a influência do campo magnético H . Para alguns valores destes, observamos um comportamento reentrante em baixas temperaturas. Também obtiveram-se os diagramas de fase no plano $(\frac{K_B T_N}{J_1}, H)$, e para alguns valores de H , nos planos $(p, \frac{K_B T_N}{J_1})$, $(\frac{K_B T_N}{J_1}, \alpha_1)$, $(\frac{K_B T_N}{J_1}, \alpha_2)$ e $(\lambda, \frac{K_B T_N}{J_1})$. Finalmente, calculou-se a dependência da magnetização de subrede em função da temperatura, auxiliando na determinação das magnetizações uniforme (m) e remanescente (residual, m_s), a fim de analisar a existência do fenômeno de frustração do spin, e o comportamento reentrante nos diagramas de fase dos planos $(\frac{K_B T_N}{J_1}, m)$ e $(\frac{K_B T_N}{J_1}, m_s)$ sob o efeito do campo magnético.

Palavras-chave: Modelo de Ising; Interações Competitivas; Campo Efetivo; Operador Diferencial; Transição de Fase; Campo Magnético

ABSTRACT

Recent studies of magnetic systems with low dimensionality have attracted much interest from the scientific community in the area of Condensed Matter Physics, both from the standpoint of theoretical and experimental. With the discovery of high temperature superconducting compounds, formed by the CuO_2 planes, the effect of doping (concentration of oxygen ions with probability distribution p) shall be investigated for their magnetic properties. In particular, these compounds have in common an antiferromagnetic ordering small doping, and in these, the Néel temperature is drastically reduced to zero when a critical concentration p_c is reached. The Ising model randomly decorated (oxygen ions) with spin $1/2$ and competitive interactions (ferromagnetic and antiferromagnetic) is used to qualitatively describe the properties of high temperature superconducting compounds, considering they have a common characteristic in shaping their structures, which are of copper oxide planes. The model studied in this dissertation consists of plans, in which the nodal spins (vertices of a square lattice) have interactions (J_1 and J_2) antiferromagnetics with the nearest neighbors spins ($J_1 < 0$) and next nearest neighbors ($J_2 < 0$) (representing the interactions the connection between the copper ions $Cu - Cu$ in the plane of CuO_2) and interact with ferromagnetic ($J_F > 0$) with the spins decorated (simulating interactions $Cu - O$) randomly distributed quenched on a two-dimensional lattice, and finally, spins between nodal planes have weak antiferromagnetic interaction ($\lambda J_1 < 0, \lambda = 10^{-5}$). In this model, we consider the action of a magnetic field and the effective interaction J_{ef} between the nodal spins, determined with the spin contribution of the decorator, using the technique of decoration-iteration transformation. We studied the effective field theory for a cluster of a spin, using the technique of differential operator to examine the phase transition of the model. Then it was discussed the critical concentration p_c in which the Néel temperature tends to zero for several values of the parameters of the spin frustration α_1 and ($\alpha_1 = J_F/J_1, \alpha_2 = J_2/J_1$) under the influence of magnetic field H . For some of these values, we observe a reentrant behavior at low temperatures. Also obtained the phase diagrams in the plane $(\frac{K_B T_N}{J_1}, H)$, and for some H values in planes $(p, \frac{K_B T_N}{J_1}), (\frac{K_B T_N}{J_1}, \alpha_1), (\frac{K_B T_N}{J_1}, \alpha_2) \in (\lambda, \frac{K_B T_N}{J_1})$. Finally, we calculated the dependence of the magnetization sublattice depending on the temperature, helping to determine the uniform magnetization (m) and the remaining (residual, m_s) in order to analyze the existence of the phenomenon of spin frustration and reentrant behavior in the diagrams phase $(\frac{K_B T_N}{J_1}, m)$ and $(\frac{K_B T_N}{J_1}, m_s)$ under the effect of magnetic field.

Keywords: Ising Model, Competitive Interactions, Effective Field, Differential Operator, Phase Transition, Magnetic Field

SUMÁRIO

Lista de Figuras

Lista de Tabelas

1	INTRODUÇÃO	15
1.1	Considerações iniciais	15
1.2	Ordenamento magnético	17
1.3	Ordenamento magnético na presença de campo magnético externo	24
1.4	Estudo da transição de fase e fenômenos críticos	26
1.5	Sistemas Magnéticos desordenados	32
1.5.1	Sistemas Magnéticos diluídos	33
1.6	Sistemas Magnéticos com interações competitivas	37
1.7	Modelos Decorados	38
1.8	Modelos Frustrados	39
1.9	Objetivo e Apresentação do Trabalho	42
2	TEORIA DE CAMPO EFETIVO.....	43
2.1	Considerações Iniciais	43
2.2	Aproximação de Campo Médio em Aglomerados Finitos	45
2.2.1	Aplicação da teoria de campo médio no modelo de Ising	45
2.3	Método Variacional: Desigualdade de Bogoliubov	47
2.3.1	Aplicação do modelo de Ising com Campo Magnético externo	49
2.3.2	Estudo do Modelo de Ising Frustrado Aleatoriamente Decorado com Interações de primeiros e segundos vizinhos com Campo Magnético via Campo Médio ..	51

2.3.3	Determinação dos Acoplamentos efetivos de interação entre spins e Campo Magnético	53
2.3.4	Abordagem do Modelo na Aproximação de Campo Médio	55
2.3.5	Resultado de Campo Médio para o Modelo	58
2.4	Formalismo da Teoria de Campo Efetivo	59
2.4.1	Aplicação da Teoria de Campo Efetivo	62
3	Estudo do Modelo de Ising, frustrado, Aleatoriamente Decorado com Interações de primeiros e segundos vizinhos submetido a Campo Magnético	67
3.1	Considerações Gerais	67
3.1.1	Teoria de Campo Efetivo Aplicada ao Modelo de Ising, Frustrado, Aleatoriamente Decorado com Interações de primeiros e segundos vizinhos submetido a Campo Magnético	69
3.1.2	Estudo do Modelo Proposto e Formalismo Teórico	69
3.1.3	Limite de Estabilidade da Fase Antiferromagnética	73
3.1.4	Curva da Magnetização	83
4	CONCLUSÕES	85
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	88

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1	Representação de Frustração geométrica num sistema antiferromagnético.	17
Figura 1.2	Ilustração esquemática de cristais ferromagnéticos em uma rede bidimensional.	18
Figura 1.3	Magnetizações espontâneas dos compostos de Níquel (N_i), Ferro (F_e) e Cobalto (C_o) em função da temperatura, e comportamento da com a curva teórica baseadas na teoria de Weiss para $S = \frac{1}{2}$.	19
Figura 1.4	Esquema de cristais antiferromagnéticos em uma rede bidimensional.	20
Figura 1.5	Ilustração esquemática de alguns arranjos de spins antiferromagnéticos.	21
Figura 1.6	Ilustração esquemática de cristais ferrimagnéticos em uma rede bidimensional.	22
Figura 1.7	Magnetização espontânea em função da temperatura para granadas de ferro do tipo $A_3 F_{e5} O_{12}$.	22
Figura 1.8	Comportamento dos spins de um material ferromagnético ($J_{ij} > 0$). (a) Spins alinhados na ausência de um campo externo. (b) Spins alinhados de acordo com o campo externo H.	24
Figura 1.9	Comportamento dos spins de um material antiferromagnético ($J_{ij} < 0$). (a) Spins alinhados de forma antiparalelamente na ausência de um campo externo. (b) Spins alinhados de acordo com o campo externo H.	25

Figura 1.10 Diagrama de fase no plano $(\frac{K_B T_N}{J_1}, H)$ para um ferromagneto.	28
Figura 1.11 Diagrama de fase da magnetização espontânea em função da temperatura para um ferromagneto.	28
Figura 1.12 Curva da magnetização no plano (m, H)	29
Figura 1.13 Ilustração esquemática de um cristal Paramagneto mostrando a ausência de ordem magnética.	32
Figura 1.14 Rede idealizando remoção de uma ligação.	34
Figura 1.15 Desordem na remoção de um sítio.	34
Figura 1.16 Rede Kagomé construída por uma transformação estrela-triângulo a partir da rede honeycomb. O traço parcial é feito sobre os sítios (O).	38
Figura 1.17 Representação de uma rede original. Os círculos pretos representam os spins.	39
Figura 1.18 Representação de uma rede decorada. Os pontos brancos são os spins decoradores.	39
Figura 1.19 Esquema do estado líquido de spin (LS) numa rede quadrada formado por estados singletos de dímero.	40
Figura 1.20 Ilustração da idéia de frustração geométrica numa rede triangular antiferromagnética.	41
Figura 2.1 Célula unitária quase bidimensional (semelhança cúbica) contendo spins nodais	

e decorador. o círculo branco é o spin decorador.	52
Figura 2.2 Representação das interações antes e depois da transformação-iteração com a dizimação do íon de Oxigênio.	53
Figura 2.3 Diagrama de fase no plano $(\frac{K_B T_N}{J_1}, m)$ para o modelo de Ising 1/2 aleatoriamente decorado quase 2d, para diferentes valores dos parâmetros de Frustração via Campo Médio mantendo fixo α_1 , α_2 e concentração p e variando H.	59
Figura 2.4 Diagrama de fase no plano $(\frac{K_B T_N}{J_1}, m_s)$ para o modelo de Ising 1/2 aleatoria- mente decorado quase 2d, para diferentes valores dos parâmetros de Frustração via Campo Médio mantendo fixo α_1 , α_2 e concentração p e variando H. ...	60
Figura 2.5 Representação de um sistema de N partículas (sistema $\Omega \cup \Omega'$).	60
Figura 3.1 Representação de uma célula unitária com um spin central (S_i) após transformação decoração-iteração e campo magnético	70
Figura 3.2 Diagrama de fase no plano $(\frac{K_B T_N}{J_1}, H/J_1)$, para o modelo de Ising 1/2 , quase 2d aleatoriamente decorado para diferentes valores da concentração p, mantendo- se fixo $\alpha_1 = 1.1$ e $\alpha_2 = 0.1$	74
Figura 3.3 Diagrama de fase no plano $(\frac{K_B T_N}{J_1}, H/J_1)$, para o modelo de Ising 1/2 , quase 2d aleatoriamente decorado para diferentes valores do parâmetro de Frustração α_2 , mantendo-se fixo $\alpha_1 = 1.1$ e p=0.45.	75
Figura 3.4 Diagrama de fase no plano $(p, \frac{K_B T_N}{J_1})$, para o modelo de Ising 1/2 aleatoriamente decorado, quase 2d para diferentes valores do parâmetro de Frustração α_1 , mantendo-se fixo $\alpha_1 = 1.1$ e H=0.0.	76
Figura 3.5 Diagrama de fase no plano $(p, \frac{K_B T_N}{J_1})$, para o modelo de Ising 1/2 aleatoriamente decorado, quase 2d para diferentes valores do parâmetro de Frustração α_1 ,	

	mantendo-se fixo $\alpha_1 = 1.1$ e $H=0.5$	76
Figura 3.6	Diagrama de fase no plano $(\alpha_1, \frac{K_B T_N}{J_1})$, para o modelo de Ising 1/2 aleatoriamente decorado, quase 2d para diferentes valores α_1 , mantendo-se fixo $P=0.2$ e $H=0.05$	77
Figura 3.7	Diagrama de fase no plano $(p, \frac{K_B T_N}{J_1})$, para o modelo de Ising 1/2 aleatoriamente decorado, quase 2d para diferentes valores α_1 , mantendo-se fixo $\alpha_2 = 0.2$ e $H=0.001$	78
Figura 3.8	Diagrama de fase no plano $(p, \frac{K_B T_N}{J_1})$, para o modelo de Ising 1/2 aleatoriamente decorado, quase 2d para diferentes valores α_1 , mantendo-se fixo $\alpha_2 = 0.05$ e $H=0.5$	78
Figura 3.9	Diagrama de fase no plano $(p, \frac{K_B T_N}{J_1})$, para o modelo de Ising 1/2 aleatoriamente decorado, quase 2d para diferentes valores do parâmetro de Frustração α_1 , mantendo-se fixo $\alpha_2 = 0.1$ e $H=1.5$	79
Figura 3.10	Diagrama de fase no plano $(p, \frac{K_B T_N}{J_1})$, para o modelo de Ising 1/2 aleatoriamente decorado, quase 2d para diferentes valores do campo (H), mantendo-se fixo $\alpha_1 = 1.5$ e $\alpha_2 = 0.1$	79
Figura 3.11	Diagrama de fase no plano $(\frac{K_B T_N}{J_1}, \alpha_2)$, para o modelo de Ising 1/2 aleatoriamente decorado, quase 2d para diferentes valores α_1 , mantendo-se fixo $P=0.2$ e $H=0.5$	80
Figura 3.12	Diagrama de fase no plano $(\frac{K_B T_N}{J_1}, \alpha_2)$, para o modelo de Ising 1/2 aleatoriamente decorado, quase 2d para diferentes valores α_1 , mantendo-se fixo $P=0.2$ e $H=0.8$	80
Figura 3.13	Diagrama de fase no plano $(\frac{K_B T_N}{J_1}, \alpha_2)$, para o modelo de Ising 1/2 aleatoriamente decorado, quase 2d para diferentes valores α_1 , mantendo-se fixo $P=0.2$ e $H=1.0$	81

Figura 3.14 Diagrama de fase no plano $(\frac{K_B T_N}{J_1}, \alpha_2)$, para o modelo de Ising 1/2 aleatoriamente decorado, quase 2d para diferentes valores α_1 , mantendo-se fixo $p=0.2$ e $H=0.05$ 82

Figura 3.15 Diagrama de fase no plano $(\lambda, \frac{K_B T_N}{J_1})$, para o modelo de Ising 1/2 aleatoriamente decorado, quase 2d para diferentes valores p , mantendo-se fixo $\alpha_1 = 1.0$, $\alpha_2=0.05$ e $H=0.01$ 82

Figura 3.16 Diagrama de fase no plano $(\frac{K_B T_N}{J_1}, m)$, para o modelo de Ising 1/2 aleatoriamente decorado, quase 2d para diferentes valores do campo (H), mantendo-se fixo $\alpha_1 = 1.1$ e $\alpha_2 = 0.15$ 83

Figura 3.17 Diagrama de fase no plano $(\frac{K_B T_N}{J_1}, m_s)$, para o modelo de Ising 1/2 aleatoriamente decorado, quase 2d para diferentes valores do campo (H), mantendo-se fixo $\alpha_1 = 1.1$ e $\alpha_2 = 0.15$ 84

LISTA DE TABELAS

Tabela 1.1	Valores da temperatura crítica T_C para o modelo de Ising ferromagnético de spin- 1/2 obtidas através de EFT-1 e EFT-2 em diversas topologias de rede (NETO, 2004).	31
------------	---	----

1 INTRODUÇÃO

1.1 Considerações iniciais

O interesse pelo magnetismo vem desde a descoberta da magnetita, que era uma pedra que tinha a propriedade de atrair pedaços de ferro. As primeiras observações que se tem notícia, é que o material foi encontrado na vila de magnésia, na Ásia menor, de onde se derivou o nome magneto e suas variações. Petrus de Maricourt (Harman, 2002) foi o primeiro experimentalista que estudou os magnetos, de onde identificou a existência de polos, o qual foi dado o nome de polo norte e sul.

Um estudo mais sistemático do magnetismo só veio no século XVII, a partir de estudos realizados pelo cientista William Gilbert, onde o mesmo tinha interesse em desvendar certas crenças da época, pois acreditava-se que os ímãs interagindo com outros materiais podiam ter efeitos curativos no corpo humano (LEON, 1988). Os estudos realizados nessa área despertaram interesses da comunidade científica em geral, sendo dessa forma, responsáveis pelo enorme progresso alcançado no entendimento de fenômenos coletivos em Física da Matéria Condensada. Assim sendo, estudar teoricamente modelos magnéticos, representa uma grande motivação não somente pelo aspecto geral dos resultados, mas por causa destes estudos paralelos poderem elucidar fenômenos experimentais não compreendidos microscopicamente, e evidenciar experimentalmente monopolos magnéticos (MORRIS, 2009).

O estudo do comportamento coletivo em magnetos pode ser realizado através da modelagem dos sistemas reais encontrados na natureza. Para este fim, diversos modelos foram propostos para descrever os sistemas magnéticos, e alcançaram enorme sucesso. Dentre estes modelos, nos concentraremos naquele que é considerado o mais simples, capaz de descrever a transição de fase que acontece no ferromagneto, denominado de modelo de Ising, o qual apresenta comportamento interessante. Devido a esta importante característica, tem sido utilizado como protótipo em diferentes áreas, tais como, mecânica estatística, sistemas biológicos, econofísica etc. É uma ferramenta para a modelagem de um sistema físico real, e tem sua validade julgada pela extensão de sua aplicabilidade e concordância com as observações experimentais.

O modelo foi proposto por Lenz ao seu aluno de doutorado Ernst Ising em 1925, inicialmente, com o objetivo de estudar o ferromagnetismo de momentos localizados. Trata-se de um modelo padrão da mecânica estatística, porque em parte, foi um dos primeiros a aparecer, mas sobretudo porque é um dos poucos modelos úteis, pois tem solução analítica exata, uma vez que para sistemas de partículas interagentes, poucos são os modelos solúveis exatamente.

Esse modelo adicionado a termos de energia de interação, pode-se utilizá-lo para estudar uma grande variedade de compostos magnéticos. Muitos destes compostos exibem diagramas de fases interessantes e muitas vezes bastante complexos.

O efeito da dopagem em composto puro La_2CuO_4 mostrado na literatura é criar buracos (O^-) nos átomos de oxigênio situados entre os íons adjacentes de cobre nos planos de CuO_2 . Esse efeito gera interação de troca ferromagnética com os dois íons de cobre mais próximo, que competirá com o acoplamento antiferromagnético dando origem a frustração magnética (OLIVEIRA, 1986). Também, tem-se o caso do modelo de Ising com interações competitivas¹. de primeiros (J_{nn}) e segundos (J_{nnn}) vizinhos, ambas interagindo antiferromagneticamente.

O fenômeno de frustração, advindo da interação de segundos vizinhos, corresponde ao conflito de mais de um tipo de configurações microscópicas. O modelo de spin frustrado bem como suas propriedades críticas, dependem fortemente da dimensionalidade do sistema, por exemplo, anisotropia de exchange, simetria do Hamiltoniano, frustração e spin. Os materiais magnéticos frustrados são conhecidos como magnetos geometricamente frustrados². Em sistemas desse tipo, o fenômeno de frustração acontece devido ao efeito de competição, de interações de troca equivalentes, e o caso mais simples, numa rede triangular ($z = 6$), exibindo forte frustrações é o antiferromagneto. Também há ainda sistemas que a competição de interações são equivalentes, mas sua configuração e grandeza podem ser ajustadas de tal forma que as flutuações quânticas cause desordem de longo alcance, igualmente aos magnetos geometricamente frustrados. Pode-se citar exemplos de sistemas que podem ser ajustados, mas contudo, balanceados pela competição de interações, e mesmo assim preservar as flutuações quânticas, que são os sistemas de spin- $\frac{1}{2}$ numa rede quadrada ferromagnética ou antiferromagnética, onde o efeito de competição em segundos vizinhos antiferromagnético induz forte frustração no sistema ao longo das direções oblíquas.

Para melhor entendimento da definição de frustração geométrica, a Fig.1.1 nos ajudará nessa compreensão, observando redes de spin de Ising.

¹No tratamento do modelo em estudo considera-se $J_{nn} \equiv J_1$ e $J_{nnn} \equiv J_2$

²Existe ainda outros sistemas geometricamente frustrados como, por exemplo, o antiferromagnético numa rede kagomé e na rede triangular empilhada.

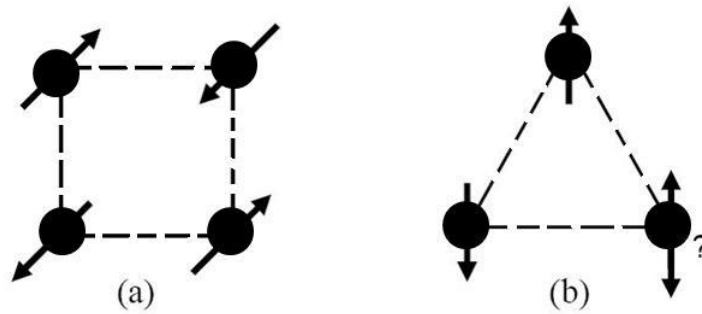


Figura 1.1: Representação de frustração geométrica num sistema antiferromagnético. a) Ausência de frustração b) Pode-se observar que o spin do vértice inferior à direita, fica frustrado pois não sabe com qual spin se orientar.

1.2 Ordenamento magnético

A maioria dos materiais possuem spins distribuídos de forma desorganizada, de forma que o campo magnético do material é nulo. Mas existem alguns materiais com uma distribuição de momentos altamente alinhados, possuindo um campo magnético intenso. Assim temos os seguintes estados nos quais os materiais magnéticos podem estar:

(A) *Paramagnetismo*: Um estado paramagnético é caracterizado macroscopicamente pela resposta linear a um campo magnético aplicado. Sem campo, uma amostra de material paramagnético não exibe magnetização. Aplicando-se um campo, a amostra adquire uma magnetização que cresce linearmente à medida que a intensidade de campo for aumentado. Se por outro lado o campo for reduzido até se anular, então a magnetização também se reduz e acaba se anulando. Para pequenos valores do campo aplicado H , a magnetização m de uma amostra no estado paramagnético é proporcional ao campo (OLIVEIRA, 2005), isto é,

$$m = \chi_0 H,$$

onde χ_0 , é a susceptibilidade magnética positiva. Crescendo-se o campo, o comportamento de m com H deixa de ser linear e para valores do campo suficientemente altos, a magnetização chega ao valor máximo.

(B) *Ferromagnetismo*: é caracterizado por uma magnetização espontânea do material para temperaturas abaixo de uma certa temperatura crítica. Isto é observado mesmo na ausência de um campo magnético aplicado ao material em questão (WIKIPEDIA, 2011). Esta situação sugere que os spins dos átomos (ou moléculas) que constituem o material, tenham uma forte tendência a se alinhar uns aos outros, dando origem a um momento magnético espontâneo.

Podemos observar tal situação na ilustração esquemática da Fig.1.2.

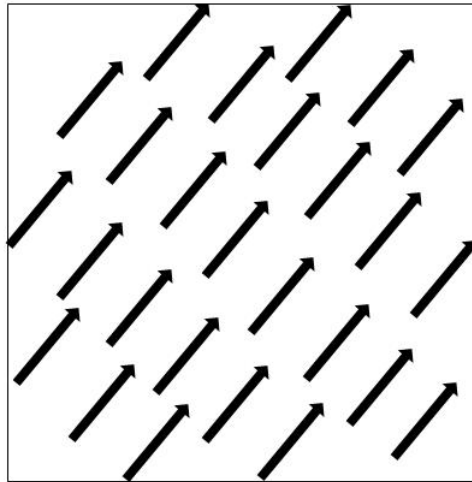


Figura 1.2: Ilustração esquemática de cristais ferromagnéticos em uma rede bidimensional.

As características desses fenômenos magnéticos intrigou os homens por mais de dois séculos depois dos trabalhos de Gilbert. Somente em 1907, Pierre Weiss (WEEISS,1907), elaborou uma teoria fenomenológica que era capaz de explicar qualitativamente o comportamento desses materiais. A magnetização espontânea que esses materiais possuem, mesmo sem a presença de um campo magnético sobre eles, só ocorria abaixo de uma temperatura crítica T_C , chamada de temperatura de Curie, tornando-se nula à medida que a temperatura é elevada, onde o material torna-se paramagnético. A teoria proposta por Weiss postula que cada dipolo magnético associado a um dado íon do material é influenciado por um campo magnético efetivo que é originado pelos dipolos magnéticos vizinhos. Tal campo magnético efetivo que faz os dipolos magnéticos alinhar-se em uma mesma direção conforme Fig. (1.2).

Tendo em vista que a teoria de Weiss consiga reproduzir qualitativamente várias propriedades de compostos ferromagnéticos (ex: MnSb, CrTe, CrO₂, CrBr₃, EuO, EuS), do ponto de vista quantitativo, ela apresenta inconsistências, por exemplo, Weiss imaginava que a energia de interação entre os momentos magnéticos no interior desses materiais era do tipo dipolo-dipolo, e que ela era responsável pelo ordenamento ferromagnético. Contudo, a energia dipolar $\Delta E_d \simeq \frac{\mu^2}{a^3}$ (μ é o momento magnético do íon e a é o parâmetro da rede cristalina) não explica fisicamente os altos valores da temperatura crítica.

Fazendo uma análise qualitativa, e supondo que nos compostos ferromagnéticos o ordenamento dos momentos magnéticos ocorre porque, a energia de interação aqui representada pela energia dipolar ΔE_d , é suficientemente maior que a energia térmica $k_B T$ (k_B é a constante de Boltzmann) isto é, $\Delta E_d \gg k_B T$. A temperatura aumentando, a magnetização decresce, e quando atingido a temperatura alta (crítica), a ordem é logo destruída por causa fundamental-

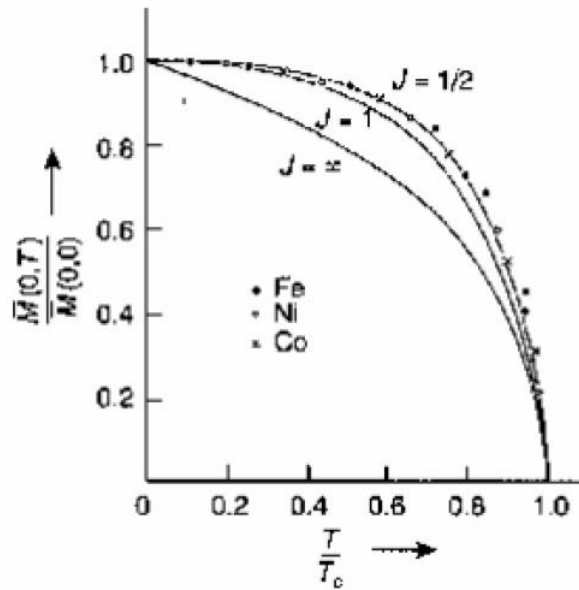


Figura 1.3: Magnetização espontânea dos compostos de Níquel (Ni), Ferro (Fe) e Cobalto (Co) em função da temperatura, e comportamento da com a curva teórica baseadas na teoria de Weiss (SILVA,2010) para $S = \frac{1}{2}$

mente da energia térmica ser da mesma grandeza de ΔE_d (energia dipolar) isto é, $\Delta E_d \simeq k_B T_C$ respectivamente. Agora, se considerarmos $\mu = \mu_B$ (magneton de Bohr), $a \simeq \text{\AA}$ e a constante k_B , a temperatura crítica $T_C \simeq 10^{-1} K$ que é bem infeiro a temperatura crítica obtida experimentalmente, da ordem de $T_C \simeq 10^3 K$. Contudo, microscopicamente falando, a origem do forte magnetismo (valores altos de T_C) não é devido a interação magnética entre os íons nos compostos ferromagnéticos, ela é de natureza extremamente fraca, e que sozinha não explica o ferromagnetismo. Por outro lado, os materiais orgânicos apresentam baixos valores para T_C o que torna a interação dipolar indispensável para descrição das propriedades magnéticas desses novos compostos (JONGH,1974).

(C) *Antiferromagnetismo*: Há uma disposição dos átomos a alinharem naturalmente seus spins antiparalelamente (SERGIO,2011), como ilustrado esquematicamente na Fig.1.4. Neste caso, o material não apresenta magnetização espontânea, e esse alinhamento tende a desaparecer acima da temperatura crítica, de modo análogo ao que foi mencionado no caso do Ferromagnetismo.

