

DARLY MACHADO ENRIQUES DA SILVA

EFEITOS DA ANISOTROPIA NO ESPAÇO DOS SPINS SOBRE A TRANSIÇÃO DE FASE
ESTRUTURAL DO MODELO XY UNIDIMENSIONAL MAGNETOSTRITIVO

Tese de

MESTRADO

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS

Rio de Janeiro

-1980-

AGRADECIMENTOS

- Ao Prof. Constantino Tsallis, pela dedicada e segura orientação.

- A Evaldo Mendonça Fleury Curado, pela paciente revisão do trabalho.

- A Aglaê C.N. de Magalhães, Evaldo M.F. Curado, Ivan F.L. Dias, Luciano R. da Silva, Paulo Roberto Hauser, R. Alexandre T. Lima, Sílvio Levy, Sydney F. Machado, pelas proveitosas discussões e sugestões sobre o trabalho.

- Aos amigos que colaboraram para a obtenção dos resultados numéricos com o uso do computador.

- À Helena S. Ferreira, pelo trabalho datilográfico.

- Aos amigos do CBPF, pelo incentivo.

- Ao CBPF-CNPq, pelo suporte financeiro.

RESUMO

Uma cadeia linear de spins $1/2$ com acoplamento XY e magnetostricção é instável com respeito a uma deformação que a separa em duas sub-redes. O mesmo sistema com acoplamento Ising não apresenta esta instabilidade à temperatura nula. No espaço temperatura, coeficiente de anisotropia (no espaço dos spins) e constante elástica da rede, aparece uma superfície de transição que separa a fase desordenada (cadeia uniforme) da fase ordenada (cadeia dimerizada). Estuda-se esta superfície e também discute-se a possibilidade de aparição (sobre esta superfície) de uma linha de pontos tricríticos delimitando regiões de transição de primeira e segunda ordens.

SUMÁRIO

	<u>Pág.</u>
AGRADECIMENTOS	iii
RESUMO	iv
LISTA DE FIGURAS	vii
LISTA DE TABELAS	ix
INTRODUÇÃO	1
<u>CAPÍTULO I - REVISÃO</u>	5
1.1 - INTRODUÇÃO	5
1.2 - CARACTERÍSTICAS DA REDE CRISTALINA	7
1.2.1 - Rede Uniforme	7
1.2.2 - Rede Dimerizada	8
1.2.3 - Ordem Estrutural	9
1.3 - S-MERIZAÇÃO	10
1.3.1 - Hamiltoniano Magnético	10
1.3.2 - Instabilidade da Cadeia Linear Antiferromagnética ($T = 0$)	11
1.3.3 - Ordem da Transição	14
1.4 - INFLUÊNCIA DE UMA ANISOTROPIA DE ACOPLAMENTO	31
1.5 - INFLUÊNCIA DO CAMPO MAGNÉTICO EXTERNO SOBRE A TRANSIÇÃO	38
1.6 - JUSTIFICATIVA DA AUSÊNCIA DE ORDEM MAGNÉTICA, A UMA DIMENSÃO	43
1.7 - "MODELO DOMB", PARA $d = 1$	44
<u>CAPÍTULO II - ENERGIA LIVRE COM ANISOTROPIA E TEMPERATURA FINITA</u> ...	47
2.1 - INTRODUÇÃO	47
2.2 - MODELO	48
2.3 - MÉTODO USADO	52
2.4 - CÁLCULO DA ENERGIA LIVRE	53
2.5 - LINHAS DE TRANSIÇÃO	55
2.6 - ORDEM DE TRANSIÇÃO	56

<u>CAPÍTULO III</u> - RESULTADOS	61
3.1 - INTRODUÇÃO	61
3.2 - GRÁFICOS	62
3.2.1 - Linhas Críticas Associadas à Anisotropia e à Temperatura Nulas	62
3.2.2 - Coeficiente de Anisotropia e Temperatura (Const tante Elástica Fixa)	63
3.3 - RESULTADOS NUMÉRICOS	65
3.3.1 - Métodos	65
3.3.2 - Ilustrações	66
<u>CAPÍTULO IV</u> - COMPARAÇÕES	81
4.1 - INTRODUÇÃO	81
4.2 - MATERIAIS	82
4.3 - COMPARAÇÕES DAS LINHAS DE TRANSIÇÃO PARA DOIS OUTROS MODELOS	85
CONCLUSÃO	88
BIBLIOGRAFIA	92

LISTA DE FIGURAS

<u>Fig.</u>	<u>Pág.</u>
1.2.2.1 - Representação estática da rede cristalina com dois átomos por célula ($s=2$): a) rede de referência; b) rede com ordem estrutural (dimerização)	8
1.2.3.2 - Exemplo de ordem estrutural (representação transversal de uma elongação longitudinal): dimerização ($s = 2, q = \pi, \eta > 0, \phi = \pi$)	10
1.3.3.3 - Dependência de τ (proporcional à distorção) com a temperatura	15
1.3.3.4 - Espectro de energia correspondente a uma dimerização, para $b = 0.1$	18
1.3.3.5 - Diagrama correspondente à primeira contribuição (2^{a} ordem) não nula para a energia livre	26
1.3.3.6 - Contorno "c" (a) antes e (b) depois da deformação. A função de Green $G^{RA}(\Omega)$ apresenta singularidades somente para o eixo imaginário nulo	28
1.3.3.7 - Função $\xi(t, q)$ para $t = 0$, com valor máximo em $q = \pi$	30
1.3.3.8 - Função $\xi(t, \pi)$	30
1.3.3.9 - Variação da temperatura crítica com a constante elástica harmônica conhecendo-se os seus limites assintóticos	31
1.4.10 - Caso uniforme ($\eta = 0 \Rightarrow b = 0$). Energia das excitações elementares como função do vetor de onda para quatro valores do coeficiente de anisotropia. $\epsilon_k = \epsilon'_k$ ou $\epsilon''_k = \epsilon_k$ conforme tabela 1.4.1	34
1.4.11 - Caso não uniforme ($\eta \neq 0$). Exemplo para $b = 0.10$. Energia das excitações elementares para vários valores da anisotropia. $\epsilon_k = \epsilon'_k$ ou $\epsilon''_k = \epsilon_k$ conforme tabela 1.4.2	34

1.4.12 - Função $L(\gamma)$ ($T = 0$)	38
1.5.13 - Função $l(t, h, q)$ para $t = 0$ e $0 \leq h \leq 1$	41
1.5.14 - Linhas de transição, com variações de K . As flechas indicam sentido crescente de q de 0 a π	42
1.7.15 - Função $f(\theta)$ quando existe uma transição de fase de primeira ordem. A região plana é característica desta ordem de transição; conseqüentemente existem múltiplas soluções para a eq. (1.7.83). (É interessante comparar-se com as isothermas de Van der Waals.)	46
3.2.1.1 - Constante elástica harmônica como função da temperatura crítica, para anisotropia nula ($\gamma = 0$)	62
3.2.1.2 - Constante elástica harmônica como função do coeficiente de anisotropia crítica, à temperatura nula ($\delta_c^{-1} = 0$)	63
3.2.2.1 - Coeficiente de anisotropia como função da temperatura crítica para vários valores da constante elástica harmônica. A linha tracejada-pontilhada é a linha tricrítica; a linha cheia é de 2ª ordem (limite de estabilidade de $\eta = 0$); a linha tracejada é de 1ª ordem (limite de metaestabilidade de $\eta = 0$)	64
3.2.2.2 - Diagrama de fases da família I ($\bar{c} > \bar{c}^*$)	65
3.2.2.3 - Diagrama de fases da família II ($\bar{c} < \bar{c}^*$)	65
3.3.2.4 - Linha de transição completa para $\bar{c} = 0,80$ e $\gamma < 1$, indicando a ordem da transição. A linha pontilhada é de 1ª ordem e a tracejada marca o limite de metaestabilidade de $\eta = C$.	73
4.2.1 - Suscetibilidade magnética típica de um sistema "spin-Peierls"	84
4.3.2 - Diagrama de fases no espaço campo magnético e temperatura, $D \gg 1$	85

LISTA DE TABELAS

<u>Tab.</u>	<u>Pág.</u>
1.4.1 - Valores numéricos das funções dadas pela eq.(1.4.64), para o caso limite	35
1.4.2 - Valores numéricos das funções dadas pela eq.(1.4.64), para a cadeia dimerizada	35
3.3.2.1 - Energia livre como função do parâmetro de ordem, mostrando os máximos e mínimos para constante elástica $\bar{c} = 0.60$ e temperatura $\delta_c^{-1} = 0.05$. Para este exemplo, a estabilidade da energia ocorre em $b > 1$	67-71
3.3.2.2 - Energia livre como função do parâmetro de ordem, mostrando os máximos e mínimos para a constante elástica $\bar{c} = 0.80$ e temperatura $\delta_c^{-1} = 0.50$	75-77
3.3.2.3 - Energia livre como função do parâmetro de ordem, mostrando os máximos e mínimos para a constante elástica $\bar{c} = 0.80$ e temperatura $\delta_c^{-1} = 0.60$	78-80

INTRODUÇÃO

A descoberta da instabilidade de Peierls em condutores metálicos lineares propiciou o aparecimento de uma considerável quantidade de trabalhos teóricos e experimentais sobre as propriedades estáticas e dinâmicas de sistemas quase-unidimensionais, na vizinhança de uma transição de fase.

Já há algum tempo (1966) é de conhecimento geral que não é possível haver ordem à longa distância, a temperaturas finitas, em sistemas unidimensionais que desprezam as forças de longo alcance⁽¹⁾. Não obstante, em qualquer sistema físico real formado por cadeias lineares, com tendência a mudar de fase através de um ordenamento, existem interações tridimensionais não nulas que induzem transição de fase a três dimensões. A temperatura crítica T_C depende fortemente da potencialidade do acoplamento intercadeia e pode ser muito menor que a temperatura de transição (obtida através da aproximação de campo médio) das cadeias isoladas. A temperaturas "suficientemente" acima de T_C , as correlações tridimensionais são anuladas e o sistema torna-se efetivamente unidimensional⁽²⁾.

Em 1966, Chesnut⁽³⁾ realizou a conexão entre o sistema metálico de Peierls e um outro — o linear de "spins" acoplados. A analogia entre ambos foi prontamente estabelecida e verificada a instabilidade do último, com respeito à alternância dos parâmetros de acoplamento "spin-spin". Esta instabilidade provoca, em ambas as fases (uniforme e alternada), o aparecimento de uma dependência térmica da suscetibilidade magnética, semelhan-

te à queia presente em sistemas físicos que comprovadamente exibem uma transição de fase.

Na década de 70, surgiram muitos trabalhos seguindo esta mesma linha de pesquisa, cuja contribuição é, inegavelmente, de suma importância para o entendimento de sistemas unidimensionais com acoplamento "spin-spin". Serão mencionados somente aqueles que interessam diretamente para o desenvolvimento deste trabalho. Em todos eles e particularmente neste, o modelo discutido é o XY, adaptado para descrever uma cadeia linear de "spins" $1/2$ com interação entre primeiros vizinhos. O Hamiltoniano sob estudo é isomorfo ao de um gás ideal de férmions numa cadeia linear. Uma transformação de Fourier mostra facilmente que, para o coeficiente de anisotropia γ não nulo, existe uma banda vazia e outra completa separadas por um "gap"⁽⁴⁾. Para $\gamma = 0$, o "gap" desaparece; neste caso, ocorre uma distorção de Peierls, correspondente a uma dimerização da cadeia e denominada de transição "spin-Peierls". Cálculos numéricos, no entanto, mostram que a distorção é extremamente pequena, em contraste com aquela das cadeias condutoras. Isto é essencialmente devido ao fato de que as energias típicas de "exchange" são demasiadamente inferiores às energias de Fermi características em condutores. Consequentemente, o efeito Pincus (distorção) não é observável em muitos casos ou até mesmo é suprimido por fonons de vetor de onda nulo [Pytte, 1974].

Em 1971, Pincus⁽⁵⁾ mostrou que, à temperatura nula, a cadeia uniforme antiferromagnética espontaneamente se distorce, possibilitando assim, o aparecimento de uma fase ordenada na qual a cadeia encontra-se dimerizada.

Em 1972, Beni e Pincus⁽⁶⁾ investigaram as proprieda-

des termodinâmicas de uma cadeia linear de "spins" elasticamente acoplados com interação antiferromagnética. Concluíram que tal sistema exibe uma transição de fase estrutural de segunda ordem, se a fase ordenada é dimerizada.

Em 1973, Dubois e Carton⁽⁷⁾ demonstraram que a fase ordenada \bar{E} , realmente, dimerizada. No Hamiltoniano XY, introduziram um parâmetro de anisotropia e obtiveram, a temperatura nu λ , um coeficiente de anisotropia limite da instabilidade.

Em 1974, Tsallis⁽⁸⁾ analisou a influência de um campo magnético externo sobre a transição de fase.

No presente trabalho, é estudado o efeito de anisotropia no espaço dos spins sobre a transição de fase estrutural do modelo XY. A análise é estendida a temperaturas finitas, mais especificamente, constrói-se as linhas de transição as quais são portadoras de algumas das informações físicas (analíticas e numéricas) mais importantes para este problema — a dependência da temperatura crítica com o parâmetro de anisotropia (sub-espaço dos parâmetros intensivos) e o efeito desta, sobre a ordem de transição (para $\gamma = 0$ a transição é de segunda ordem).

É oportuno ressaltar que está excluído do objetivo deste trabalho quaisquer averiguações sobre a fase ordenada, suposta dimerizada.

O Capítulo I é destinado a uma breve revisão dos trabalhos de Pincus, Benf e Pincus, Dubois e Carton e finalmente Tsallis. O teorema de Mermin e Wagner⁽¹⁾ e o modelo de Domb uni dimensional⁽²⁾ são também referidos neste capítulo, com o intuito de justificar algumas aproximações e/ou procedimentos adotados na formulação do modelo.

No Capítulo II, através de um Hamiltoniano anisotrópi

co, desenvolve-se a energia livre em potências do parâmetro de ordem, ou seja, utiliza-se uma expansão do "tipo Landau" e obtêm-se, analiticamente, os coeficientes dos termos de segunda e quarta ordens.

No Capítulo III, estão contidos os resultados numéricos de algumas quantidades físicas relevantes, calculadas no Capítulo II. Especificamente, o valor crítico do coeficiente de anisotropia em função da temperatura, e o valor (o interesse está centralizado no sinal) do coeficiente de quarta ordem na expansão da energia livre em potências do parâmetro de ordem.

O Capítulo IV é dedicado à comparação teórica de três modelos, particularmente no que se refere ao sub-espaço dos seus parâmetros intensivos — a temperatura e um outro, caracterizando a anisotropia do sistema (um campo externo ou uma anisotropia no espaço dos spins). Conenta-se também, brevemente, a possível representatividade, na natureza, de materiais que se cristalizam em estruturas dimerizadas para os quais este modelo é eficiente em explicar alguns de seus fenômenos físicos. Em 1966, Chesnut discutiu o modelo, aplicando-o ao "perclorato azul de Würster", e obteve resultados qualitativos com "razoável" concordância experimental⁽³⁾. Mais recentemente (1979), o modelo serviu para explicar a ordem da transição (1ª ordem) observada em alguns sais alcalinos TCNQ⁽¹⁰⁾. Cristais das famílias TTF-BDT⁽¹¹⁻¹²⁾ e MEN(TCNQ)₂⁽¹³⁾ foram submetidos à análise experimental que provou estar em completa concordância com as previsões teóricas do modelo de transição de fase do tipo "spin-Peierls".

CAPÍTULO I

REVISÃO

1.1 - INTRODUÇÃO

Certamente a simplicidade de cálculo de modelos a uma dimensão continua a fazê-los atrativos para o estudo analítico de fenômenos fisicamente interessantes. Dentre tais modelos, dá-se ênfase aqui, àqueles suscetíveis de apresentarem transição de fase.

À esta dimensão não é permitido ao sistema qualquer estabelecimento de ordem magnética⁽¹⁾.

O modelo que será objeto de estudo neste trabalho exige uma transição de fase estrutural para a cadeia linear com acoplamento XY entre "spins" $1/2$ com interação entre os primeiros vizinhos. Graças à transformação de Jordan e Wigner, o tratamento deste modelo é exato para os graus de liberdade magnéticos. As cadeias estão acopladas a um campo de fonons tridimensionais justificando, conseqüentemente, o emprego de um formalismo "tipo campo médio" para os graus de liberdade cristalinos e assegurando inclusive a existência da própria transição⁽²⁻¹¹⁻¹²⁾.

Em 1971, Pincus⁽⁵⁾ mostrou que, à temperatura nula, a cadeia antiferromagnética uniforme é instável.

Em 1972, Bení e Pincus⁽⁶⁾, utilizando a teoria de Lan

dau, provaram que, se a fase ordenada que se estabelece é dimerizada, então a transição é de segunda ordem.

Dando continuidade a este estudo, em 1974, Dubois e Carton⁽⁷⁾ demonstraram que a fase ordenada é, de fato, dimerizada. Utilizando um modelo anisotrópico intermediário entre os modelos XY e de Ising, evidenciaram, à temperatura nula, um valor crítico de anisotropia: o modelo próximo ao XY apresenta uma transição de fase estrutural (dimerização) e o outro conserva a fase uniforme mesmo à temperatura nula. Este problema foi mais uma vez enfocado por Tsallis⁽⁸⁾, que provou que um campo magnético perpendicular ao plano XY, acrescentado ao modelo, modifica drasticamente a transição; foi sugerida a possibilidade de existência de um tipo de transição bastante interessante pois permite uma fase uniforme e outra, comensurável ou não com o parâmetro de rede, e classificada como: única ou composta da superposição de diferentes modos "congelados" de vibração.

Mermin e Wagner, através da aplicação da desigualdade de Bogoliubov, demonstraram a inexistência de magnetização espontânea ou magnetização de sub-rede para o modelo XY unidimensional com interação de curto alcance, indicando portanto, ausência de ferromagnetismo ou antiferromagnetismo, à temperatura diferente de zero. Um argumento termodinâmico proposto por Landau e Lifshitz⁽¹⁴⁾ corrobora a afirmação acima, justificando-a da seguinte maneira: se a ordem na cadeia de N átomos é interrompida em "n" pontos, então o "custo" energético é "n" unidades de energia, se as interações são a curta distância, enquanto que o "ganho" em entropia é da ordem de $n \log(N/n)$. Assim, para $N \gg 1$ e a qualquer temperatura finita, a energia livre $U-TS$ é minimizada para $n \gg 1$.

A respeito dos cristais passíveis de sofrerem transição de fase, tem-se a esclarecer que aqui serão considerados apenas aqueles cujas propriedades magnéticas são predominantemente unidimensionais, isto é, nos quais os momentos magnéticos estejam fortemente acoplados em cadeias lineares magneticamente bem isoladas umas das outras⁽¹⁵⁾. Além disso, as cadeias devem estar sujeitas a um campo fonônico tridimensional⁽¹¹⁻¹²⁾.

