Universidade Federal de Santa Catarina Centro de Ciências Físicas e Matemáticas Departamento de Física Curso de Pós-Graduação em Física

MAGNETISMO EM DUAS DIMENSÕES DO MODELO DE HEISENBERG ANISOTRÓPICO

Dissertação submetida ao Curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Santa Catarina para obtenção do grau de Mestre em Ciências

por ·

Edson Eduardo Reinehr

Orientador:

Wagner Figueiredo

UFSC

Florianópolis, fevereiro de 1994

MAGNETISMO EM DUAS DIMENSÕES DO MODELO DE HEISENBERG ANISOTRÓPICO

EDSON EDUARDO REINEHR

Esta dissertação foi julgada adequada para obtenção do título de MESTRE EM CIÊNCIAS

especialidade Física e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós-Graduação.



Prof. Dr. Wagner Figueiredo - Orientador



Prof. Dr. Wagner Figueiredo - Coordenador do Curso

Banca Examinadora

Wook

Prof. Dr. Wagner Figueiredo (DF-UFSC) - Presidente

man for de Oliveir

Prof. Dr. Mário José de Oliveira (IF-USP)

Stall Sub-12

Prof. Dr. Nilton da Silva Branco (DF-UFSC)

Slowly the sail will lose sight of islands; into a mist will go the belief in harbours of an entire race.

The ten years war is finished. Helen's hair, a grey cloud. Troy, a white ashpit by the drizzling sea.

(D. Walcott)

Para minha mãe, meu pai e àqueles que com eles lutaram.

Para Nádia, irmã.

Para Carmem, Ronald, Antônio, Míriam, Jupira, Ronaldo, Elisa, Gilmar, Martiarena, Marcos, Yanko, Carol e Zazá que comigo dividiram um pequeno momento de suas vidas.

Agradecimentos

Ao Prof. Wagner Figueiredo, não só pela segura orientação, como pela sensível e generosa presença.

Aos Profs. Paulo César D'Ajello, Paulo C. Hauser e Joaquim N. B. de Moraes pelo apoio constante.

À Marta e Craco, cujo carinho levo comigo.

À Gilliam, pelas aulas de inglês e pelo café italiano.

À Sílvia, Chico, Elisete e Itamar que generosamente me acolheram em seu pequeno paraíso.

À Mércia, pela suave luz.

Aos colegas de pós-graduação que me acompanharam e auxiliaram ao longo deste curso.

À Sônia e aos demais funcionários do Departamento pela simpatia e carinho.

Aos agentes financiadores, CAPES e CNPQ.

RESUMO

Neste trabalho determinamos a dependência da magnetização em função da temperatura para o modelo de Heisenberg anisotrópico em duas dimensões, através do formalismo das funções de Green. Comparamos nossos resultados com os obtidos através de grupo de renormalização no espaço real e com resultados experimentais realizados em filmes finos. Também, neste trabalho, aplicamos o grupo de renormalização de campo médio para obter o diagrama de fases de um antiferromagneto diluído em um campo uniforme. Nossos resultados sugerem a presença de pontos tricríticos neste sistema.

ABSTRACT

In this work we calculate the magnetization as a function of temperature, for the anisotropic Heisenberg model in two dimensions, through the Green's function approach. We compare our results with those obtained through the real space renormalization group, and with experimental results performed on thin films. In this work, we also apply the mean field renormalization group to obtain the phase diagram of a dilute antiferromagnetic model in a uniform field. Our results suggest the presence of tricritical points in this system.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

FIGURAS

FIGURA 1 - Curvas da magnetização espontânea para o modelo de Heisenberg
anisotrópico18
FIGURA 2 - Temperatura crítica do ferromagneto de Heisenberg anisotrópico
em função do grau de anisotropia
FICURA 2 Magnetização normalizado nara um filmo forremecnótico de
FIGURA 3 - Magnetização normanizada para um nime terromagnetico de
Permailoy
FIGURA 4 - Blocos de um e dois spins no caso ferromagnético
FIGURA 5 - Bloco de dois spins no caso antiferromagnético
FIGURA 6 - Bloco de quatro spins no caso antiferromagnético 38
FIGURA 7 - Temperatura crítica (Tc) versus o campo crítico (Hc) através de
GRCM 1-2 para o antiferromagneto de Ising com d=3

TABELAS

- TABELA 1 Valores comparativos de temperatura crítica para o modelo de

 Heisenberg tridimensional

 16

SUMÁRIO

Agradecimentos	iv
Resumo	v
Abstract	vi
Lista de ilustrações	vii
CAPÍTULO I - INTRODUÇÃO	01
CAPÍTULO II - MODELO DE HEISENBERG ANISOTRÓPICO	
BIDIMENSIONAL	03
CAPÍTULO III - APLICAÇÃO DO GRCM AO ANTIFERROMAGNETO DE ISING DILUÍDO	22
CAPÍTULO IV - CONCLUSÕES	48
APÊNDICE - O MÉTODO DOS PONTOS ESPECIAIS	50
BIBLIOGRAFIA	61

ix

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

O estudo dos sistemas magnéticos de baixa dimensionalidade sempre despertou um grande interesse. Vários métodos tem sido empregados no estudo teórico destes sistemas. Expansões em séries de altas temperaturas ^[1], simulação de Monte Carlo ^[2], grupos de renormalização ^[3] e métodos de funções de Green ^[4] são alguns dos métodos mais frequentemente utilizados nestes estudos.

Nesta dissertação consideramos dois problemas distintos. No primeiro deles aplicamos o método das funções de Green para estudar o comportamento da magnetização, em função de temperatura, de um modelo de Heisenberg anisotrópico. Nosso objetivo em estudar este problema foi motivado por cálculos recentes empregando o grupo de renormalização no espaço real ^[5], que demonstram que, no limite de pequenas anisotropias, a magnetização em função da temperatura apresenta um comportamento peculiar. Esta peculiariedade se deve ao aparecimento de um platô nas curvas de magnetização em função da temperatura para o modelo de Heisenberg com anisotropia muito pequena . Os cálculos de grupo de renormalização têm como finalidade justificar os resultados experimentais de Mauri e colaboradores ^[6] para sistemas magnéticos quase bidimensionais. Embora estes autores afirmem que os cálculos baseados em ondas de spin não são capazes de explicar seus resultados experimentais , mostramos neste trabalho que isto se deve

essencialmente à interpretação que deve ser dada a essa região de temperaturas para sistemas quase bidimensionais. Nossos cálculos, válidos para todo o intervalo de temperaturas, se ajustam adequadamente aos resultados experimentais desses autores ^[6].

O segundo problema que consideramos nesta dissertação foi a aplicação do método de grupo de renormalização de campo médio (GRCM) ^[7] ao modelo de Ising antiferromagnético diluído na presença de um campo uniforme. Este modelo tem sido objeto de numerosas investigações experimentais ^[8] e teóricas ^[9]. Mostramos que este modelo apresenta características semelhantes ao de um ferromagneto em um campo aleatório, embora não possamos afirmar, categoricamente, que o extremo de nossa linha de transição de fases contínuas corresponda a um ponto tricrítico, pois isso pode ser devido à simplicidade do método utilizado.

Esta dissertação foi organizada da seguinte forma:

No capítulo II apresentamos o método das funções de Green aplicado ao modelo de Heisenberg anisotrópico. Apresentamos os resultados assintóticos obtidos na região de baixas temperaturas e comparamos nossos resultados com os obtidos pelo grupo de renormalização no espaço real ^[5] e diretamente com os experimentos em sistemas magnéticos quase-bidimensionais.

No capítulo III, o grupo de renormalização de campo médio (GRCM) é aplicado ao modelo de Ising antiferromagnético diluído na presença de um campo externo. Mostramos o diagrama de fases obtido com esse método, e discutimos a sua possível relação com o modelo de Ising em um campo aleatório.

No capítulo IV, apresentamos algumas conclusões obtidas neste trabalho.

Apresentamos ainda, no Apêndice, o método dos pontos especiais, um método muito eficiente para se computar somas de funções definidas na rede recíproca de sistemas cristalinos. Desenvolvemos os métodos apresentados por Chadi e Cohen ^[10] e Cunningham ^[11], de tal forma que podemos calcular somas na zona de Brillouin com um grande grau de precisão. Esses cálculos são aplicados diretamente no capítulo II, onde somas na zona de Brillouin são necessárias.

2

CAPÍTULO II

MODELO DE HEISENBERG ANISOTRÓPICO BIDIMENSIONAL

2.1 - MÉTODO DAS FUNÇÕES DE GREEN

As funções de Green são generalizações apropriadas do conceito de funções de correlação. Elas são médias estatísticas no ensemble gran-canônico de produtos de operadores na representação de Heisenberg e podem ser obtidas à partir de sua equação de movimento [12]. Tendo-se determinada esta função, podemos encontrar as funções de correlação que estão diretamente relacionadas com as grandezas termodinâmicas de interesse.

A função de Green retardada é definida pela seguinte expressão:

$$\langle\langle S_{\vec{g}}^{+}(t), S_{\vec{m}}^{-}(t')\rangle\rangle_{r} = G_{\vec{g},\vec{m}}^{r}(t,t') = -i\Theta(t-t')\left\{\langle S_{\vec{g}}^{+}(t)S_{\vec{m}}^{-}(t')\rangle - \langle S_{\vec{m}}^{-}(t')S_{\vec{g}}^{+}(t)\rangle\right\} \quad (2.1.1)$$

onde $\vec{g} e \vec{m}$ são dois pontos da rede, e a média é tomada no ensemble gran-canônico, e Θ é a função de Heavyside.

A equação de evolução para a função de Green retardada é dada por:

$$i\frac{d G_{\vec{g},\vec{m}}^{r}(t,t')}{d t} = \delta(t-t')\langle [S_{\vec{g}}^{+}(t),S_{\vec{m}}^{-}(t')]\rangle + \langle \langle [S_{\vec{g}}^{+}(t),H];S_{\vec{m}}^{-}(t')\rangle \rangle$$
(2.1.2)

Como $G_{\vec{g},\vec{m}}^{r}(t,t') = G_{\vec{g},\vec{m}}^{r}(t-t')$, podemos tomar a transformada de Fourier temporal desta função:

$$G_{\vec{g},\vec{m}}^{r}(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} G_{\vec{g},\vec{m}}^{r}(t-t') e^{iE(t-t')} d(t-t')$$
(2.1.3)

A função de Green retardada só está definida para os valores de energia cuja parte imaginária é positiva. Poderíamos também escrever a função de Green avançada $G_{\vec{g},\vec{m}}^a(E)$ para valores negativos da parte imaginária da energia E. Como as funções de Green retardada e avançada tem domínios complementares é possível definir uma função de Green válida para todo o plano complexo E, com exceção do eixo real [12]. Portanto, a equação para a transformada de Fourier da função de Green válida para todos os valores de E pode ser escrita na forma:

$$EG_{\vec{g},\vec{m}}(E) = \frac{1}{2\pi} \langle [S_{\vec{g}}^{+}(0), S_{\vec{m}}^{-}(0)] \rangle + \langle \langle [S_{\vec{g}}^{+}(t), H]; S_{\vec{m}}^{-}(0) \rangle \rangle_{E}$$
(2.1.4)

Esta é a equação de movimento da função de Green na representação de energia. Para encontrarmos a função de Green, com as quais podemos obter as funções de correlação do sistema, precisamos conhecer a forma explícita do Hamiltoniano do modelo.

2.2 - FUNÇÕES DE GREEN APLICADAS AO HAMILTONIANO DE HEISENBERG ANISOTRÓPICO

O Hamiltoniano de Heisenberg anisotrópico pode ser expresso convenientemente em termos dos operadores S_i^+ , S_i^- , S_i^z e é dado por:

$$H = -\sum_{i,j} W_{ij} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) - \sum_{i,j} J_{ij} S_i^z S_j^z - \mu h \sum_i S_i^z , \qquad (2.2.1)$$

onde W_{ij} é a constante de acoplamento de troca, J_{ij} representa uma anisotropia uniaxial no termo de acoplamento de troca, e h é um campo magnético externo e assumimos apenas interações entre spins primeiros vizinhos.

