

EDUARDO DE CAMPOS VALADARES

**CRITICALIDADE DE SISTEMAS DE SPINS NA REDE:
MODELOS CLASSICOS E QUANTICOS**

**Tese de
DOUTORADO**

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FISICAS

Rio de Janeiro

-1987-

A Myriam e Vanda
A Luti, a meus pais.

"Oposição é genuína Amizade"

(William Blake)

AGRADECIMENTOS

O autor gostaria de expressar seus sinceros agradecimentos a inúmeras pessoas, as quais, em diferentes estágios deste trabalho, direta ou indiretamente, contribuíram para a sua realização, em especial

- Ao Dr. João Antônio Plascak pelo inestimável apoio, interesse e amizade.
- Aos Profs. Francisco César de Sá Barreto (UFMG) e Affonso Gomes (CBPF) pela dedicação e contribuições críticas.
- Aos colegas: Sabino Ferreira Neto, Sérgio Talim, Paulo Sérgio Soares Guimarães, Marcus Vinícius Moreira e a tantos quantos tornaram a estada em Belo Horizonte agradável e produtiva.
- Aos Profs. do Depto. de Física da UFMG : Nilton Penha, Antônio Sérgio Pires, José Guilherme Moreira, Alencastro de Carvalho e Alaor Chaves pelas produtivas discussões, bem como ao Prof. Sílvio Roberto Salinas (USP) pelas sugestões e leitura crítica de um dos trabalhos.
- Ao Sr. Paulo Neuenschwander Maciel pelas sugestões e apoio técnico (computação e edição de textos).
- Ao Sr. Luis Henrique Loureiro Santos (CECOM/UFMG) pelos constantes préstimos em computação.
- À Dra. Mioco Foshina (CBPF) pelo envio de artigos.
- À minha família, pela compreensão e estímulo.

Este trabalho foi realizado sob os auspícios do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) , através da concessão de uma bolsa.

INDICE

	Pag.
AGRADECIMENTOS	iv
RESUMO	xvii
ABSTRACT.....	xviii
LISTA DE FIGURAS.....	ix
LISTA DE TABELAS.....	xv
INTRODUÇÃO.....	1
CAPITULO I - MODELO DE ISING COM CAMPO TRANSVERSO E DILUIÇÃO NAS LIGAÇÕES VIA O GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO DE CAMPO MEDIO.....	13
1.1 - Introdução.....	13
1.2 - Grupo de renormalização de campo médio....	15
1.3 - Considerações sobre o MIT com diluição nas ligações segundo o GRM.....	19
1.3.1 - Rede triangular.....	20
1.3.2 - Rede quadrada.....	26
1.3.3 - Rede hexagonal.....	29
1.4 - Considerações gerais.....	32
1.5 - Conclusões.....	34

CAPITULO II - ESTUDO DO MODELO ANNNI VIA O GRUPO DE	
RENORMALIZAÇÃO DE CAMPO MÉDIO.....	35
2.1 - Introdução.....	35
2.2 - Grupo de renormalização de campo médio e aglomerados empregados.....	37
2.3 - Magnetizações e aproximações de campo médio.....	38
2.3.1 - Aglomerado I.....	38
2.3.2 - Aglomerado II.....	40
2.4 - Considerações de grupo de renormalização de campo médio.....	43
2.5 - Conclusões.....	47
CAPITULO III - COMPORTAMENTO CRITICO EM SUPERFICIES:	
TRATAMENTO VARIACIONAL PARA A ENERGIA LIVRE.....	49
3.1 - Introdução.....	49
3.2 - Formalismo variacional.....	52
3.3 - Sistemas de spins semi-infinitos.....	54
3.3.1 - Modelo de Ising spin-1/2 com campo transverso e diluição nas ligações (S) e modelo de Ising spin-1/2 (V).....	55
3.3.2 - Modelo de Heisenberg anisotrópico spin-1/2 com diluição nas ligações (S) e modelo de	

	Ising spin-1/2 (V).....	67
3.3.3	- Modelo de Heisenberg anisotrópico spin-1 com termo de anisotropia uniaxial e diluição nas ligações (S) e modelo de Ising spin-1 (V).....	73
3.4	- Conclusões.....	80
CAPITULO IV - SUPER-REDES MAGNETICAS : PROPRIEDADES ESTATICAS.....		
		83
4.1	- Introdução.....	83
4.2	- Hamiltoniano do modelo e formalismo em- pregado.....	84
4.3	- Resultados e discussão.....	90
4.4	- Conclusões.....	98
CAPITULO V - TEORIA DE ESCALA DE TAMANHO FINITO PARA O MODELO DE ISING COM SPINS MISTOS (1/2 E 1) EM 2d.....		
		100
5.1	- Introdução.....	100
5.2	- Teoria de escala de tamanho finito.....	103
5.3	- Resultados e discussão.....	107
5.4	- Conclusões.....	117

CAPÍTULO VI - CONCLUSÕES E COMENTÁRIOS GERAIS.....120

APÊNDICE A130

APÊNDICE B136

BIBLIOGRAFIA.....139

LISTA DE FIGURAS

Fig.	Pág.
1.1.1 - Esboço do diagrama de fases para o MIT com diluição nas ligações em $d > 1$ dimensões.....	14
1.2.1 - Aglomerados com $N=1$ spin (a) e $N=2$ spins (b) em $d=3$ dimensões.....	16
1.3.1 - Aglomerados empregados nos presentes cálculos de GRCM para o MIT com diluição nas ligações..	19
1.3.1.1 - Configurações de spins correspondentes a T_3 (rede triangular) levadas em conta no cálculo da magnetização m_3	20
1.3.1.2 - Cruzamento do expoente do limite clássico ($g=0$) para o limite quântico ($T=0$) segundo o GRCM.....	25
1.3.2.1 - O mesmo que na figura 1.3.1.1 referente ao aglomerado de quatro spins (quadrado).....	26
1.3.3.1 - Configurações referentes ao aglomerado H_4 (estrela, rede hexagonal) empregados e respectivos pe-	

sos estatísticos.....	30
1.4.1 - Campo transversal crítico $g = \Omega/J$ vs. diluição 1-p a temperatura nula.....	33
2.2.1 - Representação esquemática da cadeia linear (aglo- merado I) e da cadeia dupla (aglomerado II) em duas dimensões.....	38
2.3.2.1 - Vetor de onda axial crítico q_c vs. J_2/J_1 para o modelo ANNNI 3d segundo diversas aproximações..	42
2.4.1 - Linha crítica paramagnética (3d) vs. J_2/J_1 de acordo com diversas aproximações.....	44
2.4.2 - Diagrama de fases do modelo ANNNI 2d forneci- do pelo GRCM.....	45
2.4.3 - Expoente crítico térmico vs. J_2/J_1 (2d).....	46
3.3.1.1 - Diagramas de fase para diferentes valores de campo transversal.....	65
3.3.1.2 - Valores críticos de $\Delta = J_S/J - 1$ vs. diluição nas ligações (S) para diferentes valores de campo transversal.....	66

- 3.3.1.3 - Inverso do comprimento de extrapolação para diferentes valores de campo transverso..... 66
- 3.3.2.1 - Inverso do comprimento de extrapolação para diferentes valores de anisotropia (S: Heisenberg anisotrópico spin-1/2; V: Ising spin-1/2)..... 70
- 3.3.2.2 - Diagramas de fases para diferentes valores de anisotropia..... 71
- 3.3.2.3 - Valores críticos de Δ vs. anisotropia..... 72
- 3.3.2.4 - Diagramas de fases para diferentes concentrações p de ligações..... 73
- 3.3.3.1 - Valor crítico Δ_c vs. D/J (D : parâmetro de anisotropia uniaxial) para diferentes valores de anisotropia (S: Heisenberg anisotrópico spin-1 com anisotropia uniaxial; V: Ising spin-1).... 77
- 3.3.3.2 - Diagramas de fases para diferentes valores de anisotropia com $D=0$ (i.e. ausência de anisotropia uniaxial)..... 78
- 3.3.3.3 - Inverso do comprimento de extrapolação para diferentes valores de anisotropia com $D=0$ 78

3.3.3.4	-	Concentração crítica vs. D/J	79
4.1.1	-	Modelo de super-rede magnética considerado...	84
4.3.1	-	Temperatura crítica vs. $\Delta = J_S/J - 1$ (Ising, $\eta = 1$) correspondente a uma única interface.....	91
4.3.2	-	Decaimento da magnetização segundo diversas aproximações ($T < T_C$).....	92
4.3.3	-	O mesmo que na figura 4.3.2 para $T > T_C$	93
4.3.4	-	Diagrama de fases T_C vs. Δ para diferentes valores da anisotropia da interface.....	94
4.3.5	-	Valores críticos de Δ vs. anisotropia.....	95
4.3.6	-	Diagrama de fases T_C vs. Δ ($\eta = 0.5$) para super redes com diferentes periodicidades.....	96
4.3.7	-	Perfil de magnetização para diferentes perio- dicidades da super-rede ($T < T_C$).....	97
4.3.8	-	O mesmo que na figura 4.3.7 para $T > T_C$	97
5.1.1	-	Arranjos de spins na rede quadrada.....	101

5.1.2	- Interações entre spins segundos vizinhos pertencentes a uma mesma sub-rede.....	101
5.2.1	- Distintos "arranjos" a partir dos quais a ma- triz transferência é construída.....	105
5.3.1	- Diagrama de fases referente ao modelo (5.1.2) com $J_1, J_2 \neq 0, J_3 = J_4 = 0$	110
5.3.2	- Expoentes térmicos correspondentes à linha crítica da fig. 5.3.1.....	110
5.3.3	- O mesmo que na fig. 5.3.1 com $J_1, J_3 \neq 0, J_2 =$ $J_4 = 0$	112
5.3.4	- O mesmo que na fig. 5.3.2 com $J_1, J_3 \neq 0, J_2 =$ $J_4 = 0$	113
5.3.5	- O mesmo que na fig. 5.3.1 com $J_1, J_4 \neq 0, J_2 =$ $J_3 = 0$	114
5.3.6	- O mesmo que na fig. 5.3.2 com $J_1, J_4 \neq 0, J_2 =$ $J_3 = 0$	114
5.3.7	- Diagramas de fases correspondentes ao modelo 5.1.2. Linha cheia : $J_1/J_2 = 0.4$ e $J_3/J_2 = 0.4$; linha tracejada: $J_1/J_2 = 0.4$ e $J_3/J_2 = 0.8$	116

5.3.8 - Expoente térmico referente à linha tracejada da
figura 5.3.7..... 116

LISTA DE TABELAS

Tab.		Pág.
1.3.1.1	- Valores críticos e expoentes para o MIT com diluição nas ligações na rede triangular.....	24
1.3.2.1	- O mesmo que na tabela 1.3.1.1 referente à rede quadrada.....	27
1.3.3.1	- O mesmo que na tabela 1.3.1.1 referente à rede hexagonal.....	31
1.4.1	- O mesmo que na tabela 1.3.1.1 referente à rede cúbica.....	33
5.3.1	- Resultados obtidos através da Teoria de escala de tamanho finito para a temperatura crítica e expoente térmico do modelo de Ising com spins mistos, juntamente com resultados de séries <u>[115]</u> e de GR <u>[113]</u>	108

6.1.1 - Valores de expoentes de acordo com a
prescrição de Slotte [121]. AE=antiga
estimativa (Capitulo I); NE=nova esti
mativa

123

RESUMO

São estudados diferentes sistemas de spins na rede (clássicos e quânticos, infinitos e semi-infinitos). A criticabilidade de tais sistemas (basicamente: modelos de Ising com campo transversal e diluição nas ligações, o modelo ANNNI, diferentes sistemas magnéticos semi-infinitos, um modelo para uma super-rede magnética e modelos de spins mistos (Ising)) é obtida através de tratamentos fenomenológicos de grupo de renormalização (Grupo de Renormalização de Campo Médio, Teoria de Escala de Tamanho finito) e um formalismo baseado na desigualdade de Bogoliubov. Comparações (quando possível) com outros tratamentos são realizadas, sendo apresentadas sugestões para futuros trabalhos.

ABSTRACT

Distinct spin lattice systems (classical and quantal, infinite and semi-infinite) are studied. The criticality of such systems (basically: diluted transverse Ising models, the ANNNI model, different semi-infinite magnetic systems, a model for a magnetic superlattice and Ising mixed spins systems) is obtained through phenomenological renormalization group treatments (Mean Field Renormalization Group, Finite Size Scaling) and by means of a formalism based on Bogoliubov's inequality. Comparisons (whenever possible) with other treatments are made as well as suggestions for future works.

INTRODUÇÃO

MODELOS DE SPINS NA REDE

No estudo das propriedades de sistemas magnéticos duas descrições foram inicialmente propostas. A primeira a ser introduzida se baseia na hipótese de momentos magnéticos localizados. Esta hipótese, devida a Langevin, juntamente com a hipótese adicional de Weiss do campo molecular, proporcional à magnetização total e atuando em cada momento localizado, permitiu explicar o comportamento da susceptibilidade magnética, χ , com a variação da temperatura T (lei de Curie-Weiss):

$$\chi = C/(T - \theta)$$

onde C é a constante de Curie e $\theta = T_c$ é a temperatura de transição do sistema.

Com o advento da Mecânica Quântica foi possível dar uma justificativa para a hipótese de momentos magnéticos localizados associados aos átomos, tendo Van Wleck desenvolvido uma teoria quântica da susceptibilidade magnética. A origem do acoplamento entre momentos localizados vizinhos e do campo molecular de Weiss foi atribuída por Heisenberg à interação de troca ("exchange"), de caráter quântico, surgindo então o modelo de Heisenberg.

Investigações subsequentes baseadas neste modelo e em suas variantes possibilitaram um avanço considerável para a compreensão do magnetismo e das transições de fase. Todavia, este tipo de modelo não se mostrou adequado para a descrição do comportamento ferromagnético de metais de transição como o ferro, cobalto e níquel, que possuem elétrons d ("metais d "). Estes elétrons, com caráter itinerante (elétrons de Bloch), desempenham nestes casos um papel importante no que concerne o comportamento magnético. Com isto teve início uma nova linha de pesquisas teóricas em magnetismo baseada na teoria de bandas de Bloch de estados eletrônicos. Stoner e Slater introduziram a teoria do ferromagnetismo devido a elétrons itinerantes utilizando a aproximação de campo médio para tratar as interações elétron-elétron. Este tipo de teoria se mostrou consistente com o número não-inteiro de magnetos de Bohr por átomo relativo às magnetizações espontâneas observadas experimentalmente para o ferro, cobalto e níquel, suas grandes energias coercitivas e os valores elevados dos termos lineares em T do calor específico a baixas temperaturas, os quais não são compatíveis com a descrição de momentos localizados.

As propriedades ferromagnéticas de metais d a temperaturas finitas não foram contudo explicadas pela teoria de Stoner, baseada na aproximação de campo médio. Por exemplo, a susceptibilidade de Curie-Weiss observada em todos os metais ferromagnéticos, a acentuada anomalia no calor específico em torno de T_c e a dependência da magnetização com a

temperatura não foram explicadas consistentemente por esta teoria, sendo melhor descritas pelo modelo de spins localizados (Heisenberg), usado amplamente na análise de dados experimentais de metais d magnéticos. Também a temperatura de Curie calculada empregando-se parâmetros consistentes com os resultados experimentais em $T=0$ K geralmente estão bem acima dos resultados experimentais.

Os pontos de partida dos dois modelos mencionados acima se encontram em extremos opostos. Ao passo que o modelo de momentos localizados se baseia em estados eletrônicos localizados no espaço real, o modelo itinerante considera estados localizados no espaço recíproco (dos momentos). Nenhuma destas descrições poderia isoladamente explicar de forma sistemática todas as propriedades de metais ferromagnéticos. A fim de se obter uma visão unificada do problema, seria necessária uma descrição que englobasse os conceitos associados aos dois tipos de modelos. Esforços neste sentido têm sido realizados, devendo-se destacar a teoria de flutuações de spin ("self-consistent renormalization (SCR) theory) proposta nos anos 70, a qual representa um passo à frente em relação à teoria Hartree-Fock-RPA. Várias propriedades, incluindo a susceptibilidade de Curie-Weiss de metais fracamente ferromagnéticos, puderam deste modo ser explicadas consistentemente. Para maiores detalhes sobre a evolução histórica dos enfoques teóricos do magnetismo e os desenvolvimentos recentes veja referência^[1].

Modelos de momentos localizados dispostos em redes periódicas infinitas ("modelos de spins na rede") têm encontrado uma grande aplicabilidade, fornecendo uma descrição consistente de diversos fenômenos magnéticos e não-magnéticos, tais como adsorção de gases em superfícies cristalinas, separação de fases e ordenamento superfluido em misturas $\text{He}^3\text{-He}^4$, transições ferroelétricas, etc.

Um dos aspectos relevantes que deve ser considerado em tais modelos está associado à presença de impurezas, sempre encontradas em sistemas reais. Por exemplo, em um cristal uma parte dos sítios pode estar ocupada por átomos que apresentam momento magnético, estando a fração restante ocupada por átomos que não exibem momento magnético. Se esta fração for maior que um certo valor crítico o ferromagnetismo inexistente. Se esta fração for pequena, então um decréscimo em T_c com o aumento do número de impurezas é esperado.

Existem dois tipos de impurezas quanto ao modo como são introduzidas. Se as impurezas se encontram em equilíbrio com a rede hospedeira (i.e. foram introduzidas de modo que sua distribuição tenha atingido a condição de equilíbrio), elas são denominadas impurezas recozidas. Se, por outro lado, as impurezas são introduzidas, por exemplo a uma temperatura acima da temperatura de fusão do cristal, o qual é a seguir resfriado abruptamente, a distribuição final das impurezas, devido à sua dificuldade de movimento, coincide com a distribuição que elas apresentam no ponto de solidificação.

Obviamente, após um longo período, o equilíbrio térmico acabará sendo atingido. Mas antes que isto ocorra, as posições das impurezas podem ser consideradas fixas, sendo então denominadas impurezas temperadas.

No presente estudo, são considerados alguns modelos de spins na rede. Eles incluem o modelo de Ising com campo transversal e diluição nas ligações^[2,3], capítulo I, o modelo ANNNI^[4,5] ("Axial Next Nearest Neighbour Ising Model"), capítulo II, modelos de sistemas magnéticos semi-infinitos ("superfícies livres"), nos quais a superfície é descrita por um modelo quântico (e.g. o modelo de Ising com campo transversal, o modelo de Heisenberg com diluição nas ligações, etc) e o volume por um modelo clássico (e.g. Ising), capítulo III. Além disso, considera-se um modelo para uma super-rede magnética, capítulo IV, e, por fim, o modelo de Ising com spins mistos na rede quadrada, capítulo V. A seguir é apresentada uma descrição sumária destes modelos e sua correlação com sistemas físicos reais, bem como uma introdução geral dos formalismos empregados. Uma introdução ao modelo de Ising com spins mistos se encontra no respectivo capítulo.

MODELO DE ISING COM CAMPO TRANSVERSO

O modelo de Ising com campo transversal (MIT), foi originalmente introduzido por de Gennes^[6] para descrever cristais ferroelétricos com ligações de hidrogênio, como o

KH_2PO_4 , no qual o próton se encontra num dos dois mínimos de um poço duplo (correspondentes aos valores ± 1 da componente z do spin). O campo transversal, que se acopla com a componente x do spin, é associado ao tunelamento do próton entre os dois mínimos e o termo de troca à energia de correlação das possíveis configurações. Desde sua introdução, este modelo tem sido empregado na descrição de diversos sistemas (para uma revisão, veja ref. [7]), tais como ferromagnetos com forte anisotropia uniaxial, compostos de terras raras com estado fundamental singlete de campo cristalino, e na descrição de alguns sistemas cooperativos de Jahn-Teller, como DyVO_4 e TbVO_4 . Mais recentemente, tem sido também empregado em teorias de campo de mésons [8] e como protótipo em teorias de calibre na rede [9].

O comportamento crítico do MIT foi obtido exatamente apenas na sua versão unidimensional [10], tratando-se de um caso particular do modelo X-Y proposto por Lieb et al. [11]. Neste caso, para um campo transversal Ω menor que um certo Ω_c , o sistema apresenta um comportamento idêntico ao modelo de Ising, ordenando-se somente em $T=0$. Para $\Omega > \Omega_c$, todavia, esse ordenamento desaparece mesmo no estado fundamental. Fradkin e Susskind [9] correlacionaram o modelo de Ising unidimensional, via o formalismo da matriz transferencial, com um problema de mecânica quântica referente a um único spin na presença de um campo transversal. Neste caso, imagina-se que o eixo da rede unidimensional é o eixo temporal do problema de mecânica quântica. Assim a matriz transferencial

leva informação de um instante para um instante vizinho, sendo ela identificada com o operador evolução temporal no contexto do problema quântico. Deste modo a dimensão espacial passa a ter um caráter de tempo discretizado. Analogamente, o modelo de Ising em duas dimensões pode ser visto como um problema de mecânica quântica referente a uma cadeia de spins unidimensional com interações entre spins primeiros vizinhos na presença de um campo transversal uniforme. Assim, uma das dimensões espaciais do problema original é convertida em um tempo discretizado. A generalização da equivalência do MIT em d dimensões em $T=0$ com o modelo de Ising em $(d+1)$ dimensões foi rigorosamente demonstrada por Suzuki [12].