Como será de largo emprego, neste e em alguns capítulos subsequentes, um parâmetro de "exchange" função da separação média entre os átomos da rede, faz-se necessário uma menção a tal modelo, ou seja, o modelo de Domb a uma dimensão, com o qual é encerrado o assunto a ser abordado neste capítulo.

1.2 - CARACTERÍSTICAS DA REDE CRISTALINA

1.2.1 - Rede Uniforme

A cada um dentre os N sítios de uma cadeia linear cíclica está associado um átomo com spin $1/2$ interagindo magneticamente (modelo XY) e elasticamente com seus dois primeiros vizinhos. Escolhe-se a unidade para parâmetro cristalino da rede de referência; sendo assim, as distâncias são reduzidas e adimensionais.

Seja x_j a elongação longitudinal do j -ésimo átomo com respeito à rede de referência, tem-se:

$$x_j = u_j + (x_j - u_j) \quad (j = 1, 2, \dots, N)$$

onde $u_j \equiv \langle x_j \rangle = jv$ e $\langle \dots \rangle =$ valor médio t ermico; v   a dilata o da rede que ser  desprezada neste trabalho.

1.2.2 - Rede Dimerizada

Designa-se "s" para o n mero de  tomos contidos em ca da c lula elementar as quais totalizam N; Ns  , portanto, o n mero global de tais  tomos. As c lulas elementares d -se o  ndice j ($j = 1, 2, \dots, N$) e o  ndice α para cada fam lia de  tomos ($\alpha = 1, 2, \dots, s$). Cada s tio  , ent o, identificado pelo par (α, j) . Por conven o: $(s+1, j) = (1, j+1)$ e $(1, N+1) = (1, 1)$.

A alonga o longitudinal x_j^α do (α, j) - simo  tomo   agora:

$$x_j^\alpha = u_j^\alpha + (x_j^\alpha - u_j^\alpha) \quad (j = 1, 2, \dots, N; \alpha = 1, 2, \dots, s) \quad (1.2.2.1)$$

onde:

$$u_j^\alpha \equiv \eta_\alpha + \left[(j-1)s + \alpha \right] v$$

$\eta_\alpha \equiv$ par metro de ordem estrutural

$v \equiv$ dilata o da rede, considerada nula.

Esquem ticamente, tem-se:

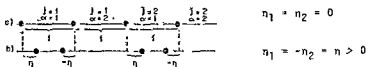


Fig. 1.2.2.1 - Representa o est tica da rede cristalina com dois  tomos por c lula ($s=2$): a) rede de refer ncia; b) rede com ordem estrutural (dimeriza o).

1.2.3 - Ordem Estrutural

Uma rede uniforme (caracterizada por $s = 1$) é dita s-merizada quando sua célula elementar possuir "s" ($s \neq 1$) átomos. À esta ordem estrutural, associa-se o conjunto de parâmetros η_α , salientando-se que a invariância do baricentro impõe que:

$$\sum_{\alpha=1}^s \eta_\alpha = 0$$

porque, por hipótese, todos os átomos são portadores de igual massa.

Descreve-se a ordem estrutural estabelecida através de uma onda estática caracterizada por $(s-1)$ graus de liberdade e comprimento de onda "s". Em particular, para $s \leq 3$, a forma de tal onda é senoidal (dois graus de liberdade - intensidade e fase), embora não seja este o tipo de onda para o caso geral⁽⁸⁾. A ordem estrutural é denotada por:

$$\eta_\alpha = \eta \cos \left(\frac{2\pi}{s} \alpha + \phi \right) \quad (\alpha = 1, 2, \dots, s) \quad (1.2.3.2)$$

sendo η e ϕ números reais determinando respectivamente a intensidade e fase do parâmetro de ordem.

É importante ressaltar que a interpretação que será dada à s-merização, é a do "congelamento" do modo de vibração vinculado ao vetor de onda $q = 2\pi/s$ na fase desordenada (uniforme). Na figura 1.2.3.2 pode ser visto um exemplo típico de ordem estrutural.

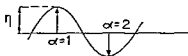


Fig. 1.2.3.2 - Exemplo de ordem estrutural (representação transversal de uma elongação longitudinal): dimerização ($s = 2$, $q = \pi$, $\eta > 0$, $\phi = \pi$).

1.3 - S-MERIZAÇÃO

1.3.1 - Hamiltoniano Magnético

Considere um cristal cuja célula primitiva é constituída de "s" spins 1/2 sujeitos a um acoplamento magnético XY entre os primeiros vizinhos. Seu Hamiltoniano pode ser escrito como:

$$\bar{H}_N = - \sum_{\alpha=1}^s J_{\alpha}^{(s)} \sum_{j=1}^N (S_{\alpha,j}^x S_{\alpha+1,j}^x + S_{\alpha,j}^y S_{\alpha+1,j}^y) \quad (1.3.1.3)$$

onde $J_{\alpha}^{(s)}$ é a integral de "exchange".

Desprezar-se-ã as flutuações das elongações cristalinas em torno dos seus valores médios. Consequentemente a eq. (1.2.2.1) transformar-se-ã em:

$$x_j^{\alpha} \approx u_j^{\alpha} \quad \psi_j^{\alpha} \quad (1.3.1.4)$$

A integral de "exchange" é suposta depender da distância entre spins; sua expansão com respeito às elongações será feita na aproximação linear, ou seja:

$$J_{\alpha}^{(s)} \equiv J(x_j^{\alpha+1} - x_j^{\alpha}) = J(u_j^{\alpha+1} - u_j^{\alpha}) = J(0) + J'(0)(u_j^{\alpha+1} - u_j^{\alpha}) \equiv$$

$$\equiv J \left[1 + v(u_j^{\alpha+1} - u_j^\alpha) \right] \quad v_j v_v \quad (1.3.1.5)$$

onde

$$J \equiv J(0) \quad , \quad J' \equiv J'(0) \quad e \quad v \equiv J'/J$$

1.3.2 - Instabilidade da Cadeia Linear Antiferromagnética ($T = 0$)

Durante o processo de magnetização, ocorre uma pequena mudança na estrutura da rede magnética; ela se deforma espontaneamente. Este fenômeno é conhecido como magnetostrição, cujos mecanismos responsáveis pela sua existência são os acoplamentos anisotrópicos entre os átomos magnéticos. A distorção provoca o aparecimento de duas sub-redes. A uma dimensão, uma delas é formada por átomos que ocupam os sítios pares e a outra os sítios ímpares, sendo que esta se desloca em relação àquela, ou vice versa, provocando uma transição de fase estrutural do tipo "dissplaciva".

Para mostrar a instabilidade da cadeia linear antiferromagnética, Pincus considerou que a cadeia alternada é obtida a partir do sistema uniforme, que se deforma espontaneamente. Assumiu uma dependência linear para a integral de "exchange" na amplitude de distorção η , tal que:

$$J_1 = J(1+c) \quad e \quad J_2 = J(1-c)$$

onde $c = v\eta$, conforme as eqs. (1.2.3.1) e (1.3.1.5).

O Hamiltoniano XY para a cadeia antiferromagnética dimerizada é o seguinte:

$$H_m = J_1 \sum_{i=1}^N (S_{2i-1}^x S_{2i}^x + S_{2i-1}^y S_{2i}^y) + J_2 \sum_{i=1}^{N-1} (S_{2i}^x S_{2i+1}^x + S_{2i}^y S_{2i+1}^y) \quad (1.3.2.6)$$

J_1 e J_2 são, respectivamente, as integrais de "exchange" entre sítios ímpar-par e par-ímpar, sendo $2N$ o número total de spins na cadeia ($N \rightarrow \infty$).

A transformação [9]:

$$\begin{cases} S_{2i}^{\dagger} = S_{2i}^x + i S_{2i}^y = a_{2i}^{\dagger} \exp \left[\pi_i \left(\sum_{j=1}^{i-1} a_{2j}^{\dagger} a_{2j} + \sum_{j=1}^i a_{2j-1}^{\dagger} a_{2j-1} \right) \right] \\ S_{2i+1}^{\dagger} = S_{2i+1}^x + i S_{2i+1}^y = a_{2i+1}^{\dagger} \exp \left[\pi_i \left(\sum_{j=1}^i a_{2j}^{\dagger} a_{2j} + \sum_{j=1}^{i-1} a_{2j+1}^{\dagger} a_{2j+1} \right) \right] \end{cases}$$

para os operadores férmions (a, a^{\dagger}) nos sítios ímpares e pares, converte a eq. (1.3.6) em:

$$H_m = \frac{J_1}{2} \sum_{i=1}^N (a_{2i-1}^{\dagger} a_{2i} + a_{2i}^{\dagger} a_{2i-1}) + \frac{J_2}{2} \sum_{i=1}^{N-1} (a_{2i}^{\dagger} a_{2i+1} + a_{2i+1}^{\dagger} a_{2i}) \quad (1.3.2.7)$$

A célula elementar contém dois spins ($s = 2$).

A transformação de Fourier:

$$\begin{cases} C_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{i2jk} a_{2j} \\ C'_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{i(2j+1)k} a_{2j+1} \end{cases} \quad \left(\frac{\pi}{2} < k \leq \frac{\pi}{2} \right) \quad (1.3.2.8)$$

modifica a eq. (1.3.2.7), em função dos novos operadores férmions C_k e C'_k , para:

$$H_m = \sum_k \left[J(k) C_k^{\dagger} C'_k + J^*(k) C_k^{\dagger} C_k \right] \quad (1.3.2.9)$$

com

$$J(k) = \frac{1}{2} (J_1 e^{ik} + J_2 e^{-ik})$$

Os vetores de onda "k" são determinados por condições periódicas de contorno, $k = 2\pi l/2N$, sendo l um número inteiro.

A diagonalização do Hamiltoniano (eq. (1.3.2.9)) é efetuado, resultando como função dos novos operadores férmions α_k e β_k , a seguinte expressão :

$$H_m = \sum_k |J(k)| (\beta_k^\dagger \beta_k - \alpha_k^\dagger \alpha_k) \quad (1.3.2.10)$$

onde

$$\begin{cases} \beta_k = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(c_k - c'_k \sqrt{\frac{m_{12}}{m_{12}^*}} \right) \\ \alpha_k = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(c_k + c'_k \sqrt{\frac{m_{12}}{m_{12}^*}} \right) \\ m_{12} \equiv J(k) \end{cases}$$

O estado fundamental é a completa ocupação dos estados α e ocupação nula dos estados β , sendo a sua energia dada por:

$$E_0 = - \sum_k |J(k)| = - \frac{N}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} |J(k)| dk = - \frac{N}{\pi} (J_1 + J_2) E(\phi^2) \quad (1.3.2.11)$$

onde $E(\phi^2)$ é a integral elíptica e

$$\phi^2 = 4 J_1 J_2 / (J_1 + J_2)^2$$

Incluindo a energia elástica de distorção, a energia do estado fundamental da cadeia dimerizada, à temperatura nula, torna-se:

$$U = -(2/\pi)NJE(\phi^2) + NC\eta^2$$

onde $\phi^2 = 1 - \epsilon^2$ e C é uma constante elástica.

No regime de fraco acoplamento ($\epsilon \ll 1$), a minimização de $U(\eta)$ com respeito a η , permite explicitar a instabilidade da cadeia linear uniforme antiferromagnética com respeito a uma distorção da rede que dimeriza a cadeia. O valor do parâmetro de ordem que torna a energia livre mínima é dado pela expressão:

$$\epsilon = \exp(-nC/Jv) \quad (1.3.2.12)$$

1.3.3 - Ordem da Transição

Com o objetivo de obter a ordem da transição referida no item 1.3.2, Beni e Pincus acrescentaram uma dependência da temperatura na energia média da cadeia dimerizada:

$$U = \langle H \rangle = \sum_k |J(k)| (f_k^+ - f_k^-) + NC\eta^2 \quad (1.3.3.13)$$

onde

$$f_k^\pm = 1 / \left[1 + \exp(\pm \beta) |J(k)| \right]$$

são os números de ocupação dos estados β_k e α_k , respectivamente. $\beta \equiv 1/k_B T$.

A energia livre do sistema pode ser avaliada de maneira exata, segundo expressão abaixo:

$$F = -2/\beta \sum_k \ln \left[2 \cosh(\beta |J(k)|/2) \right] + NC\eta^2 \quad (1.3.3.14)$$

cuja minimização com respeito a η , a T fixa, apresenta a seguin

te equação transcendental:

$$A = \int_0^1 \frac{d\theta(1-\theta^2)^{1/2}}{g(\theta, \epsilon)} \operatorname{th} [Bg(\theta, \epsilon)] \quad (1.3.3.15)$$

onde:

$$g(\theta, \epsilon) = [\epsilon^2(1-\theta^2) + \theta^2]^{1/2}$$

$$A \equiv \pi C/Jv^2 \quad \text{e} \quad B = BJ/2$$

Cálculos explícitos de $\epsilon(T)$ (eq. (1.3.3.15)) foram realizados numericamente para $\delta \ll 1$ e os resultados colocados na fig. 1.3.3.3.

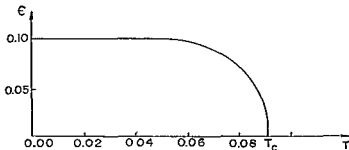


Fig. 1.3.3.3 - Dependência de ϵ (proporcional à distorção) com a temperatura.

Constata-se, através do gráfico da fig. 1.3.3.3, a existência de uma transição de fase de segunda ordem conceituada na teoria de Landau. Há uma separação nítida entre dois regimes: abaixo de uma temperatura crítica T_c , a rede está completamente ordenada (dimerizada) e acima de T_c , desordenada. Em decorrência da ordem estabelecida, surge um "gap" no espectro das excitações.

Dubois e Carton se interessaram em comprovar matemati

camente a existência da transição e verificar a sua ordem.

Inicialmente escreveram o Hamiltoniano magnético da cadeia dimerizada como:

$$H_m = -J_2 \sum_{i=0}^{N-1} \left(S_{2i}^x S_{2i+1}^x + S_{2i}^y S_{2i+1}^y \right) - J_1 \sum_{i=1}^{N-1} \left(S_{2i-1}^x S_{2i}^x + S_{2i-1}^y S_{2i}^y \right) - J_1 \left(S_{2N-1}^x S_0^x + S_{2N-1}^y S_0^y \right) \quad (1.3.3.16)$$

Assumiram, por ser conveniente para o cálculo de quantidades físicas interessantes, que a cadeia é cíclica.

Através da transformação de Jordan e Wigner:

$$a_j = \left(\prod_{i=0}^{j-1} 2S_i^z \right) s_j^\dagger \quad (1.3.3.17)$$

a eq. (1.3.3.16) torna-se

$$H_m = -\frac{J_2}{2} \sum_{i=0}^{N-1} \left(a_{2i}^\dagger a_{2i+1} + a_{2i+1}^\dagger a_{2i} \right) - \frac{J_1}{2} \sum_{i=1}^{N-1} \left(a_{2i-1}^\dagger a_{2i} + a_{2i}^\dagger a_{2i-1} \right) + \frac{J_1}{2} \left(a_{2N-1}^\dagger a_0 + a_0^\dagger a_{2N-1} \right) P \quad (1.3.3.18)$$

onde o operador $P = \prod_{i=0}^{2N-1} (2S_i^z)$ é uma constante do movimento tomando os valores ± 1 .

Para cada sub-espaco próprio de P associado ao valor próprio $\tau = \pm 1$, pode-se escrever o Hamiltoniano da seguinte maneira:

$$H_m = -\frac{J_2}{2} \sum_{i=0}^{N-1} \left(a_{2i}^\dagger a_{2i+1} + a_{2i+1}^\dagger a_{2i} \right) - \frac{J_1}{2} \sum_{i=1}^N \left(a_{2i-1}^\dagger a_{2i} + a_{2i}^\dagger a_{2i-1} \right) \quad (1.3.3.19)$$

com $a_{2N} = -\tau a_0$.

Assim, utilizando a transformação de Fourier, eq. (1.3.2.8), Du bois e Carton reobtiveram a eq. (1.3.2.9) onde para l inteiro, " k " tem a seguinte forma:

$$\begin{aligned} k &= 2\pi l / 2N & \text{para } \tau = -1 \\ k &= \pi(2l+1) / 2N & \text{para } \tau = 1 \end{aligned} \quad (1.3.3.20)$$

A diagonalização da eq. (1.3.3.19) em termos dos operadores \bar{f}_R e \bar{f}_L com α_k e β_k definidos na eq. (1.3.2.10), permite escrever a eq. (1.3.3.19) como expresso na eq. (1.3.2.10).

Define-se:

$$b \equiv \frac{J_2 - J_1}{J_2 + J_1} \quad \text{e} \quad J_0 \equiv \left| \frac{J_1 + J_2}{2} \right| \quad (1.3.3.21)$$

e reescreve-se a eq. (1.3.2.11), ou seja, a energia do estado fundamental para a cadeia dimerizada como:

$$E_0 = - \sum_k \epsilon_k = - \frac{2NJ_0}{2\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} (\cos^2 k + b^2 \sin^2 k)^{1/2} dk \quad (1.3.3.22)$$

onde $c_k = |J(k)|$ (visão tipo "partícula-buraco" (4)).

O espectro das excitações elementares para $s = 2$ é da seguinte forma:

$$c_k = \pm |J(k)| = \pm J_0 (\cos^2 k + b^2 \sin^2 k)^{1/2} \quad (1.3.3.23)$$

e cuja representação gráfica é mostrada na fig. 1.3.3.4.

O desenvolvimento em " b " da integral elíptica, eq. (1.3.3.22), fornece:

$$E_0 = - \frac{2N}{\pi} J_0 \left\{ \left[1 + b^2/2 (\log 4/b - 1/2) + \dots \right] \right\} \quad (1.3.3.24)$$

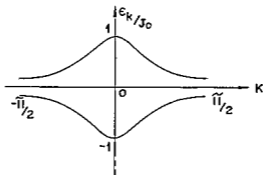


Fig. 1.3.3.4 - Espectro de energia correspondente a uma dimerização, para $b = 0.1$.

O desenvolvimento em "b" da integral elíptica eq. (1.3.3.22), fornece:

$$E_0 = -\frac{2\eta}{\pi} J_0 \left\{ \left[1 + b^2/2 (\log 4/b - 1/2) \right] + \dots \right\} \quad (1.3.3.24)$$

Sendo η o deslocamento médio relativo das sub-redes par e ímpar, as expressões eqs. (1.2.2.1) e (1.3.1.4) permitem escrever

$$\eta = u_{2j+1} - u_{2j} \quad (1.3.3.25)$$

O acoplamento de "exchange" entre spins da rede, em primeira aproximação, conforme eq. (1.3.1.5) é:

$$J_2 - J_1 = 2\lambda\eta \quad (1.3.3.26)$$

onde $\lambda \cong J_0$.

Acrescentando-se à eq. (1.3.3.23) um termo de energia elástica da rede $2NC\eta^2$, obtêm-se como energia livre do sistema por partícula, a T nula:

$$\frac{F_0}{2N} = -\frac{J_0}{\pi} + \eta^2 \left[C - \frac{\lambda^2}{2\pi J_0} \left(\log \frac{4J_0}{\lambda\eta} - 1/2 \right) \right] + \dots \quad (1.3.3.27)$$

A presença do termo \log predominante sobre o termo elástico em η^2 ($\eta \rightarrow 0$), assegura que, à temperatura nula, a cadeia dimerizada ($\eta \neq 0$) é sempre mais estável que a cadeia uniforme. Este resultado já fora obtido por Pincus para a cadeia antiferromagnética (eq. (1.3.2.12)), porém se estende também a cadeias ferromagnéticas, pois os sinais de J_1 e J_2 são irrelevantes para qualquer análise da expressão eq. (1.3.3.27).