À partir das relações de comutação, válidas para os operadores de spin:

$$[S_i^+, S_j^-] = 2S_i^z \delta_{ij} \quad , \quad [S_i^-, S_j^z] = S_i^- \delta_{ij} \quad , \quad [S_i^+, S_j^z] = -S_i^+ \delta_{ij} \quad , \qquad (2.2.2)$$

podemos explicitar a relação de comutação entre S_g^+ e o Hamiltoniano:

$$[S_g^+, H] = -2\sum_i W_{ig} S_g^z S_i^+ - 2\sum_i J_{ig} S_i^z S_g^+ + \mu h S_g^+ \qquad , \qquad (2.2.3)$$

onde estamos impondo que $W_{ii} = J_{ii} = 0$, pois não consideramos interações entre spins no mesmo ponto da rede.

Introduzindo (2.2.3) no último termo de (2.1.4) obtemos uma expressão envolvendo funções de Green de três operadores:

$$\langle \langle [S_g^+,H]; S_m^+ \rangle \rangle = -2\sum_i W_{ig} \langle \langle S_g^z S_i^+; S_m^- \rangle \rangle + 2\sum_i J_{ig} \langle \langle S_i^z S_g^+; S_m^- \rangle \rangle + \mu h \langle \langle S_g^+; S_m^- \rangle \rangle \quad (2.2.4)$$

5

em

Um procedimento rigoroso para resolver a equação (2.1.4) exigiria que escrevêssemos a equação de movimento para cada uma das funções de Green de ordem superior, e as reintroduzíssemos na equação inicial, gerando assim uma cadeia infinita de equações acopladas. Diante desta dificuldade, vários autores ^[13,14] sugeriram aproximações de tal forma que fosse possível desacoplar esta cadeia infinita de equações. Um dos desacoplamentos mais conhecidos, e que utilizaremos neste trabalho, é a aproximação de fases aleatórias (RPA), proposta por Tyablikov ^[13], na qual são desprezadas as correlações entre as componentes-transversais e longitudinais dos operadores de spin em pontos distintos da rede. Então, podemos escrever que

$$\langle \langle S_g^z, S_i^+; S_m^- \rangle \rangle \approx \langle S_g^z \rangle \langle \langle S_i^+; S_m^- \rangle \rangle$$
(2.2.5)

Utilizando-se este desacoplamento a equação (2.2.4) apresenta apenas funções de Green de dois operadores:

$$\langle \langle [S_g^+, H]; S_m^- \rangle \rangle = -2\sum_i W_{ig} \langle S_g^z \rangle \langle \langle S_i^+; S_m^- \rangle \rangle + 2\sum_i J_{ig} \langle S_i^z \rangle \langle \langle S_g^+; S_m^- \rangle \rangle + \mu h \langle \langle S_g^+; S_m^- \rangle \rangle$$
(2.2.6)

Portanto, a equação (2.1.4) toma a seguinte forma:

$$\left(E - \mu h - 2\sum_{i} J_{ig} \langle S_i^z \rangle\right) G_{\vec{g}\vec{m}}(E) = \frac{1}{\pi} \langle S_g^z \rangle \delta_{\vec{g}\vec{m}} - 2 \langle S_g^z \rangle \sum_{i} W_{ig} G_{\vec{i}\vec{m}}(E)$$
(2.2.7)

Agora vamos definir a função de Green no espaço de momentos \vec{k} . Considerando que há simetria translacional na rede podemos tomar a transformada de Fourier da função de Green.

6

$$G_{\vec{g}\vec{m}}(E) = \langle \langle S_g^+, S_m^- \rangle \rangle_E = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} G_{\vec{k}}(E) e^{i\vec{k} \cdot (\vec{g} - \vec{m})} , \qquad (2.2.8)$$

onde N é o número de células unitárias e os vetores \vec{k} são vetores de onda bidimensionais na primeira zona de Brillouin. Na rede de Bravais, devido à simetria translacional, para qualquer ponto \vec{i} teremos :

$$\langle S_i^z \rangle = \langle S^z \rangle \tag{2.2.9}$$

7

A função delta pode ser expressa como:

$$\delta_{\vec{g}\vec{m}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}.(\vec{g}-\vec{m})} , \qquad (2.2.10)$$

e, se considerarmos que os acoplamentos de troca são isotrópicos, isto é, $W_{ij} = W e J_{ij} = J$, a equação (2.2.7) assume a forma:

$$\left(E - \mu h - 2z \langle S^z \rangle (J - W\gamma_{\vec{k}})\right) \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} G(\vec{k}) = \frac{1}{N\pi} \langle S_g^z \rangle \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{g} - \vec{m})} , \qquad (2.2.11)$$

onde

$$\gamma_{\vec{k}} = \frac{1}{z} \sum_{\vec{i}} e^{i\vec{k}.(\vec{i}-\vec{g})} , \qquad (2.2.12)$$

é o fator de estrutura da rede com z primeiros vizinhos mais próximos.

Resolvendo-se a equação (2.2.11) para $\vec{g} = \vec{m}$, teremos:

$$\left(E - \mu h - 2z \langle S^{z} \rangle (J - W \gamma_{\vec{k}})\right) G(\vec{k}) = \frac{\langle S^{z} \rangle}{\pi} , \qquad (2.2.13)$$

ou

$$G(\vec{k}) = \frac{\langle S^{z} \rangle}{\pi} \frac{1}{E - E_{\vec{k}}} , \qquad (2.2.14)$$

onde

$$E_{\vec{k}} = \mu h + 2z \langle S^z \rangle (J - W \gamma_{\vec{k}}) \qquad , \qquad (2.2.15)$$

são as energias de excitação das ondas de spin no sistema.

A função densidade espectral está relacionada com o salto da função de Green no eixo real. Ela pode ser definida como

$$J(E) = \frac{i}{\frac{E}{k_B T} - 1} \lim_{\varepsilon \to 0} \left\{ G(E + i\varepsilon) - G(E - i\varepsilon) \right\}$$
(2.2.16)

Levando-se em conta a eq. (2.2.14) podemos escrever que:

$$J(E) = \frac{i}{e^{\frac{E}{k_BT}} - 1} \lim_{\varepsilon \to 0} \left\{ \frac{1}{N\pi} \sum_{\vec{k}} \langle S^z \rangle \left(\frac{1}{E - E_{\vec{k}} + i\varepsilon} - \frac{1}{E - E_{\vec{k}} - i\varepsilon} \right) \right\}$$
(2.2.17)

Calculando-se este limite obtemos a seguinte expressão:

$$J(E) = \frac{2\pi}{e^{\frac{E}{k_b T}} - 1} \frac{1}{N\pi} \sum_{\vec{k}} \langle S^z \rangle \delta(E - E_{\vec{k}})$$
(2.2.18)

A função de correlação pode ser obtida fazendo-se a antitransformada de Fourier da função densidade espectral J(E):

$$\langle S^{-}(t)S^{+}(t')\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} J(E)e^{E/k_{B}T}e^{-iE(t-t')}dE$$
 (2.2.19)

Como estamos interessados apenas nas soluções de equilibrio, utilizaremos a função de correlação somente no caso t = t', e a denotaremos por $\langle S^-S^+ \rangle$

Por outro lado, pelas relações de comutação, pode-se mostrar que a função de correlação $\langle S^-S^+ \rangle$, para um sistema com spins S=1/2, se relaciona com a magnetização $\langle S^z \rangle$ na forma:

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{2} - \langle S^- S^+ \rangle$$
 (2.2.20)

Introduzindo-se a função de correlação e definindo-se:

$$\Phi = \frac{1}{N} \sum \frac{1}{e^{\beta E_{\vec{k}}} - 1}$$
, (2.2.21)

encontramos a seguinte expressão para a magnetização, quando o sistema estiver em equilíbrio,

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{1+2\Phi} \right) \tag{2.2.22}$$

Chamando-se $\langle S^z \rangle = \sigma$, e fazendo-se uma simples manipulação algébrica, a equação (2.2.22) pode ser rescrita como

$$\frac{1}{2\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \operatorname{coth}\left(\frac{\beta E_{\vec{k}}}{2}\right)$$
(2.2.23)

Se considerarmos o limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$) podemos transformar a soma em \vec{k} em uma integral na primeira zona de Brillouin, ou seja,

$$\frac{1}{2\sigma} = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{V}{N} \int_{ZB} \coth\left(\frac{\beta E_{\vec{k}}}{2}\right) d^2 \vec{k} \qquad , \qquad (2.2.24)$$

onde $E_{\vec{k}}$ é dada pela eq. (2.2.15). Podemos ainda escrever que,

9

$$\frac{1}{2\sigma} = \frac{v}{(2\pi)^2} \int_{ZB} \coth\left[\frac{\overline{h} + \sigma(1 - j_{\overline{k}})}{\tau}\right] d^2 \overline{k} \qquad , \qquad (2.2.25)$$

onde

$$\overline{h} = \frac{\mu h}{2zJ}$$
, $\tau = \frac{k_B T}{zJ}$, $j_{\overline{k}} = \frac{W}{J}\gamma_{\overline{k}}$ e $\nu = \frac{V}{N}$

representam, respectivamente, o campo externo reduzido, a temperatura reduzida, o fator de estrutura cristalina e o volume da célula unitária. A expressão (2.2.25) relaciona a magnetização o com a temperatura e com a estrutura do cristal. No entanto, esta é uma equação autoconsistente que não possui uma solução analítica. Nossos resultados numéricos são discutidos adiante. Analiticamente, podemos determinar apenas as expansões assintóticas em altas e baixas temperaturas.

2.3 - A MAGNETIZAÇÃO PARA BAIXAS TEMPERATURAS

Como vimos na seção anterior, a magnetização é dada por uma equação que não possui solução analítica. Para o caso de baixas temperaturas, isto é, quando for válida a condição

$$\overline{h} + \sigma(1 - j_{\overline{k}}) >> \tau \qquad , \qquad (2.3.1)$$

podemos expandir assintoticamente a expressão (2.2.25).

Expandindo-se a cotangente em série de potências para valores grandes de seu argumento, podemos rescrever (2.2.25) na forma:

$$\frac{1}{2\sigma} = 1 + \frac{\nu}{2\pi^2} \sum_{l=1}^{\infty} \exp\left(\frac{-2l\bar{h}}{\tau}\right) \int_{ZB} \exp\left[\frac{-2l\sigma(1-j_{\bar{k}})}{\tau}\right] d^2\bar{k} \qquad (2.3.2)$$

Vamos expandir também a exponencial dentro do fator $j_{\vec{k}}$ em uma série de potências. Desta forma a equação (2.3.2) torna-se:

$$\frac{1}{2\sigma} = 1 + \sum_{l=1}^{\infty} A_l \int_{ZB} \prod_{p=1} \exp \left[B_l \sum_j f^p(\vec{k}) \right] d^2 \vec{k} \qquad , \qquad (2.3.3)$$

onde

$$A_{l} = \frac{\nu}{2\pi^{2}} \exp\left(\frac{-2l}{\tau} \left[\bar{h} + \sigma\left(1 - \frac{W}{J}\right)\right]\right) , \qquad (2.3.4)$$
$$B_{l} = \frac{2l\sigma W}{\tau J} \qquad e \qquad f^{p}(\bar{k}) = \frac{1}{p!} [i\bar{k}.(\bar{j} - \bar{g})]^{p} .$$

Na rede quadrada, o fator de estrutura da rede é dado por:

11

$$\gamma_{\bar{k}} = \frac{1}{2} [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)]$$
 (2.3.5)

Assim, para a rede quadrada, se considerarmos a simetria existente, a equação (2.3.3) torna-se

$$\frac{1}{2\sigma} = 1 + \sum_{l=1}^{\infty} A_l \left(\frac{a}{2\pi}\right)^2 \int_{ZB} \prod_p \exp\left[\frac{2B_l}{(2p)!}(ia)^{2p} (k_x^{2p} + k_y^{2p})\right] dk_x \, dk_y$$
(2.3.6)