Outro aspecto interessante deste modelo em $d > 1$ dimensões foi conjecturado por Harris [13]: se for introduzida uma diluição nas ligações ou por sítio [i.e. uma ligação (sítio) se encontra presente com uma probabilidade p], o campo crítico como função da concentração p em $T=0$ deveria exibir uma descontinuidade na concentração de percolação. Isto estaria ligado ao fato de inexistir ordem de longo alcance abaixo de p_c , sendo nulo o campo transversal, ao passo que acima de p_c o campo crítico deveria assumir um valor finito, necessário à destruição da ordem em aglomerados percolantes tipo cadeias.

MODELO ANNNI

O modelo ANNNI é uma generalização do modelo de Ising, com interações competitivas entre spins primeiros vizinhos e spins segundos vizinhos ao longo de uma direção axial. Foi inicialmente introduzido por Elliot^[14], sendo associado ao ordenamento senoidal em alguns metais de terras raras, como o érbio. Uma das características deste modelo, em sua versão tridimensional, é a existência de um ponto de Lifshitz (PL), definido pela primeira vez por Hornreich, Luban e Shtrikman ^[15]. No modelo ANNNI, o PL corresponde a um ponto multicrítico em que se encontram tangencialmente duas linhas de segunda ordem e uma de primeira. Ao longo de uma das linhas de segunda ordem, um parâmetro, o vetor de onda axial crítico, varia continuamente, anulando-se no PL (para uma discussão mais detalhada, incluindo a fenomenologia do PL, veja ref.^[16])

O modelo ANNNI tem servido de base para a descrição de alguns sistemas magnéticos de interesse. Um modelo similar permitiu explicar recentemente a complexa sucessão de fases comensuráveis do CeSb como função da temperatura ^[17,18]. Medidas recentes da susceptibilidade transversa no MnP ^[19], indicaram que este material exibe um PL pertencente a mesma classe de universalidade do modelo ANNNI tridimensional.

Do ponto de vista teórico, o modelo ANNNI tem sido intensivamente estudado nos últimos anos através de diferentes técnicas. O seu comportamento crítico em três dimensões e

especialmente em duas dimensões, é ainda objeto de controvérsias. Em particular, o modelo exhibe, em ambos os casos, uma complexa estrutura de fases moduladas a baixas temperaturas, não completamente elucidada.

MAGNETISMO DE SUPERFÍCIES E INTERFACES

Modelos de spins na rede têm sido empregados nos últimos anos na descrição de sistemas magnéticos apresentando superfícies livres e interfaces. Recentes avanços nas técnicas de crescimento epitaxial, notadamente a técnica de epitaxia por feixe molecular ("MBE") têm permitido a obtenção de filmes semicondutores de excelente qualidade cristalina, incluindo heteroestruturas como super-redes (para uma introdução geral sobre o assunto, veja, por exemplo, referência [20]). Esta mesma técnica tem sido empregada na obtenção de filmes magnéticos [21-24]. A caracterização destes filmes é realizada através da difração de elétrons de baixa energia ("LEED"), ressonância magnética nuclear ("NMR") ou através do efeito Mössbauer. A técnica de elétrons spin-polarizados ("SPLEED") se aplica a sistemas ferromagnéticos, fornecendo informações sobre quantidades locais relativas à magnetização e susceptibilidade. É possível que as novas técnicas de obtenção de filmes finos, juntamente com métodos de caracterização cada vez mais

precisos, permitam um desenvolvimento de estruturas magnéticas análogo ao observado atualmente em semicondutores, conduzindo a materiais artificiais com propriedades magnéticas bem diversificadas. Neste caso, os modelos de spins na rede podem vir a se tornar úteis na descrição do comportamento de tais sistemas, incluindo propriedades dinâmicas e estáticas. No presente estudo são enfatizadas estas últimas, no contexto de modelos simples para superfícies (sistemas semi-infinitos) e uma super-rede magnética (interfaces periódicas), tendo em vista serem menos estudadas na literatura.

FORMALISMOS EMPREGADOS

No estudo das propriedades críticas dos sistemas acima mencionados foram empregados diferentes formalismos. Para os modelos tratados nos capítulos I e II, respectivamente o MIT e o modelo ANNNI, utilizou-se o grupo de renormalização de campo médio (GRCM). Este formalismo é descrito no capítulo I e é basicamente uma mescla de idéias de campo médio e de grupo de renormalização. A idéia central consiste em substituir o sistema original por aglomerados finitos, mantendo-se fixa a magnetização dos spins circundantes, o que ocasiona uma quebra de simetria. Isto responde pelo caráter de campo médio do tratamento, já que na realidade as magnetizações fixadas representam campos efetivos. Compara-se a seguir a magnetização por spin referente a cada aglomerado,

introduzindo-se uma hipótese de escala adequada. No capítulo I são escolhidos aglomerados finitos, ao passo que no capítulo II, por razões físicas, são escolhidas tiras infinitas de largura finita. Este formalismo conduz a diagramas de fase e a expoentes críticos não-clássicos.

Nos capítulos III e IV, referentes, respectivamente, a sistemas magnéticos semi-infinitos e super-redes magnéticas, empregou-se um formalismo variacional baseado na desigualdade de Bogoliubov. Este tratamento corresponde, essencialmente, a um formalismo tipo "campo médio", fornecendo portanto expoentes clássicos. É bom salientar contudo que ele representa um aperfeiçoamento do campo médio (CM) tradicional, uma vez que inclui alguns efeitos de flutuação, totalmente desprezados nos cálculos de CM usuais. Com isto, os diagramas de fase obtidos são mais próximos de resultados exatos ou fornecidos por formalismos mais precisos.

No capítulo V, referente ao modelo de Ising com spins mistos na rede quadrada, é empregado o formalismo da teoria de escala de tamanho finito no contexto da matriz transferência. Este formalismo consiste, basicamente, em estabelecer uma lei de escala para o comprimento de correlação referente a sistemas finitos, com vistas à obtenção de informações sobre a criticalidade do sistema infinito original. Este tratamento é essencialmente fenomenológico e permite obter boas estimativas para expoentes críticos e diagramas de fase.

Finalmente, em todos os modelos acima mencionados em que há diluição, esta é considerada temperada. Neste caso, a energia livre é obtida considerando-se a média configuracional do logaritmo da função de partição (Z). No caso de impurezas recozidas, a prescrição é primeiro realizar a média configuracional de Z e depois tomar o logaritmo, para se obter a energia livre. Assim, é evidente a importância da ordem em que se toma a média configuracional nos dois tipos de impureza.

CAPITULO I

MODELO DE ISING COM CAMPO TRANSVERSO E DILUIÇÃO NAS
LIGAÇÕES VIA O GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO DE CAMPO MEDIO

1.1 Introdução

O modelo de Ising com campo transversal (MIT) e diluição nas ligações pode ser descrito pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -\sum_i \Omega_i \sigma_i^x - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z, \quad (1.1.1)$$

onde σ_i^α ($\alpha = x, \text{ ou } z$) são dados pelas matrizes de Pauli, $\Omega_i = \Omega$ é o campo transversal, e os acoplamentos provenientes da interação de troca entre primeiros vizinhos são variáveis aleatórias descritas pela distribuição de probabilidades envolvendo funções delta de Dirac :

$$P(J_{ij}) = (1 - p) \delta(J_{ij}) + p \delta(J_{ij} - J). \quad (1.1.2)$$

Esta distribuição estabelece que para uma fração p (concentração) de ligações os acoplamentos entre spins primeiros vizinhos valem $J_{ij}=J$ e para a fração $1-p$ restante estes acoplamentos são nulos ($J_{ij}=0$).

Harris^[13] conjecturou que este modelo deveria exibir uma descontinuidade no campo transverso crítico quando a concentração de ligações p atingisse um valor crítico p_c a zero graus absolutos. Tratamentos teóricos anteriores^[25,26] se mostraram incapazes de descrever este comportamento à temperatura nula. Cálculos de grupo de renormalização no espaço real ^[27,28] para a rede quadrada e uma aproximação envolvendo um aglomerado de dois spins para a energia livre do modelo d -dimensional^[29-30] (veja também capítulo III) foram capazes de reproduzir esta descontinuidade. Um tratamento fenomenológico, o grupo de renormalização de campo médio (GRCM) ^[31-32], descrito na próxima seção, foi empregado no estudo do MIT com diluição nas ligações ^[33], utilizando-se os aglomerados mais simples (um e dois spins). O diagrama de fases global no espaço de temperatura-campo transverso-concentração obtido através do GRCM [veja fig.(1.1.1)] se encontra em acordo com a conjectura de Harris, embora apresente detalhes fisicamente incorretos, inexistentes no diagrama obtido por dos Santos ^[28].

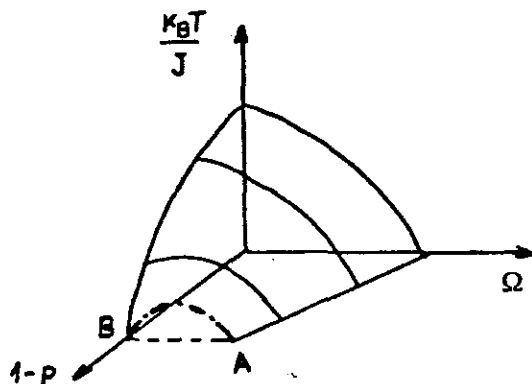


Figura 1.1.1 :Esboço do diagrama de fases para o MIT com diluição nas ligações em $d > 1$ dimensões segundo o GRCM. A conjectura de Harris corresponde à linha tracejada no plano $T=0$. A curva traço e ponto é um artefato do método.

Neste capítulo o MIT com diluição nas ligações é estudado via o GRCM nas redes triangular, quadrada e hexagonal empregando-se aglomerados que levam em conta a simetria da rede. Um cálculo para o modelo na rede cúbica através do GRCM é também realizado. As considerações aqui desenvolvidas permitem estabelecer como o tamanho e a simetria dos aglomerados empregados afetam a precisão das grandezas relevantes na descrição do comportamento crítico deste modelo [2-3].

1.2 Grupo de renormalização de campo médio

O grupo de renormalização de campo médio é um tratamento fenomenológico que reúne idéias de campo médio e de renormalização [31-32]. Basicamente, este tratamento consiste em substituir uma rede infinita de spins por dois aglomerados finitos distintos nos quais os spins circundantes têm suas magnetizações fixadas, consideradas campos efetivos. As magnetizações por spin são então determinadas nos dois casos e comparadas, supondo-se que os campos efetivos se escalam do mesmo modo que as magnetizações calculadas. A fig. 1.2.1 ilustra o procedimento adotado, para aglomerados constituídos de $N' = 1$ e $N = 2$ spins. Como ilustração, no caso do modelo de Ising usual puro ($Q=0$, $p=1$) as magnetizações dos spins nos extremos das linhas tracejadas (fig. 1.2.1) são fixadas em b' e b , respectivamente. O hamiltoniano para um único spin fica:

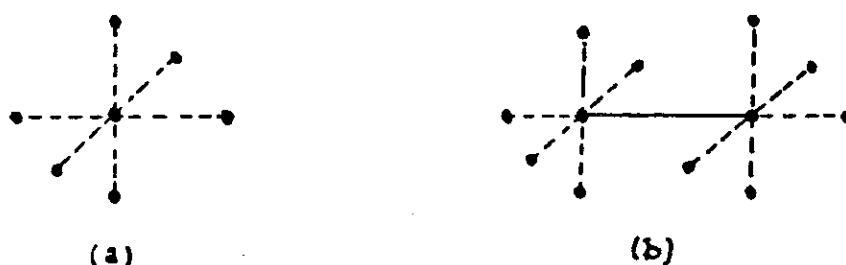


Figura 1.2.1 : Aglomerados com $N=1$ spin (a) e $N=2$ spins (b) em $d=3$ dimensões. As linhas tracejadas representam interações com spins circundantes primeiros vizinhos.

$$\mathcal{H}_1 = - \sum_{j=1}^{2d} J' \sigma_1 b'_j \quad (1.2.1)$$

onde o spin σ_1 interage com seus $2d$ vizinhos mais próximos através do termo $-J' \sigma_1 b'_j$.

De modo análogo, o hamiltoniano correspondente ao aglomerado de dois spins é representado por

$$\mathcal{H}_2 = -J \sigma_1 \sigma_2 - \sum_{j \neq 2} J \sigma_1 b'_j - \sum_{j \neq 1} J \sigma_2 b'_j \quad (1.2.2)$$

Neste caso o spin σ_1 interage com σ_2 através do termo $-J \sigma_1 \sigma_2$ e tanto σ_1 quanto σ_2 interagem com cada um de seus $(2d-1)$ primeiros vizinhos através dos termos $-J \sigma_1 b'_j$ e $-J \sigma_2 b'_j$, respectivamente. As magnetizações obtidas a partir de (1.2.1) e (1.2.2) podem ser facilmente calculadas :

$$m_1 = \tanh(2d K' b')$$

$$e m_2 = \frac{\exp(K) \sinh[(2d-1)2Kb]}{\exp(K) \cosh[(2d-1)2Kb] + \exp(-K)}$$

onde $K' = J'/k_B T$, $K = J/k_B T$ e k_B é a constante de Boltzmann.

Uma vez que a transição é de segunda ordem, próximo à transição $b', b \ll 1$. Neste caso, as relações acima valem aproximadamente

$$m_1 \cong 2d K'b'$$

$$e \quad m_2 \cong \frac{(2d-1) \exp(K) Kb}{\cosh(K)}$$

A aproximação de campo médio usual consiste em fazer simplesmente $b'=m_1$ no caso do bloco $N'=1$ e $b=m_2$ no caso do bloco $N=2$. A temperatura crítica no primeiro caso vale $K'^{-1}=2d$; portanto em $d=3$ $K'^{-1} = 6$. No segundo caso a temperatura crítica é obtida resolvendo-se uma equação transcendental; em $d=3$, $K^{-1}=5.847$, o que significa uma melhora em relação ao resultado de campo médio anterior. O expoente térmico, contudo, permanece o mesmo ($\nu_T = 0,5$). O ingrediente de renormalização entra quando se introduz a relação de escala entre m_1 e m_2 , $m_1 = \epsilon m_2$. Uma vez que b' e b têm um caráter de magnetização, supõe-se ademais que próximo à transição exista uma relação similar entre b' e b , i.e. $b' = \epsilon b$. Isto equivale a supor que

$$\partial m_1 / \partial b' = \partial m_2 / \partial b. \quad (1.2.3)$$

Desta forma é possível eliminar ϵ e obter uma relação envolvendo K e K' apenas, que é interpretada como uma relação de recorrência, permitindo assim obter o ponto fixo do sistema, $K'=K=K^*$. O expoente térmico ν_T pode ser obtido através de um procedimento bem conhecido [34], a saber:

$$\left. \frac{dK'}{dK} \right|_{K^*} = \ell^{1/\nu_T} ; \quad (1.2.4)$$

onde $\ell = (N/N')^{1/d}$ é o fator de escala e d a dimensionalidade do sistema. A título de ilustração, as equações (1.2.3) e (1.2.4) acima fornecem $K^{-1} = 4.93$ e $\nu_T = 1.537$.

Com a introdução de um campo H atuando em cada sítio, as magnetizações $m_{N'}$ e m_N referentes aos aglomerados de N' e N spins, respectivamente, passam a ser também funções de H . O expoente crítico ν_H correspondente a este campo pode ser calculado como acima, através da relação de recorrência obtida, mediante a expressão abaixo determinada no(s) ponto(s) fixo(s):

$$\left. \frac{dH'}{dH} \right|_{K^*} = \ell^{1/\nu_H}$$

onde ℓ foi definido acima.

O exemplo descrito (modelo de Ising) ilustra a operacionalização do GRGM. Os cálculos deste exemplo são bastante simples. No caso do MIT com diluição nas ligações, os procedimentos são essencialmente os mesmos. Escolhem-se dois aglomerados com N e N' spins ($N' < N$), mantendo-se fixas as componentes z dos spins que circundam cada aglomerado. Assim, é possível obter uma relação de recorrência entre (p', g', K') e (p, g, K) comparando-se as magnetizações por spin referentes aos dois aglomerados, onde p é a concentração de ligações, $K = J/k_B T$, $g = \Omega/J$ e a linha se refere ao menor dos dois aglomerados. Esta relação permite obter uma superfície crítica aproximada através de suas soluções de pontos fixos bem como estimativas

de expoentes críticos associados a alguns conjuntos invariantes no espaço (p,g,K). O fato de se dispor de uma única relação de recorrência não permite que diagramas de fluxos sejam obtidos através do GRGM e nem que os expoentes críticos estejam associados apenas aos pontos fixos do modelo, uma vez que este tratamento gera um cruzamento ("crossover") contínuo.

1.3 Considerações sobre o MIT com diluição nas ligações segundo o GRGM

Em princípio, ao se fazer uso do GRGM, diversas escolhas para aglomerados de spins são possíveis. Na fig. (1.3.1) são mostrados os aglomerados empregados em nosso tratamento via o GRGM do MIT com diluição nas ligações nas redes triangular, quadrada e hexagonal. Uma vez que estas redes permitem diferentes escolhas específicas, associadas à topologia de cada uma delas, é conveniente considerá-las separadamente.

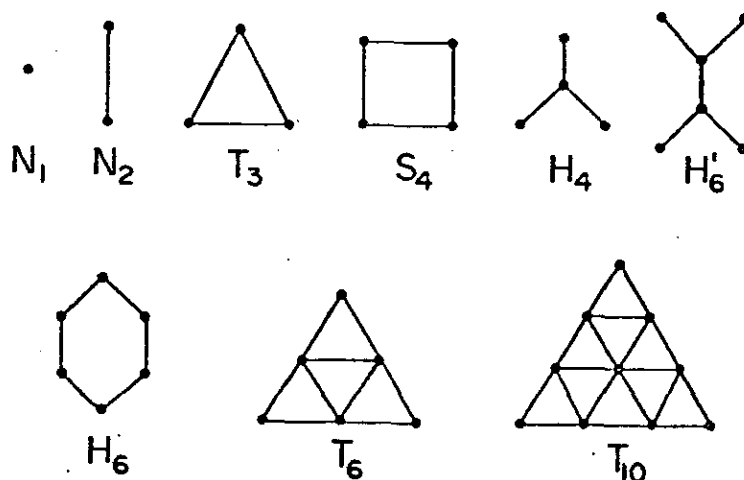


Figura 1.3.1 : Aglomerados empregados nos presentes cálculos de GRGM para o MIT com diluição nas ligações.

1.3.1. Rede triangular

Foram empregados neste caso os aglomerados N_2 e T_3 mostrados na fig. (1.3.1). A magnetização por spin correspondente a N_2 foi obtida anteriormente por Plascak [33]. Para se obter a expressão da magnetização m_N ($N=3$) correspondente a T_3 , levando-se em conta a média configuracional, é necessário determinar os autovalores dos hamiltonianos referentes às quatro configurações possíveis para o aglomerado de spins triangular, mostradas na fig. (1.3.1.1).

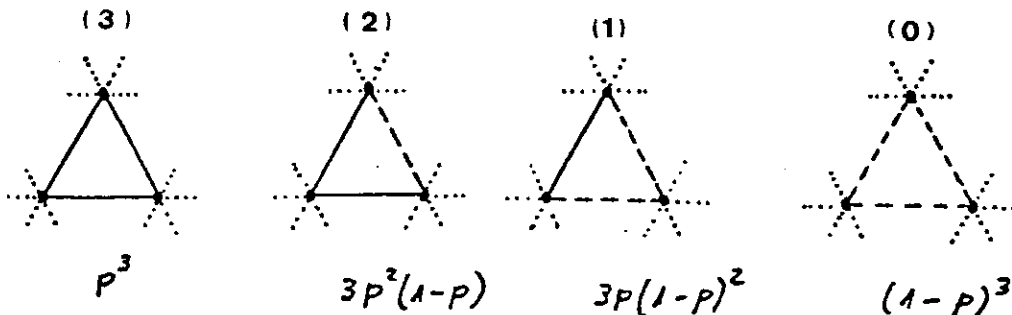


Figura 1.3.1.1 : Configurações de spins correspondentes a T_3 levando-se em conta no cálculo de m_3 . As linhas cheias se referem à ligações ($J_{ij}=J$) e as tracejadas à ausência de ligações ($J_{ij}=0$). Linhas pontilhadas representam as interações com as componentes z fixas dos spins circundantes. Os números entre parêntesis representam o total de ligações presentes nas configurações correspondentes e os respectivos pesos estatísticos, proporcionais ao número de configurações equivalentes, são expressos em termos da concentração p de ligações.