No limite $N \rightarrow \infty$, a distinção entre os vetores \vec{k} (eq. (1.3.3.20)) não influencia as propriedades termodinâmicas do sistema. Sua função de partição é:

$$Z = \text{tr } e^{-\beta E} = \prod_{\vec{k}} (1 + e^{-\beta \epsilon_{\vec{k}}})(1 + e^{\beta \epsilon_{\vec{k}}}) = \prod_{\vec{k}} \left[2 \text{ch}(\beta \epsilon_{\vec{k}}/2) \right]^2$$

onde $\epsilon = +|J(\vec{k})|$ (1.3.3.28)

Portanto a energia livre por partícula é

$$\frac{F}{2N} = -\frac{1}{\beta} \log 2 - \frac{2}{\beta N} \int_0^{\pi/2} \log \left\{ \text{ch} \left[\frac{\beta J_0}{2} (\cos^2 k + \frac{\lambda^2 \eta^2}{J_0^2} \sin^2 k)^{1/2} \right] \right\} dk + C_7^2$$

(1.3.3.29)

A minimização da eq. (1.3.3.29) com respeito ao parâmetro de ordem permite calcular a temperatura crítica, da seguinte maneira:

Inicialmente, calcula-se:

$$\frac{1}{2N} \frac{dF}{d\eta^2} \Big|_{\eta=0} = C - \frac{\lambda^2}{2\pi J_0} \int_0^1 \text{th}(\delta u) \sqrt{1-u^2}^{-1} \frac{du}{u}$$

(1.3.3.30)

com:

$$u \equiv \cos k \quad \text{e} \quad \delta \equiv \beta J_0/2$$

(1.3.3.31)

A análise da integral:

$$I(T) \equiv \int_0^1 \text{th}(\delta u) \sqrt{1-u^2} du/u$$

nos seus limites assintóticos:

$$\begin{cases} T \rightarrow \infty & \text{ou} & \delta \rightarrow 0 \implies I(T) \sim \delta\pi/4 \rightarrow 0 \\ T \rightarrow 0 & \text{ou} & \delta \rightarrow \infty \implies I(T) \sim \ln \delta \rightarrow \infty \end{cases}$$

legítima a afirmação de que existe sempre uma temperatura de transição definida por

$$C = \frac{\lambda^2}{2\pi J_0} I(T_c) \quad (1.3.32)$$

Segundo a teoria de Landau, pode-se escrever a energia livre através do desenvolvimento realizado a seguir:

$$F(n, T) = A(T) + C(T)n^2 + D(T)n^4 + \dots \quad (1.3.33)$$

A transição é de segunda ordem, pois o coeficiente $D(T)$ é positivo:

$$\begin{aligned} D(T) &\equiv \frac{1}{2} \frac{d}{dn^2} \left(\frac{dF}{dn^2} \right) \Big|_{n=0} \\ &= \frac{N\lambda^4}{4\pi J_0^3} \int_0^1 \frac{(1-u)^{3/2}}{u^3 \text{ch}^2(\delta u)} \left[\frac{1}{2} \text{sh}(2\delta u) - \delta u \right] du \geq 0 \end{aligned} \quad (1.3.34)$$

conforme já fôra obtido por Benf e Pincus (eq. (1.3.3.15)). O parâmetro de ordem como função da temperatura é expresso por:

$$\eta^2(T) = \frac{1}{2D(T)} \left[\frac{\lambda^2}{2\pi J_0} I(T) - C \right] \quad \text{para } T < T_c$$

- Existência da Transição

A deformação mais geral da cadeia uniforme é caracterizada pelo conjunto $\{x_j\}$, onde x_j é a abcissa do spin "i" com respeito à sua posição média, ou melhor, pelas componentes de Fourier \tilde{x}_q . Tal deformação está expressa no Hamiltoniano equação (1.3.1.3). À uma temperatura T_c , surge espontaneamente uma componente \tilde{x}_q para o vetor de onda "q", na fronteira da primeira zona de Brillouin; o exemplo em questão se refere ao vetor de onda de modo que se "congela" correspondente a uma dimerização.

Reescrevendo-se a eq. (1.3.1.3) como:

$$E_m = - \sum_j J_j \{ S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y \} \quad (1.3.3.35)$$

Utilizando as transformações de Jordan e Wigner (eq.(1.3.3.17)) e de Fourier (eq. (1.3.2.8)), obtêm-se as equações abaixo:

$$E_m = - \frac{1}{2} \sum_j J_j (a_j^\dagger a_{j+1} + a_{j+1}^\dagger a_j) \quad (1.3.3.36)$$

$$E_m = - \frac{1}{2} \sum_q \tilde{J}_q \sum_k \left[e^{ik} + e^{i(q-k)} \right] b_k^\dagger b_{k-q}$$

onde

$$\tilde{J}_q = \frac{1}{2N} \sum_j e^{iqj} J_j \quad (-\pi < q \leq \pi)$$

e

$$b_k = \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_j e^{ikj} a_j$$

são operadores fêrmions.

Com a finalidade de encontrar o vetor de onda "q" do modo que se "congela" quando o cristal sofre a transição de fase, Dubois e Carton usaram um tratamento perturbativo com respeito à rede uniforme (a qual corresponde ao caso limite do modo "congelado" de vetor de onda nulo). O Hamiltoniano é então:

$$H_m \equiv H_m^{(0)} + V$$

onde:

$$H_m^{(0)} = J \sum_{-\pi < k \leq \pi} \epsilon_k^{(0)} b_k^\dagger b_k \quad (1.3.3.37)$$

representa o Hamiltoniano da cadeia uniforme.

$$\epsilon_k^{(0)} = -\cos k$$

$$V = -1/2 \sum_{q \neq 0} \tilde{J}_q \sum_k \left[e^{ik} + e^{i(q-k)} \right] b_k^\dagger b_{k-q} \quad (1.3.3.38)$$

traduz a deformação (pequena) da cadeia uniforme. A expansão de J_1 em primeira ordem, conforme a eq. (1.3.1.5), é:

$$J_1 = J - \lambda (x_{j+1} - x_j)$$

e

$$\tilde{J}_q = -\lambda (e^{-iq} - 1) \bar{x}_q \quad \text{para } q \neq 0 \quad (1.3.3.39)$$

com:

$$\bar{x}_q = \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_j e^{iqj} x_j \quad (1.3.3.40)$$

A eq. (1.3.3.38) com

$$\Lambda_{kq} = -1/2 \tilde{J}_q \left[e^{ik} + e^{i(q-k)} \right]$$

escrita sob a forma:

$$V = \sum_{q,k} \Lambda_{kq} b_k^\dagger b_{k-q} \quad (1.3.3.41)$$

identifica a deformação da rede com um campo externo agindo sobre os fúrmions (Z) .

A energia livre magnética:

$$F_m = -\frac{1}{\beta} \log (\text{tr } e^{-\beta H}) = -\frac{1}{\beta} \log \text{tr } e^{-\beta(H_0+V)},$$

será desenvolvida em 2ª ordem em V (ordem mais baixa não nula). Se $F_m^{(0)}$ é a energia livre magnética da cadeia uniforme, a diferença $\Delta F_m \equiv F_m - F_m^{(0)}$, segundo Abrikosov (15) , é dada por:

$$\Delta F = -\frac{1}{\beta} \text{Ln } \langle S \rangle \quad (1.3.3.42)$$

onde S é análoga a matriz-S da teoria de campos e é representada por:

$$S = \exp \left\{ - \int_0^\beta \bar{H}_{\text{interação}}(\tau) d\tau \right\} ; \tau = it \quad (1.3.3.43)$$

Prova-se (16) que:

$$\langle S \rangle = \exp (\Gamma_1 + \Gamma_2 + \dots) \quad (1.3.3.44)$$

onde

$$\Gamma_n = \frac{(-1)^n}{n!} \int d\tau_1 \dots d\tau_n \langle T_\tau \left[\bar{H}_{\text{interação}}(\tau_1) \dots \bar{H}_{\text{interação}}(\tau_n) \right] \rangle_{\text{conexos}} \quad (1.3.3.45)$$

onde T_τ é o operador cronológico.

Portanto, a eq. (1.3.3.42) transforma-se em:

$$\Delta F = -\frac{1}{\beta} (\Gamma_1 + \Gamma_2 + \dots) = -\frac{1}{\beta} \langle S \rangle_{\text{conexo}}^{-1} \quad (1.3.3.46)$$

Segundo a eq. (1.3.3.45):

$$\Gamma_1 = - \int_0^\beta d\tau \langle \bar{H}_{\text{int}}(\tau) \rangle$$

com:

$$\bar{H}_{\text{int}} \equiv V(\tau) = \sum_{k, q \neq 0} \Lambda_{kq} b_k^\dagger(\tau) b_{k-q}(\tau)$$

Portanto:

$$\Gamma_1 = - \int_0^\beta d\tau \sum_{k, q \neq 0} \Lambda_{kq} \langle b_k^\dagger(\tau) b_{k-q}(\tau) \rangle_0 = 0$$

(o termo nos parênteses é nulo para $q \neq 0$)

$$\Gamma_2 = \frac{1}{2} \sum_{\substack{k, k' \\ q, q'}} \int_0^\beta \int_0^\beta \langle b_k^\dagger(\tau_1) b_{k-q}(\tau_1) b_{k'}^\dagger(\tau_2) b_{k'-q}(\tau_2) \rangle_0 \Lambda_{kq} \Lambda_{k'q'} d\tau_1 d\tau_2 \quad (1.3.3.47)$$

Pelo teorema de Wick, os diagramas conexos são:

$$\begin{aligned} & \langle b_k^\dagger(\tau_1) b_{k-q}(\tau_1) b_{k'}^\dagger(\tau_2) b_{k'-q}(\tau_2) \rangle_0 = \\ & = \langle b_k^\dagger(\tau_1) b_{k-q}(\tau_1) \rangle_0 \langle b_{k'}^\dagger(\tau_2) b_{k'-q}(\tau_2) \rangle_0 - \\ & - \langle b_k^\dagger(\tau_1) b_{k'-q}(\tau_2) \rangle_0 \langle b_{k'}^\dagger(\tau_2) b_{k-q}(\tau_1) \rangle_0 \end{aligned}$$

Substituindo os diagramas conexos (com contribuição não nula)

na eq. (1.3.3.47), tem-se:

$$\Gamma_2 = -\frac{1}{2} \sum_{k, q \neq 0} A_{kq} A_{k-q, -q} \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' g^0(k, \tau - \tau') g^0(k-q, \tau - \tau') \quad (1.3.3.48)$$

onde

$$g^0(k, \tau - \tau') = \langle b_k^\dagger(\tau) b_k(\tau') \rangle_0$$

Como:

$$\begin{cases} A_{k-q, -q} = A_{k, q}^* \\ g^0(k-q, \tau - \tau') = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} e^{i\omega_n(\tau - \tau')} g^0(k-q, \omega_n) \end{cases}$$

Tem-se:

$$\Gamma_2 = -\frac{1}{2\beta^2} \sum_{\substack{k, q \\ \omega_n, \omega_{n'}}} \int_0^\beta d\tau e^{i(\omega_n - \omega_{n'})\tau} \int_0^\beta d\tau' e^{i(\omega_{n'} - \omega_n)\tau'} g^0(k-q, \omega_n) g^0(k, \omega_{n'})$$

Como $\omega_n = (2n+1)\pi/\beta$ para os fêrmions:

$$\int_0^\beta d\tau e^{i(\omega_n - \omega_{n'})\tau} = \beta \delta(n - n') \quad ,$$

resultando:

$$\Gamma_2 = -\frac{1}{2} \sum_{\substack{k, q \\ \omega_n}} |A_{kq}|^2 g^0(k-q, \omega_n) g^0(k, \omega_n) \quad (1.3.3.49)$$

Assim, a primeira contribuição não nula para a energia livre é

representada pelo diagrama (Fig. 1.3.3.5):

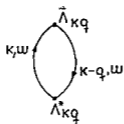


Fig. 1.3.3.5 - Diagrama correspondente à primeira contribuição de ordem 2ª não nula para a energia livre.

Substituindo $|\Lambda_{kq}|^2 = 2\lambda^2(1 - \cos q) c_D s^2(k-q/2)$ na eq. (1.3.3.49), obtêm-se para a energia livre magnética a seguinte expressão:

$$F_m = F_m^{(0)} + \frac{\lambda^2}{B} \sum_{q \neq 0} (1 - \cos q) \sum_{k, \omega_n} \frac{\cos^2(k-q/2)}{\left[i\omega_n - Jc_k^{(0)} \right] \left[i\omega_n - Jc_{k-q}^{(0)} \right]} |\bar{x}_q|^2 \quad (1.3.3.50)$$

A contribuição elástica para a energia livre \bar{E} :

$$F_e = F_e^{(0)} + \frac{C}{2} \sum_{j=1}^N (x_{j+1} - x_j)^2 = F_e^{(0)} + 2NC \sum_q (1 - \cos q) |\bar{x}_q|^2 \quad (1.3.3.51)$$

onde $F_e^{(0)}$ é a energia elástica da rede de referência.

Calculadas as quantidades referentes às energias livres magnética e elástica, pode-se agora escrever a energia livre total:

$$F = F_0 + \frac{Jv^2}{2} \sum_{q \neq 0} (1 - \cos q) \left[4NK - \chi(\beta, q) \right] |\bar{x}_2|^2 \quad (1.3.3.52)$$

onde:

F_0 = energia livre total da cadeia uniforme

$K \equiv C/Jv^2$

$$\varepsilon(B, q) \equiv -\frac{J}{B} \sum_k \sum_{\omega_n} \frac{\cos^2(k-q/2)}{\left\{ i\omega_n - J\varepsilon_k^{(0)} \right\} \left\{ i\omega_n - J\varepsilon_{k-q}^{(0)} \right\}}$$

Dividindo-se a eq. (1.3.3.52) por $2NJ$, obtêm-se a energia livre reduzida (8):

$$f = f^{(0)} + v^2 \sum_{q \neq 0} (1 - \cos q) \left[K - \varepsilon(t, q) \right] |\bar{x}_q|^2$$

onde:

$$\varepsilon(t, q) \equiv \frac{-t}{2N} \sum_k \sum_{\omega_n} \frac{\cos^2(k-q/2)}{\left\{ i\Omega_n - \varepsilon_k^{(0)} \right\} \left\{ i\Omega_n - \varepsilon_{k-q}^{(0)} \right\}} \quad (1.3.3.53)$$

com $t \equiv 1/BJ$ e $\Omega_n = \omega_n/J$.

Designa-se q_M para o valor do vetor de onda que torna $\varepsilon(t, q)$ máxima; a t fixa, o sistema é caracterizado pelos seguintes regimes:

- desordenado (uniforme), se $K - \varepsilon(t, q_M) > 0$;
- começa a se ordenar, se $K - \varepsilon(t, q_M) = 0$. A ordem estrutural que está se estabelecendo é aquela associada ao modo de vibração de vetor q_M ;
- ordenado, se $K - \varepsilon(t, q_M) < 0$.

Discussão detalhada da função $\varepsilon(t, q)$ se faz necessária para a determinação do vetor de onda do modo que se congela, consequentemente permitindo a demonstração matemática de que o sistema realmente se dimeriza.

Transformando

$$i\Omega_n + \Omega \quad \text{e} \quad it \sum_{\Omega_n} + 1/2\pi \int d\Omega, \quad ,$$

a eq. (1.3.3.53) é substituída por:

$$\ell(t, q) = \frac{-t}{2N} \sum_k \frac{\cos^2(k-q/2)}{2\pi i} \int_{c'} G^{RA}(\Omega, \epsilon_k) G^{RA}(\Omega, \epsilon_{k-q}) \left[\frac{1}{2} \operatorname{th}(\Omega/2t) \right] d\Omega \quad (1.3.3.54)$$

Designa-se "c" o contorno no plano complexo mostrado na Figura 1.3.3.6.

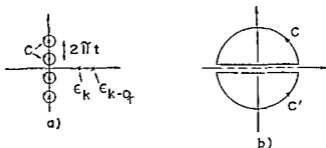


Fig. 1.3.3.6 - Contorno "c" (a) antes e (b) depois da deformação. A função de Green $G^{RA}(\Omega)$ apresenta singularidades somente para o ϵ_i no imaginário nulo.

Depois da deformação do contorno c de (a), a integral equação (1.3.3.54) é subdividida em três partes, duas das quais se anulam para contornos (c e c') no limite infinito; $\ell(t, q)$ fica, por conseguinte, reduzida a:

$$\ell(t, q) = \frac{-1}{2N} \sum_k \frac{\cos^2(k-q/2)}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ G^R(\Omega, \epsilon_k) G^R(\Omega, \epsilon_{k-q}) - \left[G^R(\Omega, \epsilon_k) G^R(\Omega, \epsilon_{k-q}) \right]^* \right\} \frac{1}{2} \operatorname{th}(\Omega/2t) d\Omega$$

pois $G^R = (G^A)^*$.

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L}(t, q) &= \frac{-1}{2N} \sum_k \frac{\cos^2(k-q/2)}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im} \left[G^R(\Omega, \epsilon_k) G^R(\Omega, \epsilon_{k-q}) \right] \text{th}(\Omega/2t) d\Omega \\
 &= \frac{1}{2N} \sum_k \cos^2(k-q/2) \left[\frac{\text{th}(\epsilon_k/2t) - \text{th}(\epsilon_{k-q}/2t)}{\epsilon_{k-q} - \epsilon_k} \right] \quad (1.3.3.55)
 \end{aligned}$$

A soma em "k" fornece (8):

$$\mathcal{L}(t, q) = \frac{1}{4\pi \text{sen}q/2} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk \cos^2(k-q/2)}{\cos k - \cos(k-q)} \left[\text{th}(\epsilon_{k-q}/2t) - \text{th}(\epsilon_k/2t) \right] \quad (1.3.3.56)$$

Fazendo $k' \equiv k-q/2$, tem-se:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L}(t, q) &= \frac{1}{4\pi \text{sen}q/2} \int_{-\pi-q/2}^{\pi-q/2} dk' \frac{\cos^2 k'}{(-2)\text{sen}k'} \left[\text{th} \left(\frac{\epsilon_{k'-q/2}}{2t} \right) - \right. \\
 &\quad \left. - \text{th} \left(\frac{\epsilon_{k'+q/2}}{2t} \right) \right] \quad (1.3.3.57)
 \end{aligned}$$

Esta integral é equivalente à representada na eq. (1.3.3.56). O integrando é o mesmo para ambas e prova-se que:

$$\int_{-\pi-q/2}^{\pi-q/2} + \int_{-\pi}^{\pi}$$

Além disso, como o integrando é par em k , pode-se escrever:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L}(t, q) &= \frac{1}{4\pi \text{sen}q/2} \int_0^{\pi} dk \frac{\cos^2 k}{\text{sen}k} \left[\text{th} \left(-\frac{\cos(k+q/2)}{2t} \right) - \right. \\
 &\quad \left. - \text{th} \left(\frac{-\cos(k-q/2)}{2t} \right) \right] \quad (1.3.3.58)
 \end{aligned}$$

Como exemplo, considere um caso particular e simples que consiste em observar o comportamento da eq. (1.3.3.58) para a temperatura nula:

$$l(0, q) = \frac{1}{2\pi} \int_{\pi/2-q/2}^{\pi/2+q/2} dk \frac{\cos^2 k}{\sin k} = \frac{1}{\pi} \left[\frac{\operatorname{arctg}(\operatorname{sen} q/2)}{\operatorname{sen} q/2} - 1 \right] \quad (1.3.3.59)$$

cujas representação gráfica é apresentada na Fig. 1.3.3.7.