Vamos nos restringir em obter uma expressão para baixas temperaturas a campo nulo. Neste caso, após expandirmos adequadamente as exponenciais em série de potências de $k_x e k_y$, e realizando as integrais necessárias , obtemos a seguinte expansão assintótica:

$$\frac{1}{2\sigma} = 1 + \frac{1}{2\pi} \frac{2\tau'}{\sigma} \sum_{l} \frac{\exp[-l\alpha(\sigma)]}{l} + \frac{1}{2\pi} \frac{1}{2^{3}} \left(\frac{2\tau'}{\sigma}\right)^{2} \sum_{l} \frac{\exp[-l\alpha(\sigma)]}{l^{2}} + \frac{1}{2\pi} \frac{10}{2^{8}} \left(\frac{2\tau'}{\sigma}\right)^{3} \sum_{l} \frac{\exp[-l\alpha(\sigma)]}{l^{3}} + \frac{1}{2\pi} \frac{33}{2^{12}} \left(\frac{2\tau'}{\sigma}\right)^{4} \sum_{l} \frac{\exp[-l\alpha(\sigma)]}{l^{4}} + \dots$$
(2.3.7)

onde

$$\tau' = \frac{\tau}{1-\Delta}$$
 , $\alpha(\sigma) = \frac{2\sigma\Delta}{\tau}$ e $\Delta = 1 - \frac{W}{J}$

ou ainda,

$$\sigma = \frac{1}{2} - \frac{\tau'}{\pi} Z_1(\alpha) - \frac{1}{4\pi} \frac{{\tau'}^2}{\sigma} Z_2(\alpha) - \frac{5}{32\pi} \frac{{\tau'}^3}{\sigma^2} Z_3(\alpha) - \frac{1}{16\pi} \frac{33}{32} \frac{{\tau'}^4}{\sigma^3} Z_4(\alpha) - \dots , \quad (2.3.8)$$

onde

$$Z_n(\alpha) = \sum_{l} \frac{\exp[-l\alpha(\sigma)]}{l^n}$$
(2.3.9)

Para o caso em que a temperatura é muito baixa, isto é $\tau' \rightarrow 0$, e a magnetização reduzida tende a $\sigma \rightarrow \frac{1}{2}$, obtemos a seguinte expansão assintótica:

$$\sigma_1 = \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \tau' Z_1(\alpha_0) - \frac{1}{2\pi} \tau'^2 Z_2(\alpha_0) - \frac{5}{8\pi} \tau'^3 Z_3(\alpha_0) - \frac{33}{64\pi} \tau'^4 Z_4(\alpha_0) - \dots , \qquad (2.3.10)$$

onde

$$Z_n(\alpha_0) = \sum_l \frac{\exp(-\frac{l\Delta}{\tau})}{l^n} , \qquad \alpha_0 = \alpha(\frac{1}{2}) = \frac{\Delta}{\tau}$$
 (2.3.11)

Substituindo σ_1 na equação (2.3.8) temos uma segunda aproximação para a equação da magnetização. Se considerarmos que, para pequenos τ ', σ difere muito pouco de 1/2, valendo então a aproximação:

$$\sigma^{-n} = (\frac{1}{2} - x)^{-n} = 2^n (1 + 2nx + ...) \qquad , \qquad (2.3.12)$$

obtemos com essa substituição uma nova aproximação para a magnetização:

$$\sigma_{2} = \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \tau' Z_{1}(\alpha') - \frac{1}{2\pi} \tau'^{2} Z_{2}(\alpha') - \frac{5}{8\pi} \tau'^{3} Z_{3}(\alpha') - \frac{33}{64\pi} \tau'^{4} Z_{4}(\alpha')$$

$$- \frac{1}{\pi^{2}} \tau'^{3} Z_{2}(\alpha') Z_{1}(\alpha_{0}) - \frac{1}{2\pi^{2}} \tau'^{4} Z_{2}(\alpha') Z_{2}(\alpha_{0}) - \frac{5}{4\pi^{2}} \tau'^{4} Z_{3}(\alpha') Z_{1}(\alpha_{0}) - \dots$$
(2.3.13)

na qual

$$\alpha' = \alpha(\sigma_1) = \frac{2\sigma_1\Delta}{\tau}$$

Para efeitos de análise consideraremos apenas o termo dominante na temperatura da expansão anterior:

$$s_2 \approx \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \frac{\tau}{1 - \Delta} \sum_l \frac{\exp(\frac{-l\Delta}{\tau})}{l} - \dots$$
 (2.3.14)

Quando o sistema bidimensional possui anisotropia, a magnetização, próxima a τ = 0, decai exponencialmente com a temperatura. No entanto, para o sistema completamente isotrópico (Δ = 0), a expressão 2.3.14 torna-se:

$$\sigma_2 \approx \frac{1}{2} - \frac{\tau}{\pi} \sum_l \frac{1}{l} - \dots$$
 (2.3.15)

Esta série diverge para qualquer temperatura não nula não havendo pois magnetização para o modelo de Heisenberg bidimensional, o que está de acordo com o teorema de Mermin e Wagner [15]

O método que utilizamos pode ser aplicado a outras estruturas cristalinas. Se calcularmos a magnetização para uma rede cúbica simples, cujo fator de estrutura é dado por

$$\gamma_{\bar{k}} = \frac{1}{3} [\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)] , \qquad (2.3.16)$$

ela pode ser aproximada, no limite de baixas temperaturas, em primeira ordem, pela expansão

$$\sigma_2 \approx \frac{1}{2} - \left(\frac{3}{2\pi} \frac{\tau}{1-\Delta}\right)^{\frac{3}{2}} \sum_l \frac{\exp\left(\frac{-l\Delta}{\tau}\right)}{l^{\frac{3}{2}}} - \dots$$
 (2.3.17)

Para o caso do modelo de Heisenberg puro ($\Delta=0$) teremos:

$$\sigma_2 \approx \frac{1}{2} - \left(\frac{3\tau}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \sum_l \frac{1}{l^{\frac{3}{2}}} - \dots$$
 (2.3.18)

Se

Neste caso a série acima pode ser identificada com a função Zeta de Riemann, que converge para um valor finito e a magnetização decai na região de baixas temperaturas segundo a lei de Bloch.

2.4 - A MAGNETIZAÇÃO PRÓXIMA À TEMPERATURA CRÍTICA.

A expressão (2.2.25) pode ser aproximada no caso do argumento da cotangente hiperbólica ser muito pequeno, o que ocorre na região próxima à temperatura crítica do sistema. Neste caso a cotangente hiperbólica pode ser aproximada por uma série de potências. Se mantivermos termos até segunda ordem, a expressão (2.2.25) torna-se:

$$\sigma \approx \left[\frac{3\tau}{A}\left(1-\frac{\tau}{\tau_c}\right)\right]^{\frac{1}{2}} , \qquad (2.4.1)$$

onde τ_c é a temperatura crítica reduzida, dada por

e

$$\frac{1}{\tau_c} \approx \frac{\nu}{2\pi^2} \int_{ZB} \frac{1}{\left(1 - \frac{W}{J} \gamma_{\vec{k}}\right)} d^2 \vec{k} \qquad , \qquad (2.4.2)$$

$$A = \frac{v}{2\pi^2} \int_{ZB} (1 - \frac{W}{J} \gamma_{\vec{k}}) d^2 \vec{k}$$
 (2.4.3)

Como podemos ver pela equação (2.4.1), o método da equação de movimento da função de Green prevê, nas proximidades da transição de fases, um comportamento crítico para a magnetização semelhante ao previsto pelas teorias de campo médio, obtendo-se um expoente crítico $\beta = 1/2$. O valor da temperatura crítica τ_c não pode ser determinado analiticamente, mas podemos avaliar a integral (2.4.2) se a substituirmos por uma soma discreta sobre os pontos da rede recíproca, ou seja,

$$\frac{1}{\tau_c} \approx \frac{2}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\left(1 - \frac{W}{J} \gamma_{\vec{k}}\right)} \qquad , \qquad (2.4.4)$$

onde o fator de estrutura para as redes quadrada e cúbica são dados respectivamente por:

$$\gamma_{\vec{k}} = \frac{1}{2} [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] \quad e \quad \gamma_{\vec{k}} = \frac{1}{3} [\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)] \quad (2.4.5)$$

Estas temperaturas críticas podem ser avaliadas pelo método dos pontos especiais, que apresentamos no Apêndice desta dissertação. Na tabela 1 comparamos o valor de temperatura crítica obtido por este método para um sistema cúbico simples com outros valores encontrados na literatura.

	Aproximação	Expansões em	Grupo de	Função de Green
	de campo	séries de altas	renormalização Migdal -	
	médio	temperaturas [16]	Kadanoff ^[17]	
Heisenberg	1.0	0.56	0.52	0.66

Tabela 1: Valores comparativos de temperatura crítica para o modelo de Heisenberg tridimensional.

16

2.5 - A CURVA DA MAGNETIZAÇÃO X TEMPERATURA

Resolvendo autoconsistentemente a equação (2.2.25), podemos obter a curva da magnetização a campo nulo para diferentes parâmetros de anisotropia , desde o modelo de Heisenberg até o modelo de Ising. Observamos na figura 1 que , à medida que a anisotropia diminui, o sistema exibe um decaimento mais rápido para a magnetização, com uma temperatura crítica cada vez menor. De acordo com nossa expansão assintótica (eq. 2.3.15), no limite do sistema bidimensional completamente isotrópico a temperatura crítica deve ocorrer para $\tau_c = 0$. Embora não possamos realizar o cálculo para este sistema devido à divergência que ocorre na integral (2.2.25), as curvas obtidas para pequenos valores da anisotropia apontam nitidamente nesta direção.

Para grandes valores da anisotropia nossas curvas são semelhantes àquelas obtidas pelo método do grupo de renormalização no espaço real ^[5], muito embora, nas proximidades da transição de fases, encontramos um expoente crítico do tipo campo médio ($\beta = 1/2$). Por outro lado, para pequenos valores de anisotropia, a forma da curva de magnetização indica um decaimento contínuo até as proximidades da transição de fases, não apresentando um platô como o sugerido por esses autores.



FIGURA 1: Curvas de magnetização para o modelo de Heisenberg anisotrópico bidimensional, onde ($\Delta = 1 - W/J$) representa o grau de anisotropia. Curva A ($\Delta = 0.999$), B (0.8), C (0.4), D (0.1), E (0.01) e F (0.001).

Construímos também a curva de temperatura crítica em função da anisotropia para o modelo de Heisenberg anisotrópico bidimensional (figura 2) onde notamos que, para pequenos valores da anisotropia (W/J = 1.0), a temperatura crítica decai muito rapidamente para zero, resultado este previsto na literatura [15].



FIGURA 2: Temperatura crítica do ferromagneto de Heisenberg anisotrópico em função do grau de anisotropia

A fim de comparar nossos resultados com a literatura, determinamos a curva de magnetização relativa em função da temperatura reduzida obtida para nosso modelo para um sistema bidimensional com anisotropia Δ = 0.20. Comparamos nossos resultados com os relatados no trabalho de Mauri e colaboradores ^[6], que realizaram medidas no volume e em uma amostra de um filme bidimensional desacoplado de Permalloy de 1.6 monocamadas de espessura. Nossos resultados se ajustam razoavelmente bem em todo o intervalo de temperatura considerado, conforme podemos observar na figura 3. A razão entre as constantes de troca da superfície e do volume, J_s/J_b = 0.66, foi escolhida já que



FIGURA 3: Magnetização normaizada para um filme ferromagnético de Permalloy (1.6 monocamadas de espessura). A curva conyínua foi obtida através de funções de Green considerando-se $\Delta = 0.20$ e uma razão entre as constantes de acoplamento de troca de superfície e de volume J_s / J_v = 0.66. A linha pontilhada representa os resultados de grupo de renormalização de espaço real ⁽⁵⁾ ($\Delta = 0.20$; J_s / J_v = 0.70) e os quadrados representam os pontos experimentais.

Nossa expansão em baixas temperaturas (eq. 2.2.14), que é equivalente ao resultado de ondas de spin, não pode ser aplicada aos resultados experimentais de Mauri e colaboradores

20

[6]. O limite de aplicabilidade desta expansão, assim como o da teoria de ondas de spin, é de cerca de 25% da temperatura crítica. No entanto, a temperatura crítica do filme de Permalloy é avaliada por Mauri e colaboradores em aproximadamente 340 K, isto é, 40% da temperatura crítica de volume do material (870 K), enquanto que a mais baixa temperatura usada para realizar as medidas neste experimento é de 80 K, o que representa aproximadamente 25% da temperatura em que ocorre a transição de fases. Desta forma, a região de temperaturas na qual as medidas foram realizadas está além daquele em que se esperamos que a teoria de ondas de spin seja aplicável com sucesso. Por isto não acreditamos nos argumentos de Mauri e colaboradores, onde afirmam que a teoria de ondas de spin não é apropriada ao estudo dos sistemas bidimensionais em baixas temperaturas.