Genericamente, estes hamiltonianos podem ser escritos na forma:

$$H_{N=3} = H_{N=3}^0 + V_{N=3} \quad (1.3.1.1)$$

$$\text{onde } H_{N=3}^0 = -J_{12} \sigma_1^z \sigma_2^z - J_{13} \sigma_1^z \sigma_3^z - J_{23} \sigma_2^z \sigma_3^z - \Omega (\sigma_1^x + \sigma_2^x + \sigma_3^x)$$

$$\text{e } V_{N=3} = +4pJb (\sigma_1^z + \sigma_2^z + \sigma_3^z)$$

Foi feita uma aproximação no espírito da aproximação do cristal virtual ("virtual crystal approximation") para as interações dos spins dos aglomerados com os spins circundantes (termo $V_{N=3}$). Cálculos levando em conta todas as configurações referentes ao potencial aleatório correspondente a estas interações mostram que a aproximação realizada não afeta os resultados finais no limite $b \ll 1$. Próximo à transição $b \ll 1$; assim, o último termo no lado direito de (1.3.1.1) pode ser tratado através de um cálculo ordinário de perturbação em segunda ordem. Os autovalores de $H_{N=3}$ são portanto dados por:

$$\lambda_n = \lambda_n^0 + \sum_m \frac{|V_{mn}|^2}{\lambda_n^0 - \lambda_m^0} \quad (1.3.1.2)$$

onde λ_n^0 designa os autovalores do hamiltoniano não perturbado $H_{N=3}$. As matrizes a serem diagonalizadas são matrizes $n \times n$ ($n=8$). O procedimento empregado na diagonalização das mesmas é descrito no apêndice A.

Sendo o termo perturbativo V_N em (1.3.1.1) proporcional a $\gamma = 4pJb$, segue-se que os autovalores perturbados podem ser escritos na forma

$$\lambda_n = \lambda_n^0 + C_n \gamma^2 \quad (1.3.1.3)$$

onde C_n é determinado através do cálculo perturbativo. A função de partição $Z^{(1)}$ referente a cada configuração da fig. (1.3.1.1) fica:

$$Z^{(1)} = \sum_n \exp(-\beta\lambda_n) \approx \sum_n \exp(-\beta\lambda_n^0 - \beta C_n \gamma^2) \approx \sum_n \exp(-\beta\lambda_n^0) (1 - \beta C_n \gamma^2),$$

e a energia livre correspondente

$$F^{(1)} = -\frac{1}{\beta} \ln Z^{(1)} \approx F_0 - \frac{1}{\beta} \ln \left(1 - \frac{\sum_n C_n \exp(-\beta\lambda_n^0) \gamma^2}{\sum_n \exp(-\beta\lambda_n^0)} \right)$$

onde $F_0^{(1)} = -\frac{1}{\beta} \ln \left(\sum_n \exp(-\beta\lambda_n^0) \right)$. Levando-se em conta que $\ln(1-x) \approx -x$ para $x \ll 1$, segue-se:

$$F^{(1)} \approx F_0^{(1)} + \left(\frac{\sum_n C_n \exp(-\beta\lambda_n^0) \gamma^2}{\sum_n \exp(-\beta\lambda_n^0)} \right)$$

E portanto a magnetização por spin de uma dada configuração fica expressa por:

$$m_N^{(1)} = -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial \gamma} \approx -\frac{2}{N} \frac{\sum_n \exp(-\beta\lambda_n^0) C_n}{\sum_n \exp(-\beta\lambda_n^0)} \gamma \quad (1.3.1.4)$$

onde $\gamma = 4pJb$. Desta relação segue-se:

$$\frac{\partial m_N^{(1)}}{\partial b} = -\frac{(2/N)}{\sum_n \exp(-\beta\lambda_n^0)} \frac{\sum_n \exp(-\beta\lambda_n^0) C_n}{\sum_n \exp(-\beta\lambda_n^0)} (4pJ) \quad (1.3.1.5)$$

Os resultados (1.3.1.4) e (1.3.1.5) são gerais, i.e., podem ser aplicados no cálculo da magnetização por spin de um aglomerado de N spins fechado no qual todos os spins possuam o mesmo status, levando-se em conta os valores de γ adequados.

No limite quântico ($T=0$), $\beta \rightarrow \infty$. Assim, apenas a contribuição referente ao autovalor negativo de maior módulo sobrevive ao se tomar este limite. Isto significa que em $T=0$

$$m_N = -\frac{2}{N} C_{n^*}$$

onde n^* corresponde ao estado fundamental de H_N . Com isto os cálculos ficam consideravelmente simplificados, embora o problema da determinação de autovalores e autovetores ainda persista. A magnetização correspondente a T_3 é dada pela soma das magnetizações $m^{(1)}$ de cada uma das configurações com 1 ligação mostradas na fig. (1.3.1.1) previamente multiplicada pelo respectivo peso estatístico:

$$m_3 = p^3 m^{(3)} + 3p^2(1-p) m^{(2)} + 3p(1-p)^2 m^{(1)} + (1-p)^3 m^{(0)}$$

de onde se obtém $\partial m_3 / \partial b$. Comparando-se esta expressão com $\partial m_2 / \partial b'$ [33], obtém-se uma relação entre (p', g', K') e (p, g, K) que é interpretada como uma relação de recorrência, cujos pontos fixos são dados por $p' = p = p^*$, $g' = g = g^*$ e $K' = K = K^*$. Os resultados obtidos para os valores críticos da concentração, campo transversal e temperatura e respectivos expoentes críticos nos limites quântico ($T=0$) e clássico ($g=0$) são mostrados na tab. (1.3.1.1), juntamente com os resultados anteriormente obtidos com o GRM considerando os aglomerados mais simples, a saber, um e dois spins. Resultados exatos e aproximados fornecidos por outros métodos também se encontram nesta tabela.

Tabela 1.3.1.1 : Valores criticos e expoentes para o modelo de Ising com diluição nas ligações e campo transverso na rede triangular.

Aglomerados	g=0	p=1	K=-	p=1	K=-	g=0	K=-	p=P _c
	K _c	v _T	g _c	v _g	P _c	v _p	g	v _p
N ₁ , N ₂	0,203	2,305	5,349	2,121	0,2	2,248	1,277	2,248
N ₂ , T ₃	0,219	1,239	5,175	1,059	0,227	1,302	1,388	1,02
T ₃ , T ₆	0,225	1,481	-	-	-	-	-	-
T ₆ , T ₁₀	0,235	1,35	-	-	-	-	-	-
Outros métodos:	0,441 ^[35]	0,910 ^[35]	4,118 ^[36]	1,54 ^[36]	0,5 ^[35]	1,131 ^[35]	-	-
Exato	0,275 ^[37]	1	4,766 ^[39]	0,638 ^[39]	0,347 ^[40]	1,34 ^[44]	-	-

A comparação das grandezas criticas fornecidas pelos pares (N₁,N₂) e (N₂,T₃) indica que ao se considerar aglomerados maiores, valores criticos mais precisos para a temperatura, campo transverso e concentração relativos aos pontos fixos do sistema são obtidos. De um modo mais conspícuo, uma precisão comparativamente melhor é obtida para todos os expoentes criticos. Deve-se atribuir isto à inclusão do aglomerado T₃, cuja simetria é a mesma da rede. Além disso, o cruzamento do limite clássico (T≠0) para o limite quântico (T=0), que ocorre com a variação continua do expoente critico ν_g com o campo transverso, fica melhor definido [veja fig.(1.3.1.2)].

A conjectura de Harris é verificada nos dois casos. Cálculos com (N₁,N₂) fornecem o mesmo valor para o expoente critico associado à diluição, ν_p , nos pontos A e B da descontinuidade de Harris [veja fig. (1.1.1)]. Por outro lado, valores distintos para ν_p são obtidos através de (N₂,T₃) para estes dois pontos indicando assim um cruzamento adicional para este expoente.

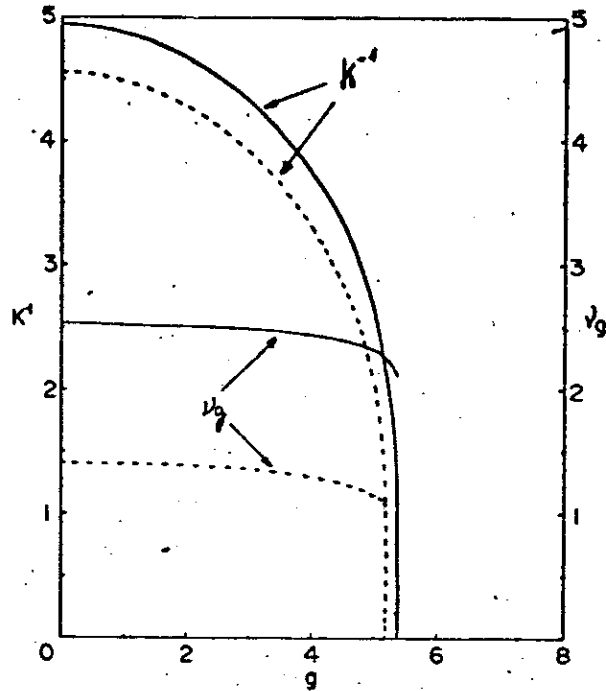


Figura 1.3.1.2 : Cruzamento do expoente ν_3 do limite clássico ($g=0$) para o limite quântico ($T=0$) segundo o GRCM. Linha cheia (N_1, N_2); linha pontilhada (N_2, T_3). Na figura são também mostradas curvas da temperatura \times campo transverso ($p=1$) para as duas aproximações. Resultados semelhantes são obtidos para as demais redes.

Em vista do comportamento oscilatório do expoente térmico no limite clássico e na ausência de diluição (modelo de Ising) quando aglomerados maiores são considerados (T_6 e T_{10}) devemos esperar um comportamento semelhante para os outros expoentes críticos quando o campo transverso e diluição forem introduzidos. Assim, expoentes críticos mais precisos devem requerer aglomerados maiores que os aqui considerados. Isto obviamente torna consideravelmente mais complexo o problema da determinação de autovalores e autovetores. Os presentes aglomerados fornecem, todavia, uma descrição satisfatória das principais propriedades críticas do modelo.

1.3.2 Rede quadrada

Para tratar o MIT com diluição nesta rede foi empregado o par (N_2, S_4) da fig. (1.3.1). As configurações referentes a S_4 consideradas no cálculo da média configuracional são mostradas na fig. (1.3.2.1).

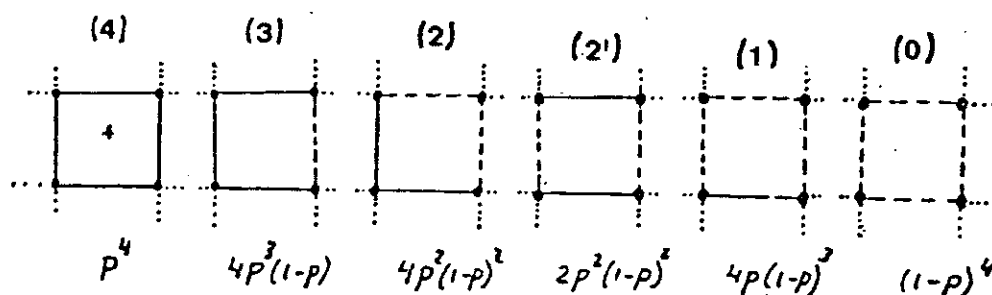


Figura 1.3.2.1 : O mesmo que na fig. (1.3.1.1) referente ao aglomerado de quatro spins (quadrado).

Como na seção anterior, os hamiltonianos referentes às diversas configurações mostradas na fig. (1.3.2.1) podem ser genericamente escritos na forma:

$$H_{N=4} = H_{N=4}^0 + V_{N=4}$$

$$\text{onde } H_{N=4}^0 = -J_{12}\sigma_1^z\sigma_2^z - J_{23}\sigma_2^z\sigma_3^z - J_{34}\sigma_3^z\sigma_4^z - J_{41}\sigma_4^z\sigma_1^z - \\ -\Omega(\sigma_1^x + \sigma_2^x + \sigma_3^x + \sigma_4^x)$$

$$\text{e } V_{N=4} = -2pJb(\sigma_1^z + \sigma_2^z + \sigma_3^z + \sigma_4^z).$$

A diagonalização de $H_{N=4}$ é realizada através de um cálculo perturbativo, como no caso da rede triangular. A magnetização por spin correspondente a S_4 é igual à soma das magnetizações

das configurações mostradas na fig. (1.3.2.1) multiplicadas pelos respectivos pesos estatísticos, a saber:

$$m_4 = p^4 m^{(4)} + 4p^3(1-p) m^{(3)} + 4p^2(1-p)^2 m^{(2)} + 2p^2(1-p)^2 m^{(2')} \\ + 4p(1-p)^3 m^{(1)} + (1-p)^4 m^{(0)}$$

onde os índices superiores i em $m^{(i)}$ se referem ao número de ligações presentes no aglomerado correspondente.

Os resultados obtidos através do presente cálculo são mostrados na tab. (1.3.2.1).

Tabela (1.3.2.1): O mesmo que na tab. (1.3.1.1) referente à rede quadrada.

Aglomerados	g=0	p=1	K=∞	p=1	K=∞	g=0	K=∞	p=p _c
	K _c	v _T	g _c	v _g	p _c	v _p	g _c	v _p
N ₁ , N ₂	0,346	1,667	3,334	1,429	0,333	1,553	1,277	1,553
N ₂ , S ₄	0,37	1,282	3,251	1,031	0,368	1,286	1,370	1,102
Decimação ⁽²⁹⁾	0,609	0,671	1,55	0,496	0,618	0,817	0,873	0,817
Exato	0,441	1	3,08 ⁽⁴²⁾	0,630 ⁽⁴²⁾	0,5 ⁽⁴⁰⁾	3/4 ⁽⁴³⁾	-	-

Cálculos de GRM para o modelo de Ising levando-se em conta aglomerados ainda maiores foram realizados anteriormente^[31], indicando uma convergência regular para a temperatura crítica e o expoente térmico. Um comportamento semelhante deve ocorrer com os outros expoentes ao se introduzir um campo transversal e diluição nas ligações.

Ao considerarmos (N₁,N₂) e (N₂,S₄), observamos essencialmente o mesmo comportamento anterior quando comparamos os resultados fornecidos por (N₁,N₂) e (N₂,T₃) para a rede triangular. Assim, um cálculo incluindo o aglomerado quadrado indica a existência de um cruzamento adicional referente ao

expoente ν_p na descontinuidade de Harris, o qual não aparece no cálculo com aglomerados de um e dois spins, respectivamente. Este novo resultado difere também do cálculo de grupo de renormalização no espaço real realizado por dos Santos [28], o qual fornece o mesmo valor para ν_p na descontinuidade de Harris. Este resultado pode estar provavelmente ligado às aproximações introduzidas por dos Santos [28] na sua relação de recorrência para a diluição.

É possível ainda obter resultados intermediários, entre os fornecidos pelo GRM e os de dos Santos [28] no limite quântico ($T=0$) do modelo de Ising puro com campo transversal, através de um procedimento introduzido por Alcantara Bonfim et al. [44], denominado grupo de renormalização sequencial. Este procedimento combina as relações de recorrência fornecidas pelo GRM e por dos Santos $g''=F_2(g')$ e $g'=F_1(g)$, respectivamente, de modo que uma terceira relação de recorrência é obtida, a saber $g''=F_3(g)$, onde $F_3(g)=F_2(F_1(g))$. O ponto fixo desta nova relação de recorrência é dado por $g''=g=g^*$, e o novo fator de escala corresponde ao produto das duas transformações.

Empregando-se as relações de recorrência do GRM com (N_1, N_2) e (N_2, S_4) e a obtida por dos Santos [28], segue-se os resultados:

$$g_c = 2,11 \text{ e } \nu_g = 0,661 \text{ [dos Santos [28] + GRM}(N_1, N_2)]$$

$$\text{e } g_c = 2,22 \text{ e } \nu_g = 0,60 \text{ [dos Santos [28] + GRM}(N_2, S_4)]$$

Comparando-se estes novos resultados com os de séries [42] $g_c = 3,08$ e $\nu_g = 0,63$, observa-se que o campo crítico fornecido

pelo grupo de renormalização sequencial nos dois casos piora. Isto pode ser compreendido levando-se em conta que o campo crítico obtido por dos Santos se encontra comparativamente mais afastado do resultado exato (séries) do que os fornecidos pelo GRM. O grupo de renormalização sequencial, ao interpolar entre estes dois resultados, tende a tornar g_c mais próximo do valor obtido por dos Santos. Por outro lado, os novos expoentes críticos obtidos estão bem mais próximos do resultado de séries ($\nu_g=0,63$) do que o valor fornecido pelo cálculo de dos Santos ($\nu_g=0,496$) e a melhor estimativa obtida através do GRM ($\nu_g=1,031$). A eficácia deste procedimento, todavia, é mais acentuada no limite do modelo de Ising puro, como mostrado por Alcantara Bonfim et al. [44].

1.3.3 Rede hexagonal

Neste caso foram empregados diversos pares de aglomerados $[(N_1, N_2), (N_2, H_4), (N_2, H_6), (H_4, H_6), (N_2, H_6), (H_4, H_6), \text{etc}]$.

No cálculo das magnetizações por spin referentes às quatro configurações de H_4 [veja fig. (1.3.3.1)], deve-se observar que os quatro spins não são equivalentes entre si. Supõe-se que no spin central atue um campo γ' (nulo) e nos demais um campo $\gamma=2Jpb$. Expressando formalmente a energia livre correspondente como $F^{(i)}=F^{(i)}(\gamma, \gamma')$, a magnetização por spin $m^{(i)}$ da configuração com i ligações fica dada por:

$$m^{(i)} = -\frac{1}{3} \left(\frac{\partial F_4^{(i)}}{\partial \gamma} \right)_{\gamma=2Jpb} - \left(\frac{\partial F_4^{(i)}}{\partial \gamma'} \right)_{\gamma'=0} \quad (b \ll 1).$$

A magnetização de H_4 fica portanto:

$$m_{H_4} = p^3 m(3) + 3p^2(1-p) m(2) + 3p(1-p)^2 m(1) + (1-p)^3 m(0)$$

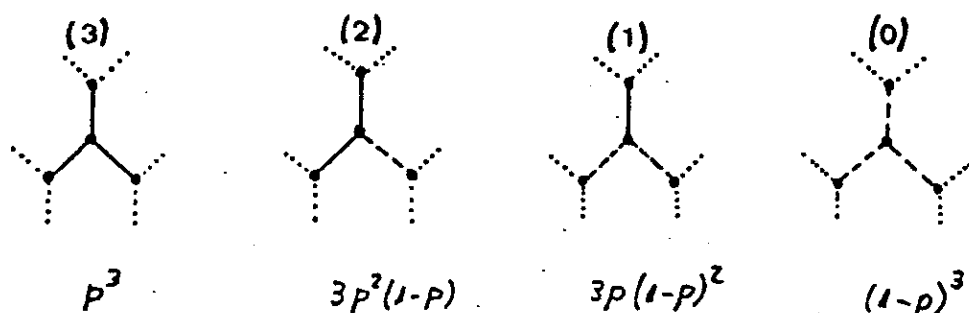


Fig. 1.3.3.1 : Configurações referentes ao aglomerado H_4 (rede hexagonal) empregados no presente cálculo de GRCM e respectivos pesos estatísticos.

Prescrições semelhantes às consideradas para H_4 se aplicam ao aglomerado H'_6 .

Para as configurações de H_6 , os hamiltonianos podem ser genericamente escritos na forma

$$H_{N=6} = H_{N=6}^0 + V_{N=6}$$

$$\text{onde } H_{N=6}^0 = -J_{12} \sigma_1^z \sigma_2^z - J_{23} \sigma_2^z \sigma_3^z - J_{34} \sigma_3^z \sigma_4^z - J_{45} \sigma_4^z \sigma_5^z - J_{56} \sigma_5^z \sigma_6^z \\ - J_{61} \sigma_6^z \sigma_1^z - \Omega (\sigma_1^x + \sigma_2^x + \sigma_3^x + \sigma_4^x + \sigma_5^x + \sigma_6^x)$$

$$\text{e } V_{N=6} = -2Jpb (\sigma_1^z + \sigma_2^z + \sigma_3^z + \sigma_4^z + \sigma_5^z + \sigma_6^z).$$

A diagonalização de $H_{N=6}$ envolve uma matriz 64×64 . O procedimento adotado para diagonalizar esta matriz é descrito no apêndice A e o cálculo da magnetização é realizado de modo análogo ao adotado para os aglomerados T_3 e S_4 . Os resultados

fornecidos pelo cálculo de GRCM para os diversos pares de aglomerados são mostrados na tab. (1.3.3.1).