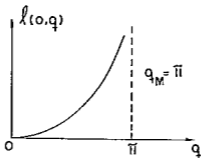


Fig. 1.3.3.7 - Função $l(t, q)$ para $t=0$, com valor máximo em $q = \pi$.

Da eq. (1.3.3.56) extrai-se uma informação sobre os comportamentos assintóticos da função $l(t, \pi)$ nos limites $t \rightarrow 0$ e $t \rightarrow \infty$, mostrados graficamente na Fig. 1.3.3.8.

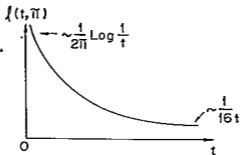


Fig. 1.3.3.8 - Função $l(t, \pi)$.

Segundo a teoria de Landau, a linha de transição de 2^a ordem é determinada pela equação:

$$\mathcal{L}\{t, q_M(t)\} = K \quad (1.3.3.60)$$

Observa-se que, no gráfico da Fig. 1.3.3.6, existe uma temperatura tal que a eq. (1.3.3.60) é satisfeita para $t = t_c$ e $q_M = \pi$; quando t decresce, o primeiro coeficiente $(K - \mathcal{L}(t, q))$ de $|\bar{x}_q|^2$ (eq. (1.3.3.53)) que se anula corresponde ao valor $q = \pi$, significando que o sistema, de fato, se dimeriza.

- Cálculo de t_c supondo:

$$i) \quad k_B t_c \ll K \longrightarrow t_c \sim e^{-2\pi k}$$

$$ii) \quad k_B t_c \gg \frac{J}{2} \longrightarrow t_c \sim 1/16k$$

Graficamente:

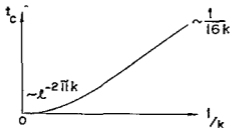


Fig. 1.3.3.9 - Variação da temperatura crítica com a constante elástica harmônica conhecendo-se os seus limites assintóticos.

1.4 - INFLUENCIA DE UMA ANISOTROPIA DE ACOPLAMENTO

À baixa temperatura, o modelo XY é sempre instável (eq. (1.3.3.27)). É interessante inserir no modelo um coeficiente de anisotropia para analisar-se seu efeito sobre a instabilidade.

Pesquisa-se um coeficiente (γ_c) (crítico) de anisotropia limite da instabilidade."

A introdução de um coeficiente de anisotropia γ permite reescrever o Hamiltoniano para a cadeia dimerizada (equação (1.3.16)), como:

$$\begin{aligned}
 H_m = & -J_2 \sum_{i=0}^{N-1} \left[(1+\gamma) S_{2i}^x S_{2i+1}^x + (1-\gamma) S_{2i}^y S_{2i+1}^y \right] - \\
 & -J_1 \sum_{i=1} \left[(1+\gamma) S_{2i-1}^x S_{2i}^x + (1-\gamma) S_{2i-1}^y S_{2i}^y \right] - \\
 & -J_1 \left[(1+\gamma) S_{2N-1}^x S_0^x + (1-\gamma) S_{2N-1}^y S_0^y \right] \quad (1.4.61)
 \end{aligned}$$

O modelo XY fornece solução exata para qualquer valor de γ (4), a despeito de terem sido aqui considerados apenas aqueles valores contidos no intervalo $-1 \leq \gamma \leq 1$, pois estuda-se um modelo intermediário entre o de Ising ($\gamma=1$) e o XY isotrópico, buscando um valor crítico de anisotropia (γ_c).

O caso $|\gamma| > 1$ será retomado posteriormente, quando então sua análise se fizer necessária nos contextos dos capítulos subsequentes. Por enquanto, servirá apenas para ilustrar os espectros de energia (ver Figs. 1.4.10 e 1.4.11).

Utilizando-se a transformação de Jordan-Wigner equação (1.3.3.17) e definindo $H_m(\gamma) = H_1 + H_2(\gamma)$, tem-se:

$$\begin{aligned}
 H_1 = & -\frac{J_2}{2} \sum_{i=0}^{N-1} (a_{2i}^\dagger a_{2i+1} + a_{2i+1}^\dagger a_{2i}) - \frac{J_1}{2} \sum_{i=1}^N (a_{2i-1}^\dagger a_{2i} + a_{2i}^\dagger a_{2i-1}) \\
 H_2(\gamma) = & -\frac{\gamma J_2}{2} \sum_{i=0}^{N-1} (a_{2i}^\dagger a_{2i+1}^\dagger + a_{2i+1} a_{2i}) - \frac{\gamma J_1}{2} \sum_{i=1}^N (a_{2i-1}^\dagger a_{2i}^\dagger + a_{2i} a_{2i-1}) \quad (1.4.62)
 \end{aligned}$$

Utilizando a transformação de Fourier (eq.(1.3.2.8))
na eq. (1.4.62), obtêm-se:

$$\begin{aligned} E_1 &= -\frac{1}{2} \sum_k \left[(J_2 e^{-ik} + J_1 e^{ik}) c_k^\dagger c_k^\dagger + (J_2 e^{ik} + J_1 e^{-ik}) c_k^\dagger c_k \right] \\ E_2 &= -\frac{\gamma}{2} \sum_k \left[(J_2 e^{-ik} - J_1 e^{ik}) c_k^\dagger c_{-k} + (J_2 e^{ik} - J_1 e^{-ik}) c_{-k}^\dagger c_k^\dagger \right] \end{aligned} \quad (1.4.63)$$

com:

$$\begin{aligned} c_k^\dagger e^{i\phi_k} &= J_2/2 (1+\gamma) e^{-ik} + J_1/2 (1-\gamma) e^{-ik} \\ c_k^\dagger e^{i\phi_k} &= J_2/2 (1-\gamma) e^{ik} + J_1/2 (1+\gamma) e^{-ik} \end{aligned}$$

obtêm-se os espectros de energia como função do coeficiente de anisotropia γ :

$$\begin{cases} \epsilon_k^+ = -J_0 (1+\gamma b) \sqrt{\cos^2 k + \left(\frac{b+\gamma}{1-\gamma b}\right)^2 \sin^2 k} \\ \epsilon_k^- = J_0 (1-\gamma b) \sqrt{\cos^2 k + \left(\frac{b-\gamma}{1-\gamma b}\right)^2 \sin^2 k} \end{cases} \quad (1.4.64)$$

e

$$\begin{cases} \phi_k^+ \equiv \arctg \left[\left(\frac{b+\gamma}{1-\gamma b}\right) \operatorname{tg} k \right] \\ \phi_k^- \equiv \arctg \left[\left(\frac{b-\gamma}{1-\gamma b}\right) \operatorname{tg} k \right] \end{cases} \quad (1.4.65)$$

A seguir faz-se a representação gráfica (Figs. 1.4.10 e 1.4.11) da eq. (1.4.64) para os casos: isotrópico, anisotrópico no limite "Ising" ($\gamma=1$), um intermediário dos anteriores e

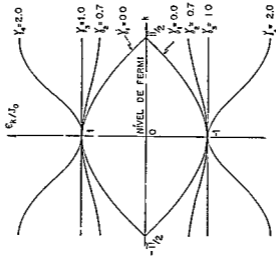


Fig. 1.4.10 - Caso uniforme ($\eta = 0 \Rightarrow b = 0$). Energia das excitações elementares como função do vetor de onda para quatro valores do coeficiente de anisotropia. $\epsilon_k = \epsilon'_k$ ou $\epsilon''_k = \epsilon_k$ conforme tabela 1a 1.4.1.

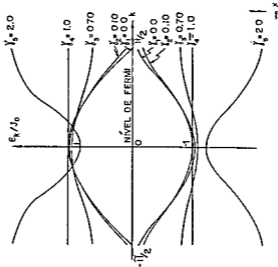


Fig. 1.4.11 - Caso não uniforme ($\eta \neq 0$). Exemplo para $b = 0,10$. Energia das excitações elementares para vários valores da anisotropia. $\epsilon_k = \epsilon'_k$ ou $\epsilon''_k = \epsilon_k$ conforme tabela 1.4.2.

um último caso para o qual $\gamma > 1$. Considera-se as cadeias uni-forme ($b = 0$) e dimerizada (particularizada para $b = 0.10$). Os dados para a construção dos gráficos estão colocados nas Tabelas 1.4.1 e 1.4.2.

TABELA 1.4.1 - Valores numéricos das funções dadas pela eq. (1.4.64), para o caso uniforme.

		b = 0.0							
		$\gamma_1 = 0.00$		$\gamma_2 = 0.70$		$\gamma_3 = 1.00$		$\gamma_4 = 2.00$	
k		ϵ_k^i/J_0	ϵ_k^u/J_0	ϵ_k^i/J_0	ϵ_k^u/J_0	ϵ_k^i/J_0	ϵ_k^u/J_0	ϵ_k^i/J_0	ϵ_k^u/J_0
0		-1.00	1.00	-1.00	1.00	-1.00	1.00	-1.00	1.00
$\pi/4$		-0.71	0.71	-0.87	0.87	-1.00	1.00	-1.58	1.58
$\pi/3$		-0.50	0.50	-0.79	0.79	-1.00	1.00	-1.80	1.80
$\pi/2$		0.00	0.00	-0.70	0.70	-1.00	1.00	-2.00	2.00

TABELA 1.4.2 - Valores numéricos das funções dadas pela eq. (1.4.64), para a cadeia dimerizada.

		b = 0.10									
		$\gamma_1 = 0.00$		$\gamma_2 = 0.10$		$\gamma_3 = 0.70$		$\gamma_4 = 1.00$		$\gamma_5 = 2.00$	
k		ϵ_k^i/J_0	ϵ_k^u/J_0	ϵ_k^i/J_0	ϵ_k^u/J_0	ϵ_k^i/J_0	ϵ_k^u/J_0	ϵ_k^i/J_0	ϵ_k^u/J_0	ϵ_k^i/J_0	ϵ_k^u/J_0
0		-1.00	1.00	-1.01	0.99	-1.07	0.93	-1.00	0.90	-1.20	0.80
$\pi/4$		-0.71	0.71	-0.73	0.70	-0.94	0.78	-1.10	0.90	-1.71	1.45
$\pi/3$		-0.51	0.51	-0.53	0.49	-0.88	0.70	-1.10	0.90	-1.91	1.69
$\pi/2$		-0.10	0.10	-0.20	0.00	-0.80	0.60	-1.10	0.90	-2.10	1.90

Algumas das informações contidas nas eqs. (1.4.64) são agora evidenciadas. Dentre elas, destaca-se:

- a) $\epsilon_k'/J_0 = 0$ é autovalor de H , $s\bar{0}$ e somente $s\bar{0}$, se $\gamma = b = 0$;
 $\epsilon_k''/J_0 = 0$ é autovalor de H , $s\bar{0}$ e somente $s\bar{0}$, se $b = \gamma$;
- b) se $b \neq 0$ ou $\gamma \neq 0$, existe sempre um "gap" no espectro para $k = \pm\pi/2$;
- c) $d(\epsilon_k/J_0)/dk|_{k=\pm\pi/2} = 0$, pois nos pontos extremos da zona de Bríllouin, a velocidade de grupo é nula;
- d) o "gap" do espectro de fêrmions é uma função crescente do coeficiente de anisotropia, a b fixo;
- e) o caso uniforme anisotrópico ($b = 0$; $\gamma \neq 0$) é matematicamente equivalente ao caso não-uniforme isotrópico ($b \neq 0$, $\gamma = 0$); γ e b têm papéis simétricos, tal que $\epsilon_k'(b, \gamma) = \epsilon_k''(\gamma, b)$ e $\epsilon_k''(b, \gamma) = \epsilon_k'(b, \gamma)$.

É de fundamental importância para a análise dos resultados deste trabalho, ter-se sempre em mente que, para sua obtenção, foi utilizada a hipótese de que a fase ordenada é dimerizada, conforme Hamiltoniano eq. (1.4.61), embora este fato não tenha sido nem provado nem justificado fisicamente para $\gamma \neq 0$ pelos autores que obtiveram a eq. (1.4.64).

Através da transformação (Z):

$$\begin{cases} u_k = 1/2 \left[e^{-i\phi_k'/2} (c_k^+ + c_{-k}^+) - e^{i\phi_k'/2} (c_{-k}^- - c_k^-) \right] \\ v_k = 1/2 \left[e^{-i\phi_k''/2} (c_{-k}^+ - c_k^+) - e^{i\phi_k''/2} (c_{-k}^- + c_k^-) \right] \end{cases} \quad (1.4.66)$$

diagonaliza-se a eq. (1.4.63), onde u_k e v_k são operadores fêrmions. Obtêm-se:

$$H_m = 1/2 \sum_k (\epsilon_k' - \epsilon_k'') - \sum_k \epsilon_k' Z_k^+ Z_k + \sum_k \epsilon_k'' v_k^+ v_k \quad (1.4.67)$$

onde $Z_k^\dagger Z_k \equiv 1 - u_k^\dagger u_k$, para uma descrição tipo "buraco" (4).

A energia do estado fundamental \bar{E} :

$$E_0 = \frac{1}{Z} \sum_k (\epsilon_k - \epsilon_k^0) \quad (1.4.68)$$

No limite $N \rightarrow \infty$, o somatório na eq. (1.4.68) é substituído por um integral, e a eq. (1.4.68) por:

$$E_0 = -\frac{2N}{2\pi} \int_0^{\pi/2} \left\{ \left[(1+\gamma b)(1-d^2 \sin^2 k) \right]^{1/2} + \left[(1-\gamma b)(1-d'^2 \sin^2 k) \right]^{1/2} \right\} dk \quad (1.4.69)$$

com:

$$d^2 \equiv 1 - \left(\frac{b+\gamma}{1+\gamma b} \right)^2$$

$$d'^2 \equiv 1 - \left(\frac{b-\gamma}{1-\gamma b} \right)^2$$

O desenvolvimento "tipo Landau", da eq. (1.4.69) em potências de η ($b = b(\eta) \approx \eta$), permite escrever a energia livre por partícula, a temperatura nula, como:

$$\frac{F_0}{2N} = \frac{E_0 + E_{elástica}}{2N} = \frac{E_0(n=0)}{2N} + \left[C - L(\gamma) \frac{\lambda^2}{J_0} \right] \eta^2 \quad (1.4.70)$$

$E_0/2N(n=0)$ cresce suavemente entre os casos limites:

$$\frac{E_0}{2N}(n=0) = -J_0/\pi \quad ; \quad \text{caso isotrópico } (\gamma = 0)$$

$$\frac{E_0}{2N}(n=0) = -J_0/2 \quad ; \quad \text{caso Ising } (\gamma = 1) .$$

A função $L(\gamma)$ apresenta os comportamentos assintóti-

cos na vizinhança de $\gamma = 0$ (modelo XY) e de $\gamma = 1$ (modelo de Ising) que constam da Fig. 1.4.12.

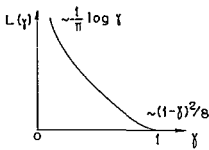


Fig. 1.4.12 - Função $L(\gamma)$
($T = 0$)

O limite assintótico de $L(\gamma)$ para $\gamma \rightarrow 1$ obtido por Dubois e Carton é $(1 - \gamma^2)/2$, porém o resultado que consta na Fig. 1.4.12 é que está em completa concordância com os resultados numéricos (ver Capítulo III).

Através da análise da eq. (1.4.70), conclui-se que o modelo de Ising é sempre estável e o XY isotrópico sempre instável. Portanto existe, no intervalo $[0, 1]$, um coeficiente de anisotropia limite da instabilidade (γ_L) definido por:

$$C = L(\gamma_L) \lambda^2 / J_0 \quad (1.4.73)$$

ou

$$K = L(\gamma_L) \quad (1.4.74)$$

É interessante observar que na eq. (1.4.70), F_0 é sempre analítica em η para $\gamma \neq 0$. Para $\gamma \rightarrow 0$, $L(\gamma) \rightarrow \infty$, invalidando consequentemente a expansão da energia livre (eq. (1.4.70)); neste caso, é necessário substituí-la pela eq. (1.3.3.27).

1.5 - INFLUÊNCIA DO CAMPO MAGNÉTICO EXTERNO SOBRE A TRANSIÇÃO

Neste contexto, é interessante analisar-se a influên-

cia do campo magnético sobre a transição de fase em questão; este estudo realizado por Tsallis⁽⁸⁾ será assunto a ser tratado como sequência natural dos anteriores.

À eq. (1.3.1.3) adiciona-se um termo devido à presença de um campo magnético externo atuando sobre o sistema de férmions, ao longo do eixo-Z.

$$H_m = - \sum_{\alpha=1}^S J_{\alpha}^{(s)} \sum_{j=1}^N (S_{\alpha,j}^x S_{\alpha+1,j}^x + S_{\alpha,j}^y S_{\alpha+1,j}^y) - \mu H \sum_{\alpha=1}^S \sum_{j=1}^N S_{\alpha,j} \quad (1.5.75)$$

onde H é, por convenção, positivo e μ é o momento magnético de cada spin. Por hipótese, $J > 0$ e $\lambda > 0$.

Utilizando-se a transformação de Jordan-Wigner eq.(1.3.3.17) e definindo-se $h \equiv \mu H/2J$, a eq. (1.5.75) é modificada para:

$$H_m/J = - 1/2 \sum_{\alpha=1}^S J_{\alpha}^{(s)} \sum_{j=1}^N (a_{\alpha,j}^{\dagger} a_{\alpha+1,j} + a_{\alpha+1,j}^{\dagger} a_{\alpha,j}) + h \sum_{\alpha=1}^S \sum_{j=1}^N a_{\alpha,j}^{\dagger} a_{\alpha,j} \quad (1.5.76)$$

Para a diagonalização do Hamiltoniano (eq.(1.5.76)), repete-se o procedimento realizado na seção 1.3.2. O Hamiltoniano resultante, cujos autovalores são agora funções do campo magnético, é expresso em termos dos operadores férmions α_k e β_k .