Essas características ocorrem em materiais cujos momentos magnéticos em média, se orientam antiparalelamente. Tal ordenamento ocorre de forma não aleatória, e cada spin da rede interage com seus primeiros vizinhos, cujos mínimos de energia corresponde aos momentos antiparalelos. Cada átomo da rede cristalina tem momento de dipolo magnético igual em módulo ao de seu vizinho mais próximo, por isso ele não possui magnetização espontânea, pois

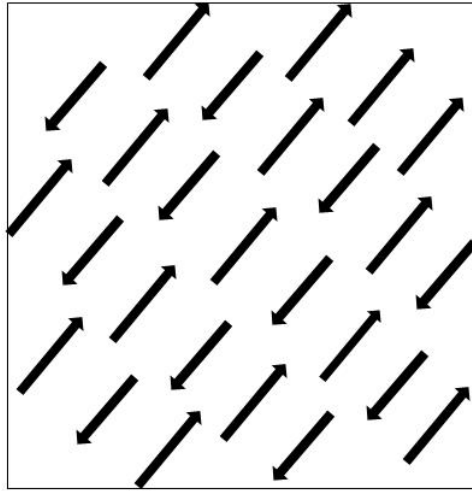


Figura 1.4: Esquema de cristais antiferromagnéticos em uma rede bidimensional.

há o cancelamento mútuo dos momentos. Ordenamento magnético desse tipo, ocorre em temperatura inferior a T_N (temperatura de Neel). Os compostos mais simples antiferromagnéticos são os fluoretos MnF_2 [$T_N = 75K$] e FeF_2 [$T_N = 90K$] que apresentam uma forma cristalina de corpo centrado, e os compostos como F_3 , $KMnF_3$ [$T_N = 95K$], $KNiF_3$ [$T_N = 275K$] e $RbMnF_3$ [$T_N = 82K$] com fortes estrutura de peroskita numa rede cúbica simples. A forte estrutura cristalina desses materiais é expressada em forma de duas subredes equivalentes A (spin *up* $\uparrow$) e B (spin *down* $\downarrow$) interpenetrantes, tendo cada uma, um valor médio dos momentos magnéticos, que corresponde a magnetização de subrede, não nula na ausência de campo magnético externo aplicado.

Quando a interação ($J > 0$) (interação de troca), faz os momentos magnéticos orientar-se em paralelo, esta característica determina um acoplamento ferromagnético (F), por exemplo: MnS_b , $CrTe$, CrO_2 , CrB_{r3} . Em materiais ferromagnéticos, os spins estão totalmente alinhados dentro de regiões pequenas (domínios). Quando aplicado um campo magnético, os momentos magnéticos dos diversos domínios vão se alinhar conforme o campo, produzindo um momento magnético significativo, como pode ser visto na Fig.1.8. Quando a interação ($J < 0$) (interação de troca), faz os momentos magnéticos orientar-se antiparalelamente sobre toda a rede cristalina, e sem a presença de um campo magnético, temos $m_A = -m_B$, que são as magnetizações das subredes A e B , respectivamente. Pode-se citar outros compostos antiferromagnéticos que têm estruturas constituídas por várias subredes, por exemplo, os compostos magnéticos de face centrada MnO [$T_N = 120K$], FeO [$T_N = 198K$], CoO [$T_N = 291K$] e NiO [$T_N = 530K$], onde as magnetizações das subredes são todas colineares.

Diferente dos compostos ferromagnéticos, que têm destruída sua transição de fase (não tem T_C por exemplo) quando sujeito a interação de campo magnético externo, os materiais

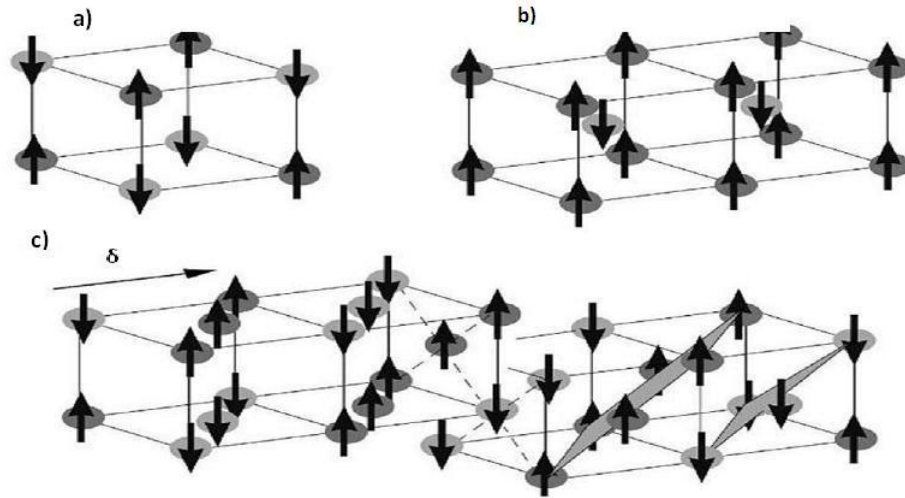


Figura 1.5: Ilustração esquemática de alguns arranjos de spins antiferromagnéticos. a) rede cúbica simples, b) rede cúbica de corpo centrado, c) rede fcc para o caso de interação negativa entre vizinhos mais próximos. A rede fcc consiste em quatro redes cúbicas simples interpenetrantes. O valor de δ liga os vizinhos mais próximos.

antiferromagnetos podem se mostrar de diversos tipos de ordenamento magnético no diagrama de fase no plano $T - H$. O desenvolvimento teórico do antiferromagnetismo foi feito primeiramente por Néel (NÉEL 1932), onde utiliza a teoria do campo molecular de Weiss, e o tratamento de duas ou mais subredes.

(D) *Ferrimagnetismo*: Um material ferromagnético tem um momento magnético espontâneo (um momento magnético mesmo sem um campo magnético aplicado). A existência de um momento espontâneo sugere que os spins dos elétrons e os seus momentos magnéticos estejam arranjados de uma maneira regular. Apenas algumas substâncias são ferromagnéticas, sendo que as mais comuns são o ferro, níquel, cobalto e suas ligas, alguns compostos de metais de terras raras, e alguns minerais de ocorrência natural, como a magnetita. A forma de ordenamento desse tipo de material é feita de modo que seus momentos se ordenem antiparalelamente, sendo que, a grandeza dos momentos das duas subredes, na ausência do campo magnético, são diferentes como mostra a Fig.1.6, ou seja, não há compensação da magnetização, como ocorre nos materiais antiferromagnetos ($m_A + m_B = 0$). Exemplos desses tipos de compostos são os constituídos pelos metais de transição, como: $MnO.Fe_2O_3$, $3Y_2O_3$, $5Fe_2O_3$. Em uma certa temperatura crítica T_C , os ferrimagnetos no qual $m = m_A + m_B$ se anula, porém, mesmo antes desse valor crítico T_C , temos uma temperatura de compensação T_{cp} ($m_A = -m_B$) onde m também se anula, não caracterizando assim uma transição de fase.

A magnetização total m para $T > T_{cp}$ cresce, e à medida que a temperatura aumenta, a magnetização atinge o valor máximo e decresce até finalmente anular-se em T_C , onde para

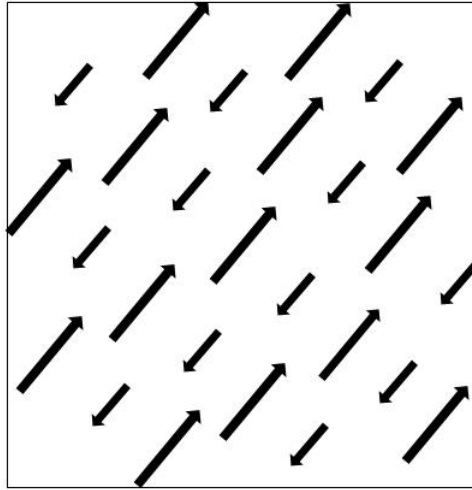


Figura 1.6: Ilustração esquemática de cristais ferrimagnéticos em uma rede bidimensional.

$T > T_C$, há ausência de ordem magnética tornando assim um sistema paramagnético. Na Fig.1.7 é apresentado o comportamento da magnetização espontânea em função da temperatura obtida experimentalmente por Pauthenet (1958) para as granadas de ferro do tipo $A_3Fe_5O_{12}$.

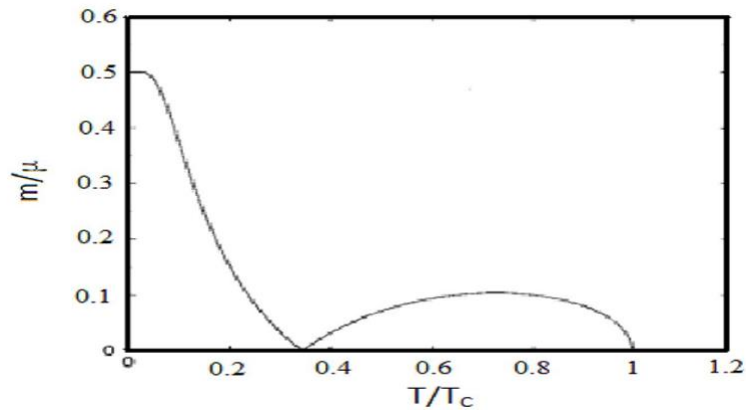


Figura 1.7: Magnetização espontânea em função da temperatura para granadas de ferro do tipo $A_3Fe_5O_{12}$ (PAUTHENET,1958).

Para identificar a ordem magnética do sistema, tanto teoricamente como experimentalmente, a susceptibilidade magnética (χ) é outra grandeza importante, pois é uma grandeza macroscópica que mede a resposta do material devido aos seus momentos magnéticos quando submetido a ação de um campo magnético externo. Matematicamente a susceptibilidade é definida por

$$\chi^{\alpha\beta} = \frac{\partial M_{\alpha}}{\partial H_{\beta}}, \quad (1.1)$$

onde $\chi^{\alpha\beta}$ é o elemento (tensor de ordem dois) da matriz χ , M_{α} e H_{β} correspondente a com-

ponente $\alpha = x, y, z$ da magnetização e do campo magnético, respectivamente. Na aplicação de campo magnético na direção do eixo de fácil magnetização, onde só teremos uma única componente para o tensor susceptibilidade χ ela poderá ser expressa da seguinte forma

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H}. \quad (1.2)$$

Resultados obtidos para a susceptibilidade de forma experimental, primeiramente foram obtidos, em 1895, pelo físico francês Pierre Curie (1907). Experimento esse que mostrou que as substâncias paramagnéticas (ausência da magnetização espontânea, i.e., $M(T, H = 0) = 0$) apresentam susceptibilidade magnética à campo nulo (χ_0) positiva e inversamente proporcional à temperatura, conhecida como lei de Curie dada pela equação abaixo:

$$\chi_0 = \frac{C}{T}, \quad (1.3)$$

onde C é a constante de Curie. Essa lei, expressada pela Eq.(1.3), pode ser encontrada em substâncias que possuem momentos magnéticos localizados (isolantes) não interagentes (livres). Estando sujeita a um campo magnético externo H , os momentos magnéticos se acoplam energeticamente com este campo devido a energia de Zeeman $(-\vec{\mu} \cdot \vec{H})$, fazendo com que os momentos se orientem conforme o campo H (mínimo de energia) e desordenem devido a interferência térmica, assim a magnetização induzida $m(T, H)$ diminuiria com o acréscimo da temperatura do sistema.

Através de Curie, também foi estudado o comportamento da magnetização de substâncias, cuja apresentam magnetismo espontâneo, ($H = 0$), que logo ficou conhecido como materiais ferromagnéticos. Ela verificou a existência da temperatura denominada temperatura de Curie (T_C), acima da qual certos materiais ferromagnéticos (ordem magnética) se comportam como paramagnéticos (ausência de magnetização)(desordem magnética). Fazendo uma análise na susceptibilidade sem presença de campo magnético, Curie observou que esta diverge em $T = T_C$ (temperatura crítica) nos materiais ferromagnéticos segundo a lei assintótica dada abaixo

$$\chi_0 = \frac{C}{|T - T_C|^\gamma}, \quad (1.4)$$

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

O que se pode compreender sobre as origens microscópicas das propriedades magnéticas dos materiais magnéticos, a descoberta de novos materiais e fenômenos, o estudo das propriedades termodinâmicas e das excitações elementares dos materiais magnéticos, bem como o

desenvolvimento de novas aplicações tecnológica, é que possibilitou avanços em novas tecnologias, assim portanto, uma melhor qualidade de vida para muitas pessoas em diversos lugares do mundo.

1.3 Ordenamento magnético na presença de campo magnético externo

Este trabalho será restrito ao estudo de modelos magnéticos localizados, descrito por um Hamiltoniano tipo Ising aleatoriamente decorado, com interações competitivas de primeiros e segundos vizinhos e campo externo, cujo objetivo é analisar a criticalidade do sistema. Indiferentemente da escolha do modelo, que represente 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*, *CrO₂*, *CrBr₃*, *EuO*, *EuS*. Num material ferromagnético, os spins estão completamente alinhados dentro de pequenas regiões conhecidas como domínios. Aplicando um campo externo, os momentos magnéticos dos diversos domínios podem ser alinhados, produzindo um momento magnético total significativo, conforme representação na Fig.1.8. Este fato confere uma importância tecnológica para os

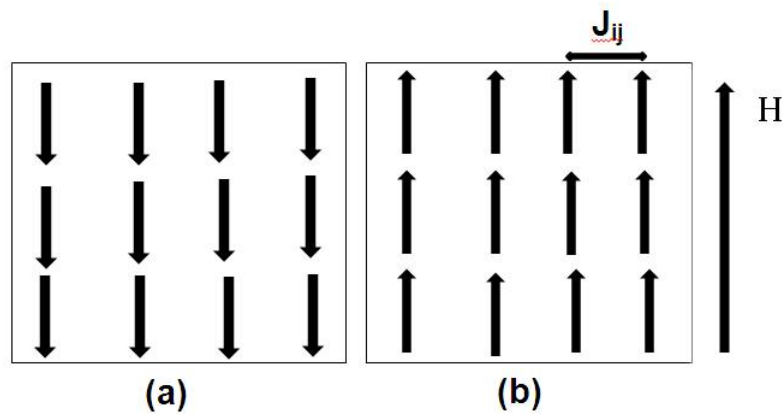


Figura 1.8: Comportamento dos spins de um material ferromagnético ($J_{ij} > 0$). (a) Spins alinhados na ausência de um campo externo. (b) Spins alinhados de acordo com o campo externo H .

materiais ferromagnéticos.

Se $J_{ij} < 0$, a configuração de energia mínima é a de spins alinhados antiparalelamente. Este ordenamento ocorre de forma não aleatória, mas cada spin da rede cristalina interage com seus primeiros vizinhos, cujo mínimo de energia corresponde aos momentos antiparalelos. O

momento de dipolo magnético de cada átomo da rede cristalina tem módulo igual ao de seu vizinho mais próximo, por isso ele não possui magnetização espontânea, pois há o cancelamento mútuo dos momentos de dipolo magnético. Este tipo de ordenamento magnético ocorre em temperatura inferior a T_N (temperatura de Neel). Para temperaturas altas ($T > T_N$), os dipolos apontam em direções aleatórias destruindo assim a ordem magnética AF. Na ausência de campo externo tem-se $m_A = -m_B$ [m_A e m_B são as magnetizações das sub-redes A (*spin-up* $\uparrow$) e B (*spin-down* $\downarrow$), respectivamente], representado pela Fig.1.9a.

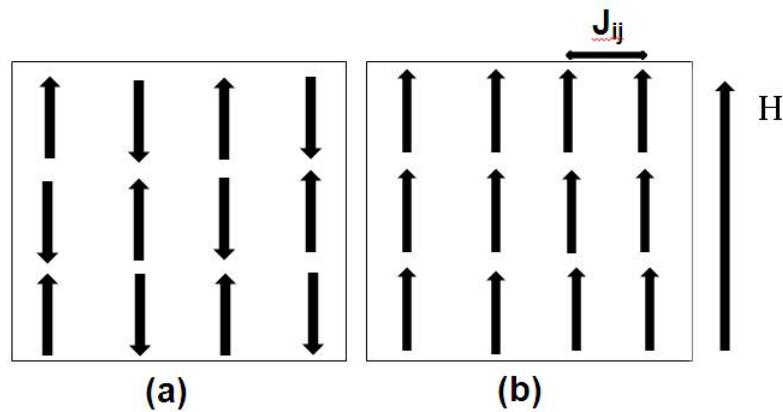


Figura 1.9: Comportamento dos spins de um material antiferromagnético ($J_{ij} < 0$). **(a)** Spins alinhados de forma antiparalelamente na ausência de um campo externo. **(b)** Spins alinhados de acordo com o campo externo H .

Diferentemente dos compostos ferromagnéticos, que na presença de campo magnético externo, na direção do eixo fácil da magnetização, a transição de fase é destruída (não existe T_c , por exemplo), os antiferromagnetos na presença do campo externo, podem exibir diversos tipos de ordenamento magnético no diagrama de fase no plano $T - H$. Do ponto de vista teórico, os primeiros estudos das propriedades magnéticas em compostos antiferromagnéticos foram desenvolvidos por Neel (NÉLL, 1932). A teoria de Neel corresponde à aplicação da teoria do campo molecular de Weiss, onde divide-se o sistema antiferromagnético em duas ou mais subredes interpenetrantes.

As propriedades magnéticas dos materiais foram intensivamente estudadas por um grande número de pesquisadores, antes mesmo de que uma teoria adequada tivesse sido desenvolvida. Estas propriedades foram bem compreendidas com base na mecânica quântica, desenvolvida no começo deste século. Estudos recentes mostram aplicações baseadas nas propriedades magnéticas da matéria, encontradas no dia-a-dia, como exemplo no ramo da medicina.

1.4 Estudo da transição de fase e fenômenos críticos

Transição de fase e fenômenos críticos tem origem na década de 60, quando os conceitos básicos de classe de universalidade e escala de funções termodinâmicas foram introduzidas. O pioneirismo no aspecto de universalidade em transição de fase foi de Kadanoff e colaboradores (WELLER,1985) em 1967.

Existe uma grande quantidade de sistemas físicos que apresentam transição de fase. Há essencialmente dois tipos de transições de fase: as Contínuas e as Descontínuas. Transição entre o sólido e o gás é descontínua, pois envolve calor latente. Quando uma substância passa de uma fase desordenada (o gás) para uma fase ordenada (o sólido), uma quantidade de calor (o calor latente) é libertada neste processo. Esta libertação de calor revela que, a estrutura do material é alterada de uma forma radical. Isto acontece, em particular, ao longo das linhas de sublimação, fusão e ebulição da maior parte das substâncias conhecidas (é por causa disto que sentimos mais calor quando, à mesma temperatura, estamos num ambiente mais húmido, dentro do chuveiro, na casa de banho, pois o vapor de água liberta uma quantidade de calor, o calor latente, ao condensar na nossa pele).

Os sistemas coloidais (dispersões de partículas esféricas, com raios da ordem de $1\ \mu\text{m}$, num solvente) fabricados recentemente exibem apenas uma fase gasosa (ou fluida), e outra sólida, separadas por uma linha de sublimação. Contudo, a maior das substâncias naturais é caracterizada por diagramas de fases um pouco mais complexos, e têm também uma fase líquida. Ao contrário do sólido e do gás, o líquido é estável numa gama de temperaturas limitada pelo ponto triplo (onde o sólido, o líquido e o gás coexistem simultaneamente) e pelo ponto crítico, onde termina a linha de condensação, ao longo da qual coexistem uma fase líquida e outra gasosa. O ponto crítico entre o líquido e o gás é um exemplo de uma transição de fase contínua, isto é, uma transição que não envolve calor latente.

Pode-se citar alguns exemplos de transições de fase: a água líquida ferve a 100°C e congela a 0°C , à pressão de 1 atm. Nestas condições, as propriedades físicas do sistema são muito especiais. Em particular, as funções termodinâmicas apresentam singularidades, por exemplo, na curva de sublimação, a densidade passa descontinuamente da densidade típica do sólido para uma densidade cerca de 1000 vezes menor, típica do gás.

Em um sistema, a mudança de fase é caracterizada por singularidades nas suas funções termodinâmicas: no caso de sistemas magnéticos, a energia livre e derivadas correspondentes, associadas a magnetização e susceptibilidade, no ponto de transição. Os parâmetros externos relevantes em que ocorre as transições de fase de sistemas magnéticos, são a temperatura T e

o campo magnético uniforme H . Portanto, para $T < T_C$ o sistema está ordenado, e próximo de T_C , o sistema começa a desordenar e logo acima de T_C , o sistema encontra-se desordenado. No sistema ferromagnético, a magnetização é o parâmetro de ordem, enquanto que no sistema antiferromagnético, a magnetização de uma dada subrede é o parâmetro de ordem.

Uma transição pode se classificar também, pela ordem da derivada da energia livre, que apresenta descontinuidade: uma transição de primeira ordem é caracterizada pela descontinuidade da magnetização, e uma transição de segunda ordem, a magnetização vai a zero continuamente quando $T \rightarrow T_C$, mas a susceptibilidade diverge, (nessa análise considerou-se o sistema à campo nulo). Para a transição de primeira ordem tem-se a coexistência de duas fases distintas (ordenada e desordenada) no ponto em que o sistema sofre transição (ponto crítico)³. Numa transição de segunda ordem, a fase ordenada se transforma de forma contínua numa fase desordenada.

As transições de fases clássicas, ou seja, movidas pelo efeito da temperatura, será abordada nessa seção. Ilustraremos esta abordagem com o exemplo do ferromagnetismo, mostrado esquematicamente na Fig.1.8.

O que determina o comportamento termodinâmico do ferromagneto de Ising é a competição entre a energia de troca e a temperatura. Para dimensões maiores que um ($d > 1$), o sistema pode se apresentar a $T > 0$, em duas fases distintas; paramagnética e ferromagnética conforme mostra a Fig.1.10. Para temperaturas altas, comparadas com J , a entropia domina a energia livre e os spins flutuam praticamente independentemente, caracterizando a fase paramagnética. Por outro lado, para baixas temperaturas, quase todos os spins permanecem alinhados em uma das duas direções possíveis, dando origem a uma ordem magnética de longo alcance. Nesta fase ferromagnética cada spin apresenta um valor médio $\langle S_i \rangle$ diferente de zero, onde $\langle \rangle$ denota a média termodinâmica sobre o ensemble canônico.

A magnetização espontânea assume diferentes valores em cada fase, e é utilizada como parâmetro de ordem, uma quantidade termodinâmica que serve para caracterizar a natureza de uma fase, Fig.1.11. Em toda a fase paramagnética, encontrada na região de temperatura $T > T_C$, sendo T_C a temperatura crítica da transição, a magnetização assume o valor zero. Na fase ferromagnética, na região de temperatura $T < T_C$ a magnetização assume um valor não nulo. Para T logo acima de T_C , existem grandes regiões ou domínios nos quais uma certa porção dos spins estão alinhados paralelamente. Existe ordem nestes domínios mas não é possível que uma fração finita destes concordem em alinhamento. Para T logo abaixo de T_C a grande mai-

³Em sistemas magnéticos, a fase ordenada ocorre quando os momentos magnéticos de uma dada configuração microscópica estão alinhados. Quando é proporcionado a variação da temperatura, há uma competição entre a energia térmica, que produz desordem no sistema.

oria dos domínios estão com o mesmo alinhamento e observa-se o ordenamento de longo alcance. Quando os tamanhos dos domínios tornam-se grandes, o tempo requerido para o ordenamento ou desordenamento torna-se longo. dizemos então que o tempo de relaxação (equilíbrio térmico) próximo a T_C é longo. Este tipo de transição descrita acima é chamada de transição de segunda ordem.

Para o caso em uma dimensão os spins estão conectados entre si por apenas duas ligações, favorecendo que as flutuações térmicas destruam qualquer alinhamento ferromagnético. Neste caso, ocorre ordem apenas em $T = 0$.

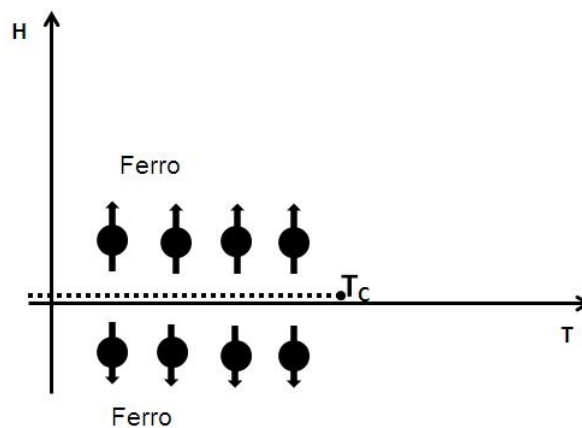


Figura 1.10: Diagrama de fase no plano $(\frac{K_B T_N}{J_1}, H)$ para um ferromagneto.

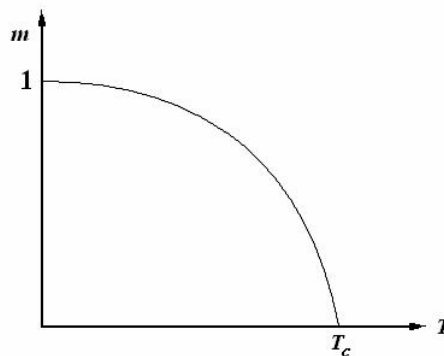


Figura 1.11: Diagrama de fase da magnetização espontânea em função da temperatura para um ferromagneto..

Para qualquer valor de temperatura finita, a entropia sempre domina a energia interna impedindo o surgimento de uma fase ordenada. Assim, diz-se que a dimensão crítica inferior do modelo de Ising, isto é, a dimensão acima da qual pode-se ter uma fase ordenada para $T \neq 0$ é então $d_l = 1$.

Outra variável termodinâmica de interesse na descrição das transições de segunda or-

dem é o comprimento de correlação ξ . O comprimento de correlação mede o tamanho linear de uma região sobre a qual as flutuações de spins estão correlacionadas, e pode-se também dizer que é o comprimento médio dos domínios com uma porção finita de spins alinhados na mesma direção. No caso de uma transição de segunda ordem, como aquela observada na transição ferromagnética-paramagnética descrita acima, as flutuações estão correlacionadas em todas as escalas de distância, de modo que o comprimento de correlação torna-se infinito.

Na fase ferromagnética existem dois estados de equilíbrio equivalentes que estão relacionados pela simetria de inversão de spins, exibida pelo Hamiltoniano de Ising. O sistema apresenta uma quebra de simetria espontânea ao escolher um dos dois estados possíveis de equilíbrio. Na Fig.1.12 está representado o diagrama de fase no plano (m, H) , o qual, apresenta uma descontinuidade na magnetização, quando $H \rightarrow 0_+$ com valor $+m_0$ e $H \rightarrow 0_-$ com valor $-m_0$. Esta descontinuidade caracteriza uma transição de primeira ordem. Algumas quantidades termodinâmicas sofrem descontinuidades ao passar pela linha de transição, $H = 0$ e $T < T_C$, e o comprimento de correlação permanece finito.