21

CAPÍTULO III

APLICAÇÃO DO GRCM AO ANTIFERROMAGNETO DE ISING DILUÍDO

3.1 - O GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO DE CAMPO MÉDIO

Embora útil como uma primeira abordagem de problemas em magnetismo, a aproximação clássica de campo médio freqüentemente fornece resultados , quando não qualitativamente errados, quantitativamente muito pobres. Uma gama enorme de outros métodos , com maior ou menor sucesso, foram desenvolvidos. Um destes métodos é o do grupo de renormalização.

A abordagem que utilizaremos aqui é a do grupo de renormalização recursivo por aproximações de campo médio (GRCM) ^[7]. Este método guarda muita semelhança com o grupo de renormalização fenomenológico ^[18], pois ambos se baseiam na comparação de blocos de tamanhos finitos, possibilitando a determinação de temperaturas críticas, embora não produzam um diagrama de fluxo no espaço de parâmetros

A proposta de trabalho do GRCM consiste em comparar parâmetros de ordem de dois sistemas finitos contendo $N \in N'$ spins na presença de condições de contorno que quebram a simetria. No caso ferromagnético, o parâmetro de ordem é a magnetização média dos blocos finitos e as condições de contorno são identificadas com os campos efetivos que envolvem estes sistemas.



FIGURA 4 : Blocos de um e dois spins no caso ferromagnético.

Dentro de cada bloco são computadas as flutuações de spin mas, em sua volta, considera-se que todo spin interage com determinado número de spins exteriores cuja magnetização é fixada como sendo igual ao campo efetivo b e b' (Figura 4). As funções magnetizações médias no interior dos blocos f_N (k,b,h) e $f_{N'}$ (k',b',h') se relacionam através de um fator de escala ε , tal que,

$$f_N(K,b,h) = \varepsilon^{(d-y_h)} f_{N'}(K',b',h') \qquad (3.1.1)$$

23

onde k e k' são as constantes de acoplamento, d é a dimensão espacial e y_h é o expoente crítico magnético.

Há uma certa arbitrariedade na escolha do comprimento de escala, mas uma escolha natural é:

$$\varepsilon = L/L' = (N/N')^{1/d} \qquad (3.1.2)$$

Se tivermos L/L' = 2, o GRCM guarda uma conexão formal com a aproximação de cumulantes em mais baixa ordem ^[7]. No caso de L/L' > 2, esta conexão desaparece.

Nas proximidades da transição de fases o parâmetro de ordem é muito pequeno e podemos expandir as funções $f_N(k,b,h) e f_{N'}(k',b',h')$. No caso ferromagnético e considerando-se um campo externo fraco, podemos escrever que:

$$f_{N'}(k',b',h') = f_{N'}(k_{c},0,0) + \frac{\partial f_{N'}(k',b',h')}{\partial b'} \bigg|_{k'=k_{c}} b' + \frac{\partial f_{N'}(k',b',h')}{\partial h'} \bigg|_{k'=k_{c}} h', \quad (3.1.3)$$

$$f_N(k,b,h) = f_N(k_c,0,0) + \frac{\partial f_N(k,b,h)}{\partial b} \bigg|_{k=k_c} b + \frac{\partial f_N(k,b,h)}{\partial h} \bigg|_{k=k_c} h \qquad (3.1.4)$$

Se introduzirmos as duas últimas expressões em (3.1.1) teremos:

e

$$\frac{\partial f_{N'}(k',b',h')}{\partial b'}\bigg|_{k=k_c} b' = \varepsilon^{(d-y_h)} \frac{\partial f_N(k,b,h)}{\partial b}\bigg|_{k=k_c} b \qquad (3.1.5)$$

$$\frac{\partial f_{N'}(k',b',h')}{\partial h'} \bigg|_{k=k_c} h' = \varepsilon^{(d-y_h)} \frac{\partial f_N(k,b,h)}{\partial h} \bigg|_{k=k_c} h \qquad (3.1.6)$$

A hipótese básica do GRCM é supor que os campos b e b' obedeçam à mesma relação de escala que $f_N(k,b,h) e f_{N'}(k',b',h')$. O campo externo se transforma de maneira usual. Portanto temos:

$$b = \varepsilon^{(d-y_h)}b'$$
 e $h = \varepsilon^{y_h}h'$. (3.1.7)

Levando-se as expressões (3.1.7) em (3.1.5) e (3.1.6) obtemos as relações de escala:

$$\frac{\partial f'_{N'}(k',b',h')}{\partial b'} \bigg|_{k'=k_c}^{b'\to 0} = \frac{\partial f_N(k,b,h)}{\partial b} \bigg|_{k=k_c}^{b\to 0} , \qquad (3.1.8)$$

$$\frac{\partial f'_{N'}(k',b',h')}{\partial h'} \Big|_{k'=k_c}^{h'\to 0} = \varepsilon^{(d-2y_h)} \frac{\partial f_N(k,b,h)}{\partial h} \Big|_{k=k_c}^{h\to 0}$$
(3.1.9)

A equação (3.1.8) com h=h'=0, pode ser vista como uma transformação do grupo de renormalização para o acoplamento k, e, desta forma, permite determinar o acoplamento crítico k_c . Os expoentes críticos y_h e y_t são dados respectivamente por:

avaliados para $k=k_c$, b=b'=0 e h=h'=0.

e

Para ilustrarmos o método, vamos aplicá-lo a um ferromagneto de Ising puro em uma rede quadrada (z = 4). Partindo-se dos hamiltonianos para blocos finitos de um e dois spins de um ferromagneto de Ising, dados respectivamente por

$$\beta H_1 = -ks_1(zb_1 + h) , \qquad (3.1.11)$$

$$\beta H_2 = -ks_1s_2 - k(s_1 + s_2)[(z-1)b_2 + h]$$

onde $b_1 e b_2$ são os campos de quebra de simetria, $k = J/k_B T > 0$ é a constante de acoplamento de troca termalizada e $h = h_0 / k_B T$ é o campo externo termalizado. Efetuando-se a soma sobre os estados possíveis do sistema finito é fácil mostrar que as magnetizações dos blocos são dadas por

$$m_{\rm l} = \tanh(4kb_{\rm l} + h)$$

$$m_2 = \frac{\operatorname{senh}(6kb_2 + h)}{\cosh(6kb_2 + h) + e^{-2k}}$$

Para campos fracos, podemos escrever que

e

$$\frac{\partial m_{l}}{\partial b_{l}}\Big|_{b_{1},h\to 0} = 4k \qquad , \qquad \frac{\partial m_{l}}{\partial h}\Big|_{b_{1},h\to 0} = 1 \qquad ,$$

$$\frac{\partial m_{2}}{\partial b_{2}}\Big|_{b_{2},h\to 0} = \frac{3ke^{k}}{\cosh(k)} \qquad , \qquad \frac{\partial m_{2}}{\partial h}\Big|_{b_{2},h\to 0} = \frac{e^{k}}{\cosh(k)} \qquad .$$

$$(3.$$

Levando-se estes resultados nas equações (3.1.8) e (3.1.9) e considerando que $\varepsilon = (L/L')^{1/2} = (2/1)^{1/2}$, obtemos os seguintes resultados:

 $k_c = 0.35$, $y_l = 0.60$, $y_h = 1.42$. (3.1.14)

Considerando-se o pequeno esforço com que foram obtidos estes valores, a comparação com os valores exatos [$k_c = 0.441$; $y_t = 1.0$; $y_h = 1.875$] estimula o uso deste método na investigação de outros sistemas magnéticos.

26

(3.1.12)

1.13)

3.2 - GRCM PARA O ANTIFERROMAGNETO DE ISING

O modelo mais simples de um antiferromagneto é o antiferromagneto de Ising, no qual os spins da rede interagem através de uma constante de acoplamento de troca J negativa, a qual favorece a orientação antiparalela entre spins primeiros vizinhos. Podemos também interpretar o sistema antiferromagnético como consistindo de duas subredes ferromagnéticas interpenetrantes, com magnetizações $m_1 e m_2$. Neste caso, nas proximidades da transição de fases, o parâmetro de ordem, isto é, a variável que vai a zero quando o sistema se aproxima da temperatura crítica, é a magnetização alternante, definida como:

$$m_s = (m_1 - m_2)/2$$
 , (3.2.1)

enquanto que a magnetização, variável não crítica do sistema, é dada por:

$$m = (m_1 + m_2)/2$$
 (3.2.2)

Dentro da abordagem do GRCM, o Hamiltoniano para o bloco finito de dois spins (ver figura 5) pode ser expresso como:

$$H = -Js_1s_2 - J(z-1)b_2s_1 - J(z-1)b_1s_2 - h_0(s_1 + s_2) \qquad , \qquad (3.2.3)$$

onde z é o número de coordenação da rede, h_0 é um campo externo e b_1 e b_2 são os campos efetivos de quebra de simetria nas duas subredes.

Podemos reescrever o Hamiltoniano mais adequadamente em função dos parâmetros, campo efetivo B e campo efetivo alternante b_{S_1} definidos como:

27

no

$$b_s = (b_1 - b_2)/2$$
 $B = (b_1 + b_2)/2$ (3.2.4)

Desta forma:

$$\beta H = -ks_1s_2 - k(z-1)[B(s_1+s_2) - b_s(s_1-s_2)] - h(s_1+s_2)$$
(3.2.5)

onde

$$k = J/(\kappa_B T)$$
 e $h = h_0/(\kappa_B T)$.

FIGURA 5 : Bloco de dois spins no caso antiferromagnético.

A função de partição para o sistema finito é facilmente obtida:

$$Z = \sum e^{-\beta H} = 2e^{+k} \cosh[2k(z-1)B + 2h] + 2e^{-k} \cosh[2k(z-1)b_s] , \quad (3.2.6)$$

onde a soma é realizada sobre os estados possíveis dos spins $s_1 e s_2$.

A magnetização m e a magnetização alternante m_s são obtidas através da função de partição, ou seja,

$$m = \frac{\sum_{1}^{1} (s_1 + s_2) e^{-\beta H}}{\sum_{1}^{1} e^{-\beta H}},$$
(3.2.7)

$$m = \frac{\operatorname{senh}[2k(z-1)B + 2h]e^{2k}}{e^{2k} \operatorname{cosh}[2k(z-1)B + 2h] + \operatorname{cosh}[2k(z-1)b_s]}$$

$$m_{s} = \frac{\sum \frac{1}{2}(s_{1} - s_{2})e^{-\beta H}}{\sum e^{-\beta H}}$$

 $m_{s} = \frac{\operatorname{senh}[-2k(z-1)b_{s}]}{e^{2k} \operatorname{cosh}[2k(z-1)B+2h] + \operatorname{cosh}[2k(z-1)b_{s}]}$

Próximo à transição de fases, o parâmetro de ordem m_s , assim como o campo efetivo b_s , tendem a zero. Podemos então expandir m_s em série de Taylor em torno da origem. Já em relação à magnetização m, isto não é possível, pois ela permanece finita na transição. Então, para um bloco de dois spins, podemos escrever que

$$m_{s}(k,B,b_{s},h) = m_{s}(k,B,0,h) + \frac{\partial m_{s}}{\partial b_{s}} \bigg|_{b_{s} \to 0} b_{s}$$

 $\frac{\partial m_s}{\partial b_s}\Big|_{b_s \to 0} = \frac{-2k(z-1)}{1 + e^{2k} \cosh[2k(z-1)B + 2h]}$

No caso de b_s pequeno, a magnetização pode ser aproximada por:

(3.2.9)

(3.2.8)

$$m_{b_s \to 0} = \frac{\operatorname{senh}[2k(z-1)B + 2h]e^{2k}}{1 + e^{2k} \operatorname{cosh}[2k(z-1)B + 2h]}$$
(3.2.10)

Para um bloco de um único spin teremos duas escolhas possíveis : ou o spin pertence à primeira ou à segunda subrede. Neste caso, para definirmos a magnetização alternante, faremos uma média sobre as duas possibilidades. Para os dois subsistemas antiferromagnéticos teremos os Hamiltonianos termalizados:

$$\beta H_1 = -kzb_2s_1 - hs_1$$
 e $\beta H_2 = -kzb_1s_2 - hs_2$ (3.2.11)

É fácil encontrar a magnetização de cada subrede:

$$m_1^{(1)} = \tanh(kzb_2 + h)$$
, (3.2.12)

$$m_2^{(1)} = \tanh(kzb_1 + h)$$
, (3.2.13)

onde o superescrito (I) significa bloco com um único spin.

e

A magnetização será dada como a média das expressões (3.2.12 e 3.2.13), enquanto que a magnetização alternante será definida como a semidiferença daquelas expressões. Nas proximidades da transição podemos escrever que

$$m^{(I)}_{b_s \to 0} = \frac{1}{2} (m^{(I)}_1 + m^{(I)}_2) = \frac{\operatorname{senh}[2kzB^{(I)} + 2h]}{1 + \cosh[2kzB^{(I)} + 2h]} , \qquad (3.2.14)$$

$$m_{s \ b_{s} \to 0}^{(I)} = \frac{1}{2} (m_{1}^{(I)} - m_{2}^{(I)}) = \frac{-2kzb_{s}}{1 + \cosh[2kzB^{(I)} + 2h]}$$
(3.2.15)

A aplicação do GRCM às equações (3.2.8 e 3.2.15) fornece a seguinte expressão:

$$\frac{(z-1)}{1+e^{2k_c}\cosh[2k_c(z-1)B^{(II)}+2h]} = \frac{z}{1+\cosh[2k_czB^{(I)}+2h]} , \qquad (3.2.16)$$

onde novamente os superescritos nos campos efetivos estão relacionados ao tamanho dos blocos.