Para $S = 1$:

$$e_k = h - J_1 \cos k \quad (-\pi < k \leq \pi) \quad (1.5.77)$$

Para $S = 2$:

Discussão analítica e numérica da eq. (1.5.80) é realizada por Tsallis (8) para alguns casos de interesse, variando-se h e t . Outrossim, o único caso a ser tratado aqui está representado no gráfico da Fig. 1.5.13.

$$t = 0 \quad \text{e} \quad 0 \leq h \leq 1$$

$$\lambda(0, h, q) = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\text{sen}q/2} \int_{|-q/2 + \text{Arcosh}|}^{q/2 + \text{Arcosh}} dk \frac{\cos^2 k}{\text{sen}k} =$$

$$= \begin{cases} \frac{1}{\pi} \left[\frac{1}{\text{sen}q/2} \text{argth} \left(\frac{\text{sen}q/2}{\sqrt{1-h^2}} \right) - \sqrt{1-h^2} \right] & \text{se } q < 2 \text{ Arcosh} \\ \frac{1}{\pi} \left[\frac{1}{\text{sen}q/2} \text{argth} \left(\frac{\sqrt{1-h^2}}{\text{sen}q/2} \right) - \sqrt{1-h^2} \right] & \text{se } q > 2 \text{ Arcosh} \end{cases}$$

Graficamente:

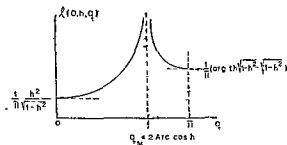


Fig. 1.5.13 - Função $\lambda(t, h, q)$ para $t = 0$ e $0 \leq h \leq 1$.

Observa-se que existe uma divergência de $\lambda(0, h, q)$ para $q = 2 \text{ Arcosh}$ sendo portanto este o valor de q_M no limite

' $K \rightarrow \infty$. Para $h = 0$, reobtem-se $q_M = \pi$, conforme gráfico da Figura 1.3.3.7.

Para diferentes valores de K , pode-se traçar, no espaço $h-t$, linhas de transição de fase, determinadas pela resolução da equação:

$$\chi(t, h, q_M(t, h)) = K \quad (1.5.81)$$

O estudo destas linhas foi realizado recentemente ⁽¹⁷⁾. Serão mostradas aqui, apenas seus comportamentos qualitativos (Figura 1.5.14).

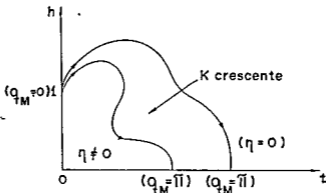


Fig. 1.5.14 - Linhas de transição, com variações de K . As flechas indicam sentido crescente de q de 0 a π .

'Como função de h e K , qualquer vetor de onda q - mesmo aqueles incomensuráveis com a rede, poderão ter um modo associado que se "congela" quando o sistema se ordena.

Sobre as linhas de transição, as flechas indicam sentido crescente do valor do vetor de onda de $q = 0$ a $q = \pi$. Para $h = 0 \rightarrow q_M = \pi$, ou seja o sistema está dimerizado.

1.6 - JUSTIFICATIVA DA AUSÊNCIA DE ORDEM MAGNÉTICA, A UMA DIMEN SÃO

A uma cadeia linear com interação de "exchange" de cur-
to alcance entre "spins", não é permitido apresentar ordem mag-
nética à temperatura finita T , segundo o teorema de Mermin e
Wagner⁽¹⁾, traduzido matematicamente (a uma dimensão) por:

$$|S_Z| < \frac{\text{CONSTANTE}}{T^{2/3}} |h|^{1/3} \quad \left[\begin{array}{l} h \rightarrow 0 \\ 1 \text{ dimensão} \end{array} \right] \quad (1.6.82)$$

onde S_Z pode ser considerada a magnetização por partícula em um
campo uniforme h , ou a diferença das magnetizações por partícu-
la, das duas sub-redes (caso antiferromagnético) em um campo de
grandeza h e de sinal oposto para as sub-redes ("staggered"). O
teorema é aplicável para o modelo de Heisenberg a restrito a
transições de fase identificadas pela ausência de magnetização
espontânea ou de sub-rede. Ele não exclui a possibilidade de
existência de outros tipos de transição. Por exemplo, um estado
com $S_Z = 0$, mas $(\partial S_Z / \partial h) = \infty$ para $h \rightarrow 0$ ($T \neq 0$), não é inconsis-
tente com a eq. (1.6.82) (18-19-20-21).

Quando um ferromagneto Ising sofre uma transição de
fase ele tem apenas dois estados ordenados - um com magnetiza-
ção positiva e outro com magnetização negativa. Embora o Hamil-
toniano seja invariante sob inversão de spins, um estado parti-
cular ordenado não o é, e por isso, costuma-se dizer que a tran-
sição de fase resulta numa "simetria {discreta} quebrada". Exis-
tem, outrossim, inúmeros sistemas nos quais o estado ordenado
"quebra" uma simetria contínua do Hamiltoniano. Por exemplo :

no ferromagneto Heisenberg, o Hamiltoniano é invariante sob rotações tridimensionais no espaço dos spins (o Hamiltoniano XY é invariante sob rotações bidimensionais), enquanto que a magnetização espontânea em um estado ordenado pode "apontar" em uma direção particular no espaço. Similarmente, há uma variação periódica de densidade num sólido cristalino, embora o Hamiltoniano seja invariante sob todas as translações (e não simplesmente aquelas da rede de Bravais).

Argumentos intuitivos levaram a acreditar que sistemas do tipo descrito acima nos quais a ordem "rompe" uma simetria contínua, não podem exibir ordem de longo alcance em uma e duas dimensões para forças de curto alcance. A desigualdade de Bogoliubov proporcionou a Mermin e Wagner (1966), através de prova rigorosa, a constatação destes argumentos para o modelo de Heisenberg⁽²²⁾.

1.7 - "MODELO DE DOMB", PARA $d = 1$

A eq. (1.3.1.5) representa uma expansão linear da integral de "exchange" em potências do espaçamento médio entre os átomos da rede, hipótese esta, essencial para a obtenção de alguns dos mais relevantes resultados presentes neste capítulo.

O modelo para o qual o parâmetro de "exchange" é suposto depender da distância média entre os átomos da rede é denominado de Modelo de Domb unidimensional.

Rice (1954), Wheeler e Griffiths (1968) analisaram detalhadamente a possibilidade de ocorrência de calor específico (a volume constante) infinito e concluíram que um calor específico magnético divergente para uma rede incompressível se tornaria, em geral, uma transição de primeira ordem numa rede com-

pressível. Domb (1956) mostrou que isto ocorre quando é discutido o modelo de Ising com interação de "exchange" entre spins primeiros vizinhos, com parâmetro J dependente do volume da rede. Aproximações do tipo campo médio aplicadas ao modelo de Ising, para as quais a temperatura crítica T_c depende do volume da rede, foram empregadas para explicar a transição de primeira ordem de alguns materiais magnéticos (Beam e Rodbell 1962, Mattis e Shultz, 1963) ⁽⁹⁻²³⁾. Para o modelo de Ising, Domb colocou a energia livre sob a seguinte forma:

$$F = - n k_B T \psi (J/kT) ,$$

onde $J = J(v)$ para uma rede compressível.

Tem-se para a pressão:

$$P = - \left(\frac{\partial F}{\partial v} \right)_T = n J' \frac{\partial \psi}{\partial v} \quad (J' \equiv \frac{dJ}{dv}) \quad (1.7.83)$$

$$E = - T^2 \frac{\partial}{\partial T} (F/T)_v = - n J \frac{\partial \psi}{\partial T}$$

onde $\partial \psi / \partial T$ permanece finita no ponto de Curie.

O calor específico, a volume constante \bar{c}_v :

$$\bar{c}_v = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_v = n k_B \left(\frac{J}{T} \right)^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial T^2}$$

Se para este modelo, o calor específico pode ser infinito, então $\partial^2 \psi / \partial T^2$ será infinita no ponto de Curie. Também

$$\left(\frac{\partial P}{\partial v} \right)_T = n J'' \left(\frac{\partial \psi}{\partial v} \right)_T + n (J'^2 / k_B T) \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial v^2} \right)_T$$

e como $\partial \psi / \partial v$ permanece finita no ponto de Curie, existe sempre

uma região em sua vizinhança ($T \geq T_c$) na qual o segundo termo é dominante ($\partial^2 \psi / \partial v^2$ diverge em T_c) e por isso $(\partial p / \partial v)_T > 0$, portanto $(\partial^2 F / \partial v^2)_T < 0$ (ou seja F é côncava como função de v). Nesta região a fase homogênea é instável, a curva $p-v$ é do tipo Van der Waals e o sistema divide-se em 2 fases. Assim a transição é de 1ª ordem. Na Fig. 1.7.15, representa-se a energia livre de Helmholtz por unidade de volume $f(p, T)$ como função de $\rho = 1/v$, quando existe uma transição de 1ª ordem (22).

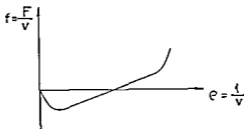


Fig. 1.7.15 - Função $f(\rho)$ quando existe uma transição de fase de primeira ordem. A região plana é característica desta ordem de transição; consequentemente existem múltiplas soluções para a equação (1.7.83). (É interessante comparar-se com as isotermas de Van der Waals).

Este é um exemplo típico de uma transição magnetotermomecânica: o calor específico foi alto o suficiente para provocar a instabilidade mecânica. Este modelo foi criticado principalmente por excluir o efeito das flutuações locais dos "espaçamentos" da rede sobre o parâmetro de "exchange".

CAPÍTULO 11

ENERGIA LIVRE COM ANISOTROPIA E TEMPERATURA FINITA

2.1 - INTRODUÇÃO

Foi mostrado (no Capítulo 1) que, à temperatura nula, a cadeia linear de spins 1/2 com acoplamento ferromagnético ou antiferromagnético XY entre primeiros vizinhos com magnetostrição sofre uma transição de fase estrutural, evidenciada pela instabilidade da cadeia uniforme frente a uma deformação que a separa em duas sub-redes. Esta instabilidade, ausente no modelo de Ising, existe para um acoplamento XY anisotrópico. No intervalo $0 \leq \gamma \leq 1$, definiu-se um coeficiente de anisotropia limite desta instabilidade γ_L ($T = 0$). É dentro deste contexto que se desenvolve este capítulo. A introdução de uma anisotropia (cujo parâmetro pode ser inclusive superior à unidade, $\gamma > 1$) no Hamiltoniano de uma cadeia linear dimerizada, permite avaliar os efeitos causados por sua presença sobre os espectros das excitações elementares e também, sobre a função de partição e consequentemente sobre todas as propriedades termodinâmicas do sistema, à temperaturas finitas. Mais especificamente, desenvolve-se a energia livre em potências do parâmetro de ordem; calcula-se analiticamente os coeficientes dos termos de segunda e quarta ordens que, sob determinadas condições prescritas pela teoria de Landau, fornecerão os subsídios teóricos necessários,

respectivamente, para a construção das linhas de transição (as quais separam as fases do sistema) e a posterior análise da ordem da transição.

2.2 - MODELO

Este modelo que é essencialmente aquele descrito no Capítulo I, envolve a escolha de termos para a energia livre que representem as contribuições dos "spins" e da rede do sistema total. Este é composto de um arranjo linear de partículas portadoras de spin 1/2 com acoplamento XY entre primeiros vizinhos e interação elástica incluindo um termo anarmônico. Sua aplicabilidade é restrita a partículas que se deslocam de suas posições de equilíbrio apenas de tal maneira que as distâncias entre partículas adjacentes alternem-se ao longo da cadeia unidimensional, em outras palavras, a restrição impõe que, se a cadeia puder se ordenar, que o faça através de uma dimerização. Esta transição, denominada de "spin-Peierls a campo magnético nulo", é uma dimerização progressiva em materiais magnéticos quasi-unidimensionais. Para $T > T_c$, o sistema é descrito como um conjunto de cadeias uniformes 1-D. O acoplamento das cadeias a um campo tridimensional de fonons da rede induz a transição magnetoelástica. Para $T < T_c$, as cadeias magnéticas têm um caráter dimerizado resultante da distorção da rede (11-12). Devido à presença de magnetostricção no modelo, os estados magnético e elástico são interdependentes; em geral esta interdependência magnetoelástica acopla as vibrações magnéticas (ondas de spin) e fonônica, removendo, assim, a degenerescência existente no espec-

tro de energia favorecendo, assim, o aparecimento de um "gap". Como resultado, a cadeia se distorce, em concordância com o teorema de Jahn-Teller.

Assume-se que a introdução de um parâmetro de anisotropia no Hamiltoniano permite apenas a dimerização como fase ordenada do sistema. Tal hipótese torna-se razoável, no entanto, quando são comparadas as influências da anisotropia e do campo magnético sobre o espectro de energias. Este, desloca o nível de Fermi, aceitando quaisquer valores de vetor de onda para o(s) modo(s) que se "congela(m)" — inclusive aqueles incomensuráveis com o parâmetro de rede, enquanto que a anisotropia mantém o "gap" de energia fixo em $k = \pm \pi/2$ para todo valor do seu parâmetro ($\gamma \geq 1$). Naturalmente, esta justificativa é baseada apenas na análise dos espectros e através de uma comparação. Uma demonstração incluiria uma sequência de procedimentos análogos àqueles realizados na Subseção 1.3.5, empregando recursos de perturbação da cadeia uniforme. O Hamiltoniano anisotrópico a ser utilizado seria aquele adaptado para considerar todas as deformações possíveis da cadeia uniforme. Embora as dificuldades operacionais sejam transponíveis, esta prova é totalmente alheia ao objetivo deste trabalho.

Repete-se, por conveniência, as equações referentes aos Hamiltonianos anisotrópicos expressos sob as formas de operadores (componentes) de spin e dos operadores férmions, respectivamente, eqs. (2.2.1) e (2.2.2).

$$\begin{aligned}
 H_m = & - J_1 \left[(1+\gamma) S_{N-1}^x S_0^x + (1-\gamma) S_{2N-1}^y S_0^y \right] - \\
 & - J_1 \sum_{i=1}^{N-1} \left[(1+\gamma) S_{2i-1}^x S_{2i}^x + (1-\gamma) S_{2i-1}^y S_{2i}^y \right] -
 \end{aligned}$$

$$- J_2 \sum_{i=0}^{N-1} \left[(1+\gamma) S_{2i}^x S_{2i+1}^x + (1-\gamma) S_{2i}^y S_{2i+1}^y \right] \quad (2.2.1)$$

$$H_m \equiv H_1 + H_2(\gamma) \quad (2.2.2)$$

onde:

$$\begin{cases} H_1 = -\frac{J_1}{2} \sum_{i=1}^N (a_{2i-1}^\dagger a_{2i} + a_{2i}^\dagger a_{2i-1}) - \frac{J_2}{2} \sum_{i=0}^{N-1} (a_{2i+1}^\dagger a_{2i} + a_{2i}^\dagger a_{2i+1}) \\ H_2 = -\gamma \frac{J_1}{2} \sum_{i=1}^N (a_{2i-1}^\dagger a_{2i} + a_{2i}^\dagger a_{2i-1}) - \gamma \frac{J_2}{2} \sum_{i=0}^{N-1} (a_{2i}^\dagger a_{2i+1} + a_{2i+1}^\dagger a_{2i}) \end{cases}$$

Mostra-se, a seguir, que o modelo é invariante sob uma transformação que age sobre os sítios pares da seguinte forma:

$$\begin{cases} S_{2i}^x = -S_{2i}^x \\ S_{2i}^y = -S_{2i}^y \\ S_{2i}^z = -S_{2i}^z \end{cases}$$

Esta é uma transformação canônica pois deixa invariante a comutação dos operadores de spin ($S = 1/2$):

$$\left[S_{2i}^x, S_{2i}^y \right] = i\hbar S_{2i}^z$$

$$\left[S_{2i}^y, S_{2i}^z \right] = i\hbar S_{2i}^x$$

$$\left[S_{2i}^z, S_{2i}^x \right] = i\hbar S_{2i}^y$$

A eq. (2.2.1) pode ser escrita sob a seguinte forma:

$$\begin{aligned}
H_m = & -J_{1Y} \left[\left(1 + \frac{1}{Y}\right) S_{2N-1}^X S_0^X - \left(1 - \frac{1}{Y}\right) S_{2N-1}^Y S_0^Y \right] - \\
& -J_{1Y} \sum_{i=1}^{N-1} \left[\left(1 + \frac{1}{Y}\right) S_{2i-1}^X S_{2i}^X - \left(1 - \frac{1}{Y}\right) S_{2i-1}^Y S_{2i}^Y \right] - \\
& -J_{2Y} \sum_{i=0}^{N-1} \left[\left(1 + \frac{1}{Y}\right) S_{2i}^X S_{2i-1}^X - \left(1 - \frac{1}{Y}\right) S_{2i}^Y S_{2i-1}^Y \right] \\
= & -J_{1Y} \left[\left(1 + \frac{1}{Y}\right) S_{2N-1}^X S_0^X + \left(1 - \frac{1}{Y}\right) S_{2N-1}^Y S_0^Y \right] - \\
& -J_{1Y} \sum_{i=1}^{N-1} \left[\left(1 + \frac{1}{Y}\right) S_{2i-1}^X S_{2i}^X + \left(1 - \frac{1}{Y}\right) S_{2i-1}^Y S_{2i}^Y \right] - \\
& -J_{2Y} \sum_{i=0}^{N-1} \left[\left(1 + \frac{1}{Y}\right) S_{2i}^X S_{2i-1}^X + \left(1 - \frac{1}{Y}\right) S_{2i}^Y S_{2i-1}^Y \right]
\end{aligned} \tag{2.2.3}$$

A comparação entre o Hamiltoniano eq. (2.2.1) e o Hamiltoniano transformado eq. (2.2.3) enfatiza a relação existente entre o conjunto de variáveis $\{J; \gamma\}$ e $\{J_Y; 1/\gamma\}$. Esta invariância do modelo estende-se, também, à sua contribuição elástica cujo Hamiltoniano é $H_{e1} = C\eta^2 + D\eta^4$; η é invariante sob a transformação; as constantes elásticas C e D e também a temperatura δ^{-1} são frequentemente empregadas nas formas: $\bar{C} \equiv 2\pi J_0 C / (J^1)^2$; $\bar{D} \equiv D_0^3 / (J^1)^4$ e $\delta \equiv \beta J_0 / 2$, respectivamente e se transformam conforme está indicado no quadro 2.1.

γ	\rightarrow	$1/\gamma$
J	\rightarrow	J_Y
δ^{-1}	\rightarrow	δ^{-1}/γ
\bar{C}	\rightarrow	\bar{C}/γ
\bar{D}	\rightarrow	\bar{D}/γ
η	\rightarrow	η

Quadro 2.1 - Resumo das variáveis anisotropia e "exchange", temperatura, constantes elásticas e parâmetro de ordem sob a transformação.

Esta transformação será ilustrada numericamente no Capítulo III.