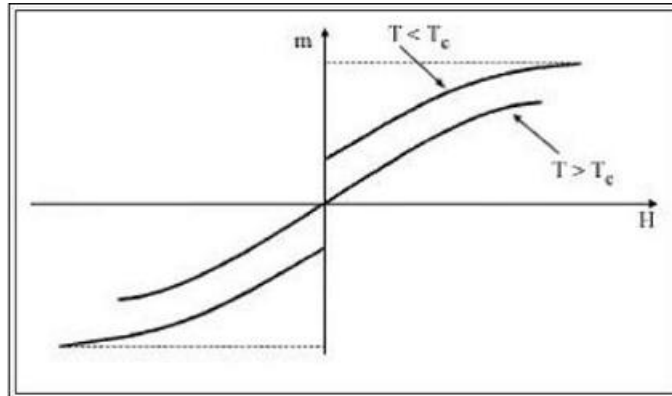


Figura 1.12: Curva da magnetização no plano (m, H) .

Esse comportamento singular ou divergente de certas funções termodinâmicas numa transição de fase é descrito em termos de expoentes críticos (STANLEY,1971). Estas transições são caracterizadas por uma temperatura de transição, ou temperatura crítica T_C . Portanto, próximo a uma transição de fase, descrevemos o comportamento singular das grandezas físicas do sistema através de comportamentos assintóticos em função da variável térmica,

$$t = \frac{T - T_C}{T}. \quad (1.5)$$

As singularidades apresentadas por grandezas termodinâmicas também podem ser caracterizadas por leis de potências com expoentes bem definidos. Para sistemas magnéticos, os expoentes críticos mais importantes são: β da magnetização a campo nulo, δ da magnetização

em T_C , γ da susceptibilidade e α do calor específico, definidos como

$$\begin{cases} M(t, H = 0) \sim |t|^\beta \\ M(t = t_c, H) \sim H^{\frac{1}{\delta}} \end{cases}; \quad (1.6)$$

$$\chi \sim |t|^{-\gamma}, \quad (1.7)$$

$$c \sim |t|^{-\alpha}. \quad (1.8)$$

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

$$\xi(T) \sim |t|^{-\nu}, \quad H = 0, \quad (1.9)$$

onde, ν também é um expoente crítico. Em transição de 1^a ordem, o comprimento de correlação é finito. O expoente crítico associado ao fenômeno de transição de fase é o η . Este expoente é conhecido por dimensão anômala, e é relacionada a função de correlação conectada, em $T = T_C$ dada por

$$G(r) \sim \frac{\exp(-\frac{r}{\xi(T)})}{r^{d-2+\eta}} (r \rightarrow \infty), \quad (1.10)$$

onde, r é a distância de um par correlacionado e d a dimensionalidade do sistema. As definições acima referem-se a parte singular destas quantidades e, salvo quando explícito, as singularidades são as mesmas para T se aproximando de T_C , por cima ou por baixo. Observamos que de forma geral, o expoente crítico associado ao comportamento assintótico de uma grandeza F é denifido por

$$\lambda = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\ln |F(t)|}{\ln |t|}. \quad (1.11)$$

Os expoentes críticos não são independentes, e estão relacionados entre si por algumas desigualdades obtidas através de considerações fundamentadas na termodinâmica e na mecânica estatística. Na criticalidade, essas desigualdades são satisfeitas como igualdades, e são conhecidas como leis de escala. Baseados em argumentos de estabilidade dos potenciais termodinâmicos, na década de 60 vários autores obtiveram relações de desigualdade entre os expoentes críticos, tais como:

$$\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2 \text{ (Rushbrooke, 1963)}, \quad (1.12)$$

Tabela 1.1: Valores da temperatura crítica T_C para o modelo de Ising ferromagnético de spin-1/2 obtidas através de EFT-1 e EFT-2 em diversas topologias de rede (NETO, 2004).

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

$$\alpha + \beta(1 + \delta) \geq 2 \text{ (Griffiths, 1965),} \quad (1.13)$$

$$vd \geq 2 - \alpha \text{ (Josephson, 1967),} \quad (1.14)$$

$$(2 - \eta)v \geq \gamma \text{ (Fisher, 1969).} \quad (1.15)$$

Estas leis são obtidas a partir de uma conjectura acerca de como algumas quantidades se transformam quando o sistema sofre uma transformação de escala. A idéia básica é que, próximo ao ponto crítico, as correlações de longo alcance das flutuações de spins são responsáveis por todos os comportamentos singulares das grandezas físicas. Portanto, o comprimento de correlação ξ é o único comprimento característico do sistema, e todos os demais serão medidos em termos dele. Esta conjectura juntamente com a afirmação de que, próximo ao ponto crítico, as funções termodinâmicas são funções homogêneas generalizadas levam-nos as conhecidas leis de escala,

$$\gamma = \beta(\delta - 1), \quad (1.16)$$

$$\gamma(\delta + 1) = (2 - \alpha)(\delta - 1) \quad (1.17)$$

$$\gamma = v(2 - \eta) \quad (1.18)$$

$$vd = 2 - \alpha \quad (1.19)$$

Portanto estas relações são de grande importância na teoria de fenômenos críticos. É conhecido experimentalmente que os expoentes críticos, que governam o comportamento das quantidades termodinâmicas nas vizinhanças de um dado ponto crítico, têm os mesmos valores para vários sistemas. Quando sistemas diferentes possuem o mesmo conjunto de expoentes críticos dizemos que eles pertencem a uma mesma classe de universalidade.

1.5 Sistemas Magnéticos desordenados

Os sólidos encontrados na natureza, ou aqueles sintetizados em laboratórios, de maneira geral, apresentam-se com algum grau de impurezas ou imperfeições quando comparados com uma estrutura cristalina perfeita, caracterizando assim a desordem.

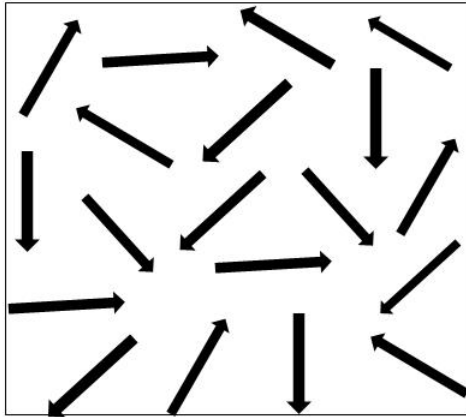


Figura 1.13: Ilustração esquemática de um cristal Paramagneto mostrando a ausência de ordem magnética.

Os materiais magnéticos apresentam-se, em geral, com uma determinada concentração de defeitos, originados pela presença de impurezas magnéticas (não magnéticas) ou ainda, devido a falhas na rede cristalina (vacâncias). Esses defeitos apresentam-se de forma pontual, de linha ou de superfície, dependendo das limitações das regiões imperfeitas na escala atômica. As imperfeições pontuais mais comuns são as impurezas químicas, sítios vazios na rede e átomos extras situados em outras posições da rede. As vacâncias são defeitos pontuais, caracterizados pela ausência de íons (ou íons extras).

As propriedades magnéticas do sistema podem ser fortemente influenciadas, em virtude da presença destes defeitos. A desordem em sólidos pode ser classificada em três tipos (STINCHCOMBE, 1983): substitucional, topológica e contínua. Na desordem substitucional, os átomos tipo do X numa estrutura cristalina perfeita, são substituídos por átomos do tipo Y de maneira completamente aleatória, sem haver contudo, alterações na estrutura da rede. Na hipótese de não haver nenhum distúrbio na rede cristalina, tem-se a formação de uma liga do tipo X_pY_{1-p} (onde p é a concentração de átomo do tipo X). Este fenômeno ocorre para muitos elementos diferentes, como em metais, em semicondutores e cristais iônicos, e têm 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 Y, é que ela seja aleatória nos sítios da rede cristalina.

No entanto, tal suposição da independência estatística, da ocupação dos sítios é não realística, devido aos termos de interação na energia coesiva, isto é, a energia livre do sistema depende da distribuição dos átomos do tipo Y em relação aos átomos do tipo X e vice-versa. A impureza substitucional pode também ser um ponto de defeito da rede, tal como uma vacância. Mesmo que fisicamente não seja possível colocar uma alta concentração de vacâncias ao acaso num sólido cristalino.

A desordem topológica ocorre principalmente em sólidos amorfos. Nesse caso, o arranjo atômico ou molecular não é o de uma rede ordenada, no entanto, algumas propriedades do material, tais como a distribuição da carga em cada sítio, satisfazem a relação $F(\vec{r} + \vec{R}_i) = F(\vec{r})$, onde $\vec{R}_i$ refere-se à posição do núcleo do átomo i no espaço real. A desordem contínua é o caso mais alto de desordem, apresenta-se com distribuição completamente aleatória dos potenciais atômicos. Dentre as desordens mencionadas, nosso estudo se concentrará ao caso da desordem substitucional em sistemas magnéticos, denotado na literatura, por um material magnético diluído.

1.5.1 Sistemas Magnéticos diluídos

Um sistema magnético diluído é um efeito da desordem e de quebra de alguma simetria do sistema, presente em quase todas as substâncias. A mistura, dependendo da concentração de átomos não magnéticos, pode atingir um limite, em que a impureza pode estar em maior quantidade, destruindo a ordem magnética do sistema diluído. Quanto a distribuição de átomos na rede cristalina podemos distinguir dois tipos:

a) temperada (*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;

b) Recozida (*annealed*), na qual a probabilidade de distribuição dos átomos magnéticos é governado pela mecânica estatística, e varia com a temperatura e o campo magnético, a qual os sítios são ocupados de tal forma que a energia livre seja mínima. A diluição em materiais magnéticos, é usualmente classificada em diluição de sítios e diluição de ligações, de acordo com a natureza dos componentes (sítios e ligações). Na diluição de sítios, íons magnéticos na rede cristalina são substituídos por íons não magnéticos, enquanto que o processo de diluição de ligações Fig.1.14 estudados por (PADILHA, PACOBAHYBA, 2006), consiste em desconectar ligações entre dois íons magnéticos adjacentes, cujas ligações magnéticas que estejam conectando sítios vizinhos são quebradas por introdução de algum tipo de íon diamagnético, que neutraliza o *overlap* das funções de onda entre os sítios (destruição do *exchange*). As Fig.1.15

ilustra os efeitos da diluição de sítios e ligação na rede quadrada.

A diferença entre os dois processos está no efeito provocado por ambos. Para visualizar isto basta verificar que, no problema de diluição de ligações, a remoção de uma ligação extingue apenas a interação entre dois íons magnéticos, enquanto que, na diluição de sítios, a substituição de um íon magnético por um íon não magnético, implica quebra de ligações diretamente relacionadas a este sítio. Tais diferenças tornam-se mais claras próximo da transição de fase, onde numa certa concentração crítica, haverá a formação de um aglomerado de íons magnéticos de tamanho infinito. Essa concentração é em geral alcançada mais rapidamente nos problemas de diluição de ligações.

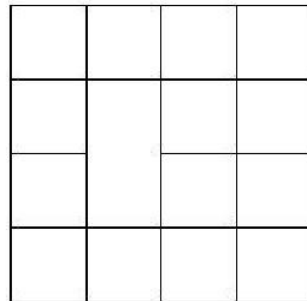


Figura 1.14: Rede idealizando remoção de uma ligação.

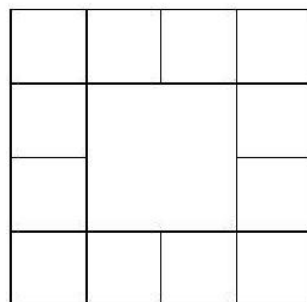


Figura 1.15: Desordem na remoção de um sítio.

A grande motivação de se estudar sistemas desordenados, está no fato de ter se tornado possível controlar, de maneira adequada, as propriedades físicas dos materiais através de técnicas de dopagem. No estudo das propriedades magnéticas de sistemas diluídos, o maior interesse tem sido dado ao estudo do comportamento da temperatura crítica como uma função da concentração de íon magnético. Fisicamente, espera-se que a ordem magnética seja gradativamente enfraquecida com a introdução de cada vez mais íons não-magnéticos sobre a rede cristalina.

Teoricamente, um Hamiltoniano (por simplicidade o modelo de Ising) é usado para estudar diluição por sítio em sistemas localizados (desordem temperada ou *quenched*), que pode ser escrito na forma

$$\mathcal{H}_S = - \sum_{\langle i,j \rangle} S_i J S_j \eta_i \eta_j, \quad (1.20)$$

onde, S_i é a variável de spin do sítio i , e η_i é a variável relacionada a desordem no sítio i podendo assumir valores 0, 1 o que implica

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

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

A ausência de ordem no sítio do tipo *quenched* acontece quando a média configuracional independe da média térmica (que é dada pela distribuição de probabilidade $\mathcal{P}(\eta_i)$) (BROUT, 1959), isto é, quando a distribuição de desordem é fixa na rede, ela não pode evoluir, ao contrário do que acontece com os graus de liberdade do spin. Para o caso mostrado na Eq.(1.3) têm-se que

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

sendo essa a situação mais usual para magnetos diluídos reais.

Teóricamente, resultados rigosos de expansão em séries (ELLIOTT, 1961), mostram que a concentração crítica p_c independe da simetria do Hamiltoniano, ou seja, $p_c(\text{Ising}) = p_c(\text{Heisenberg})$, sendo portanto, uma característica da rede.

No material diluído, a ocorrência de ordem magnética de longo alcance e transições de fase, depende da existência de um aglomerado (*cluster*) de tamanho infinito, e que a existência de tal *cluster* em função da concentração magnética, seja uma característica geométrica. Este aspecto geométrico na destruição do *cluster* infinito, como uma função da concentração p (sítio ou ligação), é conhecido como percolação, e foi mostrado (DOMB, 1961), que a concentração de percolação p_c corresponde exatamente ao mesmo valor da concentração crítica, obtida em $T = 0$ do sistema diluído.

O fato de que a concentração crítica independe do modelo, a curva crítica $T_C(p)$ vai ser sensivelmente afetada pelo tipo de simetria⁴ do Hamiltoniano usado para descrever o sistema. Para o caso da desordem *annealed*, onde as ligações ou sítios diluídos podem difundir pela rede, de forma a encontrar a configuração de mínima energia livre. Uma desordem por sítio do tipo

⁴A maneira de como se comporta $T_C(p)$ do modelo de Ising, para concentração $p_c < p < 1$, devido a forte anisotropia do spin numa única direção, para uma rede 3d, é maior do que o caso do modelo XY, e este por sua vez superior ao modelo de Heisenberg, isto é, $T_C^I(p) > T_C^{XY}(p) > T_C^H(p)$.

Annealed acontece quando calcula-se a média da variável de desordem $\{\eta_i\}$, da mesma forma que a das variáveis de spin $\{S_i\}$, isto é, obtém-se através do fator de Gibbs:

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

onde, $\beta = \frac{1}{k_B T}$, o potencial químico μ é a média de cada variável η_i , ou seja, é a própria concentração p .

É preciso também saber diferenciar desordem por sítio e por ligação (substituição), sendo possível, em princípio, que ambas as situações serem aplicadas para os casos *quenched* e *annealed*. Já para a desordem magnética por ligação, a forma típica do Hamiltoniano é

$$\mathcal{H}_B = - \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \cdot J \cdot S_j \cdot \eta_{ij}, \quad (1.24)$$

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

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

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

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \cdot S_i \cdot S_j, \quad (1.26)$$

com

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

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

Para o caso de diluição por ligação do tipo *annealed* o Hamiltoniano continua sendo dado pela Eq.(1.22), porém as médias tanto das variáveis de spin como as de desordem são dadas pelo fator de Gibbs

$$\rho \propto \exp \left[-\beta (\mathcal{H}_B - \mu \sum_{\langle i,j \rangle} \eta_{ij}) \right]. \quad (1.28)$$

Esses tipos de sistemas que apresentam desordem do tipo *annealed* e *quenched* são bem diferentes, vista que, a desordem do tipo *annealed* não é comumente achada em sistemas magnéticos reais, desde que a energia magnética não seja um fator preponderante que determine a desordem configuracional.

1.6 Sistemas Magnéticos com interações competitivas

Estudo de sistemas magnéticos com interações competitivas surgiu inicialmente com a descoberta experimental (principalmente através da técnica de espalhamento de nêutrons) de estruturas magnéticas espacialmente moduladas, com configurações mais complexas que os casos antiferromagnéticos e ferrimagnéticos (YOSHIMORI, 1959; NAGAMIYA, 1962). Teoricamente, a origem dessas estruturas magnéticas moduladas está na combinação de dois efeitos contrários: cooperação e competição (NAGAMIYA, 1962). A cooperação tende a levar o sistema magnético, no regime de baixas temperaturas, a assumir uma configuração simples como a ferromagnética ou a antiferromagnética.

A competição 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 troca (em intensidade e em sinal), diluição e combinação simultânea destes mecanismos etc. Esses fatores podem em determinadas circunstâncias, fazer com que as configurações magnéticas simples não minimizem mais a energia do sistema, havendo a necessidade do aparecimento de estruturas moduladas, as quais podem apresentar aspectos bastante complexo no modelo em questão.

Diante desses fatores, estão o aparecimento de fases moduladas incomensuráveis como o parâmetro de rede, o aparecimento de pontos multicríticos, grande numero de estados metaestáveis (como é o caso dos vidros de spin (GRETT, 1983), fases reentrantes, nas quais o sistema pode passar de uma fase desordenada para uma fase ordenada através da elevação da temperatura, fenômeno esse pela primeira vez observado no sal de Rochelle (LANDAU, 1978).

Entre todas essas manifestações, está um efeito, primeiramente identificado por Toulouse (TOULOUSE, 1977), denominado de efeito de frustração. A frustração pode ser entendida como, uma disputa entre dois ou mais tipos de interações experimentadas simultaneamente por alguns spins do sistema. Disputa essa, que torna impossível a satisfação simultânea de todas as interações, e o sistema desenvolve fases moduladas, nem sempre comensuráveis com a rede, para minimização da energia do sistema.

No ponto inicial de Toulouse, frustração é uma propriedade espacial com 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 no sistema. Tendo em vista que um sistema frustrado não é capaz de atingir uma configuração que satisfaça inteiramente os seus vínculos, desenvolve assim uma multiplicidade de estados

igualmente insatisfatórios (PADILHA,2006).

1.7 Modelos Decorados

Na literatura encontramos que, o estudo do modelo de Ising- $1/2$ (*quenched*)⁵ aleatoriamente decorados foi inicialmente incorporado por um dos precursores do modelo, Syozi (SYOZI, 1951), no intuito de estabelecer a temperatura de transição (e suas relações) da rede Kagomé a partir do valor correspondente de T_c para rede honeycomb, representado pela Fig.1.16. Era obtida uma relação importante entre as funções de partição das duas redes, que transformava a rede original (honeycomb) numa rede kagomé, com interações efetivas quando, o traço parcial sobre os spins do vértices da rede honeycomb decorada era tomado, surgindo assim uma interação efetiva entre os spins decoradores.

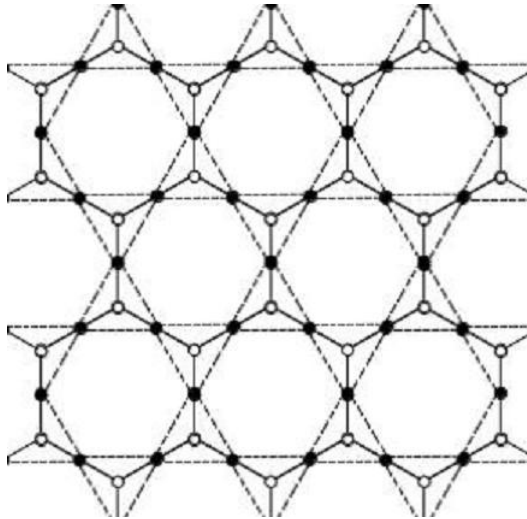


Figura 1.16: Rede Kagomé construída por uma transformação estrela-triângulo a partir da rede honeycomb. O traço parcial é feito sobre os sítios (O)(SYOZI, 1972).

Modelos decorados de spin são formados a partir de uma rede original Fig.1.17, na qual são inseridos sítios adicionais entre cada par de sítio da rede. Os sítios adicionados à rede original são ocupados por uma espécie diferente de spins, os spins decoradores, como pode ser vista na Fig.1.18.

O método para incluir efeitos de um campo magnético externo, foi estendido em 1954, (NAYA, 1954), conseguindo assim obter uma expressão equivalente para a magnetização espontânea da rede Kagomé, a partir de uma expressão equivalente para a rede honeycomb.

Fisher (FISHER, 1959), generalizou o que ele chamou de transformação de decoração-

⁵Quenched (*temperada*) onde os átomos magnéticos e não magnéticos situam-se ao acaso nos sítios de uma rede cristalina.

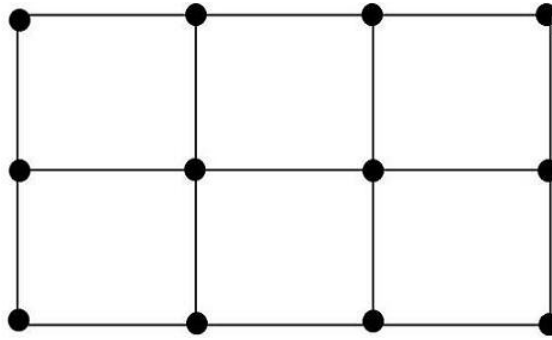


Figura 1.17: Representação de uma rede original. Os círculos pretos representam os spins.

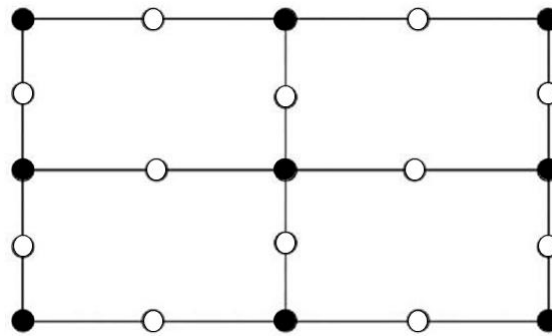


Figura 1.18: Representação de uma rede decorada. Os pontos brancos são os spins decoradores.

iteração, para o caso em que o elemento decorador é um sistema físico, 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. A partir daí, os modelos decorados foram então intensamente utilizados para estudar vários tipos de sistemas magnéticos, incluindo-se sistemas com interações competitivas. Para uma referência geral sobre modelos decorados, pode-se destacar (Syozi,1972) em (SYOSI, 1951).

1.8 Modelos Frustrados

O estudo desse modelo é usado para descrever transições de fase quânticas ocasionadas por competições de interação e flutuação quânticas. O modelo bidimensional com competição antiferromagnética de primeiros e segundos vizinhos (PACOBAYHYBA,2006) mais próximo de uma rede quadrada, foi exaustivamente estudado por diversos métodos, onde as propriedades críticas são relativamente conhecidas. Na ausência de interação de segundos vizinhos, o sistema não é frustrado e o estado fundamental $T = 0$ possui ordem antiferromagnética de longo alcance (LAPA, 2009). Segundo o teorema de Mermin Wagner (MERMIN,1966), tal modelo não apresenta ordem magnética em temperatura finita ($T > 0$). Porém este ordenamento é afetado pelas flutuações quânticas. A presença da interação de segundos vizinhos antiferromagnética, induz

forte frustração para destruir a ordem antiferromagnética e, juntamente com as flutuações, exibem uma fase paramagnética quântica conhecida como líquido de Spin, LS conforme *Fig.1.19*. Esta fase desordenada surge devido a fortes flutuações que surgem especialmente na vizinhança de pontos críticos.

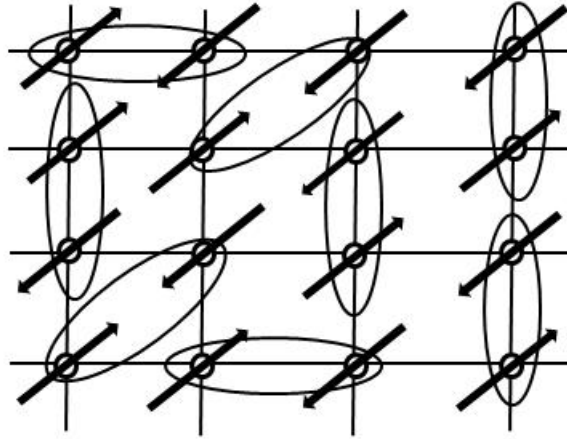


Figura 1.19: Esquema do estado líquido de spin (LS) numa rede quadrada formado por estados singletos de dímero.

As propriedades críticas dos modelos de spin frustrado dependem fortemente da dimensionalidade do sistema, por exemplo, simetria do Hamiltoniano, spin e anisotropia de exchange e principalmente frustração. No caso clássico, as flutuações quânticas são desprezadas, porém no caso quântico, as flutuações têm papel importante em conjunto com a frustração para o aparecimento de estados fundamentais incomuns. Geralmente nos sistemas antiferromagnéticos para pequenos valores de spin, a flutuação é bem significativa, enquanto os sistemas ferromagnéticos são menos afetados pelas flutuações. Outro composto de vanádio que também chama a atenção, no contexto de sistemas de spin frustrado de baixa dimensionalidade são os óxidos, contendo pirâmides de VO_5 , por exemplo, o composto CuV_2O_9 que é a primeira realização de um sistema de plaquetas bidimensionais, apresentando um estado fundamental do tipo singlete. A maior parte dos materiais magnéticos frustrados são conhecidos como magnetos geometricamente frustrados ⁶. Nestes sistemas, a frustração surge do efeito de competição de interações de troca equivalentes, e o caso mais simples, com forte frustração é o antiferromagneto numa rede triangular ($z = 6$).

É importante citar que qualquer distorção estrutural, pode inevitavelmente alterar a frustração, e como consequência, dar origem a estados fundamentais diferentes. Existem ainda sistemas em que a competição de interação são equivalentes, mas sua topologia e magnitude

⁶Há outros sistemas geometricamente frustrados como por exemplo, o antiferromagneto numa rede Kagomé e na rede triangular empilhada

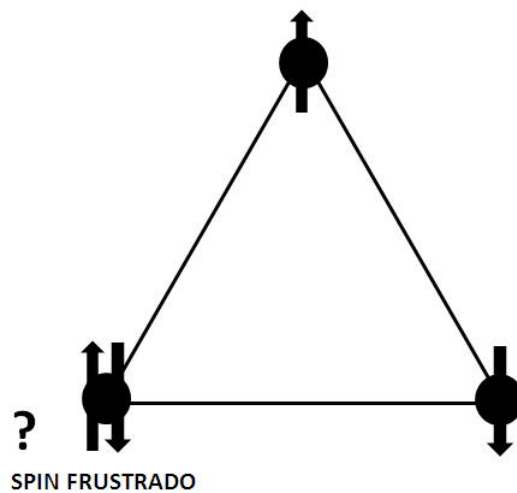


Figura 1.20: Ilustração da idéia de frustração geométrica numa rede triangular antiferromagnética. Como podemos observar o spin fica frustrado pois sua ordem em relação aos seus vizinhos mais próximo é indeterminada

podem ser ajustada tal que, as flutuações quânticas destruam a ordem de longo alcance, similar aos 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 $1/2$ numa rede quadrada ferromagnética ou antiferromagnética, onde a competição de segundos vizinhos antiferromagnética ao longo das diagonais, induz forte frustração no sistema.