Tabela (1.3.3.1): O mesmo que na tab. (1.3.1.1) referente à rede hexagonal.

Aglomerados	g=0	p=1	K=∞	p=1	K=∞	g=0	K=∞	p=p _c
	K _c	v _T	g _c	v _g	P _c	v _p	g	v _p
N ₁ , N ₂	0,5493	1,428	2,318	1,083	0,5	1,205	1,277	1,205
N ₂ , H ₄	0,5493	1,453	2,270	1,150	0,5	1,274	1,250	1,213
N ₂ , H ₆	0,5753	1,281	2,256	0,987	0,532	1,189	1,317	1,001
H ₄ , H ₆	0,603	1,089	2,242	0,797	0,574	1,159	1,420	0,883
	0,658 ⁽³⁷⁾	1	1,968 ⁽³⁸⁾	0,87 ⁽³⁶⁾	0,653 ⁽⁴⁰⁾	-	-	-

Comparando-se estes resultados fica evidente a importância da simetria dos aglomerados no que concerne expoentes críticos. Assim, ao se comparar os resultados fornecidos por (N₁,N₂) e (N₂,H₄), observa-se que os resultados para todos os expoentes pioraram, mesmo aumentando-se o tamanho dos aglomerados, ao passo que quase todos os pontos críticos permaneceram praticamente os mesmos. Resultados semelhantes são observados quando se compara os resultados fornecidos por (N₂,H₆) e (H₄,H₆), não incluídos na tab. (1.3.3.1). Por outro lado, comparando-se os resultados fornecidos por (N₂,H₆) e (H₄,H₆), observa-se uma melhora geral, quando se mantém fixo o maior aglomerado do par e aumenta-se o menor deles. Estes resultados refletem claramente a competição entre simetria e tamanho dos aglomerados no que concerne os parâmetros críticos. O tamanho se torna importante quando a simetria já está garantida no aglomerado maior do par.

Uma excelente concordância com os resultados exatos é obtida empregando-se o par (H_4, H_6) , sobretudo no limite clássico. A conjectura de Harris e um cruzamento associado a ν_p na descontinuidade de Harris [pontos A" e B" na fig. (1.4.1)] são também observados.

1.4 Considerações gerais

Os melhores valores para o campo transversal crítico versus a diluição $1-p$ a temperatura nula para as diversas redes bidimensionais são mostrados na fig. (1.4.1). As inclinações $(dg_c/dp)/g_c$ da linha crítica em $p=1$ e $T=0$ são 0,94, 0,91 e 0,86 para as redes triangular, quadrada e hexagonal, respectivamente. Estes valores são comparáveis aos obtidos com outros aglomerados e ao valor 1,07 obtido por dos Santos [28] para o MIT com diluição nas ligações na rede quadrada. Também o campo crítico na descontinuidade de Harris, que é o mesmo para todas as redes quando o par de aglomerados (N_1, N_2) é empregado, permanece quase o mesmo quando aglomerados com a mesma simetria da rede são considerados, como evidenciado na fig. (1.4.1). Observa-se claramente que os presentes resultados para as concentrações críticas referentes às redes triangular e hexagonal violam a dualidade $[p_c(\text{rede triangular}) + p_c(\text{rede hexagonal}) = 1]$. Isto é uma consequência óbvia da quebra de simetria introduzida pelo caráter de campo médio do GRM.

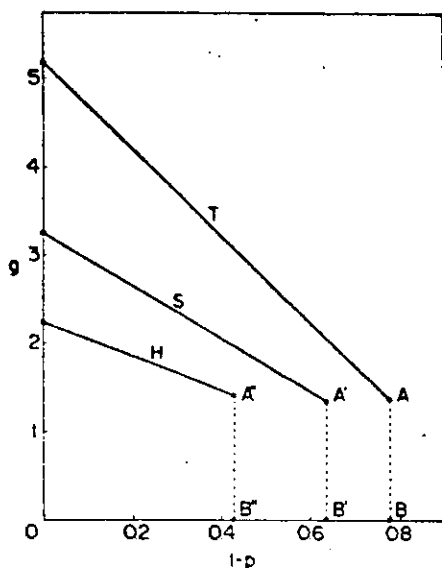


Figura (1.4.1): Campo transverso crítico $g = \Omega/J$ como função da diluição $1-p$ a temperatura nula. Melhores resultados obtidos com o par de aglomerados (N_2, T_3) para a rede triangular (T), (N_2, S_4) para a rede quadrada (S) e (H_4, H_6) para a rede hexagonal (H). A descontinuidade de Harris é aparente em $p=p_c$.

O presente procedimento pode ser também usado no estudo do modelo tridimensional, para o qual resultados de grupo de renormalização no espaço real são menos disponíveis. Os pares (N_1, N_2) e (N_2, S_4) podem ser empregados neste caso, fornecendo valores aproximados para as grandezas críticas do MIT com diluição nas ligações. A melhora na precisão dos resultados, contudo, é muito menos acentuada, comparativamente ao caso bidimensional, como se pode observar na tab. (1.4.1). Isto certamente se deve ao fato de nenhum dos aglomerados empregados neste caso apresentar a simetria (cúbica) da rede.

Tabela (1.4.1): O mesmo que na tab. (1.3.1.1) referente à rede cúbica.

Aglomerados	$g=0$	$p=1$	$K=$	$p=1$	$K=$	$g=0$	$K=$	$p=p_c$
	$-K_c$	v_T	g_c	v_g	p_c	v_p	g	v_p
N_1, N_2	0,203	1,537	5,349	1,414	0,2	1,499	1,277	1,499
N_2, S_4	0,206	1,260	5,315	1,154	0,205	1,267	1,313	1,203
	0,214 ^[45]	0,630 ^[46]	5,1 ^[42]	0,58 ^[42]	0,25 ^[47]	0,82 ^[49]	-	-

1.5 Conclusões

As considerações deste capítulo claramente evidenciam a estreita correlação entre a precisão dos parâmetros relevantes na descrição do comportamento crítico e a simetria dos aglomerados empregados nos cálculos de GRM para o MIT com diluição nas ligações. A escolha adequada, neste caso, corresponde a aglomerados com a simetria da rede. Verifica-se uma boa concordância entre os resultados obtidos para as diversas redes referentes a grandezas universais (melhor precisão para todos os expoentes, incluindo cruzamentos mais bem definidos do limite clássico para o limite quântico e um cruzamento adicional para ν_p) e não universais (valores críticos para a temperatura, concentração e campo transversal mais precisos, existência da descontinuidade de Harris, etc). Deve-se salientar ainda que o presente tratamento permite a obtenção de diagramas de fase semelhantes ao mostrado na figura (1.1.1), para todas as redes. Este diagrama se encontra em acordo com a conjectura de Harris; ele exhibe todavia detalhes incorretos como assinalado na figura. Em outros contextos, o emprego do GRM pode se tornar difícil, especialmente em modelos quânticos, se exigências de simetria requererem aglomerados maiores para o tratamento correto do problema.

Finalmente, convém salientar que não está ainda estabelecido se, considerando-se aglomerados (muito grandes) cada vez maiores para um dado sistema, obtém-se parâmetros críticos tendendo necessariamente para os valores exatos. Isto se aplica ao presente formalismo e a outros tratamentos fenomenológicos, bem como a tratamentos de grupo de renormalização no espaço real.

CAPITULO II

ESTUDO DO MODELO ANNNI VIA O GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO
DE CAMPO MEDIO

2.1 Introdução

O modelo ANNNI ("Axial Next-Nearest Neighbour Ising Model") leva em conta interações ferromagnéticas entre spins primeiros vizinhos e interações antiferromagnéticas entre spins segundos vizinhos mais próximos ao longo de uma direção axial. Apesar de sua simplicidade, este modelo tem suscitado nos últimos anos considerável interesse devido ao seu comportamento crítico extremamente rico. O hamiltoniano correspondente para interações ferromagnéticas isotrópicas entre vizinhos mais próximos $J_1 > 0$, pode ser definido como

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j,k} (J_1 S_{i,j,k} S_{i+1,j+1,k+1} - J_2 S_{i,j,k} S_{i+2,j,k}) \quad (2.1.1)$$

$$S_{i,j,k} = \pm 1$$

onde $J_2 > 0$ é uma interação competitiva antiferromagnética entre spins segundos vizinhos ao longo da direção i . Embora o modelo

(2.1.1) em uma dimensão apresenta solução exata [48], não existem resultados exatos do diagrama de fases global em duas e três dimensões. Todavia, de acordo com diversos métodos aproximativos, tem-se mostrado que este sistema em $d > 1$ dimensões exibe fases paramagnética, ferromagnética e moduladas, bem como um ponto de Lifshitz (PL) no caso do modelo tridimensional, no lado ferromagnético, a uma temperatura não nula.

Em três dimensões, a região de altas temperaturas do diagrama de fases e a vizinhança do PL foram investigadas mediante métodos de grupo de renormalização [15,49], expansões em séries de alta temperatura [50-51] e simulações de Monte Carlo [52]. Através destes cálculos, o PL foi localizado a uma temperatura absoluta $T \neq 0$. Na região de baixas temperaturas, o modelo foi estudado através de expansões em série de baixa temperatura [53], simulações de Monte Carlo [54], interações efetivas de pares, tripletos, ..., parede-parede [55] e várias teorias de campo médio [56-59]. Mostrou-se que o estado fundamental do modelo é ferromagnético para $2J_2 < J_1$, e para $2J_2 > J_1$ ele exibe uma sequência periodicamente estendida de planos ferromagnéticos, dois para cima e dois para baixo, ao longo da direção i . O ponto $T=0$, $2J_2=J_1$ é um ponto multifásico com uma degenerescência infinita para o estado fundamental. A baixas temperaturas, o modelo exibe um comportamento complexo. Fases moduladas originando-se no ponto multifásico foram evidenciadas através de diferentes métodos [56,59]; todavia permanece ainda controversa a dependência do vetor de onda axial q com a relação de acoplamentos J_2/J_1 .

Em duas dimensões, os cálculos realizados para o modelo

ANNNI incluem simulações de Monte Carlo [60] e expansões de altas temperaturas [61], os quais localizam um PL no lado ferromagnético a uma temperatura não-nula. De acordo com o consenso atual, todavia, existe uma fase desordenada estável até $T=0$, sem apresentar qualquer PL a uma temperatura finita para $J_2/J_1 < 0,5$. Este ponto de vista é fundamentado, entre outros, por trabalhos envolvendo soluções exatas (ao longo de uma determinada linha) referentes a um hamiltoniano equivalente [62], aproximações de férmions livres [63], simulações de Monte Carlo com cuidadosa análise de tamanho finito [64] e um tratamento de escala de tamanho finito [65]. Mais recentemente, um cálculo no contexto do método de variação de aglomerados [66] indicou a ausência de um PL a uma temperatura finita para $J_2/J_1 < 0,5$.

Neste capítulo são estudadas as propriedades críticas do modelo ANNNI via o grupo de renormalização de campo médio (GRCM), introduzido no capítulo anterior (seção 1.2), obtendo-se diagramas de fases para o modelo em duas e três dimensões, bem como estimativas para o expoente térmico para o modelo bidimensional [4-5].

2.2 Grupo de renormalização de campo médio e aglomerados empregados

Os aglomerados considerados no presente estudo do modelo ANNNI via o GRCM são a cadeia linear (aglomerado I) e a cadeia dupla (aglomerado II), mostrados na fig. (2.2.1).

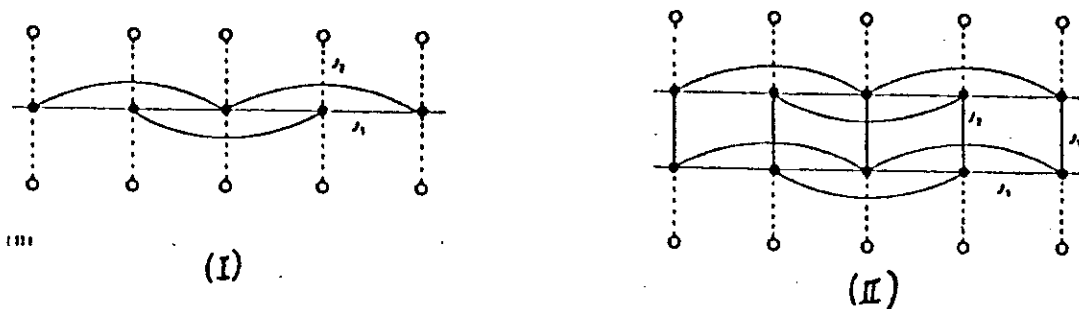


Figura 2.2.1 : Representação esquemática da cadeia linear (aglomerado I) e da cadeia dupla (aglomerado II) em duas dimensões. Os acoplamentos entre primeiros vizinhos são ferromagnéticos e os acoplamentos entre segundos vizinhos mais próximos são antiferromagnéticos. Os spins adjacentes a cada aglomerado são representados por círculos abertos.

Como nos dois aglomerados cada spin possui a mesma vizinhança, as expressões para as magnetizações em ambos os casos estão trivialmente conectadas com as respectivas susceptibilidades, as quais, no contexto deste estudo, podem ser calculadas através de uma simples generalização do procedimento envolvendo a matriz transferência, empregado no cálculo de funções correlação do modelo de Ising na cadeia linear^[67]. Detalhes deste método se encontram no apêndice B.

Na próxima seção apresentamos expressões formais para as magnetizações por spin referentes aos aglomerados I e II e os resultados correspondentes de campo médio para o modelo ANNNI. O diagrama de fases fornecido pelo GRM é discutido na seção seguinte.

2.3 Magnetizações e aproximações de campo médio

2.3.1 Aglomerado I

O primeiro passo no presente cálculo consiste em obter a magnetização por spin m_L referente ao aglomerado I na presença de um campo local h_i^l atuando em cada spin S_i da cadeia linear. Como estabelece o GRM, estes campos locais são dados por

$$h_i^l = (2d-2)J_1 b_i^l \quad (2.3.1.1)$$

onde $2d$ é o número de coordenação da rede e b_i^l designa as magnetizações mantidas fixas dos spins adjacentes ao aglomerado I. Uma vez que $b_i^l \ll 1$ e, conseqüentemente, $h_i^l \ll 1$, pode-se empregar a teoria da resposta linear [68] e obter

$$m_L(K_1^l, K_2^l, q') = \chi_L(K_1^l, K_2^l, q')(z-2)K_1^l b_q^l, \quad z = 2d \quad (2.3.1.2)$$

onde $K_1^l = \beta J_1$, $K_2^l = \beta J_2$, $\beta = 1/k_B T$, e q' é o vetor de onda ao longo da direção axial. $\chi_L(K_1^l, K_2^l, q')$ representa a susceptibilidade em termos de q' . Neste estágio, é possível extrair alguma informação sobre a criticalidade do modelo $d > 1$ dimensional via métodos de campo médio. A susceptibilidade como função de q' na fase paramagnética para o sistema em $d > 1$ dimensões pode ser escrita como [69]

$$\chi_d(K_1^l, K_2^l, q') = \frac{\chi_L(K_1^l, K_2^l, q')}{1 - \chi_L(K_1^l, K_2^l, q')(z-2)K_1^l} \quad d > 1. \quad (2.3.1.3)$$

($z=2d$)

A temperatura de transição e o vetor de onda associado à periodicidade correspondente podem ser obtidos através dos valores para os quais a susceptibilidade (2.3.1.3) diverge pela primeira vez, quando a temperatura é abaixada. Neste cálculo, as interações ao longo da direção axial são levadas em

conta exatamente ao passo que as interações perpendiculares são tratadas na aproximação de campo médio. Estas considerações foram anteriormente realizadas por Pires et al. [70]. Estes autores utilizaram em seus cálculos os resultados exatos para as funções de correlação obtidas por Stephenson [48]. Eles mostraram que os resultados obtidos de (2.3.1.3) são consideravelmente melhores que os obtidos através das teorias usuais de campo médio. Este tratamento, todavia, permite determinar apenas a linha da transição de segunda ordem das fases paramagnética-ferromagnética e paramagnética-fases moduladas. Nenhuma informação sobre as fases moduladas em baixas temperaturas é obtida através da equação (2.3.1.3).

2.3.2 Aglomerado II

Neste caso, o campo local atuando em cada par de spins da cadeia dupla é dado por

$$h_i = (2d-3)J_1 b_i, \quad (2.3.2.1)$$

onde b_i designa as magnetizações dos spins adjacentes ao aglomerado II, mantidas fixas. Se $b_i \ll 1$, pode-se então escrever

$$m_D(K_1, K_2, q) = \chi_D(K_1, K_2, q)(z-3)K_1 b_q, \quad z=2d \quad (2.3.2.2)$$

onde as grandezas que aparecem em (2.3.2.2) têm um significado análogo ao das grandezas presentes em m_L referente ao aglomerado I. O cálculo da susceptibilidade $\chi_D(K_1, K_2, q)$ para a

cadeia dupla em termos do vetor de onda q , segue de uma generalização da prescrição de Marsh ^[67] para o cálculo de funções de correlação de spins. Inicialmente são definidas "matrizes de spin" diagonais apropriadas, 16×16 , associadas à matriz transferência da cadeia dupla, muito semelhantes à matriz de spin 2×2 da cadeia linear de spins no modelo de Ising. O procedimento é então essencialmente o mesmo que o empregado no cálculo de funções de correlação de pares de spin através de um produto de matrizes. Maiores detalhes sobre este procedimento e sua generalização se encontram no apêndice B.

Neste ponto é interessante realizar um cálculo de campo médio similar ao realizado anteriormente para o aglomerado I. A susceptibilidade em termos do vetor de onda q na fase paramagnética é agora dada por

$$\chi_d(K_1, K_2, q) = \frac{\chi_D(K_1, K_2, q)}{1 - \chi_D(K_1, K_2, q)(z-3)K_1} \quad d > 1. \quad (2.3.2.3)$$

$$z = 2d$$

Como anteriormente, a temperatura crítica e o vetor de onda axial crítico são determinados pelos valores para os quais o denominador de (2.3.2.3) se anula ^[70]. A linha crítica separando a fase paramagnética como função da razão J_2/J_1 obtida na presente aproximação de campo médio com a cadeia dupla (referida como ACD) é mostrada na fig. (2.4.1) juntamente com as linhas correspondentes para a cadeia linear na aproximação de campo médio (referida como ACL) e aproximação de campo médio usual (CM) para o modelo tridimensional. Uma nitida melhora é obtida aumentando-se a largura dos aglomerados (tiras infinitas). O vetor de onda axial crítico q_c , como função de

J_2/J_1 , ao longo da linha de transição fase paramagnética-fases moduladas, vale zero (no PL) e tende ao valor $q_c = \pi/2$ (para $J_2/J_1 \rightarrow \infty$) em todas as aproximações consideradas [fig.(2.3.2.1)]

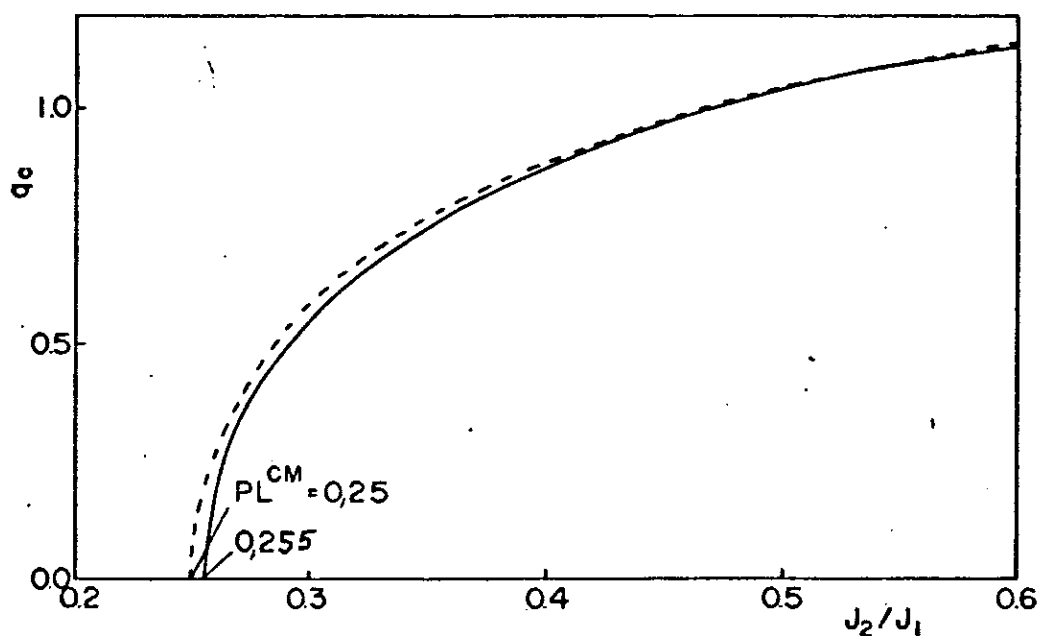


Figura 2.3.2.1 : Vetor de onda axial crítico q_c versus J_2/J_1 para o modelo 3d segundo as aproximações (praticamente coincidentes) de CM, ACL e ACD (linha tracejada) e de GRCM (linha cheia), discutida na próxima seção.