2.3 - MÉTODO USADO

A simplificação física e operacional introduzida pela transformação de Jordan-Wigner, é notável. Ela consegue reduzir ao problema de um gás ideal de férmions (modos normais de excitações magnéticas), o problema, bastante complexo, de um sistema de N corpos acoplados (átomos). O Hamiltoniano então obtido é escrito sob forma quadrática e pode ser exatamente diagonalizado. A simplicidade deste Hamiltoniano está estreitamente relacionada ao arranjo dos "spins" numa forma tal que as interações ocorram apenas entre "primeiros vizinhos" e cujas componentes ao longo do eixo-Z sejam desprezíveis (modelo XY). Caso as interações fossem estendidas aos n-ésimos vizinhos mais próximos, o Hamiltoniano (eq. (2.2.2)) envolveria um polinômio de ordem 2n nos operadores férmions⁽⁴⁾. Portanto, faz-se máximo uso do caráter da interação (acoplamento XY; "spin" 1/2; primeiros vizinhos) e da unidimensionalidade do sistema.

O Hamiltoniano (eq. (2.2.2)) é reduzido à forma diagonal (ver Capítulo I):

$$H_m = \frac{1}{2} \sum_k (c_k^\dagger - c_k^n) - \sum_k c_k^\dagger Z_k^\dagger Z_k + \sum_k c_k^n v_k^\dagger v_k \quad (2.3.4)$$

onde $Z_k^\dagger Z_k = 1 - u_k^\dagger u_k$; u_k e v_k são operadores férmions. Todas as funções e os operadores foram definidos na Seção. 1.4.

Através do Hamiltoniano (eq. (2.3.4)), pode-se obter a função de partição:

$$Z_m = \text{Tr } e^{-\beta H_m} \quad (2.3.5)$$

e, conseqüentemente, a energia livre:

$$F_m = -k_B T \ln Z_m \quad (2.3.6)$$

Em geral, surgem dificuldades operacionais inevitáveis inerentes ao modelo que frustram qualquer iniciativa de cálculo exato de Z . O modelo aqui estudado tem solução exata para qualquer valor do parâmetro de anisotropia ($\gamma \geq 1$), significando que são conhecidos o estado fundamental, todas as excitações elementares, a função de partição e por conseguinte, a energia livre (4).

2.4 - CÁLCULO DA ENERGIA LIVRE

A expressão para a função de partição (eq. (2.3.5)) tem sua forma bastante simplificada graças à natureza das partículas do sistema - férmions independentes:

$$Z_m = \prod_k \left[2 \cosh(\beta \epsilon_k^+ / 2) \right] \left[2 \cosh(\beta \epsilon_k^- / 2) \right] \quad (2.4.7)$$

onde

$$\begin{cases} \epsilon_k^+ = -J_0 (1 + \gamma b) \left[\cos^2 k + \left(\frac{b+\gamma}{1+\gamma b} \right)^2 \sin^2 k \right]^{1/2} \\ \epsilon_k^- = J_0 (1 - \gamma b) \left[\cos^2 k + \left(\frac{b-\gamma}{1-\gamma b} \right)^2 \sin^2 k \right]^{1/2} \end{cases}$$

A energia livre é o potencial "grand" canônico de tal sistema com potencial químico nulo e cuja contribuição magnética é:

$$F_m = \frac{-1}{\beta \pi} \int_0^{\pi/2} \left[\ln \left[2 \cosh \left(\frac{\beta \epsilon_k^+}{2} \right) \right] + \ln \left[2 \cosh \left(\frac{\beta \epsilon_k^-}{2} \right) \right] \right] dk \quad (2.4.8)$$

Ao anular-se o parâmetro de anisotropia γ nas eqs. (2.4.7) e (2.4.8) reobtem-se, respectivamente, a eq. (1.3.3.28) e a contribuição magnética da eq. (1.3.3.29).

Desprezando-se as flutuações cristalinas, adiciona-se à eq.(2.4.8) um termo que representa a contribuição elástica à energia livre, cuja expressão geral é dada por:

$$F = F_m + F_e; \quad (2.4.9)$$

onde

$$\frac{F_e}{2N} = \frac{F_{e1}(0)}{2N} + C_n^2 + D_n^4 + \dots \quad (2.4.10)$$

A ausência dos termos ímpares na expansão (eq.(2.4.10)) pode ser justificada através de argumentos de simetria. Mostra-se⁽¹⁴⁾ que o termo linear é identicamente nulo. Os demais termos ímpares também são nulos devido à simetria do sistema. A expansão será limitada ao termo de quarta ordem. A expansão da energia livre magnética em função do parâmetro de ordem, da temperatura e do coeficiente de anisotropia, permite reescrever a energia livre total por partícula (eq. (2.4.10)) como:

$$\frac{F}{2N} = \frac{F(0)}{2N} + (C + C_m)n^2 + (D + D_m)n^4 \quad (2.4.11)$$

onde C_m e D_m são funções de γ e T e representam as contribuições magnéticas; suas formas funcionais serão conhecidas posteriormente. A ausência do termo cúbico na eq. (2.4.11) não compromete a existência de transição de segunda ordem⁽²⁴⁾. É o coe

ficiente de η^4 quem fornecerá informações sobre a ordem da transição, assunto a ser tratado na Seção 2.6.

2.5 - LINHAS DE TRANSIÇÃO

Um dos tópicos mais relevantes para o estudo de uma transição de fase é o conhecimento de suas linhas de transição, pois são elas que delimitam as fases permitidas pelo modelo. Matematicamente elas são facilmente obtidas; para tanto, basta anular-se o coeficiente de η^2 na expansão da energia livre (eq. (2.4.11)). Determina-se, assim, a temperatura crítica pertencente ao problema.

Define-se

$$\bar{c} \equiv \frac{2\pi J_0 c}{\lambda^2} \quad (2.5.12)$$

onde J_0 tem a mesma definição introduzida no Capítulo 1, ou seja:

$$J_0 \equiv \frac{|J_1 + J_2|}{2}$$

Mas agora, as integrais de "exchange" são expandidas até quarta ordem como função do parâmetro η ($\eta \rightarrow 0$):

$$\begin{aligned} J_1 &= J - J^I \eta + \frac{J^{II} \eta^2}{2!} - \frac{J^{III} \eta^3}{3!} + \frac{J^{IV} \eta^4}{4!} \\ J_2 &= J + J^I \eta + \frac{J^{II} \eta^2}{2!} + \frac{J^{III} \eta^3}{3!} + \frac{J^{IV} \eta^4}{4!} \end{aligned} \quad (2.5.13)$$

Portanto, a eq. (1.3.3.26) com $\lambda = J^I$, pode ser reescrita como:

$$J_2 - J_1 = 2J_1^n + \frac{J^{III} n^3}{3} \quad (2.5.14)$$

As eqs. (2.4.8), (2.4.10), (2.4.11), as definições eq. (2.5.12) e $u \equiv \cos k$ e a anulação, à temperatura crítica (δ_c^{-1}), do coeficiente de n^2 (na eq. (2.4.11)), permitem escrever:

$$\tau = \int_0^1 \left[\frac{\delta_c \gamma^2}{\left[u^2(1-\gamma^2) + \gamma^2 \right] \sqrt{1-u^2} \cos^2 h \left\{ \delta_c \sqrt{u^2(1-\gamma^2) + \gamma^2} \right\}} + \frac{(1-\gamma^2)^2 u^2 \sqrt{1-u^2} \operatorname{th} \left\{ \delta_c \sqrt{u^2(1-\gamma^2) + \gamma^2} \right\}}{\left\{ u^2(1-\gamma^2) + \gamma^2 \right\}^{3/2}} \right] du \quad (2.5.15)$$

Fixando-se a constante elástica reduzida τ , a eq. (2.5.15) fornece o comportamento do coeficiente de anisotropia em função da temperatura (crítica). Cálculos numéricos desta expressão serão efetuados no Capítulo III.

2.6 - ORDEN DA TRANSIÇÃO

Sobre a linha de transição, é de interesse conhecer a ordem da transição cuja importância, dentre outras, reside na visualização da maneira com a qual varia o parâmetro de ordem com a temperatura; sua determinação permite que se detecte por exemplo, a existência de pontos ou linhas tricríticos, etc.

Landau foi o precursor da aplicação da teoria de grupos à Termodinâmica⁽²⁵⁾. Segundo ele, deve-se examinar a rela-

ção entre simetrias do cristal que sofre a transição, à alta e baixa temperaturas. Numa transição de 2^ª ordem, o parâmetro de ordem varia continuamente com a temperatura, mas a simetria do sistema varia descontinuamente, causando o surgimento ou desaparecimento de alguns elementos de simetria. Comportamento diferente têm as transições de 1^ª ordem, para as quais não existe relação entre as simetrias das fases a altas e a baixas temperaturas. O desenvolvimento da energia livre somente em potências pares do parâmetro de ordem, não invalida absolutamente a possibilidade de existência de transição de 1^ª ordem⁽²⁴⁾ - se o coeficiente de η^4 for negativo, a transição será de primeira ordem. É exatamente a análise deste coeficiente (na eq.(2.4.11)), no que se refere ao seu sinal, que possibilitará classificar a ordem da transição. A anulação deste coeficiente (sobre as linhas de transição) proporciona o aparecimento de pontos ou linhas tricríticos. Com o objetivo de calcular o coeficiente de η^4 , adotou-se o seguinte procedimento.

Define-se as variáveis reduzidas:

$$\begin{aligned}
 f &\equiv \frac{F}{2NJ_0} & ; & & \bar{c}_m &\equiv c_m \frac{J_0}{(J_1)^2} \\
 \bar{D} &\equiv \frac{D_0^3}{(J_1)^4} & ; & & \bar{D}_m &\equiv D_m \frac{J_0^3}{(J_1)^4} \\
 \bar{c}_1 &\equiv -\frac{\bar{c}_0^2 J_1^{III}}{6\pi(J_1)^3}
 \end{aligned} \tag{2.6.16}$$

O parâmetro de ordem reduzido:

$$h \equiv \frac{J_2 - J_1}{J_2 + J_1}$$

de acordo com a eq. (2.5.13), tem agora a seguinte expressão:

$$b = \frac{J_1}{J_0} \eta + \frac{J_{111}}{6J_0} \eta^3 \quad (2.6.17)$$

Com estas definições e a eq. (2.6.17), a energia livre total (eq. (2.4.10)) pode ser escrita como:

$$f_{ex} = \frac{-1}{2\pi\delta} \int_0^1 \left\{ \frac{\ell n \left[2 \cosh \left[\delta \sqrt{(1+\gamma b)^2 + (1-\gamma^2)(b^2-1)(1-u^2)} \right] \right]}{\sqrt{1-u^2}} + \right. \\ \left. + \frac{\ell n \left[2 \cosh \left[\delta \sqrt{(1-\gamma b)^2 + (1-\gamma^2)(b^2-1)(1-u^2)} \right] \right]}{\sqrt{1-u^2}} \right\} du + \\ + f_{e1}(0) + \frac{\bar{c}}{2\pi} b^2 + (\bar{v} - \bar{c}_1) b^4 \quad (2.6.18)$$

O subscrito "ex" significa que a contribuição magnética à energia livre na eq. (2.6.18) recebeu tratamento exato. A energia livre " f_{ex} " expandida será indexada por "aprox" para facilitar a distinção entre elas.

$$f_{aprox} = f_{ex}(0) + \left(\frac{\bar{c}}{2\pi} + \bar{c}_m \right) b^2 + \left[(\bar{v} - \bar{c}_1) + \bar{v}_m \right] b^4 \quad (2.6.19)$$

onde \bar{c}_m e \bar{v}_m são, respectivamente, os coeficientes reduzidos das contribuições magnéticas aos termos de 2^{a} e 4^{a} ordens na expansão da energia livre total, cujas formas funcionais são apresentadas a seguir:

$$\zeta_m = \frac{-1}{2\pi} \left\{ \int_0^1 \left[\frac{\delta \gamma^2}{\left[u^2(1-\gamma^2) + \gamma^2 \right] \sqrt{1-u^2} \cos^2 h \left[\delta \sqrt{u^2(1-\gamma^2) + \gamma^2} \right]} + \frac{(1-\gamma^2)u^2 \sqrt{1-u^2} \operatorname{th} \left[\delta \sqrt{u^2(1-\gamma^2) + \gamma^2} \right]}{\left[u^2(1-\gamma^2) + \gamma^2 \right]^{3/2}} \right] du \right\} \quad (2.6.20)$$

Quando $\delta \equiv \frac{\beta J_0}{z} = \delta_c$, a integral (eq. (2.6.20)) reproduz a que aparece na eq. (2.5.15) como resultado da anulação do coeficiente de segunda ordem na expansão da energia livre total quando ocorre a transição de fase.

O coeficiente da contribuição em quarta ordem é dado por:

$$\begin{aligned} \bar{\zeta}_m = \frac{1}{\pi} \left\{ \int_0^1 du \left[3(1-\gamma^2) \left[4\gamma^2 - (1-\gamma^2)^2 u^2 (1-u^2) \right] u^2 \sqrt{1-u^2} \right. \right. \\ \left. \left[\frac{\delta}{\cos^2 h \left[\delta \sqrt{u^2(1-\gamma^2) + \gamma^2} \right]} - \frac{\operatorname{th} \left[\delta \sqrt{u^2(1-\gamma^2) + \gamma^2} \right]}{\sqrt{u^2(1-\gamma^2) + \gamma^2}} \right] \right. \\ \left. + \frac{12\delta^2 \gamma^2 (1-\gamma^2)^2 u^2 \sqrt{1-u^2} \operatorname{th} \left[\delta \sqrt{u^2(1-\gamma^2) + \gamma^2} \right]}{\left[u^2(1-\gamma^2) + \gamma^2 \right]^{5/2} \cos^2 h \left[\delta \sqrt{u^2(1-\gamma^2) + \gamma^2} \right]} \right. \\ \left. + \frac{2\delta^3 \gamma^4 \left[\frac{3}{\cos^2 h \left[\delta \sqrt{u^2(1-\gamma^2) + \gamma^2} \right]} - 2 \right]}{\sqrt{1-u^2} \left[u^2(1-\gamma^2) + \gamma^2 \right]^2 \cos^2 h \left[\delta \sqrt{u^2(1-\gamma^2) + \gamma^2} \right]} \right] \right\} \quad (2.6.21) \end{aligned}$$

Agora podem ser explicados os coeficientes de η^2 e η^4 reescrevendo-se a eq. (2.6.19)

$$f_{\text{aprox}} = f_{\text{ex}}(\eta=0) + \left[\frac{\bar{c}}{2\bar{w}} + \bar{c}_m \right] \left(\frac{J^I}{J_0} \right)^2 \eta^2 + \\ + \left\{ \left[(\bar{v} - \bar{c}_1) + \bar{v}_m \right] \left(\frac{J^I}{J_0} \right)^4 - \frac{1}{3} \left[\frac{\bar{c}}{2\bar{w}} + \bar{c}_m \right] \frac{J^I J^{III}}{J_0^2} \right\} \eta^4 \quad (2.6.22)$$

A razão pela qual optou-se inicialmente pela expansão da energia livre total em potências de "b" e não diretamente de "η" é que as variáveis reduzidas facilitam a manipulação matemática ($b = \frac{J^I}{J_0} \eta + \frac{J^{III}}{6J_0} \eta^3$), além de permitir que as expressões estejam numa forma adequada para a realização de cálculos numéricos. Os coeficientes \bar{c}_1 e o que contem o produto $J^I J^{III}$ nas eqs. (2.6.18), (2.6.19) e (2.6.22) surgem como resultado da expansão das integrais de "exchange" até quarta ordem. Esta expansão é responsável pelo acréscimo, no desenvolvimento de b ($b = b(\eta)$), de um termo de correção de terceira ordem ao termo linear considerado no Capítulo I (7).

CAPÍTULO III

RESULTADOS

3.1 - INTRODUÇÃO

Este Capítulo é dedicado ao cálculo numérico de algumas quantidades físicas introduzidas no Capítulo II. Em particular, calcula-se a superfície de transição (no espaço temperatura-anisotropia e constante elástica) que separa as duas fases permitidas por este modelo - a fase uniforme (desordenada) e a dimerizada (ordenada). As linhas iso-constante elástica desta superfície apresentam uma topologia especial e a elas será atribuída especial atenção. A análise numérica fornece, também, o sinal do coeficiente de quarta ordem (na expansão da energia livre como função do parâmetro de ordem), ou seja, a ordem da transição sobre a superfície crítica. Em particular, isto possibilita a detecção de eventuais pontos tricríticos (lugar geométrico sobre a superfície crítica que separa as transições de 1ª e 2ª ordens.

Em todo este trabalho são analisados apenas os valores nulo e positivo do coeficiente de anisotropia. É evidente que todos os resultados são válidos para $\gamma < 0$ devido à invariância do Hamiltoniano anisotrópico.

3.2 - GRÁFICOS

3.2.1 - Linhas Críticas Associadas à Anisotropia e à Temperatura Nulas.

No Capítulo 1, encontram-se os resultados analíticos e os comportamentos assintóticos das equações que relacionam a constante elástica da rede (\bar{c}) com a temperatura crítica (δ_c^{-1}) a $\gamma = 0$ e aquela com o coeficiente de anisotropia crítica à temperatura nula. Suas representações gráficas foram obtidas através de cálculos numéricos e são mostradas nas Figs. 3.2.1.1 e 3.2.1.2, respectivamente. Note-se que estas figuras constituem apenas cortes da superfície crítica. Para a construção destes gráficos utilizou-se cálculo numérico, o que veio a confirmar os já conhecidos limites assintóticos — a) de \bar{c} para $\delta_c \rightarrow \infty$ ($\gamma = 0$) e b) \bar{c} para $\gamma \rightarrow \gamma_1^0$ ($\delta_c^{-1} = 0$) (eq. (1.4.73) e subseção 1.3.3 ($K \equiv \bar{c}/2\pi$), respectivamente).

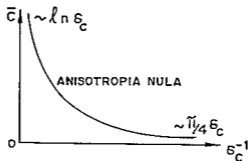


Fig. 3.2.1.1 - Constante elástica harmônica como função da temperatura crítica, para anisotropia nula ($\gamma = 0$).

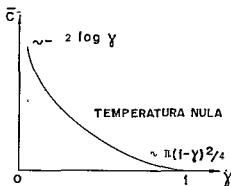


Fig. 3.2.1.2 - Constante elástica harmônica como função do coeficiente de anisotropia crítica, à temperatura nula ($\delta_c^{-1} = 0$).