1.9 Objetivo e Apresentação do Trabalho

O objetivo deste trabalho é discutir a temperatura crítica e as magnetizações uniforme e residual (remanescente), através de diagramas de fase no estado fundamental de ordem Néel. Nesta análise, estudaremos o modelo de Ising quase-bidimensional aleatoriamente decorado com interações de primeiros e segundos vizinhos e campo magnético, utilizando a teoria de campo efetivo, combinada com a técnica do operador diferencial. A descrição de fenômenos magnéticos, e estudos da criticalidade e das propriedades termodinâmicas de modelos clássicos e quânticos, com interações competitivas, tem motivado muitos teóricos, especialmente pelo surgimento de diversos tipos de ordenamento (estados modulados, vidros de spins, superantiferromagnetismo etc) e fenômenos como, de (reentrância, pontos multicríticos etc). Nesse trabalho analisam-se as magnetizações total m e residual m_s , por meio de diagramas de fase, no tratamento do modelo de Ising antiferromagnético de spin- $\frac{1}{2}$, quase-bidimensional, aleatoriamente decorado, com interação de primeiros e segundos vizinhos e campo magnético externo, para elucidar o comportamento crítico do sistema. Para o estudo desse modelo, utiliza-se a teoria de campo efetivo em aglomerados finitos (em particular, será usado um aglomerado finito de um spin (aqui denotado por EFT-1)) combinada com a técnica do operador diferencial (*Effective Field Theory* - **EFT**). A principal motivação destes estudos é que, este modelo simula qualitativamente algumas propriedades magnéticas dos compostos supercondutores de altas temperaturas, formados por planos de CuO_2 , como por exemplo, $\text{La}_{2-x}(\text{Ba}, \text{Sr})_x\text{CuO}_4$, entre outros, (onde Ba ou Sr são dopantes). O presente trabalho está organizado em quatro capítulos, sendo dado um breve relato da origem do magnetismo e considerações sobre o modelo a ser estudado no capítulo 1. No Capítulo 2, abordaremos os aspectos gerais da teoria de campo efetivo. Desenvolveremos essa teoria aliada a técnica do operador diferencial em aglomerados finitos com um e dois spins, e aplicados em sistemas clássicos (Ising) ferromagnético. No Capítulo 3, será apresentado inicialmente o modelo de Ising de spin- $\frac{1}{2}$ antiferromagnético, aleatoriamente decorado com transformação decoração interação em uma rede quase-bidimensional com interação de primeiros e segundos vizinhos e campo magnético. Pela teoria de campo efetivo em aglomerado com um spin, a técnica do operador diferencial será aplicada para tratar o modelo em estudo. A magnetização total (m) e magnetização remanescente (m_s), os diagramas de fase nos planos $(\frac{K_B T_N}{J_1}, H)$, $(p, \frac{K_B T_N}{J_1})$, $(\alpha_1, \frac{K_B T_N}{J_1})$, $(\alpha_2, \frac{K_B T_N}{J_1})$, $(\frac{K_B T_N}{J_1}, h)$, (T_N, m) e (T_N, m_s) , são obtidos para vários valores dos parâmetros de frustração α_1 , α_2 , H e da concentração p , propostos e discutidos, analisando a linha crítica de estabilidade entre as fases antiferromagnética (AF) e paramagnética (P), efeitos de frustração, reentrância e linha crítica de segunda ordem. Finalmente no Capítulo 4, apresentamos nossas conclusões, perspectivas para trabalhos futuros e considerações finais.

2 TEORIA DE CAMPO EFETIVO

2.1 Considerações Iniciais

Como mencionamos anteriormente, neste capítulo vamos analisar aproximações de campo efetivo para tratar o modelo de Ising de spin 1/2. Entretanto, temos que definir inicialmente as dificuldades que encontraremos em um determinado problema de mecânica estatística, que justifique o uso desse método aproximativo.

O objetivo da mecânica estatística é tratar sistemas com um número de graus de liberdade da ordem do número de Avogadro ($N \approx 6.10^{23}$), onde é impossível o tratamento mediante o uso microscópico completo. Em outras palavras, o sistema é tratado considerando as propriedades comuns a um conjunto de partículas, não levando em conta o que acontece com uma partícula especificamente. Isto significa que é mais importante saber quais os estados acessíveis à partícula do que em que estado está uma partícula em especial.

Portanto, seja $Z = Tr e^{-\beta E_i}$, a função de partição, onde $e^{-\beta E_i}$ é proporcional ao peso estatístico para o estado da partícula, Tr representa o funcional traço, $\beta = \frac{1}{k_B T}$ (k_B é a constante de Boltzmann e T a temperatura absoluta) e E_i é a energia de um determinado estado i . Então a busca da mecânica estatística é calcular esta soma sobre todos os estados acessíveis ao sistema, ou seja, devemos efetuar o somatório

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

que é conhecido na literatura como função de partição.

Para calcularmos a função de partição num sistema de N partículas, temos no cálculo da função de partição, o funcional Tr , que representa matematicamente uma soma sobre $(2N+1)^N$ configurações de spin. Tentando eliminar as flutuações estatísticas ($\sim N^{-\frac{1}{2}}$), a mecânica estatística de equilíbrio analisa o sistema no limite termodinâmico ¹ ($N \rightarrow \infty$), que, para um

¹Segundo o Teorema de Yang e Lee a condição (necessária, mas não suficiente) para existência de uma transição de fase é no limite termodinâmico, tendo em vista que em sistemas unidimensionais com interação de curto alcance

sistema de partículas interagentes apresenta transição de fase.(SALINAS,1999). A partir da função de partição, podemos obter toda a termodinâmica do modelo considerado, uma vez que o conhecimento da função de partição nos permite a avaliação da energia livre de Helmholtz, que é denominada função canônica², e que faz a conexão entre a termodinâmica e a mecânica estatística e que é dada por

$$F = -k_B T \ln \{Z\}. \quad (2.2)$$

De posse da energia livre Eq.(2.2), pode-se calcular duas grandezas termodinâmica importantes no qual, identifica a ordem magnética do sistema, tanto do ponto de vista teórico como experimental. Primeiro temos a grandeza denominada magnetização (M), que é a soma de todos os momentos magnéticos elementares dividido pelo volume que ocupa (grandeza intensiva³), na qual é obtida pela equação abaixo

$$M = \frac{1}{V} \left\langle \sum_i \vec{\mu}_i \right\rangle. \quad (2.3)$$

Obtendo a magnetização, pode-se agora calcular outra grandeza, a suscetibilidade magnética (χ), que é a grandeza na qual caracteriza um material magnético segundo seu comportamento quando submetido a um campo magnético aplicado, e que é dada pela equação

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H}. \quad (2.4)$$

São poucos os modelos estatísticos que apresentam cálculos exatos de suas grandezas termodinâmicas. Para se ter uma primeira avaliação do comportamento de alguns sistemas, métodos aproximativos como a de campo médio e a técnica do operador diferencial são muito utilizados . O modelo de Ising (1d) com campo, o modelo de Ising (2d) sem campo e o modelo n-vetorial (1d) sem campo são exemplos onde esses métodos obtêm bons resultados qualitativos para uma primeira análise.

O primeiro modelo que admitia transição de fase ($T_C \neq 0$) foi apresentado em 1945 por Onsager, onde ele mostrou que a temperatura crítica é dada por $2k_B T_C = J / \ln(\sqrt{2} + 1)$. Bem antes dos estudiosos (Onsager, Kramers e Wannier (1941), Rushbrooke (1938), Pierls (1936),

não apresentam ordem de longo alcance $T_C = 0$.

²Sistema termodinâmico simples, por meio de parede diatérmica, mas fixa e impermeável, constituída por um conjunto de microestados j , associados à uma distribuição de probabilidade, acessíveis a um sistema S em contato com reservatório térmico a temperatura T (SALINAS,1999).

³Quando seu valor independe do tamanho do subsistema considerado

Bethe (1935) e Bragg e Williams (1934)) já haviam obtidos resultados que contrariavam a previsão de Ising ou seja, que não seria nula a temperatura crítica. Contudo para se obter solução exata do problema, é preciso calcular a soma sobre todas as configurações $\{\sigma_i\}$ de estado para Eq.(2.1)(função canônica), o que nem sempre é possível. Isso fez com que despertasse desenvolvimento de técnicas aproximativas para se obter as variáveis termodinâmica dos mais variados modelos, na intenção de dar condições eficazes para tal limitações existentes até então.

2.2 Aproximação de Campo Médio em Aglomerados Finitos

A primeira teoria que descreveu qualitativamente a transição de fase no ferromagneto foi a aproximação de campo médio (*"mean field approximation-MFA"*). Sistemas compostos por muitos corpos em geral, têm em suas correlações originadas na interação entre estes corpos, uma dificuldade intrínseca para o estudo de suas propriedades relevantes. A dificuldade mais comum é a de calcular estas correlações, restando a alternativa de construir interações efetivas, com o objetivo de aproximar os resultados o máximo possível daqueles advindos de um cenário mais realístico. Este procedimento se multiplica em muitas áreas como: física nuclear relativística, estado sólido, entre muitas outras. Neste tipo de aproximação, considera-se que cada constituinte do sistema está submetido a um campo efetivo constante, substituindo a interação entre os componentes, de forma que nenhuma estrutura espacial é levada em conta. Dentro desta aproximação, as partículas que formam o sistema não se "percebem", pois a interação ocorre apenas através deste campo efetivo, de modo que podemos dizer que estas partículas são independentes.

2.2.1 Aplicação da teoria de campo médio no modelo de Ising

Nesta seção será apresentado o comportamento crítico do modelo de Ising, fazendo uso da aproximações de campo médio. O modelo de Ising (ISING,1925) sendo uma ferramenta poderosa para a modelagem de um sistema físico real, e que tem sua validade julgada pela extensão de suas aplicabilidades e concordância com as observações experimentais. Wilhelm Lenz propôs o modelo a seu aluno de doutorado Ernst Ising, por volta de 1925 com o objetivo de observar o ferromagnetismo de momentos localizados. Refere-se a um modelo paradigmático da mecânica estatística, porque foi um dos primeiros a aparecer, mas sobretudo, porque é um dos poucos modelos úteis (pedagogicamente) que tem solução exata analiticamente.

Portando, vamos considerar como exemplo dois átomos vizinhos i e j . Existe uma tendência de que os spins S_i e S_j no ferromagnetismo se orientam no mesmo sentido. Tal

tendência está associada a $J > 0$ (constante de acoplamento). Os demais comportamento está diretamente ligado a influência da temperatura T e por campo magnético externo H aplicado, e pelas condições de contorno (cc), impostas ao sistema em estudo. Classicamente a aproximação de campo médio para o modelo de Ising, com dois estados (spin $\frac{1}{2}$), é dado pelo seguinte Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j, \quad (2.5)$$

onde, $\langle ij \rangle$ representa a soma sobre todos os primeiros vizinhos (z) e J indica a interação de troca. Analisando um sistema ferromagnético ($J > 0$), a aproximação de campo médio para um aglomerado de um spin, poderá ser entendida imaginando que o spin S_i no Hamiltoniano Eq.(2.5) interaja através de uma média com os seus primeiros vizinhos, podendo ser escrito da seguinte forma

$$\mathcal{H}_1 = -J \sum_i S_i \left\langle \sum_{\vec{\delta}} S_{i+\vec{\delta}} \right\rangle, \quad (2.6)$$

em que a média descrita na equação é:

$$\left\langle S_{i+\vec{\delta}} \right\rangle = m, \quad (2.7)$$

Usando a Eq.(2.7), que substituída na Eq.(2.6), obtem-se Hamiltoniano da Eq.(2.8) onde, $m = \langle S_i \rangle \equiv \left\langle \frac{1}{N} \sum_i S_i \right\rangle$ representando o parâmetro de ordem (magnetização por spin) do sistema, e z é o número de coordenação.

$$\mathcal{H}_1 = -zJm \sum_i S_i, \quad (2.8)$$

Estamos adotando $\mathcal{H}_1$ o Hamiltoniano na aproximação de campo médio para um aglomerado $N = 1$ spins (**MFA-1**). Fazendo uso da Eq. (2.1), a função de partição para o nosso Hamiltoniano em questão fica

$$Z = [2 \cosh(\beta z J m)]^N. \quad (2.9)$$

A magnetização é logo obtida através da derivada total, dada por

$$m = \frac{\partial \ln Z}{\partial (\beta z J m)} = \tanh(z K m), \quad (2.10)$$

A Eq (2.10) foi obtida por Weiss, porém de forma diferente, ou seja, numa análise qualitativa do campo molecular $\lambda (= zJ)$, não podendo explicar a razão física do grande valor de λ na época. Em análise no limite $m \rightarrow 0$ na Eq. (2.10), obtemos $\frac{k_B T_C}{J} = z$, que em uma dimensão ($z = 2$) prevê ordem de longo alcance ($m \neq 0$) para $T < T_C = 2 \frac{J}{k_B}$, em contradição como resultado exato que mostra $T_C = 0$.

2.3 Método Variacional: Desigualdade de Bogoliubov

Modelos que nos dar liberdade de cálculo exato de suas grandezas termodinâmicas, não são muitos em sua maioria. Portanto, o uso de métodos aproximados são extremamente proveitosos numa primeira discussão do comportamento crítico destes sistemas. Um caminho simples de se aplicar a aproximação de campo médio é utilização do princípio variacional de Bogoliubov Eq.(2.43)(FALK,1970), que será utilizada nos cálculos seguintes. A energia livre pode ser minimizada considerando um sistema físico apropriado, e utilizando a desigualdade de Bogoliubov, no qual determina um limite superior para energia. Esse método não faz restrições quanto a sistemas clássicos ou quânticos (estatisticamente falando) e também, não é a única forma de se obter uma aproximação do tipo campo médio mas, é a que nos proporciona uma forma sistemática na obtenção de resultados melhores. Para veracidade de tal afirmação, consideremos um sistema dado por um Hamiltoniano $\mathcal{H}$, que pode ser resolvido dividindo-o em duas partes: uma parte solúvel dada por um Hamiltoniano $\mathcal{H}_0$ no qual denomina-se como de tentativa, e uma não solúvel dada por um Hamiltoniano $\mathcal{H}_1$, assim demonstrado abaixo,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{H}_1, \quad (2.11)$$

onde, λ é um parâmetro variacional. A função $F(\mathcal{H})$ (energia livre de Helmholtz) correspondente a $\mathcal{H}$ é dada pela Eq.(2.12) onde Z é a função de partição do sistema, obtida pela Eq. (2.1).

$$F(\mathcal{H}) = -k_B T \ln(Z). \quad (2.12)$$

Usando as Eqs. (2.1), (2.11) e (2.12), obtemos a energia livre escrita abaixo

$$F(\mathcal{H}) = -k_B T \ln \left[\text{Tr} \left(e^{-\beta(\mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{H}_1)} \right) \right]. \quad (2.13)$$

No intuito de estudar a dependência da energia livre de Helmholtz em λ , usaremos a primeira derivada na Eq. (2.13) que será operacionalizada da forma

$$\frac{\partial F(\mathcal{H})}{\partial \lambda} = \frac{\partial}{\partial \lambda} [-k_B T \ln(Z)] = \langle \mathcal{H}_1 \rangle. \quad (2.14)$$

No mesmo raciocínio, mas agora com o uso da segunda derivada teremos:

$$\frac{\partial^2 F(\lambda)}{\partial \lambda^2} = \frac{1}{Z^2} \left(-\beta \text{Tr} \mathcal{H}_1^2 e^{-\beta \mathcal{H}} \right) - \beta \frac{\text{Tr} \mathcal{H}_1^2}{Z} e^{-\beta \mathcal{H}} \quad (2.15)$$

$$\frac{\partial^2 F(\lambda)}{\partial \lambda^2} = -\beta \left(\langle \mathcal{H}_1^2 \rangle - \langle \mathcal{H}_1 \rangle^2 \right) = -\beta \langle (\mathcal{H}_1 - \langle \mathcal{H}_1 \rangle)^2 \rangle, \quad (2.16)$$

que é o ponto de máximo (< 0) da energia. Consequentemente, o gráfico de $F(\lambda)$ em função de λ será côncavo. Podemos agora definir um funcional energia livre através da expansão (série de Taylor) em relação a λ , que para pequenos valores de λ teremos a seguinte série

$$\Phi(\lambda) = F(\lambda = 0) + \lambda \left(\frac{dF(\mathcal{H})}{d\lambda} \right)_{\lambda=0} + \dots, \quad (2.17)$$

onde a energia em função do parâmetro variacional ($\lambda = 0$) será

$$F(\lambda = 0) = F_0 = -k_B T \ln Z_0, \quad (2.18)$$

que é a energia livre do Hamiltoniano de tentativa $\mathcal{H}_0$, que portanto

$$\Phi(\lambda) \leq \lambda \langle \mathcal{H}_1 \rangle_0 + F_0, \quad (2.19)$$

ou ainda, em consonância com a Eq. (2.11), fica

$$\Phi(\lambda) = \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 + F_0, \quad (2.20)$$

onde a média $\langle \dots \rangle_0$ significa que deve ser tomada em relação a uma distribuição canônica associada ao Hamiltoniano $\mathcal{H}_0$. O limite superior da energia mínima é caracterizado pela Eq. (2.20), podendo assim ser escrita como vista abaixo

$$F(\mathcal{H}) \leq \Phi(\lambda) = \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 + F_0. \quad (2.21)$$

De posse desses elementos obtemos a energia livre pela a técnica de campo médio minimizando-se Φ em relação a λ Eq.(2.22). Isso nos fornece uma melhor aproximação possível da energia livre, para uma dada escolha de $\mathcal{H}_0$, de acordo com a Eq. (2.21) conforme a seguir

$$F = \frac{\partial \Phi}{\partial \lambda}. \quad (2.22)$$

2.3.1 Aplicação do modelo de Ising com Campo Magnético externo

O Hamiltoniano para o modelo de Ising em uma rede quadrada na presença de um campo magnético é dada por:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - H \sum_i S_i. \quad (2.23)$$

Para não considerar as interações entre spins, temos a escolha de Hamiltoniano de tentativa $\mathcal{H}_0$ no intuito de calcular o primeiro membro da Eq. (2.21), assim teremos

$$\mathcal{H}_0 = -\lambda \sum_i S_i, \quad (2.24)$$

sendo, S_i uma variável aleatória, podendo assumir valores $+1$ e -1 e, λ é denominado parâmetro variacional. O objetivo é calcular a energia livre F_0 correspondente ao Hamiltoniano da Eq.(2.24), usando a Eq.(2.1) e Eq.(2.12) respectivamente, que é facilmente calculada, dada por

$$F_0 = -k_B N T \ln [2 \cosh(\beta \lambda)]. \quad (2.25)$$

Fazendo a subtração das Eqs. (2.23), (2.24), teremos

$$\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle = -J \sum_{\langle ij \rangle} \langle S_i S_j \rangle_0 - H \sum_{\langle ij \rangle} \langle S_i \rangle_0 + \lambda \sum_{ij} \langle S_i \rangle_0. \quad (2.26)$$

O fato de $\mathcal{H}_0$ ser um Hamiltoniano não interagente, a média $\langle S_i S_j \rangle_0$ pode ser desaco-

plada Eq.(2.27), que para sistemas com invariância translacional, temos a média Eq.(2.28) da forma

$$\langle S_i S_j \rangle_0 = \langle S_i \rangle_0 \langle S_j \rangle_0, \quad (2.27)$$

que também é

$$\langle S_i \rangle_0 \langle S_j \rangle_0 = m^2, \quad (2.28)$$

onde o parâmetro de ordem (magnetização por spin) é dado por m . Baseado nas Eqs.(2.27) e Eq.(2.28), a Eq. (2.26) tem como resultado

$$\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle = -\frac{NzJ}{2}m^2 - HNm + \lambda Nm. \quad (2.29)$$

Substituindo as Eqs.(2.25) e (2.29) na Eq.(2.20), teremos nosso $\Phi(\lambda)$. Assim o funcional $\Phi(\lambda)$ por spin é obtido pela equação abaixo

$$\Phi(\lambda) = \frac{\phi(\lambda)}{N},$$

que fazendo os cálculos, temos

$$\Phi(\lambda) = -\frac{1}{\beta} \ln [2 \cosh(\beta\lambda)] - \frac{zJ}{2}m^2 - Hm + \lambda m. \quad (2.30)$$

Minimizando $\Phi(\lambda)$ em relação a λ , através da derivada, $\frac{\partial \Phi(\lambda)}{\partial \lambda} = 0$, obtemos a Eq.(2.31) que, quando evidenciando m , teremos a Eq.(2.32), assim:

$$-\tanh(\beta\lambda) + m = 0, \quad (2.31)$$

$$m = \tanh(\beta\lambda). \quad (2.32)$$

Agora, minimizando $\Phi(\lambda)$ em relação a m , pela derivada $\frac{\partial \Phi(\lambda)}{\partial m} = 0$, temos a Eq.(2.33) onde pode-se encontrar λ Eq.(2.34).

$$\lambda - H - zJm = 0, \quad (2.33)$$

$$\lambda = H + zJm. \quad (2.34)$$

De posse do valor de λ , dado pela Eq.(2.34), poderá ser substituído na Eq.(2.32), na qual teremos como resultado para a magnetização

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

sendo que $K = \beta J$, que substituído na Eq.(2.35), poderá ser reescrita como

$$m = \tanh[\beta(zJm + H)]. \quad (2.36)$$

Assim a energia livre de Helmholtz fica reescrita da seguinte forma

$$\Phi(m) = -\frac{1}{\beta} \ln [2 \cosh(zKm + \beta H)] + \frac{zJ}{2} m^2. \quad (2.37)$$

Pode-se afirmar que $m = \tanh[\beta(H + zJm)]$ é a mesma equação encontrada usando a teoria de Weiss, e a Eq.(2.10) expandida próxima da criticalidade ($T \simeq T_C, m \simeq 0$) corresponde a uma série de potências de m conhecida como teoria de Landau, que é útil para se analisar comportamentos multicríticos em sistemas de spin.

2.3.2 Estudo do Modelo de Ising Frustrado Aleatoriamente Decorado com Interações de primeiros e segundos vizinhos com Campo Magnético via Campo Médio

Para compreender o modelo⁴, mostra-se uma ilustração da estrutura topológica do sistema considerado com campo magnético H . Tenta-se mostrar através da Fig.2.1, um desenho esquemático que represente uma célula cúbica unitária de cobre (nos vértices) decorada com íons de oxigênio, na qual os círculos cheios (pretos) representam os átomos de cobre Cu^{+2} com $spin - \frac{1}{2}$, (denotado por S_i^v , onde v significa a subrede A ou B. Os círculos brancos, representam os íons O^- de $spin - \frac{1}{2}$ no plano, (denotado por σ_i).

Em seguida, temos que os átomos dos vértices (cobre) interagem com acoplamento J_1 e λJ_1 (parâmetro de pequena anisotropia⁵, $\lambda = 10^{-5}$, em primeiros vizinhos, sobre o plano e interplanos respectivamente, de modo que, $J_1 > 0$ é a interação de troca antiferromagnética no plano formado entre os spins nodais $Cu - Cu$) da rede em questão. Introduz-se agora a

⁴O modelo sem presença de campo magnético foi estudado por (SILVA,2010).

⁵ $\lambda J_1 = 10^{-5} J_1$ representa interação fraca entre planos, descrevendo um sistema numa rede quase bidimensional.

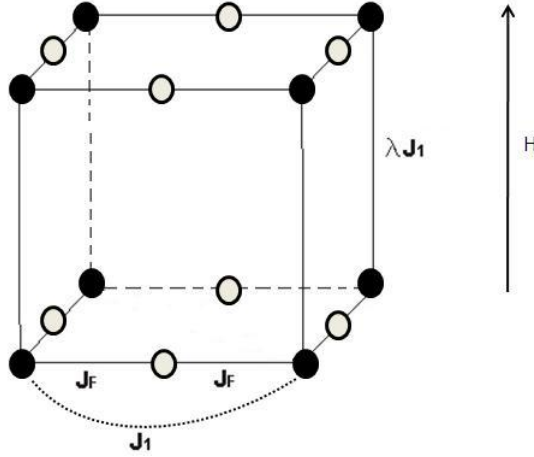


Figura 2.1: Célula unitária quase bidimensional (semelhança cúbica) contendo spins nodais e decorador. o círculo branco é o spin decorador.

interação de segundos vizinhos J_2 , antiferromagnética com os spins nodais da rede. Os átomos de oxigênio que se localizam no plano xy entre dois átomos de cobre, tem interação aleatória ou seja, uma interação efetiva ferromagnética J_F , surgindo ai o fenômeno frustração no sistema, isto é, J_F é o acoplamento de troca aleatório entre o spin decorador e o spin nodal (vértice), (simulando a interação $Cu - O$). Então o modelo pode ser descrito pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{\langle i,j \rangle \in x,y} J_1 S_i^A S_j^B + \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle \in x,y} J_2 S_i^A S_j^A - \sum_{\langle i,j \rangle \in x,y} J_F \sigma_i (S_j^A + S_j^B) + \\ & + \lambda J_1 \sum_{\langle i,j \rangle \in z} S_i^A S_j^B - H \sum_{i,j,k} (\sigma_i + S_j^A + S_k^B), \end{aligned} \quad (2.38)$$

sendo que, S_i^v ($v = A, B$) é o $spin - \frac{1}{2}$ nodal da sub-rede v no sitio i , σ_i é o $spin - \frac{1}{2}$ decorador, $\langle i, j \rangle \in x, y$ indica o somatório ao longo dos quatro primeiros vizinhos que pertence ao mesmo plano (simulando o plano CuO_2), $\langle\langle i, j \rangle\rangle \in x, y$ significa o somatório sobre os quatro segundos vizinhos no plano e $\langle i, j \rangle \in z$ é a soma sobre os dois primeiros vizinhos interplanos e H é o campo magnético externo aplicado ao sistema.

A interação $Cu - O$, sobre o plano xy , com J_F , obedece a seguinte distribuição (*quenched*) de probabilidade Eq.(2.39) e (2.40) onde J_{ef} e h_{ef} serão deduzidos a seguir.

$$P(J_{ij}^{(1)}) = p\delta(J_{ij}^{(1)} - J_{ef}) + (1 - p)\delta(J_{ij}^{(1)} - J_1), \quad (2.39)$$

$$P(h_i^{(1)}) = p\delta(h_i^{(1)} - h_{ef}) + (1 - p)\delta(h_i^{(1)} - H), \quad (2.40)$$

sendo que, $p \in [0, 1]$ e p é a concentração de ligações decoradas, h_i é a interação do campo no

sítio i e, os operadores S_i^V, σ_i são limitados aos valores ± 1 .

2.3.3 Determinação dos Acoplamentos efetivos de interação entre spins e Campo Magnético

No intuito de apresentar uma formulação matemática e comparativa, utilizando a técnica do operador diferencial em aglomerados com um spin (**EFT-1**), pode-se descrever qualitativamente o limite de estabilidade das fases **AF** e **P**, utilizando a transformação decoração-iteração no modelo dado pela Eq.(2.38).