A equação (3.2.16) só pode ser resolvida para o acoplamento crítico k_c para um dado valor do campo externo h_0 , se $B^{(I)} e B^{(II)}$, os campos efetivos definidos para os blocos de um e dois spins, forem conhecidos. Como não podemos determinar diretamente estes campos, vamos fazer uma aproximação. Vamos supor que os campos efetivos que envolvem os blocos sejam iguais às magnetizações dos respectivos blocos, ou seja, $B^{(I)} = m^{(I)}$ e $B^{(II)} = m^{(II)}$, o que equivale a fazer uma aproximação do tipo campo médio. Neste caso, as equações (3.2.10) e (3.2.14) tomam a forma:

$$B_{b_s \to 0}^{(II)} = \frac{\operatorname{senh}[2k(z-1)B^{(II)} + 2h]e^{2k}}{1 + e^{2k} \operatorname{cosh}[2k(z-1)B^{(II)} + 2h]} , \qquad (3.2.17)$$

$$B_{b_{s}\to 0}^{(I)} = \frac{\operatorname{senh}[2kzB^{(I)} + 2h]}{1 + \cosh[2kzB^{(I)} + 2h]} , \qquad (3.2.18)$$

e o sistema de equações (3.2.16 - 3.2.18) pode ser resolvido para um dado valor do campo externo h_0 .

Desta forma, é possível determinar o diagrama de fases no plano temperatura crítica versus o campo magnético externo para um modelo antiferromagnético de Ising na aproximação do GRCM. Este modelo é um caso especial de um antiferromagneto de Ising diluído, de forma que, quando tratarmos deste último modelo, discutiremos o diagrama de fases que se aplica a esta situação.

3.3 - O ANTIFERROMAGNETO DE ISING DILUÍDO

O antiferromagneto de Ising pode ser entendido como um sistema de spins localizados constituído de duas subredes interpenetrantes que possuem entre si um termo de interação J < 0, favorecendo orientações opostas dos spins vizinhos. O antiferromagneto de Ising diluído pode ser representado pelo Hamiltoniano:

$$H = -J \sum_{i,j} s_i s_j n_i n_j - h_0 \sum_i s_i n_i , \qquad (3.3.1)$$

onde n_i são variáveis de ocupação não correlacionadas, que podem assumir, em cada ponto da rede, os valores 0 ou 1. A média configuracional de ocupação $< n_i >$ é denominada p, que podemos chamar de concentração magnética.

Uma das representações mais simples para a distribuição de probabilidade de ocupação é a diluição tipo "quenched", isto é, uma representação na qual as médias configuracionais são independentes das médias térmicas. A probabilidade de ocupação de um ponto será escrita na seguinte forma:

$$P(n_i) = p\delta(n_i - 1) + (1 - p)\delta(n_i)$$
(3.3.2)

Há ainda um outro tipo de diluição na rede magnética, chamada de diluição de ligação, onde o termo de interação J_{ij} pode valer θ ou J. O Hamiltoniano e a distribuição de probabilidade podem ser representados, respectivamente, por: dos

$$H = -\sum_{i,j} J_{ij} s_i s_j - h_0 \sum_i s_i$$
$$P(J_{ij}) = p\delta(J_{ij} - J) + (1 - p)\delta(J_{ij})$$

(3.3.3)

e

Em quaisquer dos casos acima, para obtermos as variáveis relevantes do sistema diluído devemos integrá-las em relação às variáveis de ocupação. Ou seja, se tivermos uma variável $A(n_1, n_2, ..., n_i)$, o seu valor médio com respeito à sua distribuição de probabilidades é dada por:

$$\overline{A} = \int \dots \iint A(n_1, n_2, \dots, n_i) P(n_1, n_2, \dots, n_i) dn_1 dn_2 \dots dn_i \qquad (3.3.4)$$

No caso de não haver correlação entre as variáveis de ocupação n_i , a integral acima é de fácil resolução:

$$\overline{A} = \int P(n_i) dn_i \dots \int P(n_2) dn_2 \int A(n_1, n_2, \dots, n_i) P(n_1) dn_1 \qquad (3.3.5)$$

Na próxima seção recalcularemos a magnetização e a magnetização alternante para os blocos diluídos de um e dois spins, obtidos para o sistema puro na seção anterior, e calcularemos estes mesmos parâmetros para o bloco de quatro spins para obtermos um diagrama de fases da temperatura crítica versus o campo aplicado para os sistemas diluídos através do GRCM.

3.4 - O BLOCO DE DOIS SPINS DE UM ANTIFERROMAGNETO DE ISING DILUÍDO

Para um bloco de um antiferromagneto de Ising diluído com dois spins o Hamiltoniano pode ser descrito por:

$$\beta H = -ks_1s_2n_1n_2 - k(z-1)s_1n_1(B-b_s) - k(z-1)s_2n_2(B+b_s) - h(s_1n_1+s_2n_2) \qquad (3.4.1)$$

ou ainda como,

$$\beta H = -ks_1s_2n_1n_2 - [k(z-1)B + h](s_1n_1 + s_2n_2) + [k(z-1)b_s](s_1n_1 - s_2n_2) \qquad (3.4.2)$$

onde B, b_s , h e k estão definidos em (3.2.4) e em (3.2.5).

Efetuando-se a soma sobre os estados dos dois spins, encontramos a função de partição:

$$\sum e^{-\beta H} = 2 \left\{ e^{-kn_1n_2} \cosh[(n_1 - n_2)\mu_2 - (n_1 + n_2)\omega_2] + e^{kn_1n_2} \cosh[(n_1 + n_2)\mu_2 + (n_1 - n_2)\omega_2] \right\}$$
(3.4.3)

onde

$$\mu_2 = k(z-1)B + h$$
 e $\omega_2 = k(z-1)b_s$

A magnetização e a magnetização alternante são dadas por:

$$m^{(II)} = \frac{\sum_{1}^{1} (s_{1} + s_{2})e^{-\beta H}}{\sum_{1}^{1} e^{-\beta H}}$$

$$= \frac{\operatorname{senh}[(n_{1} + n_{2})\mu_{2} + (n_{1} - n_{2})\omega_{2}]}{e^{-2kn_{1}n_{2}} \cosh[(n_{1} - n_{2})\mu_{2} - (n_{1} + n_{2})\omega_{2}] + \cosh[(n_{1} + n_{2})\mu_{2} + (n_{1} - n_{2})\omega_{2}]}$$

$$m^{(II)}_{s} = \frac{\sum_{1}^{1} (s_{1} - s_{2})e^{-\beta H}}{\sum_{1}^{1} e^{-\beta H_{i}}}$$
(3.4.4)

$$= \frac{\sum_{k=1}^{\infty} (3.4.5)}{e^{-2kn_1n_2} \cosh[(n_1 - n_2)\mu_2 - (n_1 + n_2)\omega_2] + \cosh[(n_1 + n_2)\mu_2 + (n_1 - n_2)\omega_2]}$$

Para obtermos a magnetização alternante do sistema diluído precisamos integrar as expressões acima com relação à ocupação dos pontos da rede, conforme a prescrição (3.3.5):

$$\overline{m}_{s}^{(II)} = \int P(n_{2}) dn_{2} \int m_{s}(n_{1}, n_{2}) P(n_{1}) dn_{1} ,$$

$$\overline{m}_{s}^{(II)} = \int P(n_{2}) [pm_{s}(1, n_{2}) + (1 - p)m_{s}(0, n_{2})] dn_{2} , \qquad (3.4.6)$$

$$\overline{m}_{s}^{(II)} = p^{2}m_{s}(1, 1) + p(1 - p)[m_{s}(1, 0) + m_{s}(0, 1)] + (1 - p)^{2}m_{s}(0, 0)$$

Introduzindo-se a expressão (3.4.5) na expressão anterior, obtemos a magnetização alternante para o sistema antiferromagnético diluído com dois spins, ou seja:

$$\overline{m_s}^{(II)} = p^2 \frac{\operatorname{senh}(-2\omega_2)}{\cosh(2\omega_2) + e^{2k}\cosh(2\mu_2)} + p(1-p) \frac{\operatorname{senh}(-2\omega_2)}{\cosh(2\omega_2) + \cosh(2\mu_2)} \quad (3.4.7)$$

O mesmo procedimento pode ser seguido para obter-se a magnetização média do bloco diluído:

do

$$\overline{m}^{(II)} = \int P(n_2) dn_2 \int m(n_1, n_2) P(n_1) dn_1 ,$$

$$\overline{m}^{(II)} = p^2 m(1, 1) + p(1-p)[m(1, 0) + m(0, 1)] + (1-p)^2 m(0, 0) ,$$
(3.4.8)

$$\overline{m}^{(II)} = p^2 \frac{\operatorname{senh}(2\mu_2)e^{2k}}{\cosh(2\omega_2) + e^{2k}\cosh(2\mu_2)} + p(1-p)\frac{\operatorname{senh}(2\mu_2)}{\cosh(2\omega_2) + \cosh(2\mu_2)}$$
(3.4.9)

Nas proximidades da transição de fases, podemos aproximar as expressões (3.4.7) e (3.4.9) para:

$$\overline{m_s}^{(II)}_{b_s \to 0} = p^2 \frac{-2k(z-1)b_s}{1+e^{2k}\cosh(2\mu_2)} + p(1-p)\frac{-2k(z-1)b_s}{1+\cosh(2\mu_2)} \quad , \qquad (3.4.10)$$

$$\overline{m^{(ll)}}_{b_s \to 0} = p^2 \frac{\operatorname{senh}(2\mu_2)e^{2k}}{1 + e^{2k}\cosh(2\mu_2)} + p(1-p)\frac{\operatorname{senh}(2\mu_2)}{1 + \cosh(2\mu_2)} \qquad (3.4.11)$$

A derivada da magnetização alternante em relação ao campo efetivo alternante é:

$$\frac{\partial \overline{m_s}}{\partial b_s}^{(11)}{}_{b_s \to 0} = p^2 \frac{-2k(z-1)}{1+e^{2k}\cosh(2\mu_2)} + p(1-p)\frac{-2k(z-1)}{1+\cosh(2\mu_2)}$$
(3.4.12)

3.5 - O BLOCO DE UM ÚNICO SPIN DE UM ANTIFERROMAGNETO DE ISING DILUÍDO

Embora tenhamos que levar em consideração as duas subredes para o cálculo das magnetizações de um bloco de um único spin, cada bloco é composto por apenas um ponto da rede. Logo, o sistema tem uma probabilidade p do ponto estar ocupado e uma probabilidade (1-p) do ponto estar vazio. Então, conforme (3.2.14) e (3.2.15) teremos:

7

$$\overline{m^{(I)}}_{b_s \to 0} = \frac{p}{2} (m_1^{(I)} + m_2^{(I)}) = \frac{p \operatorname{senh} \left(2kzB^{(I)} + 2h \right)}{1 + \cosh(2kzB^{(I)} + 2h)} , \qquad (3.5.1)$$

$$\overline{m_s^{(I)}}_{b_s \to 0} = \frac{p}{2} (m_1^{(I)} - m_2^{(I)}) = \frac{p(-2kzb_s)}{1 + \cosh(2kzB^{(I)} + 2h)}$$
(3.5.2)

$$\frac{\partial m_s^{(I)}}{\partial b_s} = \frac{p}{2} (m_1^{(I)} - m_2^{(I)}) = \frac{p(-2kz)}{1 + \cosh(2kzB^{(I)} + 2h)} \qquad (3.5.3)$$

3.6 - O BLOCO DE QUATRO SPINS DE UM ANTIFERROMAGNETO DE ISING DILUÍDO

Um bloco de quatro spins de um antiferromagneto diluído (Figura 6) pode ser representado pelo Hamiltoniano termalizado:

$$\beta H_4 = -k(s_1n_1 + s_3n_3)(s_2n_2 + s_4n_4) - [k(z-2)B^{(IV)} + h](s_1n_1 + s_2n_2 + s_3n_3 + s_4n_4)$$
$$-k(z-2)b_s^{(IV)}(s_1n_1 + s_3n_3 - s_2n_2 - s_4n_4)$$
(3.6.1)

FIGURA 6 : Bloco de quatro spins no caso antiferromagnético.