3.2.2 - Coeficiente de Anisotropia e Temperatura (Constante Elástica Fixa)

Na Figura 3.2.2.1 é apresentada a variação do coeficiente de anisotropia com a temperatura crítica para diversos valores da constante elástica da rede. Aspectos peculiares do modelo são realçados nestas curvas, dentre os quais destacam-se:

- a) a presença de duas famílias de curvas para constante elástica \bar{c} fixa quando se varia o coeficiente de anisotropia com a temperatura. Designa-se \bar{c}^* para a constante elástica (harmônica) reduzida que separa as duas famílias. A família I ($\bar{c} > \bar{c}^*$) tem suas regiões ordenada ($\eta \neq 0$) e desordenada ($\eta = 0$) conforme o diagrama (Fig. 3.2.2.2). A família II ($\bar{c} < \bar{c}^*$) tem seus domínios ordenado ($\eta \neq 0$) e desordenado ($\eta = 0$) como mostra a Fig. 3.2.2.3. Para $\gamma = 1$ e temperatura nula ambas as famílias mostram que a fase é desordenada o que foi observado por Dubois e Carton sobre a estabi-

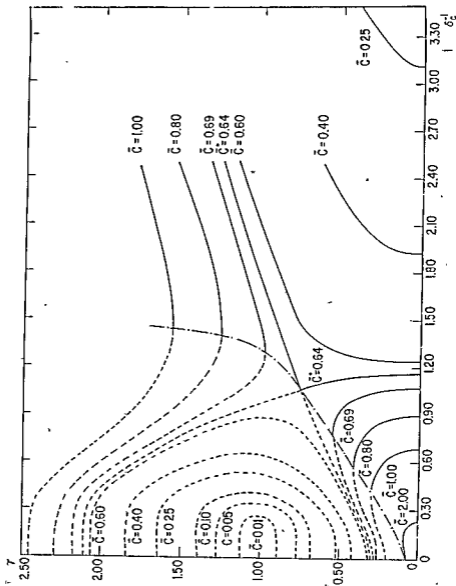


Fig. 3.2.2.1 - Coeficiente de anisotropia como função da temperatura crítica para vários valores da constante elástica harmônica. A linha tracejada-pontilhada é a linha tricrítica; a linha cheia \bar{c} de 2ª ordem (limite de estabilidade de $\eta = 0$); a linha tracejada é de 1ª ordem (limite de metaestabilidade de $\eta = 0$).

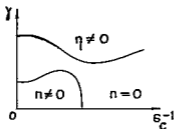


Fig. 3.2.2.2 - Diagrama de fases da família I ($\bar{c} > \bar{c}^*$).

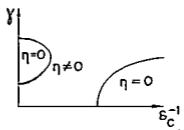


Fig. 3.2.2.3 - Diagrama de fases da família II ($\bar{c} < \bar{c}^*$).

lidade da fase desordenada no modelo de Ising unidimensional. Frequentemente a fase ordenada \bar{e} estável a baixas temperaturas. Todavia, existem modelos (e este \bar{e} um deles) que permitem o caso oposto. No caso $\bar{c} > \bar{c}^*$, observa-se, em ambos os ramos do diagrama (ver Fig. 3.2.2.2), a possibilidade de ocorrer, a γ fixo e temperatura crescente, a sequência $\eta = 0 \rightarrow \eta \neq 0 \rightarrow \eta = 0$ (8).

- b) Há de se notar, também, a presença de um 2º valor crítico da anisotropia limite da instabilidade à temperatura nula (γ_L definido por Dubois e Carton) para $\gamma > 1$.
- c) Assinala-se, também, a existência de uma linha tricrítica que separa as regiões que correspondem a transições de 1ª e 2ª ordens e que passa, sobre a superfície, no ponto de cruzamento das linhas correspondentes a \bar{c}^* (ver Fig. 3.2.2.1).

3.3 - RESULTADOS NUMÉRICOS

3.3.1 - Métodos

Os resultados numéricos mostram que $\bar{c}^* \approx 0,64$ e está

associado às coordenadas: anisotropia $\gamma^* = 0,75$ e temperatura $t_c^{-1} = 1,05$. Para a construção da Fig. 3.2.2.1, utilizou-se dois métodos. O primeiro deles consiste em anular diretamente o coeficiente de 2ª ordem na expansão da energia livre, para a obtenção das linhas críticas (de transição) e o estudo do sinal do coeficiente de 4ª ordem. A anulação deste, adicionada à anulação do termo de 2ª ordem são as condições exigidas pela teoria de Landau para a determinação dos pontos tricríticos. Outra abordagem quantitativa foi também realizada e nela esteve sob análise, na expressão da energia livre total como função do parâmetro de ordem, o comportamento dos seus máximos e mínimos, para anisotropia, constante elástica harmônica e temperaturas fixas. Este último método é mais geral que o anterior, pois é capaz de fornecer várias informações físicas contidas no modelo. Algumas ilustrações sobre ele serão dadas a seguir. Nelas, a constante elástica anarmônica foi considerada nula, o que tem efeito de afetar tão somente a ordem da transição; ela é capaz de mover a linha tricrítica, no entanto, é ineficaz em alterar quaisquer resultados referentes às linhas críticas. A sua ausência pode, todavia, significar que a estabilidade da energia livre (no sentido de começar a energia livre a crescer com b) ocorre numa região não-física de parâmetro de ordem reduzido $b \gg 0$ ($b \equiv \frac{J_1 - J_2}{J_1 + J_2} \approx \tau$) (10).

3.3.2 - Ilustrações

1º Exemplo:

A Tabela 3.3.2.1 mostra a energia livre "exata" (eq.

$\rho_C^{-1} = 0.05$ $Y = 1.00$

f_{CkSTA} b f_{CkSTA} MIN

0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	1.6	1.7	1.8	1.9	2.0
1.30000000	1.31000000	1.32000000	1.33000000	1.34000000	1.35000000	1.36000000	1.37000000	1.38000000	1.39000000	1.40000000	1.41000000	1.42000000	1.43000000	1.44000000	1.45000000	1.46000000	1.47000000
1.48000000	1.49000000	1.50000000	1.51000000	1.52000000	1.53000000	1.54000000	1.55000000	1.56000000	1.57000000	1.58000000	1.59000000	1.60000000	1.61000000	1.62000000	1.63000000	1.64000000	1.65000000
1.66000000	1.67000000	1.68000000	1.69000000	1.70000000	1.71000000	1.72000000	1.73000000	1.74000000	1.75000000	1.76000000	1.77000000	1.78000000	1.79000000	1.80000000	1.81000000	1.82000000	1.83000000
1.84000000	1.85000000	1.86000000	1.87000000	1.88000000	1.89000000	1.90000000	1.91000000	1.92000000	1.93000000	1.94000000	1.95000000	1.96000000	1.97000000	1.98000000	1.99000000	2.00000000	2.01000000

$\rho_C^{-1} = 0.05$ $Y = 0.40$

f_{CkSTA} b f_{CkSTA} MIN

0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	1.6	1.7	1.8	1.9	2.0
1.30000000	1.31000000	1.32000000	1.33000000	1.34000000	1.35000000	1.36000000	1.37000000	1.38000000	1.39000000	1.40000000	1.41000000	1.42000000	1.43000000	1.44000000	1.45000000	1.46000000	1.47000000
1.48000000	1.49000000	1.50000000	1.51000000	1.52000000	1.53000000	1.54000000	1.55000000	1.56000000	1.57000000	1.58000000	1.59000000	1.60000000	1.61000000	1.62000000	1.63000000	1.64000000	1.65000000
1.66000000	1.67000000	1.68000000	1.69000000	1.70000000	1.71000000	1.72000000	1.73000000	1.74000000	1.75000000	1.76000000	1.77000000	1.78000000	1.79000000	1.80000000	1.81000000	1.82000000	1.83000000
1.84000000	1.85000000	1.86000000	1.87000000	1.88000000	1.89000000	1.90000000	1.91000000	1.92000000	1.93000000	1.94000000	1.95000000	1.96000000	1.97000000	1.98000000	1.99000000	2.00000000	2.01000000

(MAX)

Tabela 3.3.2.1 - Continuação

$\gamma = 2.10$

$\gamma = 2.10$	$\gamma = 2.10$
0.1	0.1
0.2	0.2
0.3	0.3
0.4	0.4
0.5	0.5
0.6	0.6
0.7	0.7
0.8	0.8
0.9	0.9
1.0	1.0
1.1	1.1
1.2	1.2
1.3	1.3
1.4	1.4
1.5	1.5
1.6	1.6
1.7	1.7
1.8	1.8
1.9	1.9
2.0	2.0
2.1	2.1
2.2	2.2
2.3	2.3
2.4	2.4
2.5	2.5
2.6	2.6
2.7	2.7
2.8	2.8
2.9	2.9
3.0	3.0
3.1	3.1
3.2	3.2
3.3	3.3
3.4	3.4
3.5	3.5
3.6	3.6
3.7	3.7
3.8	3.8
3.9	3.9
4.0	4.0
4.1	4.1
4.2	4.2
4.3	4.3
4.4	4.4
4.5	4.5
4.6	4.6
4.7	4.7
4.8	4.8
4.9	4.9
5.0	5.0
5.1	5.1
5.2	5.2
5.3	5.3
5.4	5.4
5.5	5.5
5.6	5.6
5.7	5.7
5.8	5.8
5.9	5.9
6.0	6.0
6.1	6.1
6.2	6.2
6.3	6.3
6.4	6.4
6.5	6.5
6.6	6.6
6.7	6.7
6.8	6.8
6.9	6.9
7.0	7.0
7.1	7.1
7.2	7.2
7.3	7.3
7.4	7.4
7.5	7.5
7.6	7.6
7.7	7.7
7.8	7.8
7.9	7.9
8.0	8.0
8.1	8.1
8.2	8.2
8.3	8.3
8.4	8.4
8.5	8.5
8.6	8.6
8.7	8.7
8.8	8.8
8.9	8.9
9.0	9.0
9.1	9.1
9.2	9.2
9.3	9.3
9.4	9.4
9.5	9.5
9.6	9.6
9.7	9.7
9.8	9.8
9.9	9.9
10.0	10.0

Tabela 3.3.2.1 - Continuação

(2.6.18)) como função do parâmetro de ordem para alguns valores da anisotropia, $\bar{\alpha}$ constante elástica e temperatura fixas. Com estes valores, tem-se:

- a) para $\gamma = 1$ (modelo de Ising), a energia livre é mínima para $b = 0$, o que é consequência da estabilidade da fase desordenada;
- b) para $\gamma < 1$ (correspondente aos modelos XY ($\gamma = 0$) e intermediários entre este e o de Ising) existe uma região em que a energia é mínima para $b \neq 0$;
- c) para $\gamma > 1$ existe uma região em que a energia é mínima para $b = 0$ nas proximidades de $\gamma = 1$ e torna-se mínima para $b \neq 0$ com o aumento da anisotropia;
- d) dos itens anteriores, pode-se inferir que, para γ qualquer, existem a temperatura nula, dois valores do coeficiente de anisotropia limite da instabilidade γ_L ; eles estão compreendidos, para este exemplo, nos intervalos $[0,30;0,33]$ e $[2,00;2,05]$ (comparar com os valores γ_L na Fig. 3.2.2.1).

2º Exemplo

Esta ilustração tem como finalidade principal mostrar a existência da linha tricrítica. Para $\delta_c^{-1} = 0,60$, a transição é de 2ª ordem, enquanto que para $\delta_c^{-1} = 0,50$ ela é de 1ª ordem. Ambas ocorrem aproximadamente para um mesmo valor de anisotropia, $\gamma = 0,40$. Portanto, a linha tricrítica passa entre estes pontos dividindo, assim, o diagrama de fases em regiões de 2ª ou 1ª ordens. As temperaturas críticas foram obtidas como solução de $\partial^2 F / \partial n^2 \Big|_{n=0} = 0$, correspondente à transição de 2ª ordem.

Contudo, a presença de mínimos coincidentes em $b = 0$ e $b \neq 0$ na energia livre, permite determinar a temperatura crítica associada à transição de 1^a ordem. Uma maneira equivalente de obter esta informação é determinar, na Tabela 3.3.2.2, o valor do parâmetro de anisotropia que, para a temperatura crítica $\delta_c^{-1} = 0,50$, corresponde à curva de 1^a ordem. Na Figura 3.3.2.4, representa-se a linha crítica completa, mostrando qualitativamente a verdadeira linha de 1^a ordem para este exemplo. A linha pontilhada é de 1^a ordem e é obtida através do modelo.

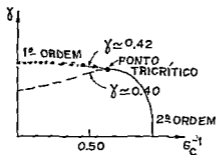


Fig. 3.3.2.4 - Linha de transição completa para $\bar{c} = 0,80$ e $\gamma < 1$, indicando a ordem de transição. A linha pontilhada é de 1^a ordem e a tracejada marca o limite de metaestabilidade de $\eta = 0$. A linha cheia é de 2^a ordem.

3º Exemplo

Uma última ilustração consiste em verificar quantitativamente a transformação canônica introduzida no Capítulo II. (Ver Fig. 3.2.2.1).

$$a) \bar{c} = 0,25 + \bar{c}/\gamma = 0,36$$

$$\gamma = 0,70 + 1/\gamma = 1,43$$

$$\delta_c^{-1} = 0,38 + \delta_c^{-1} = 0,54$$

$$\begin{aligned}
 \text{b) } \bar{c}^* &= 0,64 \rightarrow \bar{c}/\gamma = 0,85 \\
 \gamma^* &= 0,75 \rightarrow 1/\gamma = 1,40 \\
 \delta_c^{*-1} &= 1,05 \rightarrow \delta_c^{-1} = 1,34
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{c) } \bar{c} &= 1,00 \rightarrow \bar{c}/\gamma = 0,63 \\
 \gamma &= 1,60 \rightarrow 1/\gamma = 0,63 \\
 \delta_c^{-1} &= 2,00 \rightarrow \delta_c^{-1}/\gamma = 1,25
 \end{aligned}$$

Todos os exemplos estão em completa concordância com as curvas da Fig. 3.2.2.1 quanto à localização dos pontos obtidos através da transformação canônica. O último exemplo é muito importante, sobretudo, por ser através dele que pode-se afirmar que o ponto com coordenadas $(\gamma^*, \delta_c^{*-1})$ para \bar{c}^* é especial apenas no espaço anisotropia-temperatura.

$\bar{c} = 0.80$
 $\bar{\delta} = 0.60$
 $\bar{f}_{\text{exata}} = 0.44$
 \bar{b}

\bar{c}	$\bar{\delta}$	\bar{f}_{exata}	\bar{b}	f_{exata}
0.80	0.60	0.44	0.15	0.15
0.80	0.60	0.44	0.16	0.16
0.80	0.60	0.44	0.17	0.17
0.80	0.60	0.44	0.18	0.18
0.80	0.60	0.44	0.19	0.19
0.80	0.60	0.44	0.20	0.20
0.80	0.60	0.44	0.21	0.21
0.80	0.60	0.44	0.22	0.22
0.80	0.60	0.44	0.23	0.23
0.80	0.60	0.44	0.24	0.24
0.80	0.60	0.44	0.25	0.25
0.80	0.60	0.44	0.26	0.26
0.80	0.60	0.44	0.27	0.27
0.80	0.60	0.44	0.28	0.28
0.80	0.60	0.44	0.29	0.29
0.80	0.60	0.44	0.30	0.30
0.80	0.60	0.44	0.31	0.31
0.80	0.60	0.44	0.32	0.32
0.80	0.60	0.44	0.33	0.33
0.80	0.60	0.44	0.34	0.34
0.80	0.60	0.44	0.35	0.35
0.80	0.60	0.44	0.36	0.36
0.80	0.60	0.44	0.37	0.37
0.80	0.60	0.44	0.38	0.38
0.80	0.60	0.44	0.39	0.39
0.80	0.60	0.44	0.40	0.40
0.80	0.60	0.44	0.41	0.41
0.80	0.60	0.44	0.42	0.42
0.80	0.60	0.44	0.43	0.43
0.80	0.60	0.44	0.44	0.44
0.80	0.60	0.44	0.45	0.45
0.80	0.60	0.44	0.46	0.46
0.80	0.60	0.44	0.47	0.47
0.80	0.60	0.44	0.48	0.48
0.80	0.60	0.44	0.49	0.49
0.80	0.60	0.44	0.50	0.50
0.80	0.60	0.44	0.51	0.51
0.80	0.60	0.44	0.52	0.52
0.80	0.60	0.44	0.53	0.53
0.80	0.60	0.44	0.54	0.54
0.80	0.60	0.44	0.55	0.55
0.80	0.60	0.44	0.56	0.56
0.80	0.60	0.44	0.57	0.57
0.80	0.60	0.44	0.58	0.58
0.80	0.60	0.44	0.59	0.59
0.80	0.60	0.44	0.60	0.60
0.80	0.60	0.44	0.61	0.61
0.80	0.60	0.44	0.62	0.62
0.80	0.60	0.44	0.63	0.63
0.80	0.60	0.44	0.64	0.64
0.80	0.60	0.44	0.65	0.65
0.80	0.60	0.44	0.66	0.66
0.80	0.60	0.44	0.67	0.67
0.80	0.60	0.44	0.68	0.68
0.80	0.60	0.44	0.69	0.69
0.80	0.60	0.44	0.70	0.70
0.80	0.60	0.44	0.71	0.71
0.80	0.60	0.44	0.72	0.72
0.80	0.60	0.44	0.73	0.73
0.80	0.60	0.44	0.74	0.74
0.80	0.60	0.44	0.75	0.75
0.80	0.60	0.44	0.76	0.76
0.80	0.60	0.44	0.77	0.77
0.80	0.60	0.44	0.78	0.78
0.80	0.60	0.44	0.79	0.79
0.80	0.60	0.44	0.80	0.80
0.80	0.60	0.44	0.81	0.81
0.80	0.60	0.44	0.82	0.82
0.80	0.60	0.44	0.83	0.83
0.80	0.60	0.44	0.84	0.84
0.80	0.60	0.44	0.85	0.85
0.80	0.60	0.44	0.86	0.86
0.80	0.60	0.44	0.87	0.87
0.80	0.60	0.44	0.88	0.88
0.80	0.60	0.44	0.89	0.89
0.80	0.60	0.44	0.90	0.90
0.80	0.60	0.44	0.91	0.91
0.80	0.60	0.44	0.92	0.92
0.80	0.60	0.44	0.93	0.93
0.80	0.60	0.44	0.94	0.94
0.80	0.60	0.44	0.95	0.95
0.80	0.60	0.44	0.96	0.96
0.80	0.60	0.44	0.97	0.97
0.80	0.60	0.44	0.98	0.98
0.80	0.60	0.44	0.99	0.99
0.80	0.60	0.44	1.00	1.00

Tabela 3.3.2.3 - Continuação

(MAX)

CAPÍTULO IV

COMPARAÇÕES

4.1 - INTRODUÇÃO

Sistemas que apresentam transição "spin-Peierls" têm recebido atenção especial recentemente, tanto teórica quanto experimental. Este tipo de transição é rara: ela não ocorre, por exemplo, na maioria dos materiais magnéticos quase-unidimensionais. A previsão teórica de dimerização em certos tipos de cadeias tem provocado interesse experimental; os resultados pioneiros bem sucedidos datam da metade da década de 70 e foram sobre $V_{1-x}Cr_xO_2$ (Pouget et al. 1974) e sobre TTF $CuS_4C_4(CF_3)_2$ (Bray et al. 1975). Os complexos doadores-receptores $TTF^+MS_4C_4(CF_3)_4^-$ (conhecidos como TTF-BDT), onde $M = Cu, Au$, têm respectivamente as temperaturas críticas $T_c = 12$ e $2,1K$ ⁽¹¹⁻¹²⁾. Uma outra família designada por $MEM(TCNQ)_2$ foi estudada também recentemente (1979) e teve seus dados reinterpretados em termos da teoria "spin-Peierls" ⁽¹³⁾. Um sistema que apresenta uma tal transição mostra que na temperatura crítica, surge um "gap" de energia e a suscetibilidade começa a decrescer exponencialmente até anular-se à temperatura nula.