A transformação decoração-iteração consiste na obtenção de parâmetros efetivos de interação Fig.2.2 para os spins da rede original, a partir da realização do traço parcial sobre os spins decoradores no modelo em estudo. Para determinar o acoplamento efetivo equivalente

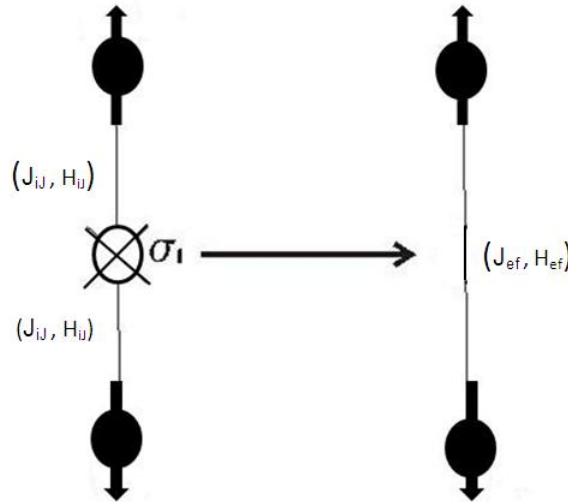


Figura 2.2: Representação das interações antes e depois da transformação-iteração com a dizimação do íon de Oxigênio.

entre os spins, não dependente da configuração do sistema decorador, conforme ilustrado pela Fig.2.2, deve-se impor a seguinte igualdade, pela invariância do sistema e pelo processo de dizimação

$$Ae^{-\beta J_{ef}S_1S_2+L_{ef}(S_1+S_2)} = Tr_{\sigma_0}e^{-\beta J_1S_1S_2+\beta J_2S_1S_2+\beta J_F\sigma_0(S_1+S_2)+L(S_1+S_2+\sigma_0)}. \quad (2.41)$$

Através do uso da transformação decoração-iteração de Fisher (FISHER, 1959) na rede

original, obtém-se o seguinte Hamiltoniano efetivo:

$$\mathcal{H}_{1ef} = \sum_{\langle i,j \rangle \in x,y} J_{ij}^{(1)} S_i^A S_j^B + \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle \in x,y} J_2 S_i^A S_j^A + \lambda J_1 \sum_{\langle i,j \rangle \in z} S_i^A S_j^B - H \sum_{i,j} S_i^A S_j^B. \quad (2.42)$$

No plano xy , as interações de primeiros vizinhos entre spins nodais, $Cu - Cu$, são descritas por uma distribuição (*quenched*) de probabilidade dada pela Eq.(2.39) e Eq.(2.40).

Definindo:

$L_{ef} = \beta H_{ef}$, $K_{ef} = \beta J_{ef}$, $K_1 = \beta J_1$, $K_2 = \beta J_2$, $K_F = \beta J_F$, $L = \beta H$ e sendo $\sigma_0 = \pm 1$, teremos:

$$\begin{aligned} A e^{-K_{ef} S_2 + L_{ef} (S_1 + S_2)} &= e^{-K_1 S_1 S_2 + K_2 S_1 S_2 + K_F (S_1 + S_2) + L (S_1 + S_2 + 1)} + \\ &+ e^{-K_1 S_1 S_2 + K_2 S_1 S_2 - K_F (S_1 + S_2) + L (S_1 + S_2 - 1)}. \end{aligned} \quad (2.43)$$

Assim, para configuração de spins $S_1 = S_2 = 1$ temos:

$$A e^{-K_{ef} + 2L_{ef}} = e^{[-K_1 + K_2 + 2K_F + L + 2L]} + e^{[-K_1 + K_2 - 2K_F - L + 2L]}. \quad (2.44)$$

Agora, escolhendo a configuração dos spins como $S_1 = -S_2 = 1$

$$A e^{K_{ef}} = e^{[K_1 - K_2 + L]} + e^{[-K_1 + K_2 - L]}. \quad (2.45)$$

E finalmente tomando a seguinte configuração $S_1 = S_2 = -1$ obteremos:

$$A e^{-K_{ef} - 2L_{ef}} = e^{[-K_1 + K_2 - 2K_F + L - 2L]} + e^{[-K_1 + K_2 - 2K_F - L - 2L]}. \quad (2.46)$$

Assim dividindo a Eq.(2.44) pela Eq.(2.46) teremos:

$$e^{4L_{ef}} = e^{4L} \frac{\cosh(2K_F + L)}{\cosh(2K_F - L)}, \quad (2.47)$$

dividindo a Eq.(2.46) pela Eq.(2.45) e multiplicando pelo resultado da divisão da Eq.(2.44) pela Eq.(2.45) teremos:

$$\frac{A^2 e^{-2K_{ef}}}{A^2 e^{2K_{ef}}} = \frac{e^{-2K_1+2K_2} 4 \cosh(2K_F + L) \cosh(2K_F - L)}{4 e^{2K_1-2K_2} \cosh^2(L)} \quad (2.48)$$

reescrevendo temos então:

$$e^{-4K_{ef}} = \frac{e^{-4K_1+4K_2} \cosh(2K_F + L) \cosh(2K_F - L)}{\cosh^2(L)} \quad (2.49)$$

logo

$$L_{ef} = L + \frac{1}{4} \ln \left[\frac{\cosh(2K_F + L)}{\cosh(2K_F - L)} \right] \quad (2.50)$$

e

$$K_{ef} = K_1 - K_2 - \frac{1}{4} \ln \left[\frac{\cosh(2K_F + L) \cosh(2K_F - L)}{\cosh^2(L)} \right]. \quad (2.51)$$

Os parâmetros de frustração são definidos como α_1 e α_2 , mostrado abaixo:

$$\alpha_1 = \frac{J_F}{J_1}, \quad (2.52)$$

$$\alpha_2 = \frac{J_2}{J_1}. \quad (2.53)$$

2.3.4 Abordagem do Modelo na Aproximação de Campo Médio

O Hamiltoniano mostrado na Eq.(2.38), pode também descrever outros tipos de sistemas, estando estes sistemas em função do parâmetro de anisotropia λ ou seja, quando temos $\lambda = 0$ é o caso bidimensional, para $\lambda = 1$ é o caso, tridimensional e no nosso caso, quase bidimensional $\lambda = 10^{-5}$ (PADILHA;PACOBAYHYBA,2006).

Para aplicação do método em nosso modelo, vamos considerar o Hamiltoniano de estudo dado pela Eq.(2.38). Partindo do princípio variacional de Bogoliubov, temos que,

$$\langle F \rangle_c \leq \langle F_0 \rangle_c + \langle \langle H - H_0 \rangle_t \rangle_c, \quad (2.54)$$

onde, F representa a energia livre de Helmholtz, H é o Hamiltoniano do nosso sistema e H_0 é o Hamiltoniano de tentativa, da qual conhecemos a solução exata, $\langle \dots \rangle_c$ denota a média configuracional sobre a distribuição do campo aleatório e, $\langle \dots \rangle_t$ é a média térmica referente a H_0 na qual tem o seguinte Hamiltoniano (também estudado por Almeida(ALMEIDA,2007))

$$H_0 = -\eta_A \sum_{i \in A} S_i^A - \eta_B \sum_{i \in B} S_i^B - \sum_i H_i S_i, \quad (2.55)$$

onde, η_A e η_B são parâmetros variacionais. O Hamiltoniano para cada sub-rede são escritos como mostrado abaixo:

$$H_{0A} = -\eta_A \sum_{i \in A} S_i^A - \sum_i H_i S_i^A \quad (2.56)$$

e

$$H_{0B} = -\eta_B \sum_{i \in A} S_i^B - \sum_i H_i S_i^B \quad (2.57)$$

Para resolução da Eq.(2.54), vamos inicialmente determinar a função de partição dada pela canônica (Eq.2.1) para as sub-redes A e B nos Hamiltonianos das Eqs.(2.56) e (2.57) respectivamente, o qual obtivemos:

$$Z_A = Tre^{\beta(\eta_A \sum_{i \in A} S_i^A + \sum_i H_i S_i^A)}, \quad (2.58)$$

e

$$Z_B = Tre^{\beta(\eta_B \sum_{i \in A} S_i^B + \sum_i H_i S_i^B)}. \quad (2.59)$$

Adotando os valores $S_i = \pm 1$, nas Eq.(2.58) e Eq.(2.59), temos respectivamente:

$$Z_A = [e^{\beta(\eta_A + H)} + e^{-\beta(\eta_A + H)}]^{\frac{N}{2}} = [2 \cosh \beta(\eta_A + H)]^{\frac{N}{2}},$$

e

$$Z_B = [e^{\beta(\eta_B + H)} + e^{-\beta(\eta_B + H)}]^{\frac{N}{2}} = [2 \cosh \beta(\eta_B + H)]^{\frac{N}{2}},$$

onde, $\frac{N}{2}$ é pelo fato de estarmos considerando duas subredes. Fazendo a conexão com a termodinâmica usando a Eq.2.2, temos a seguir a energia livre das subredes A e B, calculada através da desigualdade de Bogaliubov, respectivamente escrita como:

$$F_{0A} = -K_B T \frac{N}{2} \ln[2 \cosh \beta(\eta_A + H)], \quad (2.60)$$

$$F_{0B} = -K_B T \frac{N}{2} \ln[2 \cosh \beta(\eta_B + H)]. \quad (2.61)$$

Calculando agora a soma da médias $\langle F_0 \rangle_c = \langle F_{0A} \rangle_c + \langle F_{0B} \rangle_c$ das duas energias representada pelas Eqs(2.60) e (2.61), temos:

$$\langle F_0 \rangle = -\frac{N}{2\beta} \langle \ln[2 \cosh \beta(\eta_A + H)] \rangle_c - \frac{N}{2\beta} \langle \ln[2 \cosh \beta(\eta_B + H)] \rangle_c. \quad (2.62)$$

Agora calculando a média, $\langle H - H_0 \rangle$, temos o seguinte resultado:

$$\langle H - H_0 \rangle = \sum_{nn} J_{ij}^1 S_i^A S_j^B + \sum_{nnn} J_{ij}^2 S_i^A S_j^A + \lambda J_1 \sum_{\langle i,j \rangle \in Z} S_i^A S_j^B + \eta_A \sum_i S_i^A + \eta_B \sum_i S_i^B. \quad (2.63)$$

Usando o desacoplamento de correlações de spins (ZERNIKE, 1940) aplicando a aproximação dada por: $\langle \sigma_i \sigma_{i+\delta x} \rangle = \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_{i+\delta x} \rangle$, logo temos

$$\begin{aligned} \langle \langle H - H_0 \rangle \rangle_c &= z \frac{N}{2} J_i^1 \langle S_A \rangle \langle S_B \rangle + z' \frac{N}{4} J_{ij}^2 (\langle S_A \rangle \langle S_A \rangle + \langle S_B \rangle \langle S_B \rangle) + \\ &+ z'' \frac{N}{2} \lambda J_1 \langle S_A \rangle \langle S_B \rangle + \frac{N}{2} \eta_A \langle S_A \rangle \frac{N}{2} \eta_B \langle S_B \rangle, \end{aligned} \quad (2.64)$$

sendo que J_{ij} denota o acoplamento determinado após o cálculo das médias $\langle \dots \rangle_t$ e $\langle \dots \rangle_c$ e z o número de coordenação.

Definição:

$$\langle S_A \rangle_t \equiv m_A \text{ e } \langle S_B \rangle_t \equiv m_B.$$

Minimizando o funcional energia, temos que,

$$\langle F(H) \rangle_c \leq \Phi = \langle F_0 \rangle_c + \langle \langle H - H_0 \rangle \rangle_c. \quad (2.65)$$

Calculando m_A e m_B através das equações abaixo,

$m_A = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z_{0A}}{\partial \eta_A}$ e $m_B = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z_{0B}}{\partial \eta_B}$, por outro lado, pela definição de média (no ensemble), temos:

$$\overline{m_A} = \left\langle \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln [2 \cosh \beta (\eta_A + H)]}{\partial \eta_A} \right\rangle_c = \langle \tanh \beta (\eta_A + H) \rangle_c \quad (2.66)$$

$$\overline{m_B} = \left\langle \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln [2 \cosh \beta (\eta_B + H)]}{\partial \eta_B} \right\rangle_c = \langle \tanh \beta (\eta_B + H) \rangle_c. \quad (2.67)$$

Minimizando o funcional com respeito aos parâmetros η_A e η_B , e obtendo estes através das derivadas abaixo de acordo com as condições estacionária da energia livre de Helmholtz, $\frac{\partial \langle \Phi \rangle_c}{\partial \eta_A} = 0$ e $\frac{\partial \langle \Phi \rangle_c}{\partial \eta_B} = 0$, obtendo assim, η_A e η_B respectivamente. Substituindo nas Eq.(2.66) e (2.67) nessa ordem, temos a magnetização das sub-redes A e B, por definição de média, como podemos ver abaixo:

$$\overline{m_A} = \langle \tanh \beta (-z J_{ij}^1 m_B - z' j_2 m_A - z'' \lambda j_1 m_B + H) \rangle_c, \quad (2.68)$$

$$\overline{m_B} = \langle \tanh \beta (-z J_{ij}^1 m_A - z' j_2 m_B - z'' \lambda j_1 m_A + H) \rangle_c. \quad (2.69)$$

onde, i e j representa os sítios na rede, J_{ij}^1 a interação de troca entre todos os primeiros vizinhos e, j_2 a interação de troca entre segundos vizinhos.

Utilizando em conjunto, as definições para a magnetização m e m_s , temos:

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

$$m_s = \frac{(m_A - m_B)}{2}.$$

onde, fazendo uso da distribuição de probabilidade *quenched* nas Eqs.(2.39 e Eq.(2.40), tem-se:

$$\begin{aligned} m = \langle \frac{m_A}{2} + \frac{m_B}{2} \rangle_c &= \frac{1}{2} \int \int \overline{m_A} \{ \rho(j_{ij}^1) \rho(H) \} d j_{ij}^1 d H + \\ &+ \frac{1}{2} \int \int \overline{m_B} \{ \rho(j_{ij}^1) \rho(H) \} d j_{ij}^1 d H. \end{aligned} \quad (2.70)$$

2.3.5 Resultado de Campo Médio para o Modelo

Resolvendo numericamente a Eq.(2.70) auto-consistente, junto com as definições para m e m_s , obteremos os gráficos de m e m_s respectivamente, em função da temperatura, com o objetivo de mostrar o surgimento do efeito de frustração, devido a competição de interações J_1 e J_2 e, ilustrar a tendência ao aparecimento de duas temperaturas críticas (T_{N_1} e T_{N_2}), respectivamente.

Na Fig.2.3 representando o plano $(\frac{K_B T_N}{J_1}, m)$ em função de H , mantidos fixos os parâmetros de frustração α_1 , α_2 e concentração p , observa-se o comportamento da temperatura em relação a magnetização total. A temperatura decresce à medida que a magnetização cresce, e a partir do valor $T \simeq 1,2$ (da direita para esquerda), num pequeno intervalo, a magnetização cai, enquanto a temperatura também cai, e logo em seguida voltando a se comportar de forma inversamente, isso devido ao fenômeno de frustração aplicado por α_1 e concentração p , e ao efeito do campo sobre o sistema, tendo em vista que o modelo é sensível à interferência de forças externos.

Na Fig.2.4 mantidos fixos α_1 , α_2 , concentração p e variando H , podemos notar que a

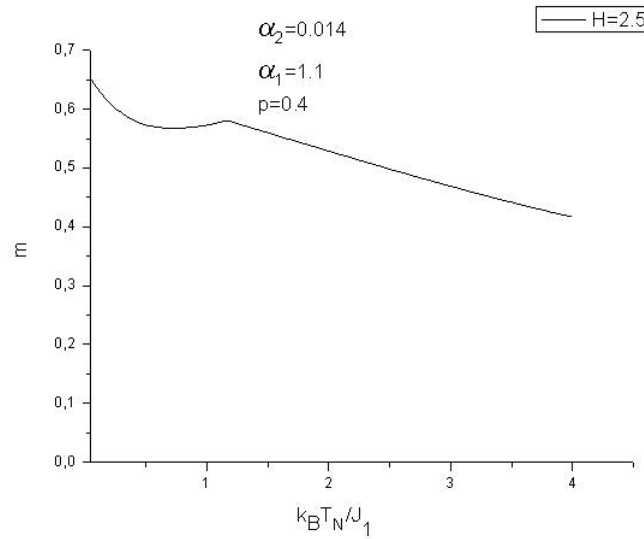


Figura 2.3: Diagrama de fase no plano $(\frac{K_B T_N}{J_1}, m)$ para o modelo de Ising 1/2 aleatoriamente decorado quase 2d, para diferentes valores dos parâmetros de Frustração via Campo Médio mantendo fixo α_1 , α_2 e concentração p e variando H .

magnetização residual cresce enquanto a temperatura crítica de transição diminui, aproximando-se de $T = 0$. Podemos interpretar ao visualizar as curvas da magnetização residual que, pontos próximos de 0.5 (da esquerda para direita), a temperatura cresce à medida que a magnetização cresce também, e depois desse valor, o efeito é inverso ou seja, a temperatura aumenta e a magnetização remanescente diminui. Esse fenômeno é mais visível para campos maiores, como o exemplo dado pela curva para $H = 3.05$, pois o que se nota é, se aumentarmos mais o campo, teremos mais reentrâncias convergindo para valores $m_s = 0$ que será caracterizado pela presença de duas temperaturas críticas (T_{N_1}) e (T_{N_2}) .

A seguir, o modelo será tratado por uma técnica mais elaborada que leva em conta as correlações entre spins a fim de melhorar resultados obtidos na teoria de campo médio.

2.4 Formalismo da Teoria de Campo Efetivo

Na mecânica estatística, todo estudo teórico com o intuito de obter as propriedades de um certo modelo, deve-se ter como ponto de partida a função de partição Eq.2.1. A solução da função de partição é de extrema dificuldade, uma vez que nem sempre é possível calcular o traço da exponencial de uma matriz, sendo este, inclusive, um dos maiores obstáculos no tratamento teórico dos sistemas de muitas partículas interagentes. Uma forma de calcular o traço da exponencial do Hamiltoniano, seria diagonalizar a matriz $\mathcal{H}$, reescrevendo a função de partição

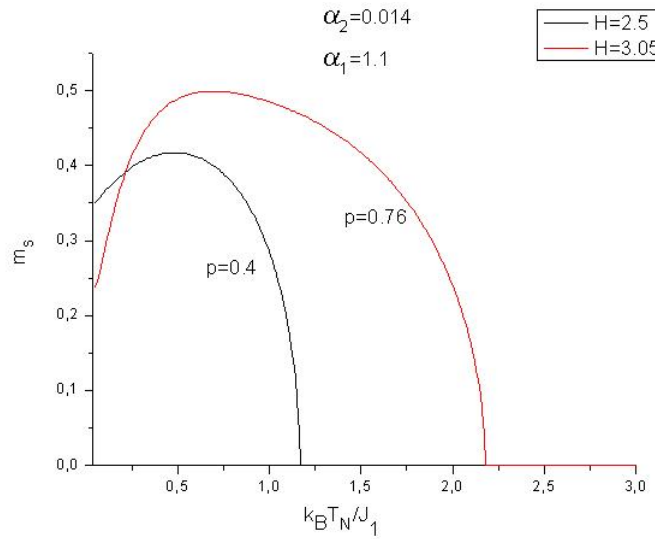


Figura 2.4: Diagrama de fase no plano $(\frac{K_B T_N}{J_1}, m_s)$ para o modelo de Ising 1/2 aleatoriamente decorado quase 2d, para diferentes valores dos parâmetros de Frustração via Campo Médio mantendo fixo α_1 , α_2 e concentração p e variando H .

como $Z = \sum_{i=1}^N e^{(-\lambda_i)}$, em que λ_i são os autovalores do Hamiltoniano $\mathcal{H}$. Contudo, assumindo o limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$, é necessário calcular infinitos autovalores. Em função disso, poucos modelos teóricos apresentam uma solução exata, dessa forma o desenvolvimento de métodos aproximados que contornem esse problema é de fundamental importância.

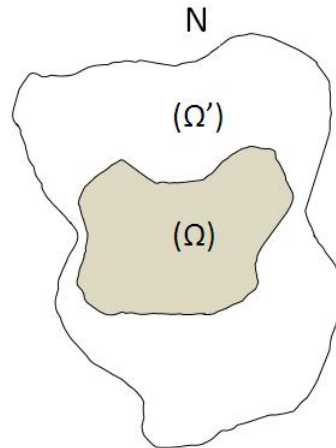


Figura 2.5: Representação de um sistema de N partículas (sistema $\Omega \cup \Omega'$).

Partindo desses princípios, surge então a Teoria de Campo Efetivo, um método de aproximativo analítico que aliado a técnica do operador diferencial (HONMURA,1978), tem mostrado resultados satisfatórios para diversos modelos os quais não existem ainda resultados exatos. A teoria de Campo Efetivo apresenta vantagem no cálculo de sistemas cooperativos de variáveis de spins.

Ao considerarmos um modelo com N partículas interagentes Fig.2.5, em uma determinada rede, o Hamiltoniano $\mathcal{H}$ que descreve esse sistema pode ser separado em duas partes distintas: uma representando um aglomerado Ω de $n < N$ variáveis de spins, levando em consideração as interações dentro do aglomerado e nas suas vizinhanças, e a parte restante, que não possui spins pertencentes ao aglomerado, denotado por Ω' . Desta forma, o Hamiltoniano do sistema é escrito da seguinte forma

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\{n\}} + \mathcal{H}_{\{N-n\}}, \quad (2.71)$$

Sabe-se que, para calcularmos a média de uma quantidade termodinâmica A , temos do formalismo do ensemble canônico, a definição dada pela Eq.(2.72), onde o funcional Tr é no espaço de todos os spins, como se ver abaixo

$$\langle A \rangle = \frac{Tr(Ae^{-\beta\mathcal{H}})}{Tr(e^{-\beta\mathcal{H}})}. \quad (2.72)$$

Tendo em vista que os Hamiltonianos $\mathcal{H}_{\{n\}}$ e $\mathcal{H}'_{\{N-n\}}$ possam comutar, ou seja, $[\mathcal{H}_{\{n\}}, \mathcal{H}'_{\{N-n\}}] = 0$, o traço da Eq.(2.72) poderá ser efetuado em dois passos: primeiro, considerando o os spins que pertencem ao aglomerado finito Ω , i.e., Tr_{Ω} , e em seguida, sobre os spins da vizinhança ou seja, os que não pertencentes ao aglomerado Ω , que é denominado por $Tr_{\Omega'}$ como pode ser mostrado no sistema da Fig.2.3.

Atendendo ao operador $O\{n\}$ das variáveis de spin, o qual pertencem ao aglomerado $\Omega(n)$, temos o valor médio da grandeza $O\{n\}$, de acordo com a Eq.(2.71), poderá ser representado como mostra a equação abaixo

$$\langle O\{n\} \rangle = \frac{Tr(O(n)e^{-\beta\mathcal{H}})}{Tr(e^{-\beta\mathcal{H}})} = \frac{Tr(O(n)e^{-\beta[\mathcal{H}_{\{n\}} - \mathcal{H}']})}{Tr(e^{-\beta\mathcal{H}})}, \quad (2.73)$$

ou também da seguinte forma

$$\langle O\{n\} \rangle = \frac{Tr' e^{-\beta\mathcal{H}'} Tr_{\{n\}} e^{-\beta\mathcal{H}_{\{n\}}}}{Tr(e^{-\beta\mathcal{H}})}. \quad (2.74)$$

Ao multiplicarmos e dividirmos a Eq.(2.74) por $Tr_{\{n\}} e^{-\beta\mathcal{H}_{\{n\}}}$ considerando que, $\mathcal{H}_{\{n\}}$ e $\mathcal{H}'_{\{N-n\}}$ comutem, o resultado não se altera, podendo assim ser reescrita da forma

$$\langle O\{n\} \rangle = \frac{1}{Tr(e^{-\beta\mathcal{H}})} Tr \left[\frac{e^{-\beta\mathcal{H}} Tr_{\{n\}} O_{\{n\}} e^{-\beta\mathcal{H}_{\{n\}}} }{Tr_{\{n\}} (e^{-\beta\mathcal{H}_{\{n\}}})} \right]. \quad (2.75)$$

Fazendo uma comparação da Eq.(2.75) com a Eq.(2.72), poderemos identificar o valor médio da variável, a qual é dada pela equação

$$\frac{Tr_{\{n\}} O_{\{n\}} e^{-\beta\mathcal{H}_{\{n\}}}}{Tr_{\{n\}} (e^{-\beta\mathcal{H}_{\{n\}}})}. \quad (2.76)$$

Observa-se pela Eq.(2.76) e da definição Eq.(2.72) que a média térmica de $O\{n\}$ no ensemble canônico é expressa por:

$$\langle O\{n\} \rangle = \left\langle \frac{Tr_{\{n\}} O_{\{n\}} e^{-\beta\mathcal{H}_{\{n\}}}}{Tr_{\{n\}} (e^{-\beta\mathcal{H}_{\{n\}}})} \right\rangle, \quad (2.77)$$

onde, $Tr_{\{n\}}$ representa o traço parcial sobre os auto-estados das variáveis de spin pertencentes ao aglomerado Ω , especificadas pelo Hamiltoniano $\mathcal{H}_{\{n\}}$, e $\langle \dots \rangle$ indica a média termodinâmica usual, aplicada sobre o Hamiltoniano total $\mathcal{H}$ do sistema. A partir dessa equação, pode-se explorar as partes que pertencem ao aglomerado e não pertencente, daí pode-se derivar uma identidade de correlação muito importante dada abaixo

$$\langle \{n\} O\{n\} \rangle = \left\langle \{n\} \frac{Tr_{\{n\}} O_{\{n\}} e^{-\beta\mathcal{H}_{\{n\}}}}{Tr_{\{n\}} (e^{-\beta\mathcal{H}_{\{n\}}})} \right\rangle. \quad (2.78)$$

A Eq.(2.77) é válida para qualquer valor de spin (SUZUKI, 1963) e qualquer funcional $O\{n\}$, desde que a comutação entre $\mathcal{H}_{\{n\}}$ e $\mathcal{H}'_{\{N-n\}}$ exista. A Eq.(2.77) foi usada de forma aproximada por Sá Barreto e Fittipaldi (1985) no estudo do modelo de Ising - $\frac{1}{2}$ com campo transversal, obtendo resultados satisfatórios comparados com por exemplo, o método de expansão em série.

2.4.1 Aplicação da Teoria de Campo Efetivo

No intuito de melhor entender a teoria, aplicaremos os conceitos de campo efetivo baseada na técnica do operador diferencial no modelo de Ising de spin $\frac{1}{2}$ sem campo, para ilustrar a identidade Eq.(2.77), e em particular a identidade de Callen-Suzuki. Assim o Hamiltoniano da Eq.(2.5) fica representado como mostra a expressão Eq.(2.79), que substituindo a Eq.(2.79) na Eq.(2.77), e definindo $O(n) = \sigma_1$, obtemos a Eq.(2.80) como é mostrado abaixo

$$\mathcal{H}_1 = -JS_1 \sum_{\langle \vec{\delta} \rangle} \sigma_{i+\vec{\delta}}, \quad (2.79)$$

$$\langle \sigma_1 \rangle = \left\langle \frac{\text{Tr}_1(\sigma_1 e^{-\beta H})}{\text{Tr}_1(e^{-\beta H})} \right\rangle, \quad (2.80)$$

onde $K = \beta J$. A função de partição fica da forma

$$\mathcal{Z}_1 = \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}_1} = e^{K \sum_{\langle \vec{\delta} \rangle} \sigma_{1+\vec{\delta}}} + e^{-K \sum_{\langle \vec{\delta} \rangle} \sigma_{1+\vec{\delta}}} \quad (2.81)$$

$$\mathcal{Z}_1 = 2 \cosh \left(K \sum_{\langle \vec{\delta} \rangle} \sigma_{1+\vec{\delta}} \right). \quad (2.82)$$

Podemos calcular a magnetização por spins, definindo $Q = K \sum_{\langle \vec{\delta} \rangle} \sigma_{1+\vec{\delta}}$, partindo da Eq.(2.82), ou seja:

$$m = \langle \sigma_1 \rangle = \left\langle \frac{\partial \ln \mathcal{Z}_1}{\partial Q} \right\rangle = \left\langle \tanh \left(K \sum_{\langle \vec{\delta} \rangle} \sigma_{1+\vec{\delta}} \right) \right\rangle. \quad (2.83)$$

A Equação (2.83) ficou conhecida como identidade de Callen e Suzuki e, foram inicialmente utilizadas para encontrar funções de correlação e temperatura crítica através de expansões em séries de altas temperaturas, e também aplicada ao modelo de Ising de spin $\frac{1}{2}$, sendo deduzida pela primeira vez por Callen (1963) onde utilizou o formalismo da função de Green, dependente de dois tempos e temperatura, e Suzuki(1963) generalizou para spin S geral.