A localização do PL, contudo, praticamente coincide com a razão $J_2/J_1 = 0,25$ fornecida pela aproximação de CM. Novamente, nenhuma informação sobre a região de fases moduladas em baixas temperaturas pode ser obtida da equação (2.3.2.3). Além disso, todos os expoentes críticos são exatamente os mesmos fornecidos pela teoria de CM usual.

Em duas dimensões, resultados semelhantes aos mostrados na figura (2.4.1) são obtidos nas aproximações ACL e ACD. O comportamento crítico assim determinado para o modelo ANNNI em duas e três dimensões representa uma evidência do caráter de campo médio das aproximações empregadas, as quais não dis-

tinguem, de uma maneira qualitativa, a dimensionalidade do sistema para $d > 1$.

2.4 Considerações de grupo de renormalização de campo médio

As magnetizações m_L e m_D obtidas nas subseções anteriores podem ser combinadas dentro do espírito do grupo de renormalização impondo-se uma relação de escala da forma $m_L = \epsilon m_D$ e supondo-se uma relação de escala semelhante entre b'_q e b_q , i.e. $b'_{q_1} = \epsilon b_{q_1}$ (confira seção 1.2). Deste modo obtém-se

$$(2d-2)K'_L \chi_L(K'_1, K'_2, q') = (2d-3)K_D \chi_D(K_1, K_2, q) \quad (2.4.1)$$

que independe do fator de escala ϵ . A equação (2.4.1) é vista como uma relação de recorrência entre os parâmetros K'_1, K'_2, q' e K_1, K_2, q . Esta única relação obviamente não permite determinar o diagrama de fluxos completo no espaço de parâmetros do hamiltoniano (2.1.1), como discutido no capítulo anterior. Por outro lado, é possível obter as soluções de pontos fixos associados à equação (2.4.1), a saber:

$$(2d-2) \chi_L(K_1, K_2, q) = (2d-3) \chi_D(K_1, K_2, q) \quad (2.4.2)$$

Esta relação permite obter a superfície crítica do modelo (2.1.1) calculando-se $(K_1^c)^{-1} = k_B T_c / J_1$ como função da razão J_2 / J_1 relativa a cada modo q . Para o modelo tridimensional, obtém-se da equação (2.4.2) a linha crítica paramagnética mostrada na fig. (2.4.1) juntamente com os resultados anteriores e os

fornecidos pelo cálculo variacional de Tomé e Salinas [71], expansões em séries de alta temperatura [51] e simulação de Monte Carlo [72].

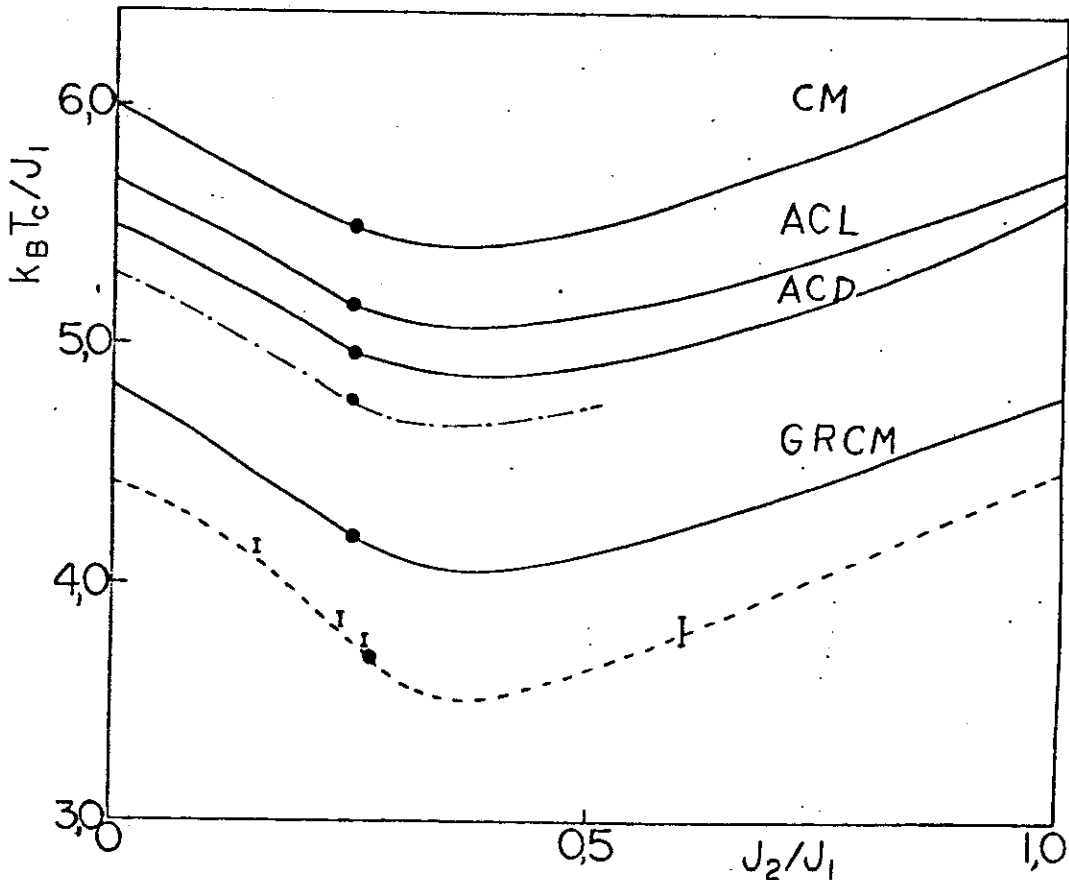


Figura 2.4.1: Linha crítica paramagnética para o modelo tridimensional como função de J_2/J_1 de acordo com diversas aproximações. Os círculos cheios representam o ponto de Lifshitz. Traço e ponto: procedimento variacional de Tomé e Salinas [71]; barras de erro: simulação de Monte Carlo; linha tracejada: expansão em séries.

Observa-se uma boa concordância entre o presente resultado de GRCM para esta linha com as curvas fornecidas por métodos mais precisos. O PL que se encontra localizado em $J_2/J_1=0,255$, deveria ser comparado ao valor $J_2/J_1=0,265$ obtido através de um cálculo de Monte Carlo envolvendo um processo de médias ("coarse graining") [72] e ao valor $J_2/J_1=0,27$ obtido por expansões em série de altas temperaturas [51]. É importante ressaltar que a presente escolha de aglomerados não permite

captar detalhes do diagrama de fases em baixas temperaturas, o que está provavelmente ligado ao fato de nenhum deles possuir a simetria cúbica da rede. Por outro lado, para o modelo bidimensional, a equação (2.4.2) fornece o diagrama de fases mostrado na fig. (2.4.2), o qual exibe algumas curvas para $q \neq 0$ na região de baixas temperaturas.

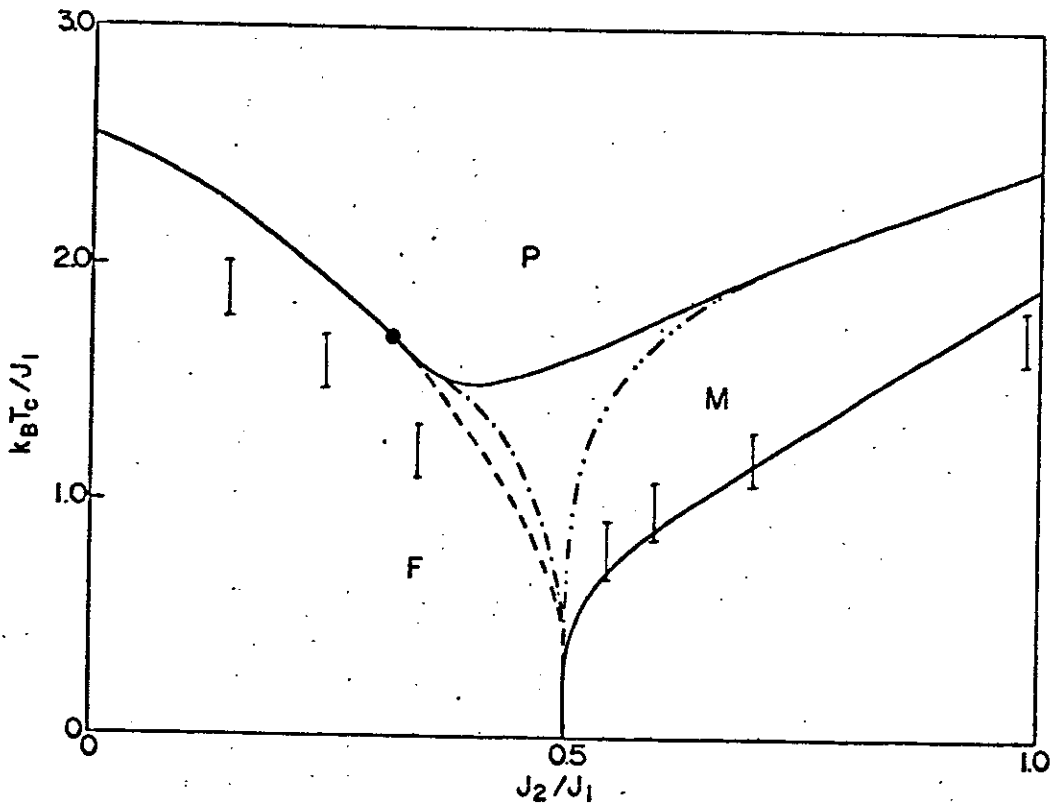


Figura (2.4.2): Diagrama de fases do modelo bidimensional fornecido pelo GRM. O círculo representa o ponto de Lifshitz (artificialmente gerado pelo método). P: fase paramagnética; F: fase ferromagnética; M: fase modulada. Linha tracejada: $q=0$; linha ponto e traço: $q=\pi/7$; linha ponto-ponto-traço: $q=2\pi/5$; linha cheia inferior: $q=\pi/2$. Barras de erro: resultados de Beale et al.^[65] correspondentes às linhas $q=0$ ($J_2/J_1 < 0.5$) e $q=\pi/2$ ($J_2/J_1 > 0.5$).

Este resultado certamente está correlacionado com o caráter bidimensional do aglomerado II. Embora uma descrição detalhada do diagrama de fases a baixas temperaturas não possa ser obtida através do presente procedimento, as linhas separando as fases

moduladas para $q = \pi/2$ e $q=0$ estão dentro dos limites estabelecidos pelo cálculo realizado por Beale et al. [65] no contexto da teoria de escala de tamanho finito, o qual também emprega tiras infinitas com larguras finitas, bem mais largas que as por nós consideradas. Não é surpreendente todavia que o presente tratamento forneça um PL a uma temperatura não nula, como nos cálculos de campo médio anteriores, uma vez que o próprio GRM ainda carrega um caráter de campo médio, inexistente no procedimento adotado por Beale et al. [65]. Além disso, estimativas para expoentes térmicos podem ser determinadas através da equação (2.4.1) calculando-se:

$$|dK_1'/dK_1|_{PF} = \ell^{1/4} \quad (2.4.3)$$

onde a derivada se refere aos pontos fixos dados pela equação (2.4.2), e $\ell = 2$ representa o fator de escala relativo aos aglomerados empregados para o modelo bidimensional [73]. Os expoentes críticos obtidos são mostrados na fig. (2.4.3).

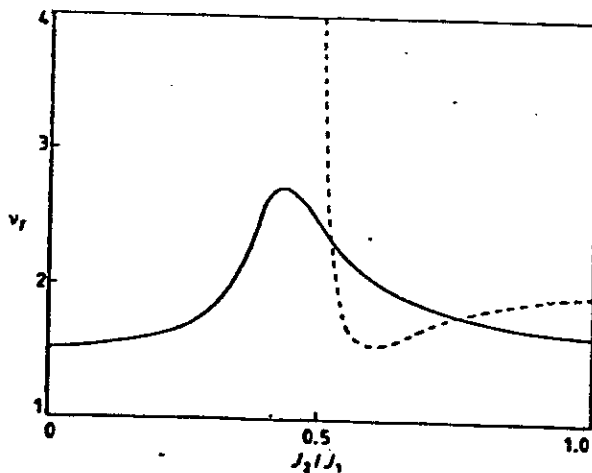


Figura (2.4.3): Expoente crítico térmico como função de J_2/J_1 para o modelo bidimensional. A curva cheia se refere à linha paramagnética. A linha tracejada se refere à $q = \pi/2$ (veja fig. (2.4.2))

Embora se observe um nitido cruzamento no ponto multifásico $J_2/J_1=0,5$ para a linha $q=\pi/2$, também se observa um comportamento patológico de χ ao longo da linha paramagnética. Este tipo de comportamento foi observado em aplicações anteriores do GRCM (no modelo de Ising antiferromagnético na rede triangular [74] e no modelo de Ashkin-Teller [75]). Um cálculo do expoente térmico para o modelo tridimensional necessitaria o conhecimento adicional do fator de escala l , o qual não é óbvio neste caso. Todavia, apenas calculando-se a derivada na relação (2.4.3) nos pontos fixos é possível obter alguma evidência de um cruzamento próximo ao PL, o que está de acordo com os resultados de Kaski e Selke [72].

2.5 Conclusões

Mesmo não fornecendo o diagrama de fases esperado para o modelo ANNNI bidimensional nem o seu complexo comportamento a baixas temperaturas para $d>1$, o presente tratamento se mostrou útil na obtenção de estimativas quantitativamente boas para algumas fronteiras críticas comparadas às obtidas através das teorias usuais de campo médio. Além disso, o tratamento adotado permite obter estimativas de expoentes críticos para o modelo bidimensional através de um procedimento bem conhecido.

O presente tratamento pode ser também facilmente empregado para estudar uma versão mais geral do modelo ANNNI, a qual apresenta um acoplamento J_0 diferente, nas direções perpendiculares à direção axial. Neste caso, ao contrário das teorias

usuais de campo médio, a localização do ponto de Lifshitz depende também da razão J_0/J_1 .

Devemos mencionar que aglomerados (tiras infinitas) mais largos poderiam ser também considerados. Em comparação com outros métodos, no presente tratamento é necessário calcular todos os autovalores e autovetores da matriz transferência. Mais importante ainda, é que a magnetização por spin para aglomerados mais largos do que a cadeia dupla não mais se encontra conectada com as susceptibilidades usuais, o que nos impossibilita de utilizar o procedimento recentemente proposto por Pesh e Kroemer [76] para calcular $\chi_N(q)$, $N \geq 3$. Além disso, é de se esperar uma convergência muito lenta para os resultados exatos à medida que a largura das faixas infinitas for aumentada, como verificado para a cadeia tripla no limite de Ising [73]. Concluimos assim que a presente escolha de aglomerados se mostra a mais adequada para uma abordagem do modelo ANNNI via o GRM.

CAPITULO III

COMPORTAMENTO CRITICO EM SUPERFICIES:
TRATAMENTO VARIACIONAL PARA A ENERGIA LIVRE

3.1 Introdução

O estudo do magnetismo de superficies, devido á suas aplicações e riqueza intrinseca, tem despertado nos últimos anos considerável interesse, tanto experimental quanto teórico (veja Refs. [77-79] para uma revisão recente). O sistema mais comumente estudado é o de um superficie livre, considerando-se o mesmo como um volume semi-infinito.

Uma realização experimental de tal sistema consiste em supor que no topo do volume magnético se encontram adsorvidos átomos magnéticos diferentes, formando uma camada na qual as interações entre os átomos constituintes são distintas das interações predominantes no interior do volume.

Vários modelos têm sido propostos para descrever os diversos sistemas possíveis. Um dos modelos mais simples consiste em uma rede cúbica de Bravais semi-infinita com uma superficie livre (1,0,0) na qual spins, dispostos nos vértices da rede, se acoplam entre si através de interações de troca $J_S = J(1 + \Delta)$, onde J representa a constante de

acoplamento entre spins primeiros vizinhos no volume, e spins na superfície com spins primeiros vizinhos na segunda camada. Este sistema corresponde ao modelo usual de Ising com acoplamentos distintos na superfície e no volume e exhibe, segundo diversas aproximações de campo médio e cálculos de grupo de renormalização [80-85] uma criticalidade conspicua, com a superfície se ordenando a uma temperatura superior à temperatura crítica do sistema cúbico infinito com acoplamento J , quando J_S excede este acoplamento a partir de um determinado valor Δ . Este comportamento pode ser compreendido dentro das aproximações usuais de campo médio, segundo as quais a magnetização decai exponencialmente dentro do volume a partir da superfície, significando que algumas camadas vizinhas à superfície se encontram magneticamente ativadas, o que permite que a superfície atinja a criticalidade também por intermédio delas.

Neste capítulo são abordados três sistemas semi-infinitos distintos, numa rede cúbica de Bravais, nos quais a superfície (S) é descrita por um modelo quântico e o volume (V), incluindo as interações deste com a superfície, é descrito por um modelo clássico, a saber :

(1) Modelo de Ising spin-1/2 com campo transversal e diluição nas ligações (S) e modelo de Ising spin-1/2 usual (V).

(ii) Modelo de Heisenberg spin-1/2 anisotrópico com diluição nas ligações (S) e modelo de Ising spin-1/2 (V).

(iii) Modelo de Heisenberg spin-1 anisotrópico com termo de anisotropia uniaxial e diluição nas ligações (S) e modelo de Ising spin-1 (V).

Alguns modelos de sistemas magnéticos com características semelhantes às dos modelos acima foram anteriormente estudados por diferentes autores. Cottam [86] mostrou que num sistema de spins ou pseudo-spins semi-infinito com acoplamentos e campos transversos distintos na superfície e no volume podem existir ondas superficiais de spin localizadas. Tamura et al. [87] realizaram um estudo de um modelo semelhante ao caso (i) acima, que inclui um campo transversal também no volume, através de um formalismo de campo médio que emprega as relações de Callen, estabelecendo que neste caso a superfície pode se ordenar, sem que a rede como um todo esteja magnetizada. Num trabalho precursor, Mills [88] considerou um sistema semi-infinito descrito pelo modelo de Heisenberg através de um cálculo de campo médio, concluindo que a superfície pode se ordenar a uma temperatura acima da temperatura de Curie do volume, se o acoplamento entre spins na mesma for superior ao do volume, a partir de determinado valor. Costa et al. [89] consideram o sistema (ii) no caso puro, i.e., ausência de diluição nas ligações da superfície, através de um tratamento de grupo de

renormalização do tipo Migdal-Kadanoff, obtendo um diagrama de fases que exhibe um ordenamento na superfície a temperaturas superiores à do modelo de Ising tridimensional numa rede cúbica, a partir de um valor crítico Δ_c , que define a localização de um ponto multicrítico no diagrama de fases.

A presença de anisotropia uniaxial associada ao magnetismo de superfícies, foi investigada pela primeira vez por Neél [90] num modelo de spins localizados e levada em conta no estudo de diversos sistemas [91], sendo experimentalmente observada em filmes finos magnéticos [92]. No tratamento de sistemas ferromagnéticos com direções preferenciais de magnetização, a existência de campos de anisotropia não é usualmente levada em consideração, por tratar-se de um efeito secundário, uma vez que resulta de interações de dipolo relativamente fracas e acoplamentos de spin-órbita. Numa superfície, um efeito adicional de anisotropia deve ser esperado em virtude da redução de simetria do volume para a superfície, com a quebra da invariância translacional.

3.2 Formalismo Variacional

No presente estudo empregamos um método variacional baseado na desigualdade de Bogoliubov (veja, por exemplo, referência [93]):

$$F(\gamma) \leq F_0(H_0) + \langle \mathcal{H} - H_0 \rangle_0 = \tilde{Q}(\gamma) . \quad (3.2.1)$$

onde $F(\mathcal{K})$ é a energia livre do sistema descrito por \mathcal{K} , $F_0(H_0)$ é a energia livre associada ao hamiltoniano tentativo $H_0 = H_0(\gamma)$, onde γ são parâmetros variacionais, e $\langle \dots \rangle_0$ representa a média térmica tomada sobre o "ensemble" definido por H_0 .