A magnetização e a magnetização alternante podem ser obtidas através da soma sobre os estados possíveis dos quatro spins. Após determinarmos estas expressões, bastante extensas para reproduzí-las, precisamos integrá-las em relação às variáveis de ocupação, conforme a distribuição de probabilidade (3.3.5). A partir daí obtemos:

$$\overline{m^{(IV)}} = p^4 m^{(IV)}(1,1,1,1) + p^{(IV)}(1,0,1,1) + m^{(IV)}(1,0,1,1) + m^{(IV)}(1,1,0,1) + m^{(IV)}(1,1,1,0)] + p^2(1-p)^2 [m^{(IV)}(0,0,1,1) + m^{(IV)}(1,0,0,1) + m^{(IV)}(1,1,0,0) + m^{(IV)}(0,1,1,0) + m^{(IV)}(0,1,0,1) + m^{(IV)}(1,0,1,0)] + p(1-p)^3 [m^{(IV)}(0,0,0,1) + m^{(IV)}(1,0,0,0) + m^{(IV)}(0,1,0,0) + m^{(IV)}(0,0,1,0)]$$

(3.6.2)

Nas proximidades da transição de fases, a expressão anterior pode ser aproximada, quando $b_s \longrightarrow 0$, para:

$$\overline{m}^{(IV)} = p^{4} \frac{\operatorname{senh}(4\mu_{4})e^{4k} + 2\operatorname{senh}(2\mu_{4})}{\cosh(4\mu_{4})e^{4k} + 2 + e^{-4k} + 4\cosh(2\mu_{4})} + p^{3}(1-p) \frac{3\operatorname{senh}(3\mu_{4})e^{2k} + (2 + e^{-2k})\operatorname{senh}(\mu_{4})}{\cosh(3\mu_{4})e^{2k} + (2 + e^{-2k})\cosh(\mu_{4})}$$
$$p^{2}(1-p)^{2} \left[\frac{2\operatorname{senh}(2\mu_{4})}{e^{-2k} + \cosh(\mu_{4})} + \tanh(\mu_{4})\right] + p(1-p)^{3} \tanh(\mu_{4})$$

(3.6.3)

onde

$$\mu_4 = k(z-2)B^{(IV)} + h$$
, $k = \frac{J}{\kappa_B T}$ $e h = \frac{h_0}{\kappa_B T}$

De forma semelhante, a derivada da magnetização alternante em relação ao campo efetivo torna-se:

$$\frac{\partial \overline{m}_{s}^{(IV)}}{\partial b_{s}} \bigg|_{b_{s} \to 0} = -2k(z-2)p^{4} \left[\frac{2\left[e^{-4k} + 2\cosh(2\mu_{4})\right]}{\cosh(4\mu_{4})e^{4k} + 2 + e^{-4k} + 4\cosh(2\mu_{4})} \right] + p^{3}(1-p) \times \frac{\partial \overline{m}_{s}^{(IV)}}{\cosh(4\mu_{4})e^{4k} + 2 + e^{-4k} + 4\cosh(2\mu_{4})} = 0$$

$$\frac{4e^{-4k} + \cosh(4k) + 2 + 2e^{-2k} + 4(1 + 2e^{-2k})\cosh(2\mu_4) + (1 + 2e^{2k})\cosh(4\mu_4)}{\frac{1}{2}\cosh(6\mu_4)e^{4k} + (1 + 2e^{2k})\cosh(4\mu_4) + \cosh(2\mu_4)[3 + \frac{e^{-4k}}{2} + \cosh(2k)] + 2(1 + 2e^{-2k}) + \cosh(4k)}$$

$$+ p^{2}(1-p)^{2} \left[\frac{2}{1+e^{2k}\cosh(2\mu_{4})} + \frac{1}{1+\cosh(2\mu_{4})} \right] + p(1-p)^{3} \left[\frac{1}{1+\cosh(2\mu_{4})} \right]$$

(3.6.4)

onde

$$\mu_4 = k(z-2)B^{(IV)} + h$$
, $k = \frac{J}{\kappa_B T}$ $e h = \frac{h_0}{\kappa_B T}$

3.7- O GRCM PARA OS BLOCOS FINITOS DO ANTIFERROMAGNETO DE ISING DILUÍDO

Comparando-se as derivadas das magnetizações alternantes em relação aos campos efetivos dos blocos de um e dois spins, dadas pelas expressões (3.4.12 e 3.5.3), conforme a abordagem do GRCM, podemos escrever para o sistema diluído que :

$$\frac{pz}{1+e^{2k_c}\cosh(2\mu_1)} = p^2 \frac{(z-1)}{1+e^{2k_c}\cosh(2\mu_2)} + p(1-p)\frac{(z-1)}{1+\cosh(2\mu_2)} , \quad (3.7.1)$$

onde

$$\mu_1 = kzB^{(I)} + h$$
 e $\mu_2 = k(z-1)B^{(II)} + h$

Os campos efetivos em cada bloco são também dados por:

$$B^{(I)} = \frac{p \operatorname{senh}(2kzB^{(I)} + 2h)}{1 + \cosh(2kzB^{(I)} + 2h)} , \qquad (3.7.2)$$

$$B^{(II)} = p^2 \frac{\operatorname{senh}(2\mu_2)e^{2k}}{1 + e^{2k}\cosh(2\mu_2)} + p(1-p)\frac{\operatorname{senh}(2\mu_2)}{1 + \cosh(2\mu_2)}$$
(3.7.3)

A resolução simultânea deste sistema de três equações não lineares nos permite encontrar k_c , $B^{(I)} e B^{(II)}$ para uma dada concentração p e um dado campo externo h_0 . De forma semelhante, aplicando aos blocos de um e quatro spins o formalismo do GRCM podemos, a partir das equações (3.5.3 e 3.6.4), obter a relação de escala entre estes blocos:

$$\frac{\partial \overline{m}_{s}^{(I)}(p,B^{(I)},h,k)}{\partial b_{s}}\bigg|_{k=k_{c}}^{b_{s}\rightarrow0} = \frac{\partial \overline{m}_{s}^{(IV)}(p,B^{(IV)},h,k)}{\partial b_{s}}\bigg|_{k=k_{c}}^{b_{s}\rightarrow0} , \qquad (3.7.5)$$

que pode ser escrito como

$$\frac{pz}{1+e^{2k_c}\cosh(2\mu_1)} = (z-2)p^4 \left[\frac{2\left[e^{-4k_c}+2\cosh(2\mu_4)\right]}{\cosh(4\mu_4)e^{4k_c}+2+e^{-4k_c}+4\cosh(2\mu_4)}\right]$$

$$+p^{3}(1-p)\left[\frac{4e^{-4k_{c}}+\cosh(4k_{c})+2+2e^{-2k_{c}}+4(1+2e^{-2k_{c}})\cosh(2\mu_{4})+(1+2e^{2k_{c}})\cosh(4\mu_{4})}{\frac{1}{2}\cosh(6\mu_{4})e^{4k_{c}}+(1+2e^{2k_{c}})\cosh(4\mu_{4})+\cosh(2\mu_{4})[3+\frac{e^{-4k_{c}}}{2}+\cosh(2k_{c})]+2(1+2e^{-2k_{c}})+\cosh(4k_{c})}\right]$$

+
$$p^{2}(1-p)^{2}\left[\frac{2}{1+e^{2k_{c}}\cosh(2\mu_{4})}+\frac{1}{1+\cosh(2\mu_{4})}\right] + p(1-p)^{3}\left[\frac{1}{1+\cosh(2\mu_{4})}\right]$$
 (3.7.6)

Da mesma forma que para os blocos de um e dois spins, identificamos os campos efetivos $B^{(I)}$ e $B^{(IV)}$, respectivamente, com a magnetização $m^{(I)}$ (eq. 3.5.1) e $m^{(IV)}$ (eq. 3.6.3).

Analogamente, podemos também relacionar os blocos de dois e quatro spins conforme fizemos com os blocos de um e quatro spins. Na próxima seção apresentaremos os resultados obtidos para o diagrama de fases de um antiferromagneto diluído na presença de um campo magnético uniforme.

3.8 - O DIAGRAMA DE FASES

Determinamos o diagrama de fases no plano temperatura crítica versus campo para diversos valores da diluição do sistema antiferromagnético. Na figura 7 estamos considerando a aproximação de GRCM para os blocos de 1 e 2 spins (GRCM 1-2) em uma rede cúbica (z = 6). Este diagrama é obtido resolvendo-se autoconsistentemente as três equações (3.7.1 - 3.7.3).

Para o sistema sem diluição (p = 1), a transição entre as fases antiferromagnética e paramagnética é de segunda ordem. Esta curva é análoga à obtida por Bienenstock ^[19], utilizando expansões em séries de altas temperaturas. Entretanto, quando o sistema se torna diluído, observamos que as curvas correspondentes às transições contínuas terminam em um determinado ponto.

No formalismo do GRCM não podemos determinar as soluções que ocorrem para campos magnéticos maiores que os correspondentes a esses pontos. Acreditamos que possam representar pontos tricríticos. Esta conjectura é baseada no fato de que um antiferromagneto diluído na presença de um campo magnético uniforme é equivalente a um sistema ferromagnético na presença de um campo aleatório ^[20,21]. De acordo com Aharony ^[22], um ferromagneto em um campo aleatório exibe um ponto tricrítico no plano temperatura versus intensidade do campo aleatório. Por esta razão somos inclinados a acreditar que os pontos A, B e C em nosso diagrama de fases representam de fato pontos tricríticos.

43

FIGURA 7: Temperatura crítica (T_c) versus o campo crítico (h_c) através de GRCM 1-2 para o antiferromagneto de Ising diluído com d = 3. As linhas críticas são interrompidas para os sistemas diluídos. Os pontos A, B e C sugerem pontos tricríticos.

Mesmo que aumentemos o tamanho dos blocos os resultados obtidos são qualitativamente semelhantes àqueles representados na figura 7. Por exemplo, na figura 8, mostramos o diagrama de fases obtido na aproximação do GRCM para blocos de dois e quatro spins.

FIGURA 8: Temperatura crítica (T_c) versus o campo crítico (h_c) através de GRCM 2-4 para o antiferromagneto de Ising diluído com d = 3. As linhas críticas são interrompidas para os sistemas diluídos. Os pontos A, B e C representam extremos destas linhas.

Notamos ainda que, para valores da concentração p inferiores a um dado valor crítico, a temperatura crítica se reduz a zero, não havendo magnetização em nenhuma temperatura finita, indicando que atingimos o limiar de percolação do sistema. Este resultado não aparece quando consideramos uma aproximação de campo médio para blocos finitos. Isto pode ser observado na figura 9, onde mostramos a dependência da temperatura crítica em função da concentração, a campo nulo, nas aproximações de campo médio para um bloco de dois spins e do GRCM para blocos de um e dois spins. A concentração crítica de percolação que encontramos

45

para uma rede cúbica simples de um antiferromagneto de Ising utilizando o GRCM 2-4 foi $p_c = 0.20$, um pouco diferente do valor encontrado por Stinchcombe ^[23] para a mesma rede ($p_c = 0.31$).