Fazendo uso da identidade do operador diferencial ou de projeção, que é definido pela relação $e^{\alpha D_x} F(x) = F(x + \alpha)$ onde $D_x = \frac{\partial}{\partial x}$, a Eq.(2.83) ficará reescrita da seguinte forma

$$m = \left\langle \prod_{\langle \vec{\delta} \rangle} e^{K \sigma_{1+\vec{\delta}} D_x} \right\rangle \tanh(x) \big|_{x=0}. \quad (2.84)$$

Empregando a identidade de van der Waerden para spin $\frac{1}{2}$, isto é, $e^{\alpha \sigma_i} = \cosh \alpha + \sigma_i \sinh \alpha$, a qual ($\sigma_i = \pm 1$), a Eq.(2.84) ficará assim escrita

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^z \left[\cosh(KD_x) + \sigma_{1+\vec{\delta}} \sinh(KD_x) \right] \right\rangle \tanh(x) |_{x=0}. \quad (2.85)$$

A equação acima (Eq.(2.85)) é exata, mas a manipulação matemática é difícil, pois as correlação entre muitos spins são envolvidas no segundo membro, gerando um conjunto infinito de equações acopladas de funções de correlação. Considerando como primeiros vizinhos $\{\sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \sigma_5\}$ do aglomerado $\Omega = \{\sigma_1\}$, a equação Eq.(2.85) para uma rede quadrada ($z = 4$),ficará reescrita da forma

$$m = (\alpha_x + \sigma_2 \beta_x) (\alpha_x + \sigma_3 \beta_x) (\alpha_x + \sigma_4 \beta_x) (\alpha_x + \sigma_5 \beta_x) \tanh(x) |_{x=0}. \quad (2.86)$$

onde $\alpha_x = \cosh(KD_x)$ e $\beta_x = \sinh(KD_x)$. A equação Eq. (2.86) pode ser reescrita, usando o artifício de que $\Phi_{par}(D_x) \tanh x |_{x=0} = 0$, da forma como na Eq.(2.87) ou usando simetria translacional Eq.(2.88) como mostrado abaixo

$$m = A \langle \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4 + \sigma_5 \rangle + B \langle \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 + \sigma_2 \sigma_3 \sigma_5 + \sigma_3 \sigma_4 \sigma_5 + \sigma_2 \sigma_4 \sigma_5 \rangle, \quad (2.87)$$

$$m = 4Am + 4B \langle \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 \rangle, \quad (2.88)$$

onde, $A = \alpha_x^3 \beta_x \tanh(x) |_{x=0} = \frac{t_4 + 2t_2}{8}$, $B = \alpha_x \beta_x^3 \tanh(x) |_{x=0} = \frac{t_4 - 2t_2}{8}$ e $t_n = \tanh(nK)$.

A Eq. (2.88) pode se mostrar de varias outras maneiras similares, que podem ser obtidas para funções de correlação, e são identificadas como equações de Dobrushin-Lanford-Ruelle (1969) e utilizadas em teorias de campos para escrever a distribuição de probabilidade no limite de volume infinito, de uma forma mais precisa (PARISI,1988). As funções de correlação dos spins são desacopladas fazendo uma primeira aproximação (superior a **MFA**),da forma

$$\langle \langle \sigma_i \sigma_j \dots \sigma_n \rangle \rangle_c \simeq \langle \langle \sigma_i \rangle \rangle_c \langle \langle \sigma_j \rangle \rangle_c \dots \langle \langle \sigma_n \rangle \rangle_c, \quad (2.89)$$

com $i \neq j \neq \dots \neq n$, $m_v = \langle \langle \sigma_i^v \rangle \rangle_c$, $m_u = \langle \langle \sigma_i^u \rangle \rangle_c$, e é conhecida como desacoplamento de Zernike (1940), a qual não considera a correlação entre diferentes spins porém, as relações do tipo $\langle (\sigma_i^v)^2 \rangle = \langle (\sigma_i)^2 \rangle = 1$ e $\langle (\sigma_i)^{2n+1} \rangle = \langle (\sigma_i) \rangle$ são tomadas exatamente na contagem, o que é feito usando a identidade de van der Waerden, enquanto a aproximação de campo médio usual, despreza todo tipo de correlação ou seja, $\langle (\sigma_i)^n \rangle = \langle (\sigma_i) \rangle^n$. Usando a aproximação Eq.(2.89), a

Eq. (2.88) ficará reescrita na forma de **EFT-1** (*Effective Field Theory*) como mostrado a seguir

$$m = A_1(T)m + A_3(T)m^3, \quad (2.90)$$

onde, $A_1(T) = 4A = \frac{1}{2}(t_4 + 2t_2)$ e $A_3(T) = 4B = \frac{1}{2}(t_4 - 2t_2)$, lembrando que $t_n = \tanh(nK)$ e $T = K^{-1}$. Podemos obter numericamente a partir da Eq. (2.90) fazendo $m \rightarrow 0$, a temperatura crítica T_C , tendo como resultado

$$A_1(T_C) = 1, \quad (2.91)$$

que pode ser encontrado através da Eq. (2.91) $\frac{k_B T_C}{J} = 3.089(4,00, \mathbf{MFA})$, e pode ser comparada com a solução exata $\frac{k_B T_C}{J} = 2.269$. Podemos mostrar através da Eq. (2.90), que próximo da criticalidade, a magnetização se anula segundo uma lei de potência, com um expoente crítico $\beta = \frac{1}{2}$, que é o esperado, pois o tratamento é o de campo efetivo, resultando para a magnetização uma expressão $m = \Phi(m)$ que é autoconsistente.

Para qualquer rede com número de coordenação z , podemos aplicar o desacoplamento Eq.(2.89), o que significa fazer a seguinte aproximação na Eq. (2.85)

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta} \neq \pm 1}^z \cosh K D_x + \sigma_{1+\vec{\delta}} \sinh K D_x \right\rangle \tanh(x) |_{x=0}, \quad (2.92)$$

ou

$$m = \left(\cosh K D_x + \sigma_{1+\vec{\delta}} \sinh K D_x \right) \tanh(x) |_{x=0}. \quad (2.93)$$

Podemos escrever a Eq.(2.93), usando o fato de que $\Phi_{par}(D_x) \tanh x |_{x=0} = 0$ da forma geral e reduzida

$$m = \sum_{p=0}^{[z]} A_{2p+1}^z(T) m^{2p+1}, \quad (2.94)$$

com

$$A_n^z(T) = \frac{z!}{(z-n)!n!} \alpha_x^{z-n} \beta_x^n \tanh x |_{x=0}, \quad (2.95)$$

onde, se z for ímpar é $[z] = \frac{z-1}{2}$ e, se z for par será $[z] = \frac{z-2}{2}$ da forma como aparece. Obtém-se a temperatura crítica através da Eq. (2.91) quando fazemos o limite $m \rightarrow 0$ ou seja,

$$A_n^z(T_C) = 1, \quad (2.96)$$

o qual obtemos a solução exata $T_C = 0$ para uma rede linear ($z = 2$), que é melhor do que o obtido através de **MFA** ou seja, $T_C = 2.00$. Para redes cúbicas simples ($z = 6$), pode-se comparar com resultados de simulação Monte Carlo (LANDAU,2000) $\frac{k_B T_C}{J} = 4.511$, na qual nos mostra a Eq. (2.96) $\frac{k_B T_C}{J} = 5.073$ (6.000, **MFA**).

Através dessa teoria, podemos obter as grandezas termodinâmicas como, (energia interna, calor específico, susceptibilidade), contudo nos limitaremos a analisar a criticalidade, onde T_C será obtido. Podemos encontrar expoentes clássicos no presente formalismo, expresso pela equação de estado Eq.(2.94), que na sua versão simples de um único spin, não consegue diferenciar a topologia do sistema. Uma rede bidimensional com topologia triangular por exemplo, tem o mesmo número de coordenação $z = 6$ de uma rede cúbica simples, ou seja, a aproximação **EFT-1** encontra utilizando a Eq. (2.94) para as duas redes mencionadas acima $\frac{k_B T_C}{J} = 5.073$.

A aproximação que nos permite reescrever a média da tangente hiperbólica Eq.(2.80) da média do argumento, é a de campo médio (**MFA**), como mostra as Eqs.(2.97) e (2.98) ou seja, reproduz o mesmo resultado de **MFA-1** dado pela Eq. (2.10), reproduzindo $T_C(z = 2) \neq 0$ de modo errôneo.

$$m = \left\langle \tanh K \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}} \right\rangle \simeq \sigma_1 = \tanh K \left\langle \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}} \right\rangle \quad (2.97)$$

$$m = \tanh(zKm) \quad (2.98)$$

O uso do desacoplamento Eq.(2.89), que obtém como resultado de **EFT-1** Eq.(2.94), onde as funções de correlação entre spins diferentes são tratados com uma aproximação, mas em relação a cinemática de spin $\sigma_i^{2n} = 1$ ($\sigma_i = \pm 1$) foi tratada de forma exata com uso da identidade de van der Waerden ($e^{\lambda \sigma_i} = \cosh \lambda + \sigma_i \sinh \lambda$). Por outro lado, a **MFA** trata tanto as correlações quanto as auto-correlações $\langle \sigma_i^2 \rangle$ de forma aproximada, tendo resultado espúrio $T_C(z = 2) \neq 0$ consequentemente.

Fazendo o uso de **EFT-1** Eq.(2.94), com o desacoplamento Eq.(2.89), as funções de correlação entre spins diferentes tem tratamento com aproximação de forma exata, através da identidade de van der Waerden, enquanto que **MFA**, trata tanto as correlações como as auto-correlações σ_i^{2n} . Os métodos mais utilizados para resolução de problemas de muitos corpos na mecânica estatística é **MFA**, onde é possível encontrar na literatura, a saber: metamagneto (RUNEHR;FIGUEIREDO,1998), vidro de spin (WALASEK;CIEPLAK,1997), entre outros (PARENTE,2009).

3 ESTUDO DO MODELO DE ISING, FRUSTRADO, ALEATORIAMENTE DECORADO COM INTERAÇÕES DE PRIMEIROS E SEGUNDOS VIZINHOS SUBMETIDO A CAMPO MAGNÉTICO

3.1 Considerações Gerais

As investigações inerentes ao Hamiltoniano de Ising tem sido um dos modelos intensivamente estudado na mecânica estatística nos últimos anos. Soluções exatas têm sido obtida para modelos unidimensionais e certas classes de redes bidimensionais. A simulação de Monte Carlo (LANDAU, 2000), tem sido o método mais adequado para tratar este modelo em redes tridimensionais. Por outro lado, técnicas mais simples que fazem uma descrição qualitativa bastante razoável deste modelo, revelam-se satisfatória quando comparadas com resultados experimentais. Entre elas, destacam-se: (BOMFIM e FITTIPALDI, 1983), (HONMURA e KANEYOSHI, 1979). O estudo do modelo antiferromagnético surgiu com mais intensidade a partir do trabalho de pesquisa feito por Neel, em (NEEL, 1932), quando determinou a temperatura crítica (T_N), a qual as magnetizações de sub-redes se anulam para o modelo de Ising com interações de primeiros vizinhos. Os modelos antiferromagnéticos tem sido a grande motivação de estudos (GALAM et al, 1988), devido ao fato de se notar no diagrama de fase, a existência de transições de fase induzidas por campos externos e à frequência de pontos multicríticos.

Ainda que o modelo Ising numa rede quadrada, com interação entre primeiros vizinhos J_1 sejam obtidas exatamente, com propriedades de spin- $\frac{1}{2}$, este modelo simples ainda é incapaz de explicar diversos fenômenos ¹ reais, ocorridos sobretudo em sistemas $2d$ e quase $2d$ (MORÁN-LOPES, AGUILERA GRAJA e SANCHES, 1993). Para explicar algumas propriedades físicas desses sistemas, a interação de longo alcance deve ser considerada. Todavia, quando as interações distantes são levadas em conta, ou quando é aplicado ao sistema um campo magnético, o Hamiltoniano se torna de difícil solução, implicando algum tipo de aproximação que reproduza com certeza resultados experimentais já obtidos.

Na literatura, a interação de primeiros e segundo vizinhos ($J_1 - J_2$), numa rede d-

¹O caso da não aplicabilidade do Hamiltoniano de Ising na sua forma simples, com interação só de primeiros vizinhos: O oxigênio disposto 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)

dimensional, é conhecido como diagrama de fase no estado fundamental ($T = 0$) do modelo Ising (PACOBAYHA, 2006). As fases ferromagnética (**F**), antiferromagnética (**AF**), superantiferromagnética (**SAF**) e paramagnética (**P**) são as possíveis fases encontradas numa rede quadrada. A dependência destas fases está na razão entre as interações de primeiros e segundos vizinhos, denominada pelo parâmetro de frustração e definido como $\alpha_2 = \frac{J_2}{J_1}$. É observada em uma variedade de sistemas, a transição de fase em sistemas de spin com frustração. Também é observado em alguns casos, o fenômeno de reentrância, o qual é importante para estabelecer conexão com a transição vidro de spin (*spin – glass transitions*) (SANTOS, 1987) e (VAKS, 1966). A degenerescência e o crescimento na energia do estado fundamental ($t = 0$), assim como também, um decréscimo na temperatura de transição sobre o estado ordenado, é causado devido a presença de frustração no sistema.

Para a descrição de sistemas magnéticos numa rede quadrada, a representação do modelo, $J_1 - J_2$, é muito importante, onde os momentos de dipolo de spin- $\frac{1}{2}$ nos sítios da rede, interagem entre primeiros vizinhos (lados do quadrado) Fig.2.1 e em segundos vizinhos (diagonais). Atualmente o modelo $J_1 - J_2$ é estudado (SILVA,2010) com interações de primeiros vizinhos antiferromagnéticas $J_1 > 0$ e, também de segundos vizinhos $J_2 > 0$, sendo um tema de muitas pesquisas, motivadas sobretudo, com a descoberta dos supercondutores de altas temperaturas. O parâmetro de frustração $\alpha = \frac{J_2}{J_1}$ resulta ser um estudo adequado no sistema. O estado fundamental ($T = 0$) do sistema será determinado pelo valor de α . O estado fundamental será antiferromagnético quando $J_2 \ll J_1$, onde os spins se ordenam antiparalelamente em relação aos seus primeiros vizinhos. Em contrapartida, quando J_2 cresce em relação a J_1 , a frustração começa a desordenar o antiferromagneto dos momentos magnéticos e, conseqüentemente, outros estados fundamentais com ordenamentos diferentes surgem. Como exemplo pode-se citar o caso clássico de transição de fase de primeira ordem, do estado antiferromagnético para o estado colinear, quando $\frac{J_2}{J_1} = 0,5$.

Com a entrada de compostos supercondutores de altas temperaturas, por Bednorz e Müller em (BEDNORZ e MÜLLER, 1986) no cenário da pesquisa, modelos fenomenológicos foi propostos na tentativa de descrever suas propriedades magnéticas e de transporte. Como exemplo, no compostos formados por planos de CuO_2 , o magnetismo é o elemento fundamental para uma possível teoria microscópica. Sabe-se que, os íons de cobre interagem antiferromagneticamente com um acoplamento J_1 no plano e λJ_1 entre planos na fase pura dos compostos (La_2CuO_4 (2-1-4), e é descrito teoricamente pelo modelo de Heisenberg antiferromagnético quase-2d de spin- $\frac{1}{2}$, conforme (SHIRANE et al, 1987), (VAKNIN, 1987) e (TRANQUADA, 1988), os quais obtiveram resultados através dos experimentos de espalhamento de nêutrons. Por exemplo, íons de oxigênio situados entre os átomos de cobre (Cu) no plano, apresenta um

desbalanceamento de carga, quando dopado de composto puro de La_2CuO_4 com elementos alcalinos (Ba , Sr), induzindo assim um spin ($\vec{\sigma}$) efetivo $\frac{1}{2}$, que tenha de maneira aleatória, interação ferromagnética, provocando assim o fenômeno de frustração com estes átomos.

A competitividade de interações nos planos de CuO_2 , diminui a ordem antiferromagnética do sistema, e a temperatura de Neel (T_N) diminui à medida que a concentração de buracos aumenta, anulando-se finalmente no valor crítico x_C . A fase supercondutora para $x > x_C$, aparece, onde as correntes supercondutoras nos planos de CuO_2 acopla os pares de Cooper via energia de *exchange*. Para descrever as propriedades críticas dos compostos supercondutores de altas temperaturas formados por planos de CuO_2 , o modelo de Ising aleatoriamente decorado é usado com sucesso na fase isolante, embora acredita-se que sistemas com spins sejam melhores descritos pelo modelo de Heisenberg. Com a presença de spins decorador, o sistema fica frustrado (DINGER, 1987), (LYRA, 1993), (OLIVEIRA, 1990), (SANTOS et al, 1989) e (PAUL e MATTIS, 1991). Vários autores estudaram o modelo de Ising decorado através da transformação do tipo decoração-iteração (SYOZI, 1972) e (SANTOS e FITTIPALDI, 1989), onde suas propriedades termodinâmicas e diagramas de fase foram analisados, com interação entre primeiros vizinhos (SANTOS, 1987), (PAUL, 1991) entre outros.

São objetivos deste capítulo estudar o comportamento crítico do modelo de Ising de spin- $\frac{1}{2}$, frustrado, aleatoriamente decorado, com interações competitivas de primeiros e segundos vizinhos e campo magnético, simulando (qualitativamente) o comportamento crítico da fase isolante de compostos supercondutores de altas temperaturas, formados por planos CuO_2 . Para esse fim, será aplicada a teoria de campo efetivo, via técnica do operador diferencial no modelo magnético. A princípio, o modelo é descrito por um Hamiltoniano Ising aleatoriamente decorado, temperado (*quenched*), (EFT-1). Em seguida, a transformação do tipo decoração-iteração (EFT-1) será utilizada como ferramenta de apoio no problema.

3.1.1 Teoria de Campo Efetivo Aplicada ao Modelo de Ising, Frustrado, Aleatoriamente Decorado com Interações de primeiros e segundos vizinhos submetido a Campo Magnético

3.1.2 Estudo do Modelo Proposto e Formalismo Teórico

A concentração de buracos criados na banda do oxigênio devido á frustração pode variar no intervalo $0 \leq x \leq 2$, tendo o conhecimento de que a supercondutividade substitui o antiferromagnetismo para $x \simeq 0,05 - 0,1$ para compostos $La_{2-x}(Sr,Ba)_xCuO_2$ ($T_C \simeq 40K$) (BEDNORZ, 1986) ou para $x \geq 0,30$ no composto $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ ($T_C \simeq 90K$) (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 e p , do tipo $x = 2p$, que nos permitirá fazer inferências teoria-experiência. Portanto, o presente modelo poderá simular o comportamento de algumas propriedades magnéticas dos compostos supercondutores de alta temperatura na sua fase (isolante) antiferromagnética.

O Hamiltoniano descrito pela Eq.(2.38) pode também descrever vários outros tipos de sistemas, bastando apenas alterar o valor do parâmetro de anisotropia: caso bidimensional ($\lambda = 0$), caso tridimensional ($\lambda = 1$). Tais casos, já foram estudados, considerando interação entre primeiros vizinhos e utilizando a técnica do operador diferencial por (HONMURA e KANEYOSHI em 1978), nas referências (FITTIPALDI et al, 1992) e (PAUL e MATTIS, 1991) respectivamente. Entretanto, dar-se-á maior ênfase ao caso quase-2d ($\lambda = 10^{-5}$) retratado em (PADILHA, 2006).

No intuito de uma análise do modelo, objetiva-se estudar sua criticalidade, usando a técnica do operador diferencial num aglomerado com um spin (**EFT-1**). Desta forma, se fará uma análise para o Hamiltoniano, descrito na Eq.(2.38), considerando a priori, como spin central um íon de cobre da sub-rede A para a sub-rede B.

Então podemos reescrever o Hamiltoniano da Eq.(2.38) para um aglomerado com um spin ($N=1$), representado pela Fig.3.1, considerando como spin central, um íon de cobre das sub-redes $v = A(B)$ e $\mu = B(A)$, a saber:

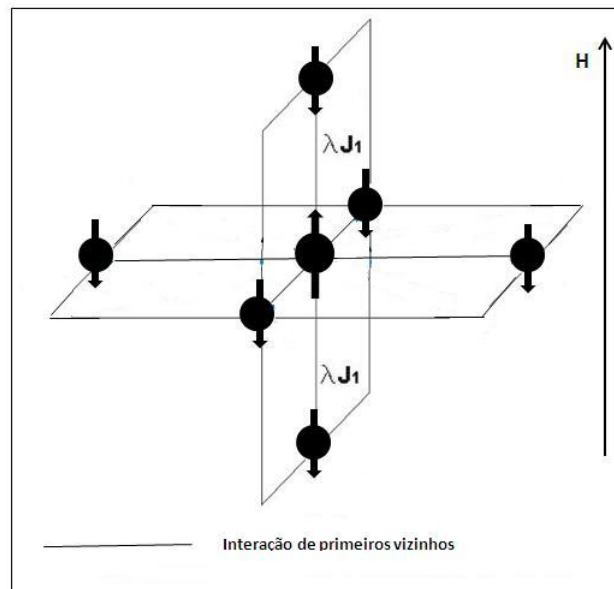


Figura 3.1: Representação de uma célula unitária com um spin central (S_i) após transformação decoreação-iteração e campo magnético.

$$\mathcal{H}_1^v = S_1^v \left[\sum_{\delta_{x,y}}^4 J_{1\delta_{x,y}} S_{1+\delta_{x,y}}^\mu + J_2 \sum_{\delta_{x,y}}^4 S_{1+\delta_{x,y}}^v + \lambda J_1 \sum_{\delta_z}^2 S_{1+\delta_z}^\mu - H \right]. \quad (3.1)$$

Definindo:

$$\xi_{1v} = -\beta \left(\sum_{\delta_{x,y}}^4 J_{1\delta_{x,y}} S_{1+\delta_{x,y}}^\mu + J_2 \sum_{\delta_{x,y}}^4 S_{1+\delta_{x,y}}^v + \lambda J_1 \sum_{\delta_z}^2 S_{1+\delta_z}^\mu \right), \quad (3.2)$$

e substituindo a Eq.(3.2) na Eq.(3.1), tem-se: $-\beta \mathcal{H}_1^v = S_1^v (\xi_{1v} + L)$, sendo $L = \beta H$.

Fazendo a média sobre as possíveis configurações, tem-se a magnetização da sub-rede v como $m_v = \langle \langle S_1^v \rangle \rangle_c$, de modo que $\langle \dots \rangle$ representa a média térmica, e $\langle \dots \rangle_c$ a média configuracional calculada sobre a probabilidade expressa na Eq.(2.72). Logo, a magnetização de subrede v poderá ser expressa como:

$$m_v = \langle \langle S_1^v \rangle \rangle_c = \left\langle \left\langle \frac{\text{Tr} [S_1^v e^{-\beta \mathcal{H}_1^v}]}{\text{Tre}^{-\beta \mathcal{H}_1^v}} \right\rangle \right\rangle_c = \left\langle \left\langle \frac{\partial \ln Z_1^v}{\partial (\xi_{1v})} \right\rangle \right\rangle_c, \quad (3.3)$$

sendo que, $Z_1^v = \text{Tre}^{-\beta \mathcal{H}_1^v} = 2 \cosh(\xi_{1v} + L)$. Pode-se agora a partir da equação acima, encontrar a expressão para a magnetização de subrede v , tal que:

$$m_v = \langle \langle \tanh(\xi_{1v} + L) \rangle \rangle_c. \quad (3.4)$$

Considerando um aglomerado com um spin, pode-se aplicar a técnica do operador diferencial na Eq.(3.4), obtendo-se então:

$$m_v = \left\langle \left\langle e^{(\xi_{1v}) Dx} \right\rangle \right\rangle_c F(x)|_{x=0}, \quad (3.5)$$

com $F(x) = \tanh(x + L)$. Fazendo uso da identidade de Van der Waerden $e^{a\sigma_i} = \cosh(a) + \sigma_i \sinh(a)$, para um sistema de spin- $\frac{1}{2}$ com dois estados, de modo a se obter a magnetização das sub-redes m_A e m_B , em termos das múltiplas funções de correlação de spin, encontramos como segue:

$$m_v = \left\langle \left\langle \prod_{\delta_{x,y}}^4 [\alpha_{x'1} - S_{1+\delta_{x,y}}^\mu \beta_{x'1}] \prod_{\delta_{x,y}}^4 [\alpha_{x'2} - S_{1+\delta_{x,y}}^v \beta_{x'2}] \prod_{\delta_z}^2 [\alpha_{\lambda x'} - S_{1+\delta_{x,y}}^\mu \beta_{\lambda x'}] \right\rangle \right\rangle_c F(x)|_{x=0}, \quad (3.6)$$

onde $\alpha_{x'1} = \cosh(K_{1\delta_{x,y}} Dx)$, $\beta_{x'1} = \sinh(K_{1\delta_{x,y}} Dx)$, $\alpha_{x'2} = \cosh(K_2 Dx)$, $\beta_{x'2} = \sinh(K_2 Dx)$, $\alpha_{\lambda x'} = \cosh(\lambda K_1 Dx)$, $\beta_{\lambda x'} = \sinh(\lambda K_1 Dx)$ e $K_{1\delta_{x,y}} = \beta J_{1\delta_{x,y}}$, $K_1 = \beta J_1$, $K_2 = \beta J_2$.

Empregando-se o desacoplamento de spins de Zernike, (ZERNIKE, 1940), expressa pela Eq.(2.89) a qual desconsidera a correlação entre diferentes spins e calculando a média configuracional de cada termo, tem-se a magnetização expressa por:

$$m_v = \left(X'_1 - m_\mu Y'_1\right)^4 \left(X'_2 - m_v Y'_2\right)^4 \left(X'_\lambda - m_\mu Y'_\lambda\right)^2 F(x)|_{x=0}, \quad (3.7)$$

cujas as médias configuracionais são dadas como:

$$X'_1 = \langle \alpha_{x'1} \rangle = p \cosh(K_{eff} Dx) + (1-p) \cosh(K_1 Dx),$$

$$Y'_1 = \langle \beta_{x'1} \rangle = p \sinh(K_{eff} Dx) + (1-p) \sinh(K_1 Dx), \quad (3.8)$$

$$X'_2 = \langle \alpha_{x'2} \rangle = \cosh(\alpha_2 K_1 Dx), \quad (3.9)$$

$$Y'_2 = \langle \beta_{x'2} \rangle = \sinh(\alpha_2 K_1 Dx), \quad (3.10)$$

$$X'_\lambda = \langle \alpha_{\lambda x'} \rangle = \cosh(\lambda K_1 Dx), \quad (3.11)$$

$$Y'_\lambda = \langle \beta_{\lambda x'} \rangle = \sinh(\lambda K_1 Dx). \quad (3.12)$$

e

$$F(x) = \langle \tanh(x+L) \rangle_c = p \tanh(x+L_{eff}) + (1-p) \tanh(x+L). \quad (3.13)$$

Devemos lembrar que a presença do campo magnético faz com que a função $F(x)$ não tenha mais uma paridade bem definida, conforme temos discutido anteriormente neste capítulo. De forma análoga a m_v , pode ser obtido a magnetização m_μ com as mesmas médias configuracionais, que tem como resultado:

$$m_\mu = \left(X'_1 - m_v Y'_1\right)^4 \left(X'_2 - m_\mu Y'_2\right)^4 \left(X'_\lambda - m_v Y'_\lambda\right)^2 F(x)|_{x=0}, \quad (3.14)$$

tendo em vista que a função $F(x)$ uma tangente hiperbólica, e também uma função ímpar, então a combinação de operadores diferenciais pares, $\hat{\phi}_{par}(Dx)$, envolvida na expansão, quando aplicada no limite $x = 0$, é nula, ou seja, $\hat{\phi}_{par}(\hat{D}_x) \tanh(x)|_{x=0} = 0$. Assim, expandindo-se a Eq.(3.7), em potências de m_A e m_B , têm-se:

$$m_v = \sum_{j=0}^4 \sum_{q=0}^4 \sum_{r=0}^2 C_{jqr}(T, \lambda, p, H, \alpha_1, \alpha_2) m_\mu^{j+r} m_v^q, \quad (3.15)$$

com:

$$C_{jqr}(T, \lambda, p, H, \alpha_1, \alpha_2) = (-1)^{j+r+q} \binom{4}{j} \binom{4}{q} \binom{2}{r}.$$

$$X_1'^{(4-j)} Y_1'^{(j)} X_2'^{(4-q)} Y_2'^{(q)} X_\lambda'^{(2-r)} Y_\lambda'^{(r)} \tanh(x+L)|_{x=0}, \quad (3.16)$$

onde os valores de $C_{jqr}(T, \lambda, p, H, \alpha_1, \alpha_2)$ são obtidos analiticamente pela relação $e^{aDx}F(x) = F(x+a)$, porém omitiremos por serem demasiadamente grandes.