Propriedades termodinâmicas aproximadas do sistema descrito por \mathcal{K} são obtidas minimizando-se o lado direito da desigualdade (3.2.1) acima com relação aos parâmetros variacionais γ e supondo-se que $F(\mathcal{K}) = \bar{F}_{\min}(\gamma)$.

Diferentes escolhas para o hamiltoniano tentativo em (3.2.1) conduzem a diferentes aproximações. Para se obter resultados ao menos comparáveis com a aproximação de aglomerados de dois spins de Ferreira et al. [94] para os modelos aqui considerados, suporemos que o Hamiltoniano tentativo seja da forma :

$$H_0 = \sum_{\substack{\text{camadas} \\ i=1}}^{N'} H_0^{(i)} \quad (N' \rightarrow \infty) \quad (3.2.2)$$

onde o hamiltoniano para a camada i

$$H_0^{(i)} = \sum_{\substack{\text{spins} \\ \text{livres}}} H_L^{(i)} + \sum_{\text{pares}} H_P^{(i)}$$

H_L representa o hamiltoniano para um spin livre e H_P se refere a um par de spins acoplados, numa determinado plano paralelo à superfície. A soma sobre spins livres e pares de spins abrange todos os spins numa camada e o somatório em i leva em conta a contribuição de todas as camadas. Supõe-se ainda que a magnetização em cada camada seja uniforme, isto

é , o sistema é translacionalmente invariante ao longo das direções paralelas à superfície.

Um dos pontos básicos do tratamento de Ferreira et al. [94] consiste em supor que a magnetização por spin obtida através de H_L e H_P seja a mesma, o que permite estabelecer uma relação entre os parâmetros variacionais γ .

Este formalismo, além de simples, permite obter equações gerais, aplicáveis a todos os modelos propostos neste capítulo, bastando para tanto nelas substituir as relações obtidas entre os parâmetros variacionais, específicas para cada modelo.

3.3 Sistemas de spins semi-infinitos

Em todos os sistemas considerados neste capítulo, supõe-se que as ligações entre os spins na superfície se encontram diluídas. A distribuição de probabilidades para os acoplamentos entre spins primeiros vizinhos na superfície, definida a partir de funções delta de Dirac, é dada por:

$$P(J_{1j}) = p\delta(J_{1j} - J_S) + (1-p)\delta(J_{1j}) \quad (3.3.1)$$

onde p designa a fração de ligações presentes, $(1-p)$ a fração de ligações ausentes e $J_S = J(1+\Delta)$.

Nas próximas seções, o formalismo variacional é empregado no tratamento dos sistemas propostos.

3.3.1. Modelo de Ising spin-1/2 com campo transverso e diluição nas ligações (S) e modelo de Ising spin-1/2 (V)

O hamiltoniano para este sistema pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & - \sum_{(\rho, \rho')} J_{\rho, \rho'} \sigma_{1, \rho}^z \sigma_{1, \rho'}^z - J \sum_{i=2}^{N'} \sum_{(\rho, \rho')} \sigma_{i, \rho}^z \sigma_{i, \rho'}^z - \\ & - J \sum_{\rho} \sum_{i=1}^{N'} \sigma_{i, \rho}^z \sigma_{i+1, \rho}^z - \Omega \sum_{i, \rho} \sigma_{i, \rho}^x - h_1 \sum_{\rho} \sigma_{1, \rho}^z - h \sum_{i, \rho} \sigma_{i, \rho}^z \quad (3.3.1.1) \\ & (N' \rightarrow \infty) \end{aligned}$$

onde σ^{α} , $\alpha = x, y, z$, são dadas pelas matrizes de Pauli, i corresponde à i -ésima camada e ρ, ρ' se referem à coordenadas paralelas à superfície. O primeiro somatório corresponde às interações na superfície, o segundo a interações nas camadas internas e o terceiro a interações entre camadas. O quarto e o quinto somatórios se referem, respectivamente, às contribuições dos campos transversos (Ω) e longitudinal (h_1), atuando somente na superfície, ao passo que o último termo leva em conta a contribuição do campo h atuando em todo sistema. J é a constante de acoplamento entre spins primeiros vizinhos em todo sistema exceto na superfície, onde o acoplamento $J_{\rho, \rho'}$ é dado pela distribuição de probabilidades (3.3.1).

A parte do hamiltoniano tentativo referente a spins situados na superfície, assume, neste caso, a forma:

$$H^{(1)} = \sum_{\substack{\text{Spins} \\ \text{livres}}} H_L + \sum_{\text{pares}} H_P \quad (3.3.1.2)$$

onde

$$H_L^{(4)} = - \gamma_L^{(4)} \sigma_1^z - \Omega \sigma_1^x \quad (3.3.1.3)$$

é o hamiltoniano para um spin livre e

$$H_P^{(4)} = - J_S \sigma_1^z \sigma_2^z - \gamma_P^{(4)} (\sigma_1^z + \sigma_2^z) - \Omega (\sigma_1^x + \sigma_2^x) \quad (3.3.1.4)$$

é o hamiltoniano para um par de spins ligados. $\gamma_L^{(4)}$ e $\gamma_P^{(4)}$ são parâmetros variacionais. Os índices 1 e 2 nas variáveis de spin em (3.3.1.4) são empregados para indicar que os spins pertencem ao par ligado. As somas em (3.3.1.2) se referem a spins livres e pares de spins desconexos que se distribuem por toda a superfície.

As expressões para as funções de partição $Z_L^{(4)}$ e $Z_P^{(4)}$ correspondentes a $H_L^{(4)}$ e $H_P^{(4)}$ foram anteriormente determinadas por Plascak e Salinas [95]. Para valores de $\gamma_L^{(4)}$ e $\gamma_P^{(4)}$ muito pequenos (i.e. $\gamma_L^{(4)}, \gamma_P^{(4)} \ll 1$) é possível escrever $Z_L^{(4)}$ e $Z_P^{(4)}$ em termos de uma expansão em $\gamma_L^{(4)}$ e $\gamma_P^{(4)}$, respectivamente [95] :

$$-\frac{1}{\beta} \ln Z_L^{(4)} = -\frac{1}{\beta} \ln(2 \cosh \beta \Omega) - \frac{1}{2} \frac{\tanh \beta \Omega}{\Omega} (\gamma_L^{(4)})^2 + O[(\gamma_L^{(4)})^4] \quad (3.3.1.5)$$

$$-\frac{1}{\beta} \ln Z_P^{(4)} = -\frac{1}{\beta} \ln E + \frac{1}{2} S (\gamma_P^{(4)})^2 + O[(\gamma_P^{(4)})^4] \quad (3.3.1.6)$$

onde $E = 2 \cosh \beta J_S + 2 \cosh \beta \lambda_2^0$,

$$\lambda_2^0 = [J_S^2 + 4 \Omega^2]^{1/2},$$

$$S = 2 [\exp(\beta J_S) \frac{2 J_S}{\Omega^2} + \exp(-\beta \lambda_2^0) C - \exp(\beta \lambda_2^0) D] E^{-1},$$

$$\left\{ \begin{array}{c} C \\ D \end{array} \right\} = \frac{J_S^2 + 2 \Omega S + J_S \lambda_2^0}{\lambda_2^0}$$

A magnetização por spin na superfície pode ser obtida, de acordo com Ferreira et al. [94], das relações (3.3.1.5) e (3.3.1.6), impondo-se que o valor médio de $\langle \sigma_i^z \rangle \equiv m_1$ seja o mesmo nos dois casos, i.e.

$$m_1 = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \gamma_L^{(i)}} f_L = \frac{1}{2\beta} \frac{\partial}{\partial \gamma_P^{(i)}} f_P \quad , \quad (3.3.1.7)$$

$$\text{onde } f_L = \ln Z_L(\gamma_L^{(i)}) \quad (3.3.1.8)$$

$$\text{e } f_P = 2(1-p) \ln Z_L(\gamma_P^{(i)}) + p \ln Z_P(\gamma_P^{(i)}) \quad (3.3.1.9)$$

$f_L(\gamma_L^{(i)})$ e $f_P(\gamma_P^{(i)})$ representam as energias livres resultantes ao se realizar a média configuracional de acordo com a distribuição (3.3.1). A relação (3.3.1.7) estabelece um vínculo entre $\gamma_L^{(i)}$ e $\gamma_P^{(i)}$, a saber:

$$m_1 = \frac{(\tanh \beta \Omega)}{\Omega} \gamma_L^{(i)} = \left[-\frac{p}{2} S + (1-p) \frac{\tanh(\beta \Omega)}{\Omega} \right] \gamma_P^{(i)} \quad (3.3.1.10)$$

Nas demais camadas ($i > 1$) tem-se :

$$H_L^{(i)} = - \gamma_L^{(i)} \sigma_i^z \quad (3.3.1.11)$$

$$\text{e } H_P^{(i)} = - J \sigma_1^z \sigma_2^z - \gamma_P^{(i)} (\sigma_1^z + \sigma_2^z) \quad (3.3.1.12)$$

onde o índice i designa a i -ésima camada e $\gamma_L^{(i)}$ e $\gamma_P^{(i)}$ são parâmetros variacionais. A determinação de $Z_L^{(i)}$ e $Z_P^{(i)}$ é trivial em ambos os casos:

$$Z_L^{(i)} = 2 \cosh(\beta \gamma_L^{(i)}) \quad (3.3.1.13)$$

$$e Z_P^{(i)} = 2 \exp(\beta J) \cosh(2\beta \gamma_P^{(i)}) + 2 \exp(-\beta J) \quad (3.3.1.14)$$

Levando-se em conta que a magnetização por spin na i -ésima camada $m_i \equiv \langle \sigma_i^z \rangle$, obtida de (3.3.1.13) e (3.3.1.14) é a mesma de acordo com o presente tratamento, tem-se:

$$m_i = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \gamma_L^{(i)}} \ln Z_L^{(i)} = \frac{1}{2\beta} \frac{\partial}{\partial \gamma_P^{(i)}} \ln Z_P^{(i)} \quad (3.3.1.15)$$

Estas igualdades permitem obter a seguinte relação entre $\gamma_L^{(i)}$ e $\gamma_P^{(i)}$, quando $\gamma_L^{(i)}, \gamma_P^{(i)} \ll 1$:

$$m_i \approx \beta \gamma_L^{(i)} = \frac{\exp(\beta J)}{\cosh(\beta J)} \beta \gamma_P^{(i)} \quad (3.3.1.16)$$

A expressão para $\bar{\Phi}(\gamma)$ é obtida efetuando-se a média $\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0$ e levando-se em conta que $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = m^2$, uma vez que em H_0 não existe correlação entre spins pertencentes a diferentes aglomerados. Deste modo:

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 = & - (Nz/2 - n) J_S m_1^2 - (Nz/2 - n) J \sum_{i=2}^{N'} m_i^2 - \\ & - JN \sum_{i=1}^{N'} m_i m_{i+1} - h N \sum_{i=1}^{N'} m_i - h_1 m_1 + \\ & + (N-2n) \sum_{i=1}^{N'} \gamma_L^{(i)} m_i + 2n \sum_{i=2}^{N'} \gamma_P^{(i)} m_i \quad (3.3.1.17) \end{aligned}$$

onde n designa o número de pares de spin desconexos, suposto o mesmo para todas as camadas, cada uma contendo um total de N spins, sendo $N-2n$ o número correspondente a spins livres. O número total de ligações entre primeiros vizinhos numa camada é dado por $Nz/2$, onde z é o número de coordenação da camada.

Minimizando $\bar{\Phi}(T, \gamma_L^{(i)}, \gamma_P^{(i)}, \Omega, h, h_1, N, n) = F_0 + \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0$ em relação aos parâmetros variacionais $\gamma_L^{(i)}$ e $\gamma_P^{(i)}$ referentes à camada i , obtêm-se as seguintes equações :

$$-2(Nz/2-n)J_m m_1 - JN m_2 + (N-2n)\gamma_L^{(1)} + 2n\gamma_P^{(1)} = 0 \quad (3.3.1.18)$$

$$-2(Nz/2-n)J m_i - JN(m_{i-1} + m_{i+1}) + (N-2n)\gamma_L^{(i)} + 2n\gamma_P^{(i)} = 0 \quad (i \geq 2) \quad (3.3.1.19)$$

No tratamento original de Ferreira et al. [94] (modelo de Ising numa rede hipercúbica, com pares desconexos dispostos em todas as direções possíveis), observou-se que $\bar{\Phi}$ decrescia à medida que n aumentava. Assim, para se obter uma boa aproximação para a energia livre exata, considerou-se este número como um parâmetro adicional. O melhor valor de n foi determinado comparando-se a energia livre F obtida de uma expansão em série de altas temperaturas com a expansão análoga de $\bar{\Phi}$, obtendo-se:

$$n = Nz'/2$$

(3.3.1.20)

onde z' é o número de primeiros vizinhos mais próximos. O mesmo procedimento foi empregado por Plaschak e Salinas [95] no tratamento de sistemas quase-unidimensionais. Neste tratamento foram considerados pares apenas ao longo de uma direção, sendo então tomado $n=N$. No presente contexto, o hamiltoniano tentativo leva em conta interações entre spins ao longo de duas direções somente (planos das camadas paralelas à superfície livre). Assim, adotou-se o valor intermediário $n=2N$, o que equivale a fazer $z'=4$ em (3.3.1.20). Esta parece a escolha mais óbvia para n e a que mais se aproxima do espírito da proposta de Ferreira et al. [94]. Em vista do caráter aproximativo da mesma é de se esperar que ela reflita, de um modo qualitativo, as propriedades críticas do sistema considerado. É ilustrativo mencionar que se tomarmos $n=N$ nas relações (3.3.1.18) e (3.3.1.19) acima, no limite de campo transversal nulo, obtemos os resultados anteriormente obtidos por Plaschak [96] que empregou para hamiltoniano tentativo cadeias lineares de Ising, situadas nos planos das camadas. Assim, tomando-se $n=2N$ segue-se:

$$-Jm_2 - H - H_1 - 3\beta\gamma_L^{(i)} + 4\beta\gamma_P^{(i)} = 0 \quad (3.3.1.21)$$

$$-J(m_{i-1} + m_{i+1}) - H - 3\beta\gamma_L^{(i)} + 4\beta\gamma_P^{(i)} = 0 \quad (i \geq 2), \quad (3.3.1.22)$$

onde $H = \beta h$ e $H_1 = \beta h_1$, $\beta = 1/k_B T$

Inserindo nestas equações as expressões obtidas para $\gamma_L^{(i)}$, $\gamma_p^{(i)}$, $\gamma_L^{(i)}$ e $\gamma_p^{(i)}$, obtêm-se duas novas relações entre as magnetizações por spin das diversas camadas:

$$- Jm_2 - H - H_1 - \left(\frac{3\beta\Omega}{\tanh(\beta\Omega)} - \frac{4}{\frac{(1-p)\tanh\beta\Omega}{\Omega} - \frac{pS}{2}} \right) = 0 \quad (3.3.1.23)$$

$$- J(m_{i-1} + m_{i+1}) - H - [1 - 2 \exp(-2\beta J)]m_i = 0 \quad (i \geq 2) \quad (3.3.1.24)$$

A magnetização em camadas muito profundas (o volume propriamente dito) $m_v = m_{i \rightarrow \infty}$, é obtida de (3.3.1.24):

$$m_v = H / [2 \exp(-2\beta J) - 1 - 2\beta J]. \quad (3.3.1.25)$$

A transição de fase no volume ocorre quando o denominador de (3.3.1.25) se anula, i.e.

$$2 \exp(-2\beta_c J) = 1 + 2\beta_c J \quad (3.3.1.26)$$

donde $k_B T_c / J = 5,34$. Este resultado para a temperatura crítica do volume (modelo de Ising) corresponde a um valor intermediário entre o valor obtido por Ferreira et al. [94], $k_B T_c / J = 4,932$, considerando-se pares de spins desconexos ao longo de todas as direções, e o valor $k_B T_c / J = 5,68$, obtido por De Carvalho e Salinas [97], na aproximação de cadeias

lineares e Plascak e Salinas [95], que empregaram pares desconexos ao longo de uma direção somente.

Como nas aproximações usuais de campo médio [77], o sistema de equações (3.3.1.23) e (3.3.1.24) pode ser resolvido supondo-se que

$$m_1 = m_v + \xi \exp[-q(1-1)] \quad (3.3.1.27)$$

A magnetização m_1 fica então:

$$m_1 = \chi_{1,1} H_1 + \chi_1 H, \quad (3.3.1.28)$$

onde $\chi_{1,1} = 1/\mathbb{D}(\beta, \Delta)$ (3.3.1.29)

$$\chi_1 = \frac{(y-1)\beta J}{[2\exp(-2\beta J) - 1 - 2\beta J] \mathbb{D}(\beta, \Delta)} \quad (3.3.1.30)$$

$$\mathbb{D}(\beta, \Delta) = - \frac{3\beta\Omega}{\tanh(\beta\Omega)} + \frac{4}{-pS + (1-p)\frac{\tanh(\beta\Omega)}{\beta\Omega}} + (3.3.1.31)$$

$$+ \beta J_s y + (1 - 2\exp(-2\beta J_s))$$

e $y = \exp(q) = \frac{1}{2\beta J} \{ 2 \exp(-2\beta J) - 1 + [(2\exp(-2\beta J) - 1 - 2\beta J)(2\exp(-2\beta J) - 1 + 2\beta J)]^{1/2} \}$ (3.3.1.32)

Deste modo, o sistema se ordena na superfície a uma temperatura $T=T_c$, idêntica à do volume, para $\Delta \leq \Delta_c$. Isto resulta do fato de $\mathbb{D}(\beta, \Delta)$ ser sempre positivo para $T > T_c$ e $\Delta < \Delta_c$, onde Δ_c é obtido de

$$\mathbb{D}(\beta_c, \Delta) = 0 \quad (3.3.1.33)$$

Das equações (3.3.1.29) e (3.3.1.30) é ainda possível obter o comprimento de extrapolação λ , definido em teorias de campo médio para superfícies [77]. Este comprimento está associado às diferenças de magnetização para a superfície e o volume. O comprimento de extrapolação aumenta à medida que estas diferenças diminuem, tornando-se infinito quando a magnetização se torna uniforme em todo cristal. No presente tratamento, a expressão para este comprimento é dada por:

$$\lambda = \beta_c J / \mathbb{D}(\beta_c, \Delta) \quad (3.3.1.34)$$

Para $\Delta > \Delta_c$ a superfície se ordena a uma temperatura $T_c(\Delta)$ diferente da do volume, dada pela solução de

$$\mathbb{D}(\beta, \Delta) = 0 \quad (3.3.1.35)$$

Esta temperatura de transição para a fase ferromagnética superficial corresponde à temperatura mais alta que anula o denominador de $\chi_{i,i}$ na relação (3.3.1.28).

Para campo transversal nulo ($g = 0$), obtêm-se o valor

$\Delta_c = 0,39$ que pode ser comparado com os resultados $\Delta_c = 0,25$ (campo médio usual), $\Delta_c = 0,30$, obtido por Plaschak [96], através de um cálculo variacional empregando cadeias lineares de Ising como hamiltoniano tentativo, $\Delta_c = 0,3068$, obtido por Kaneyoshi et al. [98], que empregam um formalismo de campo médio envolvendo relações de Callen, $\Delta_c = 0,5 \pm 0,03$ obtido através de um cálculo de Monte Carlo [85], $\Delta_c = 0,569$ de Costa et al. [89a], fornecido por um tratamento de grupo de renormalização do tipo Migdal-Kadanoff, e $\Delta_c = 0,6 \pm 0,1$ de séries [80].

Com a inclusão de um campo transversal na superfície, o valor de Δ_c cresce à medida que a intensidade do campo é aumentada. O campo transversal afeta a magnetização da superfície uma vez que introduz flutuações (quânticas) extras, as quais, juntamente com as flutuações térmicas, tendem a destruir qualquer ordem de longo alcance na superfície. O diagrama de fases obtido através da presente aproximação é mostrado na figura (3.3.1.1) para diferentes valores do campo transversal ($g = \Omega/J = 0, 3$ e 5) no caso puro ($p=1$). Três fases distintas são observadas no diagrama de fases, a saber, "volume e superfície paramagnéticos (P), superfície ferromagnética (SF) e volume e superfície ferromagnéticos (VF). A interseção das linhas críticas ocorre num ponto multicrítico, cuja localização no diagrama de fases é dada por Δ_c .