O modelo XY, tanto para a cadeia uniforme quanto para a dimerizada, foi estendido para estudar sistemas Heisenberg, com excelentes resultados. O acoplamento longitudinal foi trata

do através de métodos aproximados⁽²⁹⁾. Benf mostrou que a aproximação Hartree-Fock, quando aplicada à cadeia linear antiferromagnética, equivale essencialmente à renormalização da integral de "exchange" no modelo XY⁽³⁰⁾.

As linhas de transição no espaço anisotropia-temperatura provenientes do modelo em estudo foram mostradas na Figura 3.2.2.1. É interessante compará-las com aquelas obtidas a partir de outros modelos nos espaços dos parâmetros intensivos para eles relevantes; no caso, o campo magnético externo e a temperatura, o que será efetuado, de maneira qualitativa, neste capítulo.

4.2 - MATERIAIS

Um sistema verdadeiramente unidimensional é claramente inatingível. Efeitos magnéticos tridimensionais estão sempre presentes de alguma forma. É possível, não obstante, estudar sistemas nos quais os íons magnéticos têm um forte acoplamento em uma dimensão, via uma interação intracadeia J e um fraco acoplamento nas outras direções, via uma interação intercadeia J' , se íons não-magnéticos separam as cadeias. A razão J/J' determina quão bem o sistema comporta-se como unidimensional. A $k_B T \leq J$, correlações ao longo das cadeias ocorrerão devido à interação intracadeia e a $k_B T \leq J'$, efeitos tridimensionais, devido à interações intercadeias, tornar-se-ão importantes. Um grande valor para a razão J/J' é necessário a fim de que se possa ter uma larga faixa de temperaturas sobre a qual predominam efeitos unidimensionais.

Em 1966, Chesnut⁽³⁾ aplicou o modelo de Heisenberg ao

"perclorato azul de Würster" ("N,N dimethyl paraphenylenediamine perchlorate"). A ênfase aqui é dada à interação entre as moléculas orgânicas ao longo das cadeias lineares. O comportamento (queda exponencial quando a temperatura se anula) da suscetibilidade magnética confirma a presença de tal interação. Segundo Beni e Pincus⁽⁶⁾, apesar de razoável concordância experimental da suscetibilidade obtida por Chesnut, o "perclorato azul de Würster" sofre uma transição de fase de 1ª ordem, enquanto que o modelo prediz 2ª ordem.

Medidas de condutividade elétrica, suscetibilidade magnética e calor latente em sais alcalinos - TCNQ revelaram que uma transição de fase ocorre a $T_c = 348, 395$ e 381 K para Na-, K-, Rb-TCNQ, respectivamente. O espaçamento dos íons de TCNQ- no interior da cadeia é uniforme na fase de alta temperatura e é alternado na fase de baixa temperatura. Medidas de espalhamento de raios-X, no entanto, mostram que a transição de fase estrutural de tais sais é de 1ª ordem⁽¹⁰⁾.

Investigações de espalhamento de neutrons para o $(CD_3)_4NM_nCl_3$ (TMMC deuteroado) evidenciam, simultaneamente, as excitações de onda de "spin" e ausência de ordem à longa distância. Existem, também, sólidos orgânicos, alguns baseados, por exemplo, no tetracianoquinodimetano que cristalizam-se em estruturas dimerizadas. As propriedades de ressonância magnética destes sistemas dimerizados foram interpretadas em termos do antiferromagneto alternado de Heisenberg⁽⁵⁾.

Os complexos doadores-receptores $TTF^+MS_4C_4(CF_3)_4^-(TTF-BDT)$ com $M = Cu$ constituem uma família para a qual o modelo de Heisenberg apresenta um número maior de resultados coerentes com os experimentais. Ele não somente explica a queda exponencial

da suscetibilidade quando a temperatura se anula, mas fornece a ordem correta da transição (2^a ordem), a campo magnético nulo (11,12). Este último teste do modelo tem se mostrado bastante eficaz porquanto esta família dentre as demais mencionadas, é a única que exhibe concordância experimental quanto à ordem de transição.

Reinterpretação e discussão dos dados de suscetibilidade magnética e calor específico da família $\text{MEM}-(\text{TCNQ})_2$ utilizando a teoria "spin-Peierls" foram realizados também recentemente (1979). Os resultados sugerem que, à baixa temperatura, a cadeia TCNQ poderia estar tetramerizada. A suscetibilidade magnética acima da temperatura de transição mostrou comportar-se tal qual a da cadeia unidimensional antiferromagnética de Heisenberg (13). A forma característica da suscetibilidade magnética de um sistema descrito pela teoria "spin-Peierls" é mostrada na Fig. 4.2.1. O modelo tomado como referência para comparações

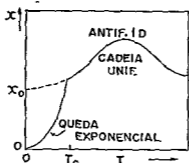


Fig. 4.2.1 - Suscetibilidade magnética típica de um sistema "spin-Peierls".

com a experiência tem sido frequentemente o de Heisenberg e não o XY apresentado nos Capítulos II e III. Todavia, o tratamento do termo $S_i^z S_j^z$ na aproximação Hartree-Fock realizado por Beni (1973) mostrou que a cadeia Heisenberg composta de "spins" 1/2 dimeriza-se de maneira completamente similar à cadeia XY (30).

4.3 - COMPARAÇÕES DAS LINHAS DE TRANSIÇÃO PARA DOIS OUTROS MODELOS

Os modelos a serem comparados com o XY anisotrópico unidimensional quanto aos seus diagramas de fase serão referidos como 1º e 2º modelos.

1º MODELO:

Este modelo⁽²⁸⁾ é descrito através do seguinte Hamiltoniano:

$$H = J \sum_{a,b} (S_a^X S_b^X + S_a^Y S_b^Y + D S_a^Z S_b^Z) + H (\sum_a S_a^Z + \sum_b S_b^Z)$$

onde a e b são duas famílias de "spins" num arranjo tridimensional, $D \geq 1$ é o parâmetro de anisotropia no espaço dos "spins" e H é um campo magnético que atua sobre o sistema ao longo do eixo Z. A Fig. 4.3.2 mostra o diagrama de fases do 1º modelo.

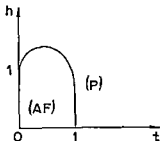
Fig. 4.3.2 - Diagrama de fases no espaço campo magnético e temperatura, $D \gg 1$.

n = número de coordenação

$h \equiv H/nJD$

$t \equiv 2k_B T/nJD$

A obtenção do diagrama Fig. 4.3.2 tem sua validade condicionada a $D \gg 1$. (Uma fase "spin-flop" pode aparecer se esta restrição não for satisfeita.)



2º MODELO

Este modelo é o XY isotrópico unidimensional com campo magnético ao longo do eixo Z. O diagrama de fases foi apresentado no Capítulo I (Fig. 1.5.14). O Hamiltoniano completo inclui uma contribuição elástica (17.31).

Os modelos com campo magnético (2º modelo) e com anisotropia (Capítulos I e II) diferem sensivelmente do 1º modelo, no que se refere ao tipo de ordem estabelecida. Enquanto neste, há possibilidade de aparecimento de ordem magnética, os dois primeiros, pelo teorema de Mermin e Wagner, somente admitem transição de fase estrutural e mesmo assim porque foram desprezadas as flutuações cristalinas. O 2º modelo admite distintas fases estruturais, inclusive algumas incomensuráveis — enquanto que o 1º modelo e o XY anisotrópico unidimensional têm apenas uma fase ordenada. Como resultado da aplicação da teoria aos três modelos, nota-se que entre eles existe em comum o valor das derivadas nas proximidades da temperatura crítica: $-\infty$ para $h \rightarrow 0$ (Figs. 1.5.14 e 4.3.2) e para $\gamma \rightarrow 0$ (Fig. 3.2.2.1). Na outra extremidade ($t \rightarrow 0$), o valor da derivada é $+\infty$ para $h \rightarrow 1$ (Figs. 1.5.14 e 4.3.2) identificando a transição como de 2ª ordem, enquanto a derivada é nula para $\gamma \rightarrow \gamma_L$ (transição de 1ª ordem). Observa-se que para constante elástica tendendo a zero ($K \rightarrow 0$) as curvas das Figs. 4.3.2 e 1.5.14 (correspondentes aos 1º e 2º modelos, respectivamente) se assemelham; o ponto de inflexão na Fig. 1.5.14 é suavizado à proporção que a constante elástica é reduzida, significando que o 2º modelo tende a tornar-se puramente magnético (como o é o 1º modelo). A anisotropia D introduzida no 1º modelo desempenha um papel análogo ao da anisotropia

γ , pois ambas atuam no espaço dos "spins", sendo que γ age sobre os sítios primeiros vizinhos de uma cadeia linear e D sobre as famílias de "spins" a e b . Quando $D = 1$ e $H = 0$, o sistema é isotrópico tal qual o é para $\gamma = 0$. Para $\gamma \geq 1$, verificou-se, no Capítulo III, o aparecimento de um outro ramo nas curvas representativas das linhas de transição (a constante elástica fixa) cuja fase ordenada é também dimerizada. Este fenômeno aparentemente não se manifesta para $D \geq 1$. Embora as anisotropias no espaço dos "spins", γ ou D , e o campo magnético externo sejam em essência de mesma natureza, no sentido que, de alguma forma ambos privilegiam uma direção (não necessariamente um sentido) dos "spins", distinguem-se sobremaneira quanto aos seus modos de agir sobre os "spins". A anisotropia no espaço dos spins, do modo como foi conduzida no presente modelo, é incapaz de produzir modificações marcantes na transição de fase, como por exemplo, ser a responsável pela transição pois ela ocorre, mesmo para $\gamma = 0$. Este tipo de anisotropia é intrínseco ao sistema porquanto ela é uma medida do acoplamento de intercâmbio ("exchange"). Existem compostos nos quais o intercâmbio efetivo pode ser altamente anisotrópico; outros, no entanto, são bem descritos através de modelos puramente isotrópicos. Em alguns casos, contudo, ao campo magnético externo cabe atribuir responsabilidade pela própria transição de fase, propiciando, por exemplo, o aparecimento de fases do tipo comensurável - incomensurável ou mesmo uma fase intermediária ainda sem classificação (11,12,17,31).

CONCLUSÃO

Aspectos físicos qualitativos e quantitativos relativos à transição "spin-Peierls" no modelo XY unidimensional podem ser evidenciados através do estudo deste modelo simples que envolve três parâmetros — a temperatura, o coeficiente de anisotropia no espaço dos "spins" e a constante elástica harmônica. Os principais resultados foram evidenciados no diagrama de fases no espaço anisotropia-temperatura, a constante elástica fixa. São eles:

- a) presença de duas famílias de curvas para constante elástica \bar{c} fixa ($\bar{c} \geq \bar{c}^*$), sendo que cada família possui também dois ramos. Em ambas as famílias é a fase dimerizada que é estável à temperatura fixa e coeficiente de anisotropia suficientemente grande (para cada valor de \bar{c});
- b) à temperatura fixa e anisotropia crescente, existem duas possibilidades de sequência de fases para a família I ($\bar{c} > \bar{c}^*$); sendo $\eta \neq 0$ e $\eta = 0$ os parâmetros de ordem associados às fases ordenada (dimerizada) e desordenada (uniforme), respectivamente, as sequências de fases possíveis para a família I são:

$$\eta \neq 0 \rightarrow \eta = 0 \rightarrow \eta \neq 0$$

$$\eta = 0 \rightarrow \eta \neq 0$$

- c) a família II ($\bar{c} < \bar{c}^*$) se distingue da outra por exibir, numa

pequena região do diagrama, uma única fase ($n \neq 0$). À temperatura fixa e anisotropia crescente, as sequências possíveis de fase (incluindo a região mencionada acima) para a família II são:

$$n \neq 0 \rightarrow n = 0 \rightarrow n \neq 0$$

$$n \neq 0$$

$$n = 0 \rightarrow n \neq 0$$

- d) À temperatura nula, existem dois valores do coeficiente de anisotropia limite de instabilidade, um deles obtido por Dubois e Carton⁽⁷⁾ para $\gamma \leq 1$ e um outro para $\gamma > 1$ resultam da extensão do modelo para estes valores da anisotropia.
- e) Frequentemente, a estabilidade da fase ordenada ocorre na região de baixa temperatura; este modelo, todavia, exhibe casos contrários que, apesar de falta de evidências experimentais, não são proibidos teoricamente⁽¹⁹⁾. Considerações termodinâmicas exigem que, a altas temperaturas ($T \rightarrow \infty$), a fase estável seja sempre desordenada (uniforme).
- f) A linha tricrítica passa, sobre a superfície de transição, no ponto de cruzamento das linhas críticas correspondentes a \bar{c}^* .
- g) As linhas de transição de 1ª ordem têm sua existência condicionada à anisotropia do sistema. O modelo XY isotrópico ($\gamma = 0$) apresenta uma transição de fase de 2ª ordem para todos os valores da constante elástica^(6,7). A região de 1ª ordem corresponde, no diagrama, a baixas temperaturas e gran -

co) o campo magnético ao longo do eixo Z, com a finalidade de calcular a suscetibilidade magnética (χ_T). A discussão completa deste problema envolveria, também, um número bastante grande de diagramas de Feynman.

Interessante, seria também, incluir os termos do tipo $S_i^Z S_j^Z$ no Hamiltoniano anisotrópico e tratá-lo através do Método Variacional propondo para Hamiltoniano Variacional, o presente Hamiltoniano. Relembremos, aqui, que as famílias de substâncias dos tipos TMMC, TTF-BDT, MEM-(TCNQ)₂, etc, preenchem os requisitos necessários para realizações experimentais do presente modelo ou ao menos de algumas de suas predições.

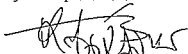
BIBLIOGRAFIA

- (1) N.D. MERMIN and H. WAGNER, "Absence of Ferromagnetism or Anti ferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models" - Phys. Rev. Lett., 17 (1966), 1133.
- (2) W. DIETERICH, "Ginsburg - Landau Theory of Phase Transition in Pseudo-one-dimensional Systems", Advan.Phys.,25(1976),615.
- (3) D.B. CHESNUT, "Instability of a Linear Spin Array: Application to Würster's Perchlorate", Journal of Chem. Phys., 45 (1966), 4677.
- (4) E. LIEB, T. SCHULTZ and D. MATTIS, "Two Soluble Models of an Antiferromagnetic Chain", Ann. Phys., 16 (1961), 407.
- (5) P. PINCUS, "Instability of the Uniform Antiferromagnetic Chain" - Solid State Commun., 22 (1971), 1971."
- (6) G. BENI and P. PINCUS, "Instability of the Uniform Antiferromagnetic Chain. I. XY Model in the Adiabatic Approximation" , Journal of Chem. Phys., 57 (1972), 3531.
- (7) J.Y. DUBOIS et J.P. CARTON, "Instabilité de la Chaîne Magnétique Linéaire XY", J. Physique, 35 (1973), 372.
- (8) C. TSALLIS, "Contribution a L'Etude Theorique des Transitions de Phase Magnetiques et Structurales", Tese de Doutorado de Estado, Universidade de Paris-Sud, França (1974).
- (9) S.R. SALINAS, "Phase Diagrams for Compressible Ising Models", J. Phys. C: Solid State Phys., 7 (1974), 241.
- (10) Y. TAKAKA and K. MOTIZUKI, "Spin-Peierls Transition in Alkali-TCNQ Salts", Journal of the Physical Society of Japan, 47 (1979), 1752.
- (11) I.S. JACOBS et al., "Spin-Peierls Phase Diagrams: observations

- and Models", Journal of Magnetism and Magnetic Materials" ,
15 (1980), 332.
- (12) D. BLOCH et al., "New High-Field Phase in the Spin-Peierls System, Tetrathiafulvalene - $\text{CuS}_4\text{C}_4(\text{CF}_3)_4$ ", Phys. Rev.Lett. 44 (1980), 294.
- (13) S. HUIZINGA et al., "Spin-Peierls Transition in N-Methyl -N-Ethilmorpholinium-Ditetracyanoquinodimethanide [MEM - $(\text{TCNQ})_2$]", Phys. Rev. B19 (1979), 4723.
- (14) L. LANDAU and E.M. LIPSHITZ, "Statistical Physics, Pergamon Press (1968).
- (15) D.W. HONE and P.M. RICHARDS, "One- and Two-Dimensional Magnetic Systems", A. Rev. Mater. Sci. 4 (1974), 337.
- (16) A.A. ABRIKOSOV, L.P. GORKOV and I.E. DZIALOSHINSKI, "Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics", Dover Publications, N.Y., (1975), Capítulo 3.
- (17) R.A.T. LIMA e C. TSALLIS, (comunicação privada).
- (18) C. TSALLIS, "Classical Statistical Approach to Anisotropic Two-Dimensional XY-Model" - Nuovo Cimento 34B(1976), 411.
- (19) C. TSALLIS, "Influence of Long-Range Forces in Isotropic Two Dimensional Magnetism", Phys. Stat. Sci. 86(1978), K 101.
- (20) J.M. KOSTERLITZ and D.J. THOULESS, "Ordering, Metastability and Phase Transitions in Two-Dimensional Systems", J. Phys. C 6 (1973), 1181.
- (21) H.E. STANLEY and T.A. KAPLAN, "Possibility of a Phase Transition for the Two-Dimensional Heisenberg Model", Phys. Rev. Lett. 17 (1966), 913.
- (22) C. DOMB and M.S. GREEN, "Phase Transitions and Critical Phenomena", Academic Press (1972), Volume 1, Capítulo I.
- (23) C. DOMB, "Specific Heats of Compressible Lattices and the Theory of Melting" - Journal of Chem.Phys. 25(1956), 783.

- (24) N. BOCCARA, "Symetries Brisées", Hermann (1976).
- (25) C.N. RAO and K.J. RAO, "Phase Transitions in Solids", Mc Graw-Hill International Book Company (1978).
- (26) R.E. PEIERLS, "Quantum Theory of Solids", Oxford at the Clarendon Press (1955), Capítulo I.
- (27) M. STEINER, J. VILLAIN, C.G. WINDSOR, "Theoretical and Experimental Studies on One-Dimensional Magnetic Systems", Advances in Physics 25 (1976), 87.
- (28) S.F. MACHADO e C. TSALLIS, (em andamento).
- (29) S. KATSURA and S. INAWASHIRO, "Linear Heisenberg Model of Ferro- and Antiferromagnetism", Journal of Mathematical Physics 5 (1964), 1091.
- (30) G. BENI, "Instability of the Uniform Antiferromagnetic Chain II. Heisenberg Interaction in the Hartree-Fock Approximation", Journal of Chem. Phys. 58 (1973), 3200.
- (31) C. TSALLIS, "Structural Phase Transition of a Linear Magnetic Chain Under the Influence of External Magnetic Field and Stress", Ferroelectrics 14 (1976), 661.

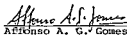
Tese apresentada ao Centro Brasileiro de Pesquisas
Físicas do Conselho Nacional de Desenvolvimento Ci
entífico e Tecnológico, fazendo parte da Banca Exa
minadora os seguintes professores:



Constantino Tsallis - Presidente



Enrique V. Anda



Affonso A. G. Gomes

Rio de Janeiro, 15 de dezembro de 1980