3.1.3 Limite de Estabilidade da Fase Antiferromagnética

Introduzindo as variáveis $m = \frac{1}{2}(m_A + m_B)$, definida como a magnetização uniforme ou magnetização total do sistema e $m_s = \frac{1}{2}(m_A - m_B)$, definida por magnetização residual (*staggered*) podemos reescrever a Eq.(3.14) em termos dessas novas variáveis m e m_s , ou seja,

$$m + m_s = \sum_{j=0}^4 \sum_{q=0}^4 \sum_{r=0}^2 C_{jqr}(T, \lambda, p, H, \alpha_1, \alpha_2) [m - m_s]^{j+r} m_0^q, \quad (3.17)$$

e

$$m - m_s = \sum_{j=0}^4 \sum_{q=0}^4 \sum_{r=0}^2 C_{jqr}(T, \lambda, p, H, \alpha_1, \alpha_2) [m + m_s]^{j+r} m_0^q, \quad (3.18)$$

onde usamos o fato de que $m_a = m + m_s$ e $m_B = m - m_s$. Entretanto, estamos interessados em estudar a criticalidade desse sistema, ou seja, próximo à temperatura crítica. Neste caso, a magnetização Staggered, m_s (parâmetro de ordem do sistema) tende a zero com a aproximação da temperatura de Néel, permitindo considerar apenas os termos lineares em m_s na Eq.(3.17) ou na Eq.(3.18). Este processo gera um conjunto de duas equações acopladas que resolvidas simultaneamente, obtém-se assim os diagramas de fase, ou seja,

$$A_0(T, \lambda, p, H, \alpha_1, \alpha_2, m_0) = m_0. \quad (3.19)$$

e

$$A_1(T, \lambda, p, H, \alpha_1, \alpha_2, m_0) = 1. \quad (3.20)$$

com

$$A_0(T, \lambda, p, H, \alpha_1, \alpha_2, m_0) = \sum_{j=0}^4 \sum_{q=0}^4 \sum_{r=0}^2 m_0^{j+r} C_{jqr}(T, \lambda, p, H, \alpha_1, \alpha_2), \quad (3.21)$$

e

$$A_1(T, \lambda, p, H, \alpha_1, \alpha_2, m_0) = \sum_{j=0}^4 \sum_{q=0}^4 \sum_{r=0}^2 (-1)^{p+q} m_0^{j+r-1} C_{jqr}(T, \lambda, p, H, \alpha_1, \alpha_2), \quad (3.22)$$

onde m_0 é o valor da magnetização total na temperatura crítica ($m_s = 0$).

Resolvendo numericamente a Eq.(3.19) e Eq.(3.20), construímos os diagramas de fase para diferentes valores de α_1 , α_2 , p e $\lambda = 10^{-5}$ (caso quase bidimensional) é que foi possível observar o comportamento de T_N , α_1 , α_2 , H , m e m_s nos diagramas de fase, nos planos (T_N, H) , $(p, \frac{K_B T_N}{J_1})$, $(\alpha_1, \frac{K_B T_N}{J_1})$, $(\alpha_2, \frac{K_B T_N}{J_1})$, $(\frac{K_B T_N}{J_1}, h)$, (T_N, m) e (T_N, m_s) para o modelo apresentado.

Nas Fig.3.2 e Fig.3.3 para $T_c(H)$ desenvolveram-se valores diferentes de concentração p e fixando os parâmetros de frustração α_1 e α_2 , obtendo linhas críticas de transição de segunda ordem, onde divide a fase antiferromagnética (AF parâmetro de ordem $m_s \neq 0$) da fase paramagnética (P $m_s = 0$). Foi observado na Fig. 3.2 o fenômeno de reentrância à medida que a concentração cresce. Verifica-se também que o comportamento do sistema sob a aplicação do campo externo é o esperado ou seja, quanto maior é o campo externo, menor será a temperatura crítica do sistema. Já na Fig.3.3 pode-se notar que quando aumentamos a interação antiferromagnética (α_2) a temperatura cai, e o campo passa a decrescer tendendo a uma dupla temperatura crítica. Esse comportamento dar origem a reentrâncias devido a frustração do sistema dado por α_1 . Para uma explicação física desse fenômeno, a sua origem é atribuída a competição entre dois tipos de interação por exemplo, uma interação ferromagnética (α_1) presente aleatoriamente na ligação entre os spins decoradores e o spin nodal, e outra interação antiferromagnética (α_2) existente entre os spins da rede estudada (PADILHA, 2006). Quando o efeito de frustração é grande em baixas temperaturas surge o estado desordenado, e à medida que aumentamos T , este efeito fica de certa forma enfraquecido, induzindo uma certa ordem (primeira transição de fase $T = T_{N_1}$) e será destruída em altas temperaturas (segunda transição de fase $T = T_{N_2}$). Esse fenômeno de reentrância ocorre para qualquer valor de concentração p , o que modifica é o parâmetro crítico de frustração α_1 como poderá ser visto adiante.

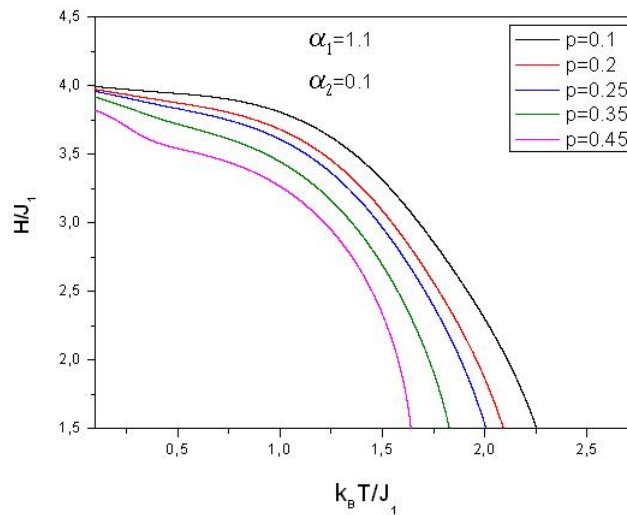


Figura 3.2: Diagrama de fase no plano $(\frac{k_B T}{J_1}, H/J_1)$, para o modelo de Ising 1/2, quase 2d aleatoriamente decorado para diferentes valores da concentração p , mantendo-se fixo $\alpha_1 = 1.1$ e $\alpha_2 = 0.1$.

O diagrama de fase, da Fig.3.2 mantendo fixos os parâmetros de frustração α_1 e α_2 , mostra claramente que com o aumento da concentração p , a temperatura de transição decresce e o campo se aproxima do ponto crítico. Pode-se observar que para $\alpha_1=1.1$ surge uma pe-

quena frustração e conseqüentemente o surgimento de reentrância, contudo vale salientar que no gráfico Fig.3.3 para o valor da concentração $p=0.45$ a reentrância aparecer fortalecendo assim o que havíamos visto na Fig.3.2, isso devido ao efeito de competitividade. É notado também que à medida que o campo aumenta as reentrâncias desaparecem e assim também as frustrações tendo em vista que o campo ordena o sistema.

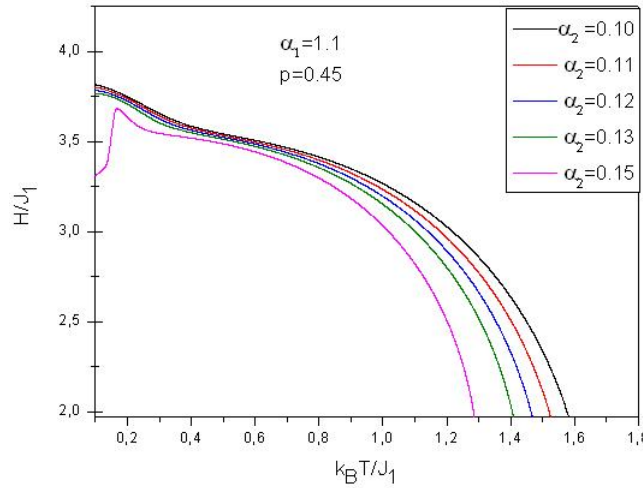


Figura 3.3: Diagrama de fase no plano $(\frac{K_B T_N}{J_1}, H/J_1)$, para o modelo de Ising 1/2, quase 2d aleatoriamente decorado para diferentes valores do parâmetro de Frustração α_2 , mantendo-se fixo $\alpha_1 = 1.1$ e $p=0.45$.

A Fig.3.3 mostra o diagrama de fase $H(T)$ para diferentes valores de α_2 mantendo fixo p e α_1 . Pode-se observar um caso parecido (no surgimento de reentrância) com o que havíamos visto na Fig.3.2 para $p = 0.45$, quando fixamos o valor de α_1 e α_2 variando p . Pode-se observar que quando o parâmetro de frustração α_2 cresce, a temperatura crítica cai fazendo o campo convergir em um único ponto, desaparecendo assim a reentrância (em função de α_2) devido a pequena frustração aplicada por α_1 . Pode-se ainda perceber a existência de um α_2 crítico, $\simeq 0.14$, que é onde começam a surgir as reentrâncias até que o valor de H tenda a zero, e então o aparecimento de uma nova temperatura crítica. Observa-se também que após a esse α_2 crítico, a temperatura decresce enquanto o campo aumenta, o que caracteriza um comportamento crítico de um metamagneto.

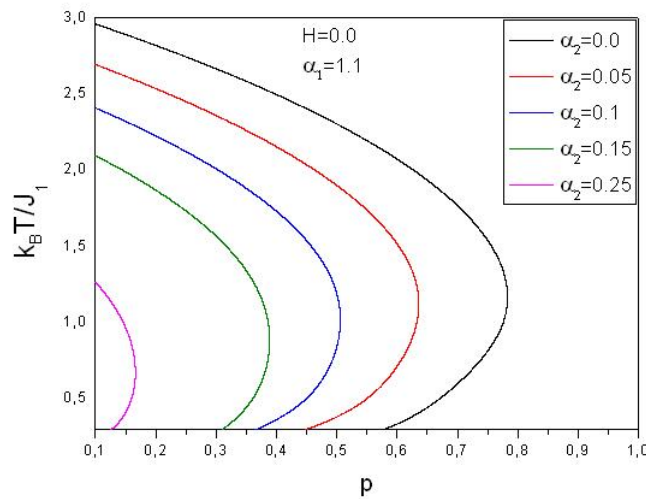


Figura 3.4: Diagrama de fase no plano $p, \frac{K_B T_N}{J_1}$, para o modelo de Ising 1/2 aleatoriamente decorado, quase 2d para diferentes valores do parâmetro de Frustração α_1 , mantendo-se fixo $\alpha_1 = 1.1$ e $H=0.0$.

A Fig.3.4 nos mostra para diferentes valores de α_2 quando mantido fixo $H=0$ e $\alpha_1 = 1.1$, a mudança na criticalidade da concentração p , à medida que a temperatura decresce ou seja, quando p vai diminuindo, a temperatura crítica de transição também diminui. Podemos verificar que com o aumento do parâmetro de frustração α_2 a criticalidade da concentração p_c sofre decréscimo, o que é fisicamente esperado essa variação na ausência de campo magnético uniforme como pode ser visto em (SILVA,2010).

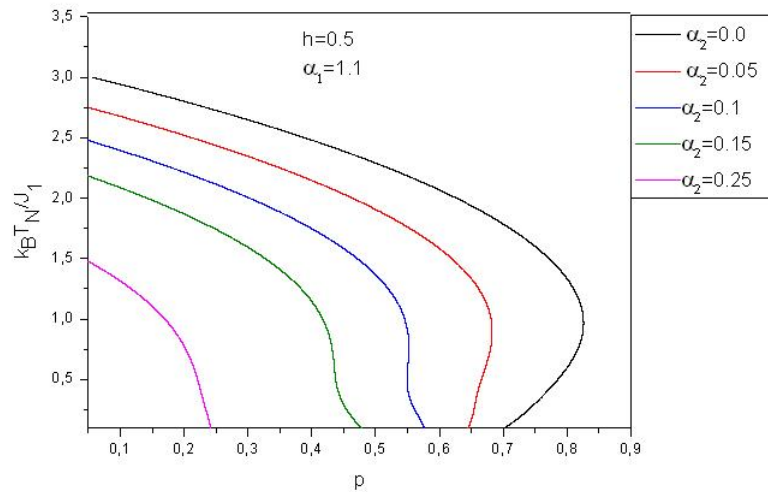


Figura 3.5: Diagrama de fase no plano $(p, \frac{K_B T_N}{J_1})$, para o modelo de Ising 1/2 aleatoriamente decorado, quase 2d para diferentes valores do parâmetro de Frustração α_1 , mantendo-se fixo $\alpha_1 = 1.1$ e $H=0.5$.

A Fig.3.5 nos leva ao exemplo visto na Fig.3.4 só que agora temos um campo para influenciar no sistema com diferentes valores de α_2 . Pode-se observar notavelmente neste diagrama a mudança repentina na criticalidade da concentração p a partir das variações de α_2 ,

aparecendo assim a influência do campo no surgimento de reentrância o que já de se esperar. Podemos ver que quanto maior for o campo externo menor é a temperatura crítica do sistema. Vimos também que com o aumento do campo, a concentração assume valores maiores, assim a temperatura cresce, à medida que a concentração diminui.

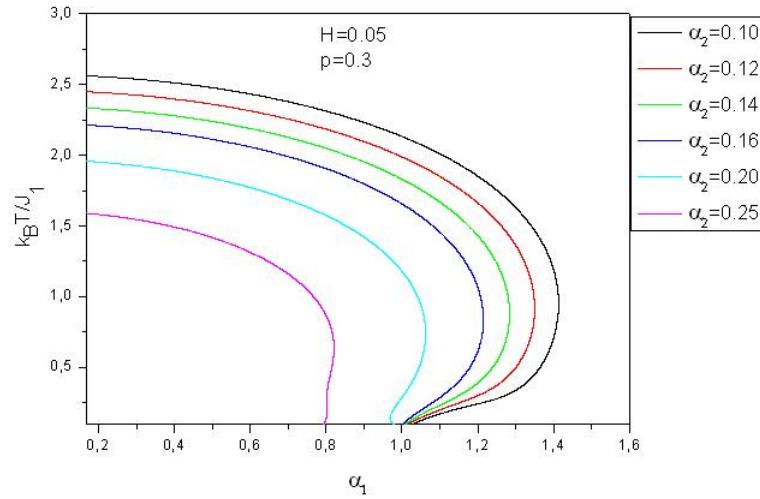


Figura 3.6: Diagrama de fase no plano $(\alpha_1, \frac{K_B T_N}{J_1})$, para o modelo de Ising 1/2 aleatoriamente decorado, quase 2d para diferentes valores α_1 , mantendo-se fixo $P=0,2$ e $H=0,05$.

Na Fig.3.6 para diversos valores de α_2 mantendo fixo o $H=0,05$ e $p=0,3$, pode-se observar que quando a interação antiferromagnética α_2 diminui, as reentrâncias vão aparecendo, convergindo em um único ponto $\cong 1$, ao passo que a temperatura crítica de transição aumenta gradativamente. O fenômeno de reentrância é notado à medida que a interação antiferromagnética (α_2) cresce.

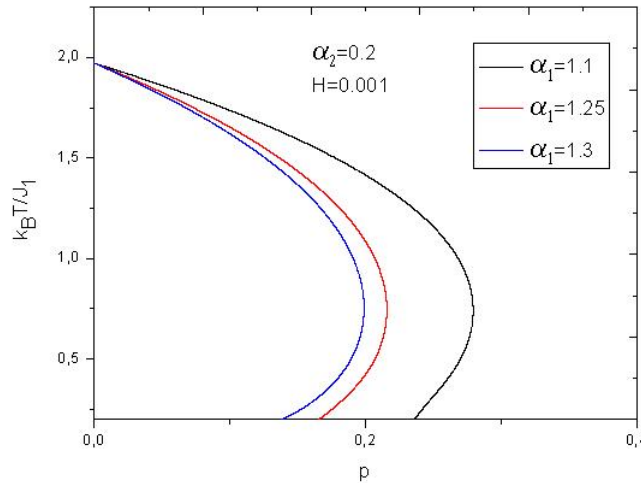


Figura 3.7: Diagrama de fase no plano $(p, \frac{K_B T_N}{J_1})$, para o modelo de Ising 1/2 aleatoriamente decorado, quase 2d para diferentes valores α_1 , mantendo-se fixo $\alpha_2 = 0.2$ e $H=0.001$.

O diagrama de fase $T(P)$ que é representado pela Fig.3.7 para diferentes valores de α_1 mantendo fixo H e α_2 mostra que, com o aumento da frustração α_1 , a concentração decresce e a temperatura de transição permanece estável num único ponto, tendo em vista que o campo sendo quase desprezível, chega-se a resultados já obtidos anteriormente por (SILVA,2010).

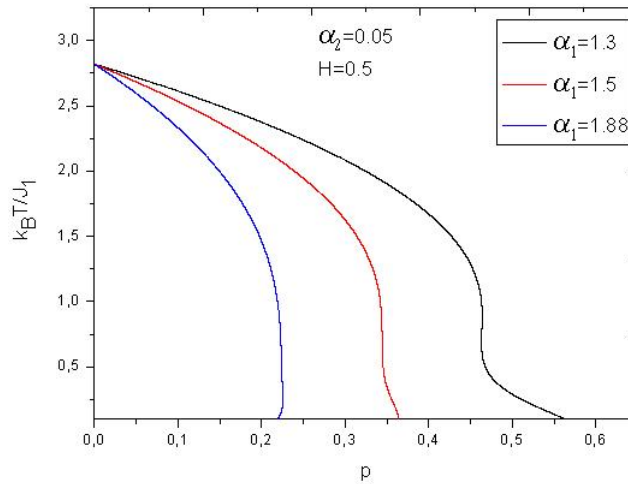


Figura 3.8: Diagrama de fase no plano $(p, \frac{K_B T_N}{J_1})$, para o modelo de Ising 1/2 aleatoriamente decorado, quase 2d para diferentes valores α_1 , mantendo-se fixo $\alpha_2 = 0.05$ e $H=0.5$.

Veja agora na Fig.3.8 um caso parecido com o da Fig.3.7, só que agora temos um campo, e podemos perceber a contribuição do mesmo no sistema. Vemos neste gráfico que a concentração p assumi valores maiores, que os obtidos no gráfico da Fig.3.7. Vemos também que a temperatura permaneceu estável, só que em um valor mais alto $\cong 2.7$. Pode-se perceber que quando aumentamos a frustração α_1 , as reentrâncias desaparecem e tem efeito contrário quando decrescemos seu valor.

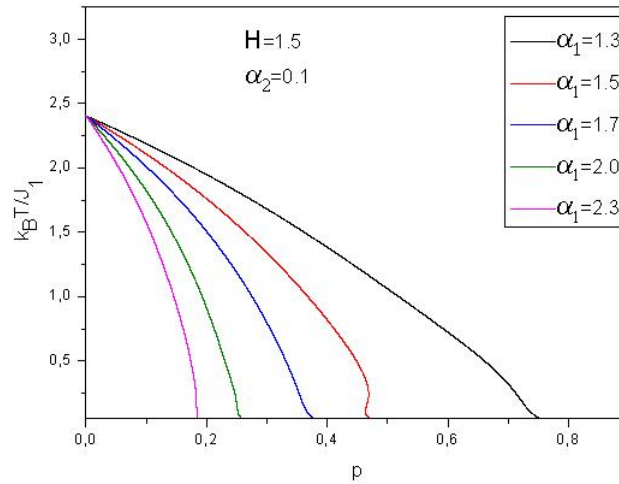


Figura 3.9: Diagrama de fase no plano $(p, \frac{K_B T_N}{J_1})$, para o modelo de Ising 1/2 aleatoriamente decorado, quase 2d para diferentes valores do parâmetro de Frustração α_1 , mantendo-se fixo $\alpha_2 = 0.1$ e $H=1.5$.

Na Fig.3.9 é notado que quando aumentamos a interação ferromagnética (α_1), as re-entrâncias desaparecem e a concentração cai, mas quando a interação antiferromagnética (α_2) é aumentada, Fig.3.8, a temperatura passa a ter um valor menor devido a sensibilidade do sistema ao efeito do campo magnético.

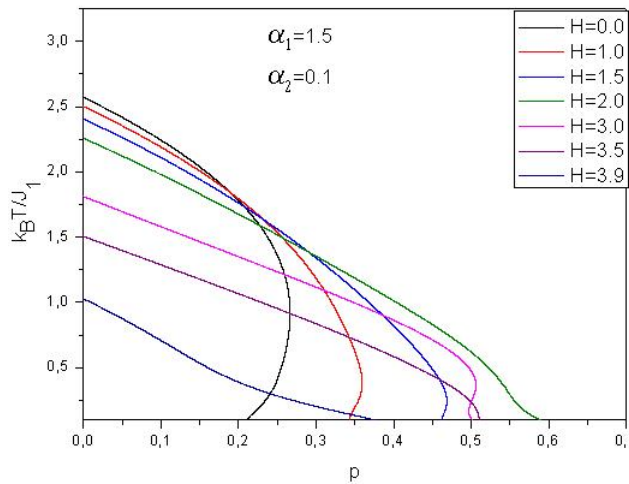


Figura 3.10: Diagrama de fase no plano $(p, \frac{K_B T_N}{J_1})$, para o modelo de Ising 1/2 aleatoriamente decorado, quase 2d para diferentes valores do campo (H), mantendo-se fixo $\alpha_1 = 1.5$ e $\alpha_2 = 0.1$.

Na Fig.3.10 mantendo fixos os parâmetros de frustração α_1 e α_2 , o sistema mostra uma grande interação ferromagnética (α_1) e pouca interação antiferromagnética (α_2) dadas pelos parâmetros de frustração α_1 e α_2 . Vimos que quando aumentamos o campo, a temperatura cai gradativamente à medida que a concentração aumenta para valores aproximados de H num intervalo de 2,0 a 3,9. E no passo que a concentração aumenta a temperatura aumenta para um

intervalo aproximado de 0 a 2,0.

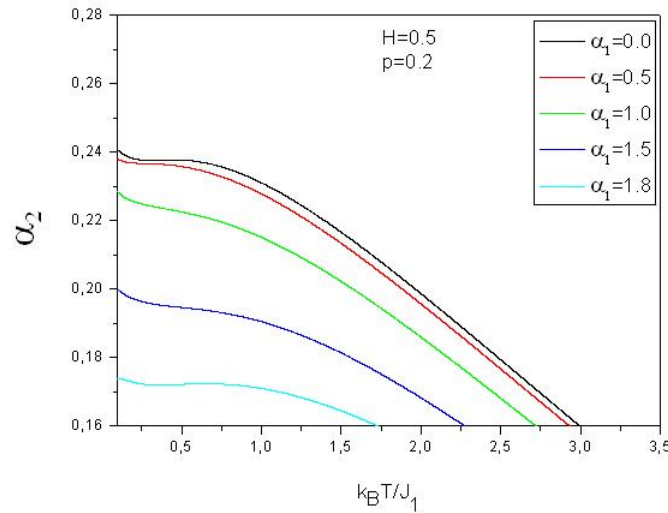


Figura 3.11: Diagrama de fase no plano $(\frac{K_B T_N}{J_1}, \alpha_2)$, para o modelo de Ising 1/2 aleatoriamente decorado, quase 2d para diferentes valores α_1 , mantendo-se fixo $P=0.2$ e $H=0.5$.

O que pode ser observado na Fig.3.11 quando mantidos fixos o valor de $h=0.5$ e $p=0.2$, é a diminuição da temperatura em função do aumento do parâmetro de frustração α_1 . Também é notada a mudança na criticalidade do parâmetro α_2 à medida que a temperatura crítica decresce, assim como a presença de reentrância à medida que a temperatura diminui. Essa variação de T favorece a interação de segundos vizinhos (antiferromagnética) (α_2) no sistema levando em conta que a competição de interação é razoavelmente alta.

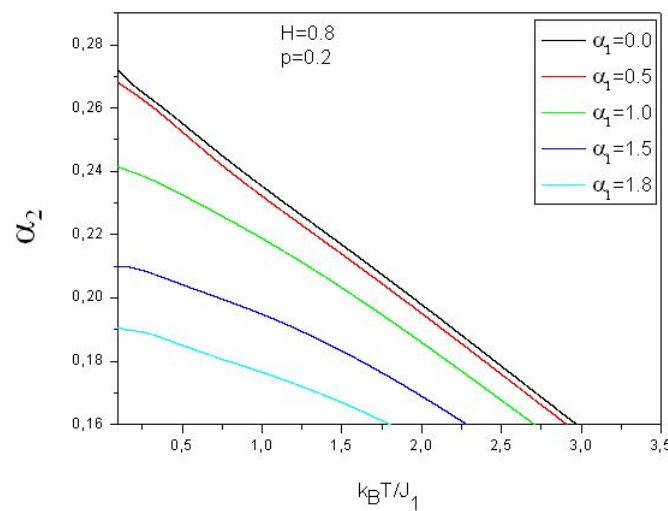


Figura 3.12: Diagrama de fase no plano $(\frac{K_B T_N}{J_1}, \alpha_2)$, para o modelo de Ising 1/2 aleatoriamente decorado, quase 2d para diferentes valores α_1 , mantendo-se fixo $P=0.2$ e $H=0.8$.

Na Fig.3.12 podemos observar um caso parecido visto na Fig.3.11, onde as linhas

críticas do parâmetro de frustração α_2 quando mantido fixo os valores de $H=0.8$ e $p=0.2$ aumentaram, e que o decréscimo da temperatura acontece em função do aumento do parâmetro de frustração α_1 fazendo assim as reentrância desaparecem. Não podemos desprezar a influência do campo para que o crescimento da interação de segundos vizinhos aconteça à medida que a competição α_1 aumenta.