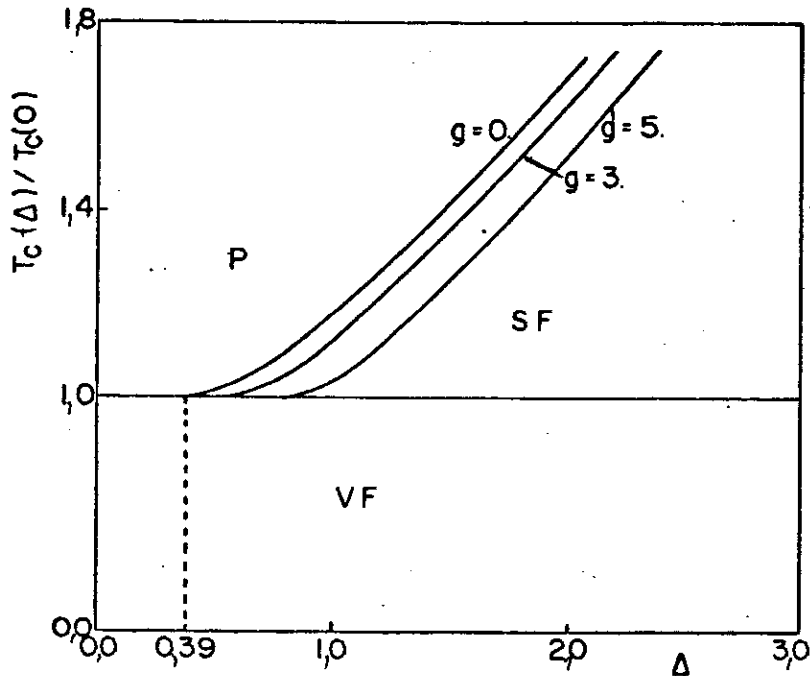


Figura 3.3.1.1: Diagrama de fases para diferentes valores de $g = \Omega/J$ para o modelo considerado.

A introdução de diluição nas ligações da superfície ($p < 1$) faz com que Δ_c seja também uma função crescente quando p diminui. Para um valor crítico p_c , Δ_c se torna infinito, significando que abaixo desta concentração a superfície não percola, mesmo se os acoplamentos forem infinitos na mesma. Para valores da concentração de ligações menores que p_c , a superfície não consegue se ordenar a uma temperatura superior à temperatura crítica do volume. Isto significa que na superfície se torna impossível a existência de um alinhamento de spins de comprimento infinito para temperaturas acima de T_c . É importante salientar que o valor de p_c aqui obtido ($= 0,255$) é inferior à concentração crítica $p_c = 1/3$ [30] de uma superfície completamente livre, i.e. sem acoplamento com o volume. Isto se deve ao fato da interação entre a superfície e o volume aumentar, efetivamente, as vias de acoplamento entre os spins da

superfície. A figura (3.3.1.2) exibe o comportamento de Δ_c versus a diluição (1-p) para diferentes valores do campo

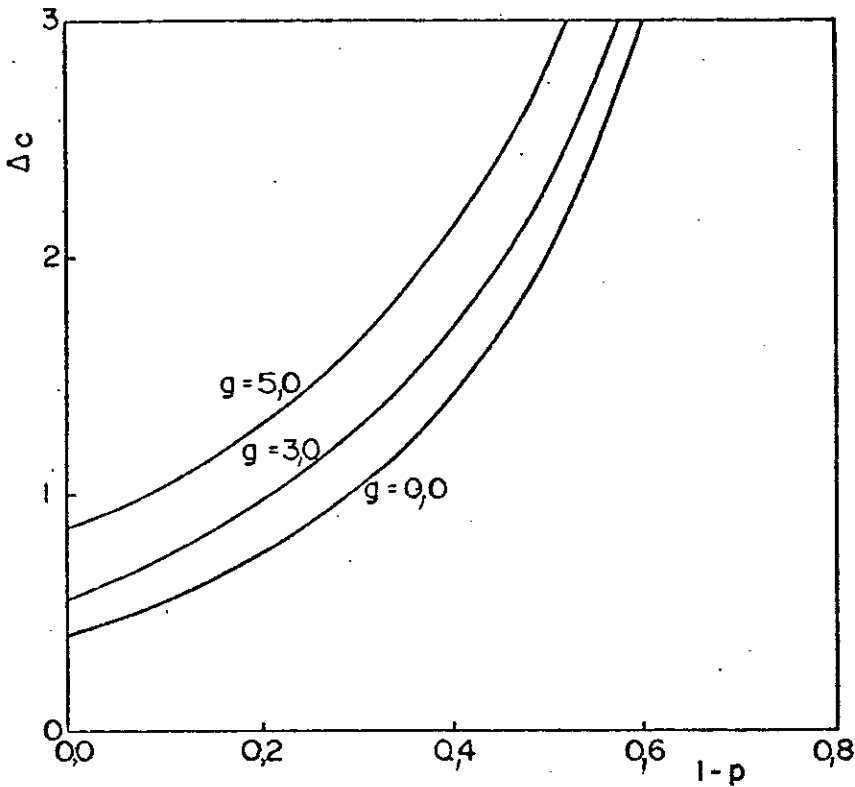


Figura 3.3.1.2 : Valores críticos de $\Delta = J_S/J - 1$ vs. diluição nas ligações (S) para diferentes valores de g .

O inverso do comprimento de extrapolação, λ^{-1} , é mostrado na figura (3.3.1.3) para $g=0, 3$ e 5 para o caso puro ($p=1$).

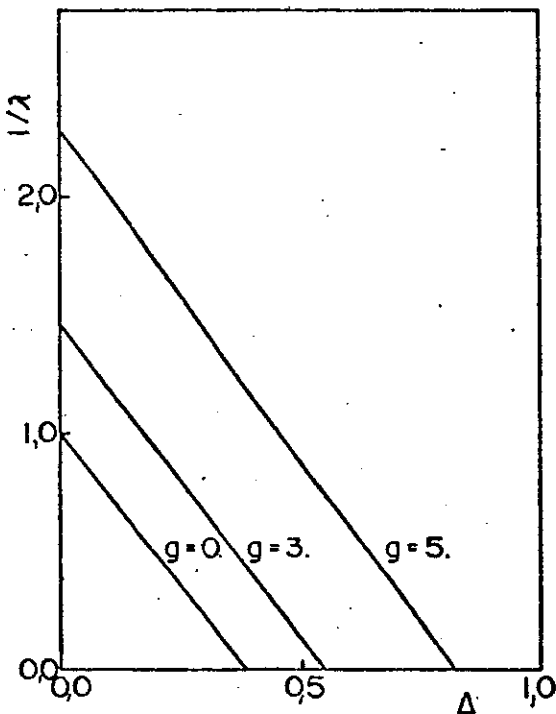


Figura 3.3.1.3: Inverso do comprimento de extrapolação, λ^{-1} , para diferentes valores de g .

Note que em $\Delta = \Delta_c$, λ^{-A} se anula e que $1/\lambda(\Delta=0)$ se afasta da unidade ($g=0$, limite Ising) para valores crescentes do campo. Todos estes resultados evidenciam o caráter do campo transversal, o qual tende a diminuir a correlação entre spins na superfície.

3.3.2. Modelo de Heisenberg anisotrópico spin-1/2 com diluição nas ligações (S) e modelo de Ising spin-1/2 (V)

O hamiltoniano correspondente a este modelo pode ser escrito como:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H} = & - \sum_{\rho, \rho'} J_{\rho\rho'} \left[(1-\eta) (\sigma_{1\rho}^x \sigma_{1\rho'}^x + \sigma_{1\rho}^y \sigma_{1\rho'}^y) + \sigma_{1\rho}^z \sigma_{1\rho'}^z \right] - \\
 & - J \sum_{i=2}^{N'} \sum_{\rho, \rho'} \sigma_{i\rho}^z \sigma_{i\rho'}^z - J \sum_{i=1}^{N'} \sum_{\rho} \sigma_{i\rho}^z \sigma_{i+1\rho}^z - \\
 & - h \sum_{\rho} \sigma_{1\rho}^z - h \sum_{i, \rho} \sigma_{i\rho}^z \quad (3.3.2.1)
 \end{aligned}$$

onde $\eta \in [0, 1]$. As mesmas convenções adotadas para o modelo (3.3.1.1) da seção anterior se aplicam novamente. Como mencionado antes (confira também [94]), o presente formalismo fornece equações gerais, aplicáveis a todos os modelos considerados neste capítulo. Seguindo a mesma linha de argumentação da seção 3.3.1, é fácil mostrar que as equações

obtidas minimizando-se $\tilde{Q}(\gamma)$ [relação (3.2.1)] para o presente sistema, são idênticas às equações (3.3.1.21) e (3.3.1.22), i.e. :

$$-Jm_2 - H - H_1 - 3\beta\gamma_L^{(i)} + 4\beta\gamma_P^{(i)} = 0 \quad (3.3.2.3)$$

$$-J(m_{1-1} + m_{1+1}) - H - 3\beta\gamma_L^{(i)} + 4\beta\gamma_P^{(i)} = 0 \quad (1 \geq 2) \quad (3.3.2.4)$$

onde os parâmetros variacionais $\gamma_L^{(i)}$ e $\gamma_P^{(i)}$ se referem agora aos hamiltonianos tentativos :

$$H_L = -\gamma_L^{(i)} \sigma_1^z \quad (3.3.2.5)$$

para um spin livre e

$$H_P = -J_S [(1-\eta)(\sigma_1^x \sigma_2^x + \sigma_1^y \sigma_2^y) + \sigma_1^z \sigma_2^z] - \gamma_P^{(i)} (\sigma_1^z + \sigma_2^z) \quad (3.3.2.6)$$

para um par de spins ligados, na superfície. As funções de partição correspondentes são, respectivamente:

$$Z_L^{(i)} = 2 \cosh(\beta \gamma_L^{(i)}) \quad (3.3.2.7)$$

$$e Z_P^{(i)} = 2 \exp(\beta J_S) \cosh(2\beta \gamma_P^{(i)}) + 2 \exp(-\beta J_S) \cosh[2\beta J_S(1-\eta)]$$

(3.3.2.8)

Impondo novamente a igualdade das magnetizações fornecidas pelos hamiltonianos de spin livre e par de spin ligados, levando em conta a média configuracional :

$$m_1 = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \gamma_L^{(1)}} f_L(\gamma_L^{(1)}) = \frac{1}{2\beta} \frac{\partial}{\partial \gamma_P^{(1)}} f_P(\gamma_P^{(1)}) \quad (3.3.2.9)$$

$$\text{onde } f_S = \ln Z_L(\gamma_L^{(1)}) \quad (3.3.2.10)$$

$$e \quad f_P = 2(1-p) \ln Z_L(\gamma_P^{(1)}) + p \ln Z_P(\gamma_P^{(1)}) \quad (3.3.2.11)$$

Explicitamente, obtêm-se a relação :

$$m_1 = \tanh(\beta \gamma_L^{(1)}) = \frac{p \sinh(2\beta \gamma_P^{(1)})}{\cosh(2\beta \gamma_P^{(1)}) + \exp(-2\beta J_S) \cosh[2\beta J_S(1-\gamma)]} + (1-p) \tanh(\beta \gamma_P^{(1)}) \quad (3.3.2.12)$$

Quanto às demais camadas, os parâmetros variacionais são essencialmente os mesmos da seção anterior, pois em ambos os casos o modelo (Ising) é o mesmo. Deste modo, seguem-se os seguintes resultados :

$$m_1 = \chi_{1,1} H_1 + \chi_1 H \quad (3.3.2.13)$$

$$\text{onde } \chi_{1,1} = 1/\mathbb{D}(\beta, \Delta) \quad (3.3.2.14)$$

$$\chi_1 = (\gamma-1) \beta J / \{ (2 \exp(-2\beta J) - 1 - 2\beta J) \mathbb{D}(\beta, \Delta) \} \quad (3.3.2.15)$$

$$D(\beta, \Delta) = -3 + \frac{4}{2p / (1 + \exp(-2\beta J_s) \cosh(2\beta J_s(1-\eta))) + (1-p)} + (\beta J) \eta + [1 - 2 \exp(-2\beta J)]$$

(3.3.2.16)

e η é dado pela relação (3.3.1.32) da seção anterior. Neste caso, os valores de Δ_c , do comprimento de extrapolação, e da temperatura crítica de ordenamento superficial $T_c(\Delta)$ são obtidos das relações (3.3.1.33)-(3.3.1.35), com $D(\beta, \Delta)$ dado pela equação (3.3.2.16). Assim em $\Delta = \Delta_c$, $D(\beta_c, \Delta) = 0$ e portanto $\lambda \rightarrow \infty$. Curvas para λ^{-1} versus Δ para diferentes valores do parâmetro de anisotropia ($\eta = 0, 0.5$ e 1) para o caso puro ($p=1$) são mostradas na figura (3.3.2.1).

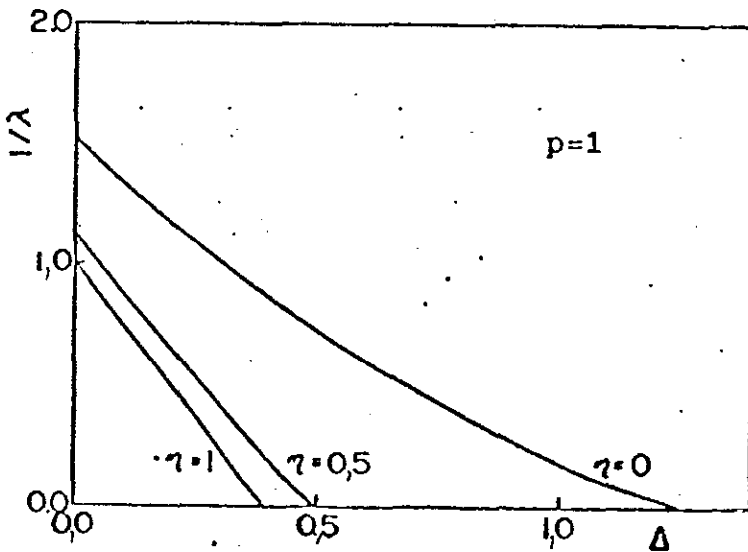


Figura 3.3.2.1:
Inverso do comprimento de extrapolação, λ^{-1} , para diferentes valores de anisotropia para o modelo considerado.

Nos limites $\eta=1$ (Ising puro) e $\eta=0$ (Helsenberg isotrópico puro), $\Delta_c = 0.39$ e $\Delta_c = 1.23$, respectivamente. Estes resultados

são inferiores aos obtidos por Costa et al., $\Delta_c = 0,569$ ^[89a] ($\eta=1$) e $\Delta_c = 2,499$ ($\eta=0$) ^[89b], através de um tratamento de grupo de renormalização do tipo Migdal-Kadanoff. Esta discrepância é de se esperar em vista do caráter de campo médio do presente tratamento, que tende a superestimar as interações do modelo. Contudo, o diagrama de fases fornecido pelo presente método está qualitativamente de acordo com o obtido por Costa et al. ^[89b] [veja figura (3.3.2.2)], bem como o comportamento de Δ_c (que define a localização de um ponto multicritico no diagrama de fases) com o parâmetro de anisotropia (η), mostrado na figura (3.3.2.3).

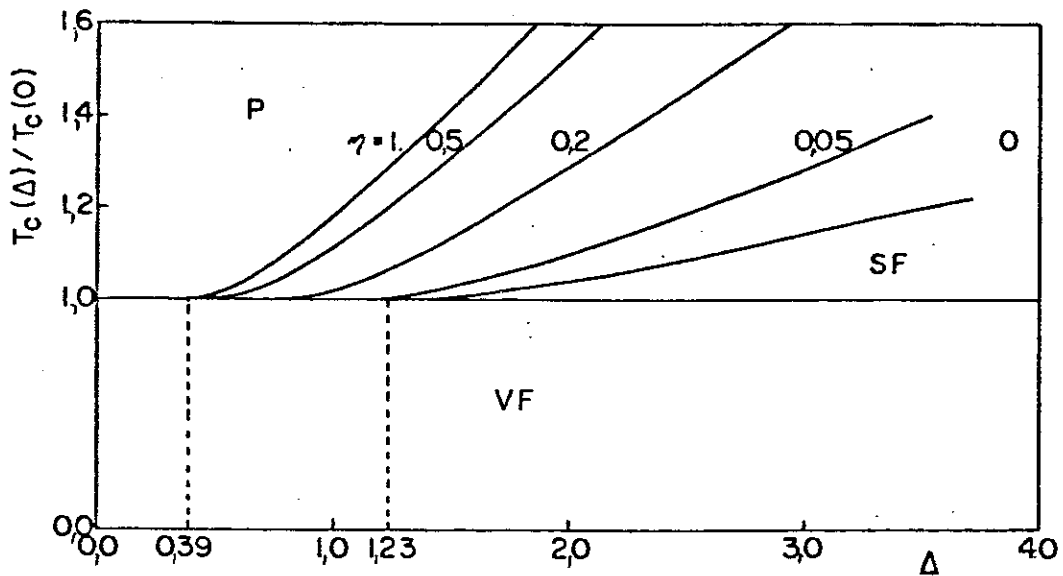


Figura 3.3.2.2: Diagrama de fases para diferentes valores de anisotropia (η) - caso puro ($p=1$).

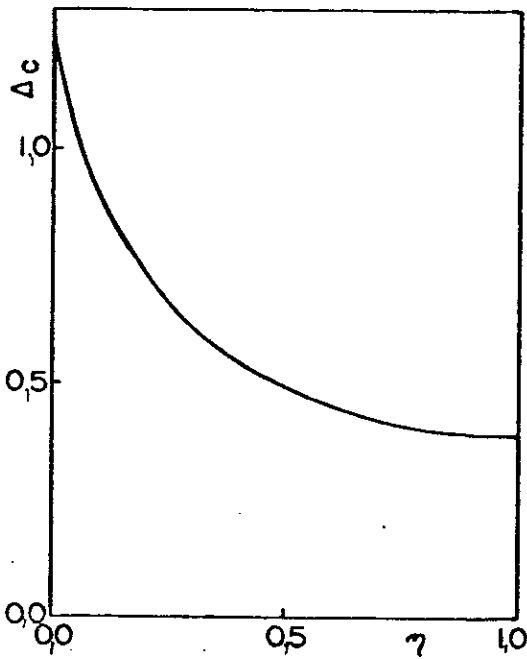


Figura 3.3.2.3: Valores críticos de Δ versus anisotropia (η).

Tanto os resultados de da Costa et al. [89b] quanto os do presente tratamento evidenciam que Δ_c decresce monótona e continuamente quando η aumenta de 0 a 1, atingindo seu valor máximo em $\eta=0$, onde apresenta um valor finito.

Para $p < 1$ (diluição nas ligações da superfície), são obtidos dois valores para a concentração, a saber, $p_c = 0,255$ ($\eta \neq 0$) e $p_c = 0,765 = 3p_c$ ($\eta=0$), abaixo dos quais a superfície não percola. Deve-se salientar que para o modelo de Heisenberg anisotrópico com diluição nas ligações em 2d, o presente tratamento fornece duas concentrações críticas, a saber $p_c^* = 1/3$ ($\eta \neq 0$) e $p_c = 1$ ($\eta=0$), de modo que também neste caso tem-se $p_c^* = 3 p_c$. Para o caso anisotrópico $\eta = 0,5$, é mostrado na figura (3.3.2.4) o diagrama de fases correspondente, para diferentes valores da concentração de ligações ($p=1, 0,8, 0,6$ e $0,4$). Note que neste caso $p_c=0,255$. Para outros valores de $\eta \neq 0$, o diagrama de fases apresenta essencialmente o mesmo comportamento.