FIGURA 9: Temperatura crítica (T_c) versus a concentração de sítios p para o antiferromagneto de Ising diluído com d = 3, a campo nulo, através de aproximação de campo médio para um bloco de dois spins (linha tracejada), e através de GRCM com blocos de dois e quatro spins (linha cheia).

Embora o GRCM não dê informações definitivas sobre o diagrama de fases global, ele nos permite obter informações qualitativamente melhores que aquelas determinadas por aproximações do tipo campo médio. As constantes de acoplamento crítico que obtivemos, quando comparadas com valores da literatura, são consideravelmente melhores que as obtidas por campo médio (ver tabela 2).

dimensão	campo médio (1 spin)	campo médio (4 spin)	GRCM 1-2	GRCM 2-4	valores de K _c obtidos por outros métodos
d=2	0.250	0.286	0.346	0.369	0.441 *
d=3	0.166	0.176	0.202	0.205	0.214 **

Tabela 2 : Constantes de acoplamento críticas obtidas para antiferromagneto de lsing puro (p=1) na ausência de campo externo através de aproximação de campo médio e de GRCM. (* valor exato - ** expansão em séries ^[24]).

CAPÍTULO IV

CONCLUSÕES

Nesta dissertação determinamos o comportamento da magnetização em função da temperatura para o modelo de Heisenberg anisotrópico , através do formalismo das funções de Green. Mostramos que, para pequenos valores da anisotropia, as curvas de magnetização não apresentam nenhum platô, ao contrário das previsões do grupo de renormalização no espaço real. No limite de baixas temperaturas , a magnetização decai exponencialmente com a temperatura e , em particular, a temperatura crítica se toma nula no caso do modelo de Heisenberg bidimensional. Os resultados obtidos foram comparados com medidas recentes determinadas para filmes ferromagnéticos. Mostramos também que, com a utilização do método das funções de Green, é possível descrever o comportamento da magnetização para todos os valores de temperatura, muito embora, nas vizinhanças do ponto crítico, o expoente $\dot{\beta}$ da magnetização seja igual ao obtido através de cálculos de campo médio. Entretanto, na região de temperaturas bem inferiores à temperatura crítica, as expansões assintóticas obtidas são as mesmas que as obtidas pela teoria de ondas de spin. Infelizmente, as medidas experimentais obtidas para os filmes finos estão acima do intervalo de temperatura onde se supõe que as expansões em ondas de spin possam ser aplicadas.

Ainda neste trabalho, determinamos o diagrama de fases de um modelo de Ising antiferromagnético diluído na presença de um campo uniforme, através do grupo de renormalização de campo médio. Com este método não fomos capazes de determinar o diagrama de fases global, visto que a aplicação do grupo de renormalização de campo médio é restrita às transições de fases contínuas. Entretanto, devido à equivalência entre o modelo de Ising antiferromagnético diluído em um campo uniforme e o modelo de Ising ferromagnético em um campo aleatório, acreditamos que os pontos extremos das linhas de transição de fases contínuas possam representar pontos tricríticos.

APÊNDICE A

MÉTODO DOS PONTOS ESPECIAIS

Muitos cálculos em cristais envolvem médias sobre a zona de Brillouin de funções periódicas do vetor de onda. Para se obter uma precisão razoável nestes cálculos é necessário, em geral, conhecer o valor da função sobre um grande número de pontos.

Chadi e Cohen ^[10] e também Cunningham ^[11] desenvolveram um processo no qual um resultado bastante preciso é obtido fazendo-se uma soma sobre um pequeno número de pontos, ditos pontos especiais.

A.1 - GERAÇÃO DOS PONTOS ESPECIAIS

No trabalho de Chadi e Cohen ^[10], é desenvolvido um método para gerar um conjunto sucessivo de pontos especiais. Vamos nos restringir às funções periódicas que variam suavemente.

Uma função periódica do vetor de onda pode ser escrita em série de Fourier como:

$$\overrightarrow{g(k)} = f_0 + \sum_{m=1}^{\infty} g_m e^{i \overrightarrow{k} \cdot \overrightarrow{R_m}}$$
(A.1.1)

Se usarmos a simetria completa da rede podemos construir uma função $f(\vec{k})$, a partir de $g(\vec{k})$, ou seja,

$$f(\vec{k}) = \frac{1}{n_l} \sum_{i,j} g(T_i \vec{k}) \qquad , \qquad (A.1.2)$$

onde T_i representa cada uma das operações de simetria do grupo puntual da rede e n_i é o número de elementos em T. Então

$$\vec{f(k)} = f_0 + \sum_{n=1}^{\infty} f_m A_m(\vec{k})$$
, (A.1.3)

onde

$$A_m(\vec{k}) = \sum_{\substack{k \in R \\ |\vec{k}| = C_m}} e^{i \vec{k} \cdot \vec{R}} , \quad \text{com } m = 1, 2, \dots \quad (A.1.4)$$

A soma em (A.1.4) se realiza sobre os vetores equivalentes da rede \bar{R} , que estão relacionados entre si através das operações de simetria de T. Os vetores são ordenados de modo que $0 < C_m < C_{m+1}$.

A equação (A.1.4) associa a cada $A_m(k)$ um conjunto de vetores dentro da m-ésima "concha" da rede direta. Os $A_m(k)$ são funções reais escolhidas de modo a satisfazerem as seguintes condições [10]:

$$\frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_{ZB} A_m(\vec{k}) d^3 k = 0 , \quad m = 1, 2, .. , \quad (A.1.5)$$

$$\frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_{ZB} A_m(\vec{k}) A_n(\vec{k}) d^3k = N_n \delta_{mn} \qquad , \qquad (A.1.6)$$

$$\overrightarrow{A_m(k+g)} = A_m(k) \qquad , \qquad (A.1.7)$$

$$A_m(T\vec{k}) = A_m(\vec{k}) , \qquad (A.1.8)$$

$$A_{m}(\vec{k})A_{n}(\vec{k}) = \sum_{j} a_{j}(m,n)A_{j}(\vec{k}) , \qquad (A.1.9)$$

$$A_0(\vec{k}) = 1$$

onde

e

 Ω é o volume da célula primitiva,

 N_n é o número de vetores da rede dentro da n-ésima "concha" na rede,

G é qualquer vetor da rede recíproca,

T_i é um elemento do grupo puntual T,

 $a_j(n,m)$ são coeficientes inteiros que podem ser determinados por uma escolha específica de $n \in m$.

Geralmente queremos obter um valor médio \tilde{f} sobre a zona de Brillouin (ZB), o que exige o cálculo de uma integral sobre a rede recíproca:

$$\bar{f} = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_{ZB} f(\vec{k}) d^3 \vec{k} = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int [f_0 + \sum_{m=1}^{\infty} f_m A_m(\vec{k})] d^3 \vec{k}$$
(A.1.10)

Devido a condição (A.1.5) a expressão acima se resume a $\overline{f} = f_0$. O método dos pontos especiais consiste em encontrar um ponto ou um conjunto de pontos $\vec{k_i}$ da rede que maximizem o número de $A_m(\vec{k})$ que se anulam. Como os coeficientes f_m decrescem rapidamente com o aumento de *m*, a avaliação do valor da função $f(\vec{k_i})$ sobre estes pontos $\vec{k_i}$ dará uma aproximação com bastante precisão para f_0 . A média na zona de Brillouin da função $g(\vec{k})$, definida na eq. (A.1.1), é obviamente também igual a f_0 , ou seja, $\vec{g} = \vec{f} = f_0$.

Se obtivéssemos um único ponto \vec{k}_0 tal que $A_m(\vec{k}_0) = 0$ para m = 1, 2, ..., N e $N \rightarrow \infty$, então, da eq. (A.1.3), teríamos que $\bar{f} = f_0 = f(\vec{k}_0)$. Infelizmente este ponto ideal não existe. Por outro lado, sabemos que normalmente os coeficientes f_m decrescem rapidamente com o aumento de *m*. Desta forma, se encontrarmos um ponto, ou um conjunto de pontos, que maximizam o número de $A_m(\vec{k})$ que se anulam, poderemos determinar f_0 com bastante precisão.

Vamos impor as seguintes condições para os pontos k_i e seus fatores peso α_i :

$$\sum_{i=1}^{N} \alpha_i A_m(\vec{k}_i) = 0 \qquad , \qquad (A.1.11)$$

$$\sum_{i=1}^{N} \alpha_i = 1 , \qquad (A.1.12)$$

onde $N \neq 0$ maior *m* para o qual a equação A.1.11 \neq satisfeita.

Podemos escrever então, a partir das eqs. A.1.11, A.1.12 e A.1.3, que:

$$f_0 = \sum_{i=1}^N \alpha_i f(\vec{k}_i) - \sum_{m>N}^\infty f_m \sum_{i=1}^N \alpha_i A_m(\vec{k}_i) = 1$$

 $\sum_{i=1}^{N} \alpha_i A_m(\vec{k}_i) = 0$

pois para
$$m < N$$

Então, se acharmos um conjunto de $\{k_i\}$ e $\{\alpha_i\}$ para os quais N é muito grande, o segundo termo tende a ser muito pequeno, pois f_m decresce rapidamente com o aumento de m. Neste caso, poderíamos escrever, para N suficientemente grande, que

$$f_0 = \sum_{i=1}^n \alpha_i f(\vec{k_i}) \tag{A.1.14}$$

Esta é uma expressão simples para calcular f_0 . Tudo o que precisamos fazer é calcular \vec{f}_i , para alguns dos valores de \vec{k}_i que satisfaçam (A.1.11).

Suponhamos que os pontos $\vec{k_1}$ e $\vec{k_2}$ satisfaçam $A_m(\vec{k}) = 0$ para determinados valores de *m* denotados por $\{N_1\}$ para $\vec{k_1}$ e $\{N_2\}$ para $\vec{k_2}$. A partir destes dois pontos podemos encontrar um novo conjunto de pontos $\vec{k_i}$ que satisfazem a eq. (A.1.1), para valores de *m* tanto de $\{N_1\}$ quanto de $\{N_2\}$. Estes novos pontos estão relacionados a $\vec{k_1}$ e $\vec{k_2}$ através da relação [10]:

$$\overrightarrow{k_i} = \overrightarrow{k_1} + \overrightarrow{T_i} \overrightarrow{k_2} , \qquad (A.1.15)$$

onde T_i é cada uma das operações do grupo puntual da rede. É fácil mostrar que os novos pontos $\overrightarrow{k_i}$ obtidos podem ser usados para se obter um conjunto ainda maior de pontos especiais. O peso para cada ponto é dado por

(A.1.13)

(A.1.16)

onde n_i é o número de vetores de onda diferentes (não relacionados por um vetor da rede recíproca) obtidos quando é aplicado cada elemento do grupo puntual T_i sobre o ponto $\vec{k_i}$.

Resumidamente o método para se achar pontos especiais se desenvolve do seguinte modo:

- Escolhemos $\vec{k_1}$ de modo que $\{N_I\}$ seja o maior possível, e que inclua a primeira região.

-Determinamos a primeira função $A_m(\vec{k}_1) = 0$ não nula.

- Escolhemos $\overrightarrow{k_2}$ que zere a função $A_m(\overrightarrow{k_1})$, e a maior quantidade possível de $\overrightarrow{A_m(\overrightarrow{k})}$ superiores.

- Aplicamos a equação (A.1.15) e geramos o conjunto dos pontos especiais.

- Repetimos este processo à partir do segundo passo, e encontramos conjuntos de pontos de qualquer tamanho, que nos darão uma avaliação cada vez mais precisa de f_0

A.2 - GERAÇÃO DOS PONTOS ESPECIAIS PARA A REDE QUADRADA

O procedimento acima pode ser aplicado a qualquer tipo de rede cristalina. Neste trabalho estamos interessados em gerar pontos especiais na rede quadrada e na rede cúbica simples. A seguir, apresentamos a sequência de passos necessária para se obter um número tão grande quanto se queira de pontos especiais para estas redes.