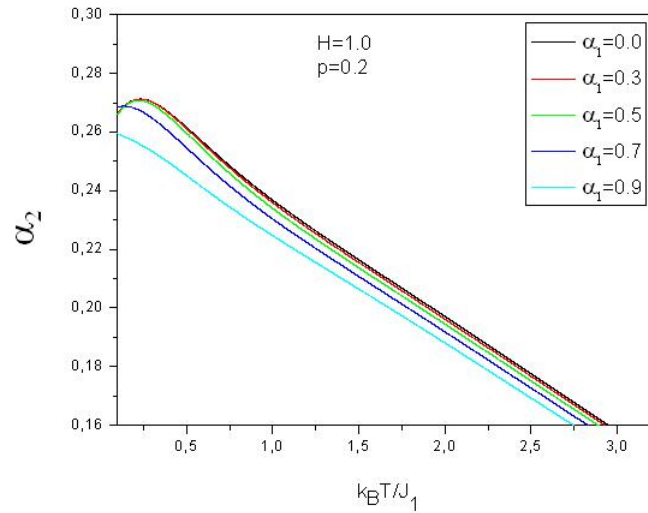


Figura 3.13: Diagrama de fase no plano $(\frac{K_B T_N}{J_1}, \alpha_2)$, para o modelo de Ising 1/2 aleatoriamente decorado, quase 2d para diferentes valores α_1 , mantendo-se fixo $P= 0.2$ e $H=1.0$.

No diagrama 3.13, mantendo fixos $H = 1.0$ e $p = 0.2$, apresenta uma mínima queda na temperatura de transição, quando o parâmetro de frustração α_1 cresce, e com a diminuição da temperatura crítica, aparece o fenômeno de reentrância, tendo em vista que, o campo tem a função de ordenar, mas a temperatura de transição ainda se encontra alta, dificultando assim a ação do campo magnético. Essa pequena variação de T favorece a interação de segundos vizinhos (antiferromagnética) (α_2) no sistema. Veja que com o aumento do campo fez com que as reentrâncias se intensificassem numa pequena variação do parâmetro de frustração α_2 .

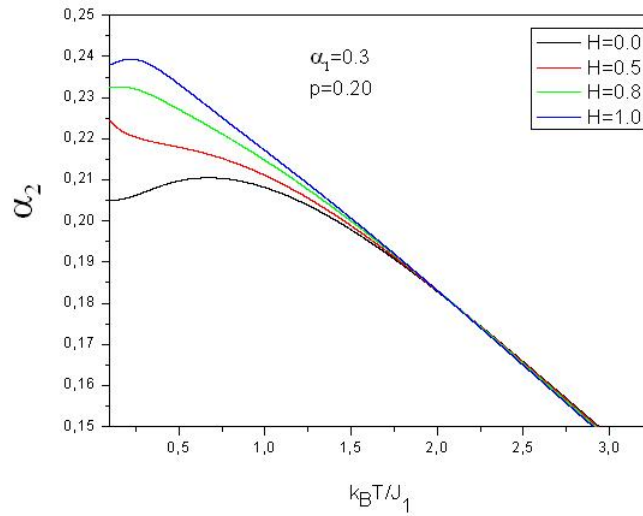


Figura 3.14: Diagrama de fase no plano $(\frac{K_B T_N}{J_1}, \alpha_2)$, para o modelo de Ising 1/2 aleatoriamente decorado, quase 2d para diferentes valores α_1 , mantendo-se fixo $p=0.2$ e $H=0.05$.

Podemos interpretar a Fig.3.14, quando mantido fixos α_1 e p , da seguinte forma: Observa-se que quando aumentamos o campo magnético, a interação antiferromagnética (α_2) aumenta contribuindo para o aparecimento de reentrâncias, devido ao fenômeno de competitividade entre as interações. Pode-se observar também que a temperatura crítica sofre pouca variação com o aumento do campo em baixas concentrações.

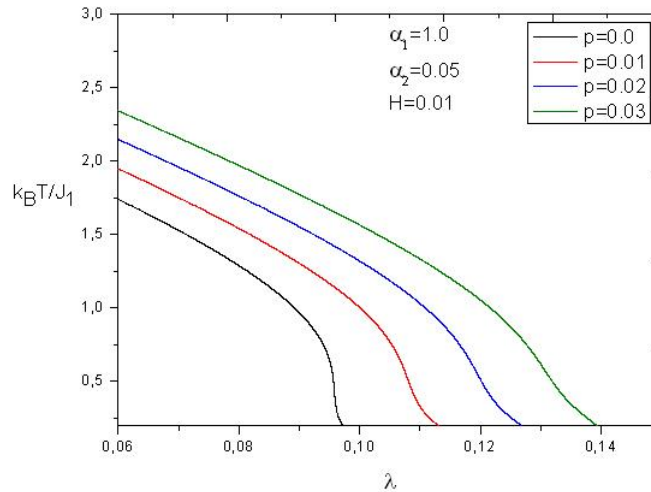


Figura 3.15: Diagrama de fase no plano $(\lambda, \frac{K_B T_N}{J_1})$, para o modelo de Ising 1/2 aleatoriamente decorado, quase 2d para diferentes valores p , mantendo-se fixo $\alpha_1 = 1.0$, $\alpha_2=0.05$ e $H=0.01$.

Observa-se no diagrama de fase da Fig.3.15, fixando os parâmetros de frustração α_1 , α_2 e H que, enquanto a concentração decresce, o parâmetro de anisotropia (λ) também decresce, surgindo reentrância para valores de p tendendo a zero. A relação de λ com a temperatura

de transição é inversamente proporcional, sabendo também que a interação antiferromagnética (α_2) aplicada é pequena e não se opõe de forma decisória a esse comportamento.

3.1.4 Curva da Magnetização

O comportamento das magnetizações nos planos $(\frac{K_B T_N}{J_1}, m)$ e $(\frac{K_B T_N}{J_1}, m_s)$, é determinado resolvendo Eq.3.19) para diferentes valores da concentração p e parâmetros de frustração α_1 e α_2 mantendo fixo H . Na Fig.3.17 pode-se notar que à medida que o campo aumenta a temperatura crítica muda de valor fazendo a magnetização total variar, ou seja, para um valor baixo de campo como mostrado na Fig.3.16, a magnetização tende a zero, e quando aumentamos o campo há um salto considerável para valores mais altos para a magnetização, mudando sempre a temperatura crítica do sistema.

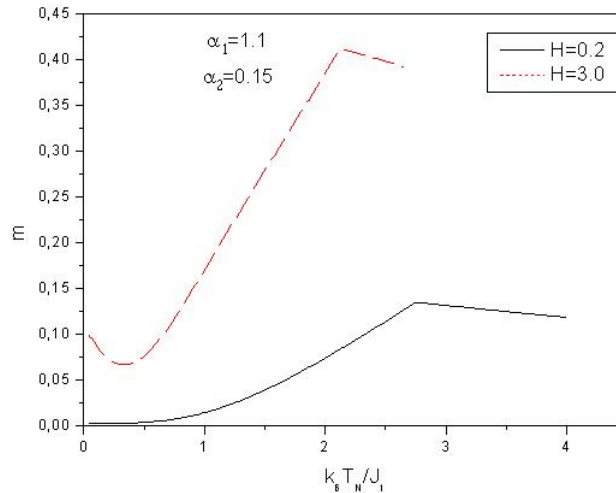


Figura 3.16: Diagrama de fase no plano $(\frac{K_B T_N}{J_1}, m)$, para o modelo de Ising 1/2 aleatoriamente decorado, quase 2d para diferentes valores do campo (H), mantendo-se fixo $\alpha_1 = 1.1$ e $\alpha_2 = 0.15$.

Na Fig.3.16 é observado o comportamento da magnetização total em função da temperatura quando mantido fixo os parâmetros de frustração e competição α_2 e α_1 respectivamente para diversos valores de campo. Foi observado o fenômeno de reentrância à medida que aumentamos o campo como também o aumento da magnetização total. Esse comportamento acontece sob a influência de dois tipos de interação do sistema, (AF) dada pela interação de troca entre os spins de primeiros e segundos vizinhos e, (F) atribuída à presença do íon de oxigênio, interação efetiva. Pode-se interpretar ao observar o gráfico que, a temperatura $T \simeq 2,3$ marca o ponto crítico de transição de fase paramagnética para antiferromagnética, assim podemos concluir que à medida que o campo cresce, decresce o ponto de transição entre as fases.

Pode-se observar na Fig.3.17 $m_s(t)$ para diferentes valores de α_1 e α_2 que à medida que

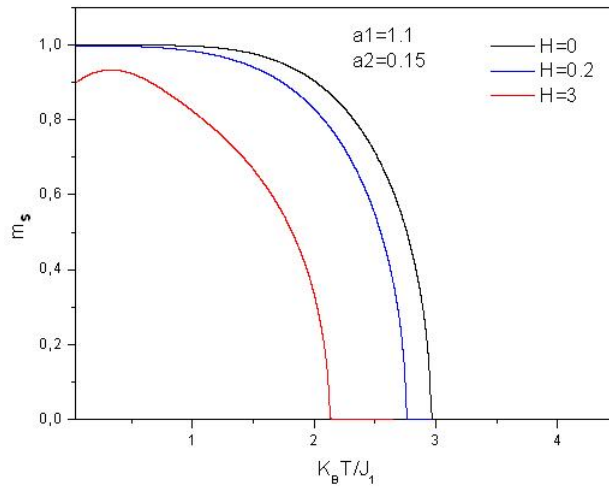


Figura 3.17: Diagrama de fase no plano $(\frac{K_B T_N}{J_1}, m_s)$, para o modelo de Ising 1/2 aleatoriamente decorado, quase 2d para diferentes valores do campo (H), mantendo-se fixo $\alpha_1 = 1.1$ e $\alpha_2 = 0.15$.

o campo cresce a temperatura decresce, tendo em vista que uma pequena frustração aplicada e a interação de segundos vizinhos ser também pequena, não faz oposição a esse comportamento, fazendo assim a magnetização staggered (m_s) crescer em função também desses dois parâmetros até convergir em um único ponto. É notado também que quando a temperatura cresce, m_s decresce anulando assim a temperatura T_N e contribuindo para o aparecimento de reentrância devido a competitividade entre as interações.

4 CONCLUSÕES

O objetivo principal desse trabalho foi o de estudar a magnetização e os diagramas de fase do modelo de Ising- $\frac{1}{2}$ frustrado, quase-bidimensional, aleatoriamente decorado com interações de primeiros e segundos vizinhos e campo magnético, utilizando a teoria de campo efetivo via técnica do operador diferencial em aglomerados finitos.

Para isso foi necessário uma revisão geral de conceitos, fundamentos e técnicas a serem usadas no modelo em estudo. Foi mostrado uma visão geral de tópicos significativos sobre sistemas ordenados e desordenados, discutiu-se os diferentes tipos e formas de configuração. Como é de suma importância para o desenvolvimento do trabalho foi explicada a Teoria de Campo efetivo aplicada ao modelo de Ising com algumas comparações com Teoria de Campo Médio.

No capítulo 1, foi apresentado tópicos tais como: ordenamento magnético com campo e sem campo; transição de fase e fenômenos críticos; sistemas ordenados ; sistemas magnéticos desordenados, sistemas magnéticos diluídos, sistemas magnéticos com interações competitivas; modelos decorados, modelos frustrados, afim de que apresentem-se como um breve introdução de nossos estudos que posteriormente serviria como apoio ao desenvolvimento desse estudo.

No capítulo 2, primeiramente foi desenvolvido a técnica de campo médio em aglomerados finitos para o modelo de Ising- $\frac{1}{2}$, (1D) ferromagnético com campo magnético para exemplificar e evidenciar a técnica de forma simples. Logo após a técnica do operador diferencial foi desenvolvida e aplicada, na versão de aglomerado com um spin (EFT-1) no modelo de Ising- $\frac{1}{2}$, ferromagnético. A teoria de campo efetivo têm em comum, os mesmos expoentes críticos universais obtidos na aproximação de campo médio(i.e., $\beta = \frac{1}{2}$, $\gamma = 1$, $\alpha = 0(disc.)$, $\delta = 3$, $\nu = \frac{1}{2}$, $\eta = 0$). Resultados esses citados neste capítulo, já foram desenvolvidos por outros autores, e o nosso objetivo foi apresentar uma visão inicial do método para ser utilizada nos capítulos seguintes.

No capítulo 3, foi dado mais ênfase a técnica do operador diferencial ao ser desenvolvida na versão de aglomerado com um spin no modelo de Ising- $\frac{1}{2}$ antiferromagnético, frus-

trado, quase bidimensional, aleatoriamente decorado, com decoração de primeiros e segundos vizinhos e campo magnético.

Na seção 3.2 obtivemos os diagramas de fase nos planos (T_N, H) , $(p, \frac{K_B T_N}{J_1})$, $(\alpha_1, \frac{K_B T_N}{J_1})$, $(\alpha_2, \frac{K_B T_N}{J_1})$, $(\frac{K_B T_N}{J_1}, H)$, $(\frac{K_B T_N}{J_1}, m)$ e $(\frac{K_B T_N}{J_1}, m_s)$ para diferentes valores dos parâmetros de frustração (α_1 e α_2) e concentração de íons de oxigênio (p), assim como campo em função da temperatura para o modelo em questão. Em análise ao plano $(\frac{K_B T_N}{J_1}, p)$ mostrado em (SILVA,2010), vemos o aparecimento de reentrância, fortalecendo assim nossos resultados nos diagramas de fase intermediado pela frustração, o que é realmente constatado experimentalmente em sistemas magnéticos com interações competitivas e suas eventuais consequência. Discutiu-se a variação da concentração crítica p_c , onde a temperatura de Néel tende a zero para muitos valores de parâmetros de frustração α_1 e α_2 . Esse comportamento pode ser explicado pela introdução em nosso modelo, da transformação decoração-iteração, que altera a concentração de íons de oxigênio na rede. Nas Figs.(3.2) e (3.3) para $T(H)$ desenvolveram-se diferentes valores de concentração p e frustração α_1 e α_2 , obtendo linhas críticas de transição de segunda ordem, onde divide a fase antiferromagnética (AF parâmetro de ordem $m_s \neq 0$) da fase paramagnética ($P m_s = 0$). Também é observado o fenômeno de reentrância à medida que a concentração cresce e verifica-se que o comportamento do sistema sob a aplicação do campo externo é o esperado ou seja, quanto maior é o campo externo, menor será a temperatura crítica do sistema. Para uma explicação física desse fenômeno, a sua origem é atribuída a competição entre dois tipos de interação por exemplo, uma interação ferromagnética presente aleatoriamente na ligação entre os spins decoradores e o spin nodal, e outra interação antiferromagnética existente entre os spins da rede estudada. Quando ao efeito de frustração é grande em baixas temperaturas surge o estado desordenado, e à medida que aumentamos T , este efeito fica de certa forma enfraquecido, induzindo uma certa ordem (primeira transição de fase $T = T_{N_1}$) e será destruída em altas temperaturas (segunda transição de fase $T = T_{N_2}$). Vimos que com o aumento do parâmetro de frustração α_2 a temperatura de transição cai fazendo assim surgir também o fenômeno de reentrância, e a fase antiferromagnético é logo perdida mediante essas perturbações. Em todos os casos de variação de parâmetro foram observadas coerência em seu comportamento com relação as respostas do sistema, como a temperatura crítica diminui mediante o aumento do campo externo.

Futuras investigações podem ser feitas como consequência deste trabalho de dissertação, tais como:

- (a) Investigar o efeito do tratamento de campo magnético aleatório no modelo de Ising Frustrado aleatoriamente decorado com interação de primeiro e segundos vizinhos;

- (b) Crescer o tamanho do aglomerado (célula unitária) estudado, a fim de eliminar efeito de tamanho finito e melhorar resultados encontrados;
- (c) Fazer a descrição do problema através do Hamiltoniano de Heisenberg, levando em consideração, desta forma, sua real simetria, a fim de confirmar os resultados obtidos através deste método (EFT-2);
- (d) Inserir campo transversal e analisar a transição de fase quântica em sistemas frustrados.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AHARONY, A., et al, **Phys. Rev. Lett.** 60, 1330 (1988).
- ALMEIDA, Devair Marcelo de, **Comportamento Multicrítico de um Metamagneto em Campos Magnético Uniforme e Aleatório**. Dissertação de Mestrado. UFMT - Universidade Federal de Mato Grosso. Centro de Ciências Exatas e da Terra. Departamento de Física.
- ALMEIDA, J. R. L. de, FITTPALDI, I. P., SÁ BARRETO, F. C., J. **Phys. C** 14, 103 (1981);
- ANDERSON, P. W., **Condensed Matter** (Amsterdam North Holland) (1979).
- ANJOS, R. A. dos, VIANA, J. R., SOUSA, J. R. de, **Phys. Lett. A** 372, 1180 (2008).
- ARAÚJO, I.G. de; **Estudo Sistemático da Fase Antiferromagnética do Modelo de Heisenberg Anisotrópico**. Tese de doutorado, UFSCar-Universidade Federal de São Carlos, 2004.
- BANDER, D.L. Mills, **Phys. Rev. B** 38, 12015. (1988).
- BARRETO, F.C.S., FITTIPALDI, I.P. **Rev. Bras. Fis.** 11, 745, (1981).
- BAXTER, J., **Exactly Solved Models in Statistical Mechanics**, Academic Press, London, 1982.
- BERNARDES, L.A. Bastos., **Estudo das Propriedades Termodinâmicas do Modelo de ASHKIN-TELLER na Presença de Campo Magnético Aleatório**. São Carlos, 1995. Tese (Doutorado em Física)- Universidade de São Paulo, Instituto de Física de São Carlos.
- BEDNORZ, J. G., MÜLLER, K. A., Z. **Phys. B** 64, 189 (1986).
- BONFIM, O. F. de A., FITTIPALDI, I. F., **Phys. Lett.** 98A, 199 (1983).
- BÖTE, H. W. J., COMPAGNER, A., HOOGLAND, H., **Physica A** 141, 375 (1987).
- BUZANO, C., PRETTI, M., **Phys. Rev. B** 56, 636 (1997).
- CALLEN H. B., **Phys. Lett.** 4, 161 (1963).
- CHANDRA, P., DOUCOT, B., **Phys. B** 38, 9335 (1988);
- DINGER, T. R., et al., **Phys. Rev. Lett.** 58, 2687 (1987); WORTHINGTON, T. K., GALLAGHER, W. J., DINGER, T. R., **Phys. Rev. Lett.** 59, 1160 (1987).
- DOBRUSHIN, R. L., **Theor. Prob. Appl.** 13, 197 (1969).

ELLIOTT, R. J. B. R. Heap, MORGAN, D. J. e RUSHBROOKE, G. S., **Phys. Rev. Lett.** 5, 366 (1960); MORGAN, D. J. e RUSHBROOKE, G. S., *Molec. Phys.* 4, 291 (1963), *ibid* 6, 477 (1966); RUSHBROOKE, G. S. e MORGAN, D. J., *Molec. Phys.* 4, 1 (1961).

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

FILHO, E. B.; **Transição de Fase Quântica Induzida por Campo Externo.** Dissertação de Mestrado em Física, UFAM-Universidade Federal do Amazonas, 2003.

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

FILHO, Edgar Bublitz, J. Ricardo de Sousa, **Phys. Lett. A** 323(2009) 9 (*b*)*J.Magn.Magn.Matter* 269 (2004)266.

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

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

FRANK B. e 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 (1998); MOREIRA, A. F. S., FOGUEIREDO, W., HENRIQUES, V. B., *Eur. Phys. J. B* 27, 153 (2002).

GREST, G. S., SOUKOULIS, C. M., **Magnetic Phase Transitions - Springer Series in Solid State Sciences**, vol. 48, 223 (1983).

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

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

HONMURA, R., SARMENTO, E. F., TSALLIS, C., FITTPALDI, I. P., **Phys. Rev. B** 29, 2761 (1984).

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

HURD, C. M., *Contemp. Phys.* 23 5, 469 (1982).

IOFFE, L. B., LARKIN, A. I., **Mod Phys. Lett.B** 2, 203 (1988).

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

JASCUR, M., STRECKA, J., **MAGN, J. M.**, *Mater* 272-276, 984 (2004).

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

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

LANDAU, L. D., LISFSHITZ, E. M., **Statistical Physics** - Pergamon Press (1978).

- LANFORD, O. E., RUELLE, D., Comm.**Math. Phys.** 13, 194 (1969).
- LAPA,R.S. **Modelo de Heisemberg Quântico Ferromagnético Frustado Numa rede quadrada Anisotrópica.** Manaus, 2009. Dissertação (mestrado em Física)Universidade Federal do Amazonas.
- LI, M. S., WALASEK, K., CIEPLAK, M., **Phys. Rev. B** 56, 11715 (1997).
- LESSA, J.C., **Estudo de Propriedades Críticas de Sistemas de Spin de Ising Desordenados.** Rio de Janeiro, 2006. Tese(Doutorado em Física)- Universidade Federal do Rio de Janeiro.
- LYRA, M. L., SILVA, C. R. da,**Phys. Rev. B** 47, 526 (1993).
- MARTINS, D.C. **The Theory of Magnetism I.** Springer-Verlag, (1981).
- N.D.Mermin e H. Wagner, **Phys.Rev. Lett.**,17,1133-1136 (1966)
- MORÁN-LOPES, J. L., AGUILERA-GRAJA, F., SANCHEZ, J. M., **Phys. Rev. B** 48, 5 (1993).
- MORÁN-LOPEZ, J. L., AGUILERA-GRANJA, F., SANCHEZ, J. M., **J. Phys. Condens. Matter** 6, 9759 (1994).
- MORÁN-LOPEZ, J. L., AGUILERA-GRANJA, F., SANCHEZ, J. M., **Phys. Rev. B** 48, 3519 (1993).
- MORRIS,D.J.P, e autores, **Science** 326, 411 (2009).
- NAGAMIYA, T., NAGATOR, K., KITANO, Y., . **Theor. Phys.** 27, no 6, 1253 (1962).
- NAYA, S., **Prog. Theor. Phys.** 11, 53 (1954).
- NÉLL, 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.
- O'HARE, A., KUSMARTSEV, F. V., KUGEL, K. I., **Phys. Rev. B** 79, 014439 (2009).
- OLIVEIRA, Mário José de, **Termodinâmica.** São Paulo-SP: Editora Livraria da Física,(2005).
- OLIVEIRA, M.C. de, **J. Phys.** 47, 1107 (1986).
- OLIVEIRA, P. M. C. de, PENNA, T. J. P., **Physica A** 163, 458 (1990).
- ONSAGER,L.**Phys. Rev.**65,261,(1944).
- PACOBABHYBA, J. T. M.; **Modelos Magnéticos com Frustração e Diluição.** Tese de Doutorado em Física, UFSCar-Universidade Federal de São Carlos, 2006.

PADILHA, I. T. PACOBAHYBA, J. T. M., SOUSA, J. R. de, **Physica A** (2006).

PADILHA, I. T.; **Estudo das Propriedades Termodinâmicas no modelo de Ising aleatoriamente decorado com interações competitivas**. Dissertação de Mestrado em Física, UFAM-Universidade Federal do Amazonas, 2006.

PARENTE, W.E. Ferreira.; **Modelo de Heisenberg com interação Dzyaloshinski-moriya a campo magnético externo**. Dissertação de Mestrado em Física, UFRR-Universidade Federal de Roraima, 2009.

PARISI, G., **Statistical Field Theory**, Addison-Wesley, (1988).

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

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

RODRIGUES, G. J. B. **O Porquê de Estudarmos os Materiais Magnéticos**. Revista Brasileira de Ensino de Física, Porto Alegre-RS, vol. 20, n.4, p.315-320, dez.1998.

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

SALINAS, SÍLVIO R. A. **Introdução à Física Estatística**. São Paulo, ed. Universidade de São Paulo, 1999-(academia; 9)

SÁ BARRETO, F. C., FITTIPALDI, I. P., **Physica A** 129, 360 (1985).

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

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

SANTOS, R. J. V. dos, FITTIPALDI, I. P., ALSTRON, P., STANLEY, H. E., **Phys. Rev. B** 40, 4527(1989).

SANTOS, R. J. V. dos, FITTIPALDI, I. P., ALSTRON, P., STANLEY, H. E., **Phys. Rev. B** 40, 4527(1989).

SARMENTO, E. F., TSALLIS, C., **Phys. Rev. B** 27, 5784 (1983); KANEYOSHI, T., TAMURA, I., HONMURA, R., **Phys. Rev. B** 29, 2769 (1984).

SERGIO.**Ising**. UFRJ. disponível em: <http://www.if.ufrj.br/teaching/sergio/ising/ising.html>).

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

SILVA, Geisel Maia da, I. T. PACOBAHYBA, J. T. M.; **Estudo do Comportamento Crítico do Modelo de Ising, Frustrado, Aleatoriamente Decorado com Interação de Primeiros e Segundo vizinhos**. Dissertação de Mestrado em Física, UFRR-Universidade Federal de Roraima, 2010.

SIQUEIRA, A. F., FITTIPALDI, I. P., **Phys. Rev. B** 31, 6092 (1985); **Phys. Stat. Sol. B** 119, K31 (1983).

- SMART, J. S.; **Effective Field Theories os Magnetism** , Saunders, Philadelphia, 1966.
- SOUSA, J. R. de, ARAÚJO, I. G. de, J. **Mag. Mag. Mat.** 202, 231 (1999).
- SOUSA, J. R. de, ARAÚJO, I. G., **MAGN, J.** Mater 219, 355 (2000).
- SOUSA, J. R. de, FITTIPALDI, I. P., J. Appl. **Phys.** 75, 5835 (1994).
- STANLEY, H. E., **Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena** , Oxford University Press, New York, 1971.
- STANLEY, S.V.B., GOLDBERGER, A.L., GOLDBERGER, Z.D., HAVLIN, S., MANTEGNA, R.N., OSSADNIK, S.M., PENG, C.K., SIMONS, M., **Physica A** 205, 214 (1994).
- STINCHCOMBE, R. B., **Phase Transitions and Critical Phenomena**, Vol. 7, Editado por C. Domb e J. L. Lebowitz, Academic Press, (1983).
- STRECKA, J., JASCUR, M., MAGN, J. M., Mater 260, 415; **Phys. Rev. B** 66, 174415 (2002)
- SUZUKI, Mansuo, **Exponential Product Formulas and Quantum Analysis** , (University of Tokyo), 1996.
- SYOZI, I.; **in Phase Transition and Critical Phenomena** , edited by C. Domb and M. S. Green, (Academic Press, New York), Vol. I., 1972.
- TAHIR-KHELI R. A., **Phys. Rev.** 188, 1142 (1969);
- TAMURA, I., SARMENTO, E. F., FITTIPALDI, I. P., KANEYOSHI, T., **Phys. Stat. Solidi B.** 118, 409 (1983).
- TOULOUSE, G., Comm. **Phys.** 2, 115 (1977).
- TRANQUADA, J. M., et al., **Phys. Rev. Lett.** 60, 156 (1988)
- VAKNIN, D., et al., **Phys. Rev. Lett.** 58, 2802 (1987)
- VAKS, V. G., LARKIN, A. I., OVSCHINNIKOV, N., Sov. **Phys.** - JETP 22, 820 (1966).
- VIANA, J. R., SOUSA, J. R. de, **Phys. Rev. B** 75, 052403 (2007).
- WELLER, D., ALVARADO, S. F., GUDAT, W., SCHRODER, K., CAMPAGNA, M., **Phys. Rev. Lett** 54, 1555(1985).
- WIKIPEDIA.org disponível em: <http://pt.wikipedia.org/wiki/Magnetismo>.
- ZANGWILL, **Physics at Surfaces**, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1988.
- ZERNIKE, F., **Physica** 1, 565 (1940).
- ZHANG D., **Philosophical Magazine**, Vol. 87, No. 34, 1 December, 5309-5419, (2007) .