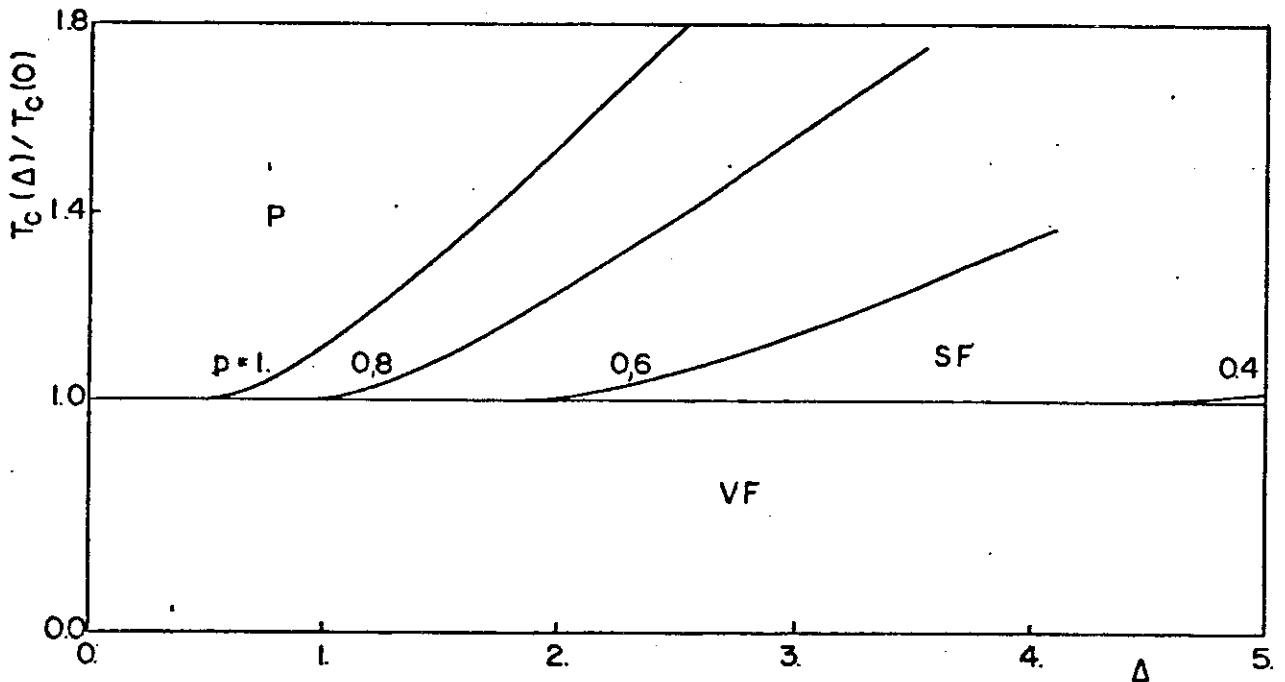


Figura 3.3.2.4: Diagramas de fases para diferentes concentrações p de ligações.

3.3.3. Modelo de Heisenberg anisotrópico spin-1 com termo de anisotropia uniaxial e diluição nas ligações (S) e modelo de Ising spin-1 (V)

O hamiltoniano para este modelo pode ser escrito como :

$$\mathcal{H} = - \sum_{\rho, \rho'} J_{\rho, \rho'} [(1-n) (S_{1, \rho}^x S_{1, \rho'}^x + S_{1, \rho}^y S_{1, \rho'}^y) + S_{1, \rho}^z S_{1, \rho'}^z] - J \sum_{i=2}^{N'} \sum_{i, \rho} S_i^z S_{i, \rho}^z - J \sum_{i=1}^{N'} \sum_{i, \rho} S_i^z S_{i+1, \rho}^z - h \sum_{i, \rho} S_i^z - h_1 \sum_{1, \rho} S_{1, \rho}^z - D \sum_{\rho} (S_{1, \rho}^z)^2 \quad (N' \rightarrow \infty)$$

(3.3.3.1)

onde S^x , S^y e S^z são matrizes 3×3 , definidas para spin-1 e o último somatório corresponde ao termo de anisotropia

uniaxial da superfície. As equações resultantes da minimização de $\bar{Q}(\gamma)$ [confira relação (3.2.1)] são obtidas como nas seções anteriores:

$$-J m_2 - H - H_1 - 3\beta \gamma_L^{(i)} + 4\beta \gamma_P^{(i)} = 0 \quad (3.3.3.2)$$

$$-J(m_{i-1} + m_{i+1}) - H - 3\beta \gamma_L^{(i)} + 4\beta \gamma_P^{(i)} = 0 \quad (3.3.3.3)$$

onde $\gamma_L^{(i)}$ e $\gamma_P^{(i)}$ são parâmetros variacionais referentes aos hamiltonianos tentativos para a superfície:

$$H_L = -\gamma_L^{(i)} S_1 - D (S_1)^2 \quad (3.3.3.4)$$

para um spin livre e

$$H_P = -J_S [(1-\eta)(S^X S^X + S^Y S^Y) + S^Z S^Z] - D[(S^Z)^2 + (S^Z)^2] - \gamma_P^{(i)} (S^Z + S^Z) \quad (3.3.3.5)$$

para um par de spins ligados. As funções de partição correspondentes são, respectivamente :

$$Z_L^{(i)}(\gamma_L^{(i)}) = 1 + 2\exp(\beta D) \cosh(\beta \gamma_L^{(i)}) \quad (3.3.3.6)$$

$$\begin{aligned} e Z_P^{(i)}(\gamma_P^{(i)}) &= 2\exp[\beta(J_S + 2D)] \cosh(2\beta \gamma_P^{(i)}) + \exp[-\beta(J_S - 2D)] + \\ &+ 4\exp(\beta D) \cosh(\beta \gamma_P^{(i)}) \cosh[\beta J_S (1-\eta)] + \\ &+ 2\exp[-\beta(J_S/2 - D)] \cosh(\beta M) \end{aligned} \quad (3.3.3.7)$$

onde $M = \frac{1}{2}[(J_S - 2D)^2 + 8 J_S (1 - \gamma)^2]^{1/2}$.

Impondo agora a igualdade das magnetizações obtidas considerando-se a média configuracional para os dois casos, tem-se, no limite de $\gamma_L^{(i)}, \gamma_P^{(i)} \ll 1$:

$$\begin{aligned}
 m_s &= \frac{2 \exp(\beta D)}{1 + 2 \exp(\beta D)} \beta \gamma_L^{(s)} = \\
 &= \frac{[2p(2 \exp[\beta(J_S + D)] + \cosh[\beta J_S(1 - \eta)])]}{2 \exp[\beta(J_S + D)] + 4 \cosh[\beta J_S(1 - \eta)] + 2 \exp(-\beta J_S/2) \cosh(\beta M) + \exp[\beta(-J_S + D)]} \\
 &+ \frac{2(1-p) \exp(\beta D)}{1 + 2 \exp(\beta D)} \beta \gamma_P^{(s)}
 \end{aligned}
 \tag{3.3.3.8}$$

Para as demais camadas, são tomados os hamiltonianos tentativos:

$$H_L = -\gamma_L^{(i)} S_1^z \tag{3.3.3.9}$$

para um spin livre e

$$H_P = -J S_1^z S_2^z - \gamma_P^{(i)} (S_1^z + S_2^z) \tag{3.3.3.10}$$

para um par de spins ligados. As funções de partição correspondentes são, respectivamente :

$$Z_L^{(i)} = 1 + 2 \cosh(\beta \gamma_L^{(i)}) \tag{3.3.3.11}$$

$$e Z_P^{(i)} = 2 \exp(\beta J) \cosh(2\beta J) + 2 \exp(-\beta J) + 4 \cosh(\beta J) + 1. \quad (3.3.3.12)$$

Igualando as magnetizações por spin obtidas destas duas relações, tem-se, no limite de $\gamma_L^{(i)}, \gamma_P^{(i)} \ll 1$:

$$m_s \approx \frac{2\beta\gamma_L^{(i)}}{3} \approx \frac{2(2\exp(\beta J)+1)\beta\gamma_L^{(i)}}{4\cosh(\beta J)+5} \quad (3.3.3.13)$$

Introduzindo agora a aproximação usual de campo médio para as magnetizações nas camadas (decaimento exponencial) e juntamente com os diversos parâmetros variacionais acima, obtêm-se a partir de (3.3.3.3) e (3.3.3.13) :

$$m_s = H / \left[\frac{2(4 \cosh(\beta J) + 5)}{2 \exp(\beta J) + 1} - 2\beta J - 9/2 \right] \quad (3.3.3.14)$$

que fornece a temperatura crítica do volume T_c , quando o denominador se anula, i.e. :

$$\frac{2(4 \cosh(\beta_c J) + 5)}{2 \exp(\beta_c J) + 1} = 2\beta_c J + 9/2$$

donde $k_B T_c / J = 3.67$. Para fins de comparação, devemos mencionar que o resultado de campo médio é $k_B T_c / J = 4$. Nota-se, portanto, que o presente tratamento fornece um resultado mais preciso. Expressões análogas às apresentadas em (3.3.1.28)-(3.3.1.32) são também obtidas para este modelo. Em $\Delta = \Delta_c$ e $T = T_c$, $\lambda \rightarrow \infty$. Para $\Delta > \Delta_c$ a superfície se ordena a uma temperatura $T_c(\Delta)$ maior que T_c . Δ_c é agora função da anisotropia η , do parâmetro de anisotropia uniaxial (D) e da concentração de ligações na superfície (p).

Na figura (3.3.3.1) são apresentadas curvas de Δ_c versus D , para o modelo puro ($p=1$) para η variando de $\eta=0$ (Heisenberg isotrópico spin-1) a $\eta=1$ (Ising spin-1).

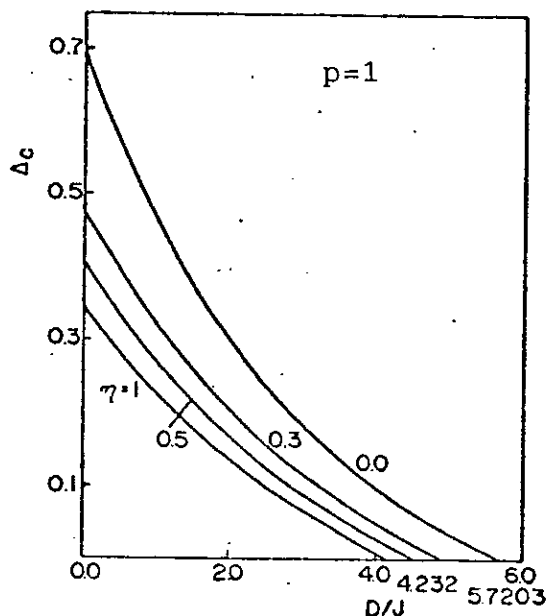


Figura 3.3.3.1 : Valor crítico Δ_c versus o parâmetro de anisotropia uniaxial (D/J) para diferentes valores de anisotropia (η), referentes ao modelo considerado.

Observa-se, como era de esperar, que Δ_c é maior quando efeitos quânticos estão presentes ($\eta \neq 1$), uma vez que introduzem flutuações adicionais. A medida que D/J aumenta, Δ_c diminui para todos os valores de anisotropia, indicando que a contribuição da anisotropia uniaxial é no sentido de favorecer o alinhamento dos spins da superfície na direção z . Para $\eta=0$ (Heisenberg isotrópico), $\Delta_c=0$ em $D/J=5.72$ e para $\eta=1$ (Ising), $\Delta_c=0$ em $D/J=4.23$. O diagrama de fases para o sistema puro ($p=1$) com $D=0$ (ausência de anisotropia uniaxial) com $\eta=0, 0.5$ e 1 , é apresentado na figura (3.3.3.2), exibindo três fases, como nos sistemas tratados nas subseções anteriores. Nos limites $\eta=1$ e $\eta=0$, $\Delta_c=0.344$ e $\Delta_c=0.697$, respectivamente.

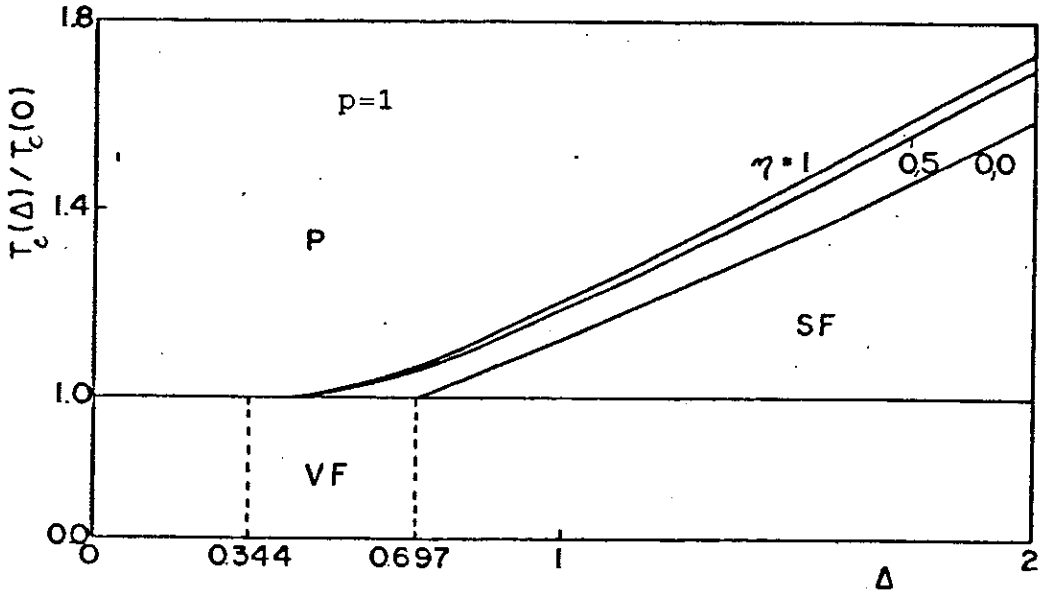


Figura 3.3.3.2 : Diagramas de fases para diferentes valores de anisotropia (η) com $D=0$ (i.e. ausência de anisotropia uniaxial).

O comportamento do comprimento de extrapolação correspondente a $\eta = 0, 0.5$ e 1 é mostrado na figura (3.3.3.3) e o comportamento da concentração crítica p_c variando D/J é mostrado na figura (3.3.3.4).

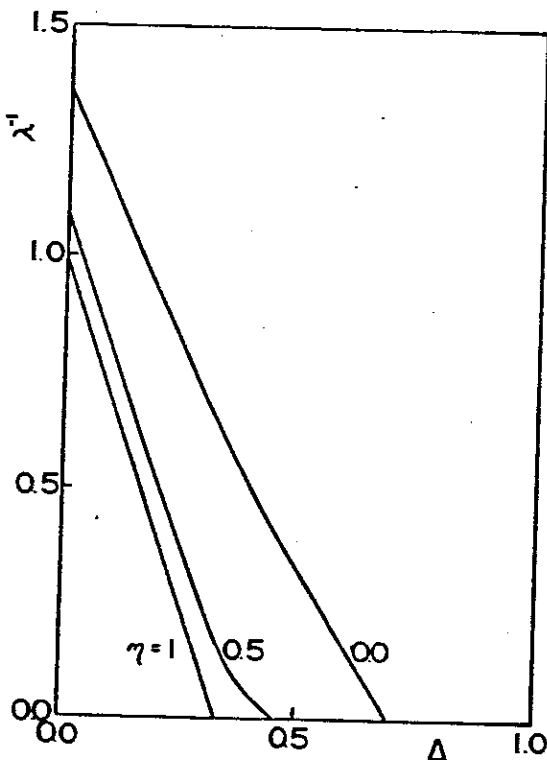


Figura 3.3.3.3: Inverso do comprimento de extrapolação para diferentes valores de anisotropia (η), com $D=0$.

Para valores de p menores que p_c a superfície não percola, mesmo se o acoplamento J_S for infinito. Duas curvas distintas para p_c versus D/J são obtidas, uma para $\eta = 0$ (Heisenberg isotrópico) e outra para valores de $\eta \neq 0$ (Heisenberg anisotrópico).

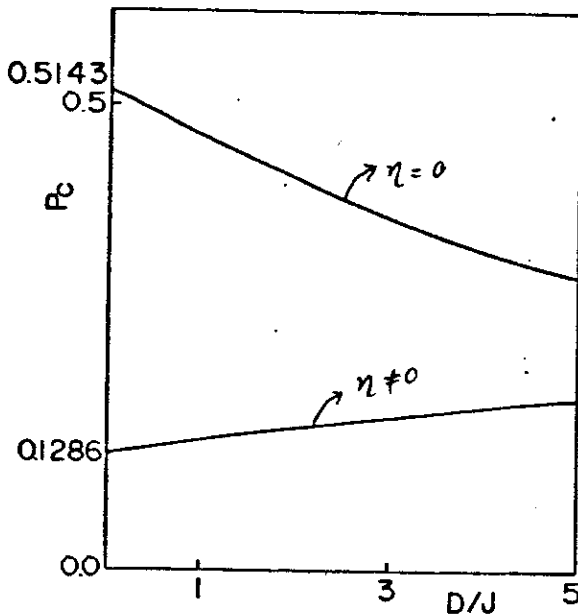


Figura 3.3.3.4 : Concentração crítica (p_c) versus D/J

Um resultado análogo é obtido para o modelo de Heisenberg anisotrópico spin-1 bidimensional diluído com termo de anisotropia uniaxial [em particular, para $D=0$, $p_c=1/6$ ($\eta \neq 0$) e $p_c=2/3$ ($\eta=0$)]. No sistema semi-infinito considerado, as duas curvas para p_c tendem assintoticamente para $p_c=0.22$, quando $D/J \rightarrow \infty$. Este comportamento indica que no limite de anisotropia muito forte, as contribuições quânticas deixam de ser importantes e a superfície apresenta um comportamento essencialmente clássico, tipo Ising spin 1/2, pois neste limite o estado $S^z = 0$ não se encontra ocupado.

3.4 Conclusões

Os resultados acima indicam que o formalismo variacional é um método eficaz, permitindo uma descrição satisfatória do comportamento crítico de diferentes sistemas ferromagnéticos semi-infinitos, capazes de exibir uma fase ferromagnética superficial. Os parâmetros relevantes destes sistemas obtidos mediante o presente tratamento se encontram também em acordo com os resultados fornecidos por outros métodos. É possível considerar ingredientes adicionais, por exemplo, um campo transversal no volume, o que corresponde a uma generalização do caso (i). Observa-se neste caso, que aumentando-se o campo transversal no volume (Ω), mantendo-se constante o campo transversal da superfície (Ω_s), os valores críticos Δ_c , a partir dos quais a fase ferromagnética superficial pode existir, diminuem. Deve-se salientar que, neste caso, a temperatura crítica do volume diminui concomitantemente com o aumento de Ω . Este comportamento contrasta com o efeito do aumento do campo transversal na superfície, mostrado na figura (3.3.1.2), que representa uma tendência oposta. Resultados semelhantes foram anteriormente obtidos por Tamura et al. [81], através de um formalismo de campo efetivo.

Um sistema de interesse, correlato ao caso (ii), consiste em supor que as interações entre spins na superfície e no volume sejam descritas pelo modelo de Heisenberg anisotrópico spin-1/2 (com anisotropia η_s e η_v

respectivamente). É intuitivo que modelos de volume cada vez mais próximos do modelo de Heisenberg isotrópico deverão requerer valores progressivamente maiores de J_S/J para que a fase ferromagnética superficial exista. O presente tratamento fornece no limite ($\eta_S=0, \eta_V=0$) um valor finito para esta relação ($J_S/J = 1.81$). Este resultado contrasta com um resultado, obtido para uma rede CFC na aproximação da fase aleatória [99], o qual sugere a existência de um valor crítico $\eta_S = \eta_c$ positivo, finito, abaixo do qual a fase superficial ferromagnética inexistente.

Recentemente, este problema foi retomado através de um tratamento de grupo de renormalização no espaço real [100]. O teorema de Mermin e Wagner [101] é invocado para evidenciar que apenas quando $\eta_S = \eta_V = 0$ $\Delta_c \rightarrow \infty$. Este teorema não permite a existência de magnetização espontânea a qualquer temperatura finita se: a) o sistema não envolve interações de longo alcance (hipótese satisfeita pelo modelo); b) o sistema é bidimensional (no presente caso ele é $\infty \times \infty \times$ finito devido ao perfil de decaimento exponencial da magnetização ao se penetrar o volume) e c) o sistema apresenta uma quebra de simetria correspondente a interações magnéticas, todas elas associadas a um grupo contínuo de simetrias (hipótese satisfeita se $\eta_S = \eta_V = 0$ no sistema considerado). De acordo com estes argumentos, um volume do tipo Ising não satisfaz a condição c) do teorema, não sendo portanto possível aplicá-lo neste caso. Em nosso cálculo a condição c) acima, devido ao caráter de campo médio da aproximação

aqui considerada, é artificialmente violada .Isto explica porque no limite $\eta_s = \eta_v = 0$ se obtém através do presente cálculo um valor finito para Δ_c .

No contexto dos presentes cálculos, seria interessante estudar os sistemas considerados neste capítulo que apresentam diluição, para concentrações entre a concentração de percolação de uma superfície totalmente livre (sistema bidimensional) e a concentração p_c em que Δ_c se torna infinito (i.e. a partir da qual desaparece o ordenamento na superfície estando o volume desordenado), para valores de $\Delta \gg 1$.

CAPITULO IV

SUPER-REDES MAGNETICAS: PROPRIEDADES ESTATICAS

4.1 Introdução

Recentes avanços nas técnicas de crescimento epitaxial tornaram possível a preparação de super-redes nas quais camadas de materiais magnéticos e não-magnéticos se alternam [102] Também foram propostas super