Na rede quadrada, os vetores unitários da rede são:

$$\vec{a}_1 = a(1,0)$$
 ; $\vec{a}_2 = a(0,1)$; $\vec{R} = a(l,n)$, (A.2.1)

enquanto que os vetores unitários da rede recíproca podem ser expressos como:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(1,0)$$
 e $\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(0,1)$ (A.2.2)

A função $A_m(\vec{k})$ assume a seguinte forma para a rede quadrada:

$$\overrightarrow{A_m(k)} = 2\cos[a(k_x l + k_y n)] \qquad (A.2.3)$$

Para o vetor $\vec{R} = \vec{a}_2 = a(0,1)$ teremos $A_m(\vec{k}) = 0$ apenas se

$$\vec{k}_{m}(\vec{k}) = 2\cos[a(k_{x}0+k_{y}1)] = 0$$
, ou seja $k_{y} = \frac{\pi}{2a}$. (A.2.4)

De forma semelhante, para o vetor unitário $\vec{R} = \vec{a}_1 = a(1,0)$ teremos $A_m(\vec{k}) = 0$,

apenas se

$$\vec{A_m(k)} = 2\cos[a(k_x 1 + k_y 0)] = 0$$
, ou seja $k_x = \frac{\pi}{2a}$ (A.2.5)

Logo, o primeiro ponto especial no espaço de momentos é: $\vec{k}_1 = \frac{\pi}{a}(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$.

Agora, à partir deste ponto, a função $A_m(\vec{k}_1)$ torna-se nula para todo $\vec{R} = a(l,n)$ em que a soma l + n seja impar.

O primeiro ponto para o qual $A_m(\vec{k}_1)$ é não nulo ocorre para $\vec{R} = a(2,0)$ Então podemos determinar um segundo ponto gerador, usando o mesmo procedimento anterior. Este ponto é $\vec{k}_2 = \frac{\pi}{a}(\frac{1}{4}, \frac{1}{4})$. Este segundo ponto gerador anulará a função $A_m(\vec{k}_2)$ para todos os pontos $\vec{R} = a(l,n)$ onde $\frac{l+n}{2}$ é impar.

À partir de $\overrightarrow{k_1}$ e $\overrightarrow{k_2}$ podemos obter o conjunto de pontos especiais através da relação (A.1.15). As operações T_i para o grupo puntual da rede quadrada são quatro:

$$T_i = \{(1,1); (-1,1); (1,-1); (-1,-1)\}$$
(A.2.6)

Aplicando estas operações aos pontos geradores segundo a eq. (A.1.15) teremos quatro pontos especiais:

$$\vec{k}_{i}^{(1)} = \frac{\pi}{a} (\frac{3}{4}, \frac{3}{4}) , \quad \vec{k}_{i}^{(2)} = \frac{\pi}{a} (\frac{3}{4}, \frac{1}{4})$$

$$\vec{k}_{i}^{(3)} = \frac{\pi}{a} (\frac{1}{4}, \frac{3}{4}) , \quad \vec{k}_{i}^{(4)} = \frac{\pi}{a} (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}) .$$
(A.2.7)

Na realidade, temos três pontos especiais independentes, pois $k_i^{(2)}$ é equivalente a $\rightarrow^{(3)}$ k_i , com os seguintes pesos:

57

$$\vec{k}_{i}^{(1)} = \frac{\pi}{a} (\frac{3}{4}, \frac{3}{4}) , \quad \alpha_{i}^{(1)} = \frac{1}{4} ; \quad \vec{k}_{i}^{(2)} = \vec{k}_{i}^{(3)} = \frac{\pi}{a} (\frac{3}{4}, \frac{1}{4}) , \quad \alpha_{i}^{(2)} = \frac{2}{4} ;$$

$$\vec{k}_{i}^{(4)} = \frac{\pi}{a} (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}) , \quad \alpha_{i}^{(4)} = \frac{1}{4} .$$

(A.2.8)

A primeira região na qual $A_m(\vec{k}_2)$ é diferente de zero ocorre para $\vec{R} = a(0,4)$ Neste caso, repetindo-se o procedimento anterior, encontramos novo ponto gerador $\vec{k}_3 = \frac{\pi}{a}(\frac{1}{8}, \frac{1}{8})$. Este ponto é tal que anula todos os $A_m(\vec{k}_3)$ para os quais $\frac{l+n}{4}$ é ímpar.

Combinando-se este novo ponto gerador com os pontos especiais \vec{k}_i dados em (A.2.8) através das operações de simetria:

$$\vec{k_j} = \vec{k_i} + T_j \vec{k_3}$$
 (A.2.9)

podemos gerar mais 16 pontos especiais. Desta forma obtemos:

$$\overrightarrow{k}_{j}^{(1)} = \frac{\pi}{a} (\frac{1}{8}, \frac{1}{8}) , \quad \overrightarrow{k}_{j}^{(2)} = \frac{\pi}{a} (\frac{1}{8}, \frac{3}{8}) , \quad \overrightarrow{k}_{j}^{(3)} = \frac{\pi}{a} (\frac{3}{8}, \frac{5}{8}) , \quad \overrightarrow{k}_{j}^{(4)} = \frac{\pi}{a} (\frac{3}{8}, \frac{7}{8}) ,$$

$$\overrightarrow{k}_{j}^{(5)} = \frac{\pi}{a} (\frac{3}{8}, \frac{3}{8}) , \quad \overrightarrow{k}_{j}^{(6)} = \frac{\pi}{a} (\frac{3}{8}, \frac{1}{8}) , \quad \overrightarrow{k}_{j}^{(7)} = \frac{\pi}{a} (\frac{5}{8}, \frac{3}{8}) , \quad \overrightarrow{k}_{j}^{(8)} = \frac{\pi}{a} (\frac{7}{8}, \frac{3}{8}) ,$$

$$\overrightarrow{k}_{j}^{(9)} = \frac{\pi}{a} (\frac{5}{8}, \frac{5}{8}) , \quad \overrightarrow{k}_{j}^{(10)} = \frac{\pi}{a} (\frac{1}{8}, \frac{5}{8}) , \quad \overrightarrow{k}_{j}^{(11)} = \frac{\pi}{a} (\frac{1}{8}, \frac{7}{8}) , \quad \overrightarrow{k}_{j}^{(12)} = \frac{\pi}{a} (\frac{5}{8}, \frac{7}{8}) ,$$

$$\overrightarrow{k}_{j}^{(13)} = \frac{\pi}{a} (\frac{7}{8}, \frac{7}{8}) , \quad \overrightarrow{k}_{j}^{(14)} = \frac{\pi}{a} (\frac{5}{8}, \frac{1}{8}) , \quad \overrightarrow{k}_{j}^{(15)} = \frac{\pi}{a} (\frac{7}{8}, \frac{1}{8}) , \quad \overrightarrow{k}_{j}^{(16)} = \frac{\pi}{a} (\frac{7}{8}, \frac{5}{8}) .$$

(A.2.10)

Estes pontos, exceto os da primeira coluna, são equivalentes dois a dois, o que nos fornece efetivamente dez pontos especiais. Os quatro pontos diagonais $\frac{\pi}{a}(\frac{i}{8},\frac{j}{8})$ tem peso $\alpha_{ii} = \frac{1}{16}$, enquanto os outros seis pontos $\frac{\pi}{a}(\frac{i}{8},\frac{j}{8})$, $\cos i \neq j$ tem peso $\alpha_{ij} = \frac{2}{16}$. Estes conjuntos de pontos nos garantem que $A_m(\vec{k}_3) = 0$ até $\vec{R} = a(8,0)$.

Se quisermos obter um resultado ainda mais preciso deveremos encontrar um novo ponto gerador \vec{k}_4 , e obter um novo conjunto de 64 pontos especiais que anulem $A_m(\vec{k}_4)$ até $\vec{R} = a(16,0)$.

Genericamente, para a rede quadrada, podemos obter qualquer número de pontos especiais, dependendo da aproximação desejada. Se quisermos um resultado com uma precisão $\varepsilon \approx \frac{3}{2.2^{2N}}$ teremos que usar $2^{N-2} (2^{N-1}+1)$ pontos especiais. Cada ponto especial poderá ser

escrito na forma

$$\frac{\pi}{a}(\frac{i}{2^N},\frac{j}{2^N}) , \text{ onde } i \le j \quad e \quad i, j = 1,3,5...,(2^N - 1) \quad (A.2.11)$$

Os pontos em que i=j terão peso $\alpha_{ii} = \frac{1}{2^{N+1}}$ enquanto que $\alpha_{ij} = \frac{2}{2^{N+1}}$ para os pontos em que $i\neq j$. A partir destes pontos podemos construir uma rede de pontos especiais tão precisa quanto desejarmos.

Para a rede cúbica simples, os vetores unitários da rede são dados por:

$$\vec{a}_1 = a(1,0,0)$$
 ; $\vec{a}_2 = a(0,1,0)$; $\vec{a}_3 = a(0,0,1)$; $\vec{R} = a(l,n,m)$ (A.2.12)

e o procedimento para obter os pontos especiais é o mesmo que o descrito para a rede quadrada.

Para ilustrar a precisão do método, anexamos os resultados obtidos numericamente para a função

$$f(\bar{k}) = \sum_{\bar{k}} \frac{1}{1 - \frac{1}{2} \left[\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a) \right]} , \qquad (A.2.13)$$

definida para uma rede cúbica simples e comparamos nossos resultados com os obtidos por Watson (25).

número pontos especiais	f	
120	1. 464 061	· · · ·
816	1. 490 289	
5 974	1. 503 346	
45 760	1. 509 8 67	
357 760	1. 513 126	
2 829 056	1. 514 756	1. 516 386 (25)

Observamos que, com um número adequado de pontos especiais, podemos obter uma aproximação bastante satisfatória para a função, o que atesta a utilidade do método para a avaliação de somas dentro da zona de Brillouin.

BIBLIOGRAFIA

1.	Binder K. e Hohenberg P. C. 1974 Phis. Review B 9 2194.
2.	Binder K e Landau D. P. 1984 Phys. Rev. Letters 52 318.
3.	Mariz A. M., Costa U. M. S. e Tsallis C. 1987 Europhysics Letters 3 27.
4.	de Moraes J. N. B. e Figueiredo W. 1993 J. Phys. Cond. Matter 5 3809.
5.	Continentino M. A. e Lins de Mello, E. V. 1990 J. Phys. Cond. Matter 2 3131.
6.	Mauri D., School D., Siegmann H. C. e Kay E. 1989 Phys. Rev. Lett 62 1900.
7 .	Indekeu J. O., Maritain A. e Stella, A. L. 1982 J. Phys. A: Math Gen. 15 L291.
8.	Belanger D. P. 1992 Brazilian Journal of Physics 4 283.
9.	Imry Y. 1984 J. Stat. Phys. 34 849.
10.	Chadi D. J. e Cohen M. L. 1973 Physical Review B 8 5747.
11.	Cunningham S. L. 1974 Physical Review B 10 4988.
12.	Zubarev D. N. 1960 Soviet Physics Uspekhi 3 320.
13.	Tyablikov S. V. 1959 Soviet Physics Doklady 4 604.
14.	Callen H. 1963 Phis. Review 130 890.
15.	Mermin, N. D. e Wagner H. 1973 Phys. Rev. Letter 7 5212.
16.	Sykes M. F., Gaunt D. S. e Glen M. 1976 J. Phys. A 9 97.
17.	Lie F., Chen H. H. e Tseng H. C. 1988 Physical Review B 38 508.

- 18. Nightingale M. P. 1976 Physica A 85 561.
- 19. Bienenstock A. 1966 J. Applied Phys. 37 1459.
- 20. Cardy J. 1984 Physical Review B 29 505.
 - 21. Perez J. F., Pontim L. F. e Baeta Segundo J. A. 1986 Phys. Letter A 116 287.
- 22. Aharony A. 1978 Physical Review B 18 3318.
- 23. Stinchcombe R. B. 1983 "Dilute Magnetism" in Phase Transitions and Critical Phenomena. Ed. Domb e Green, vol 7, Academic Press.
- 24. Domb C. 1974 "Ising Model" in Phase Transitions and Critical Phenomena.Ed. Domb e Green, vol 3, Academic Press.
- 25. Watson G. N. 1939 Quart. J. Math. (Oxford) 10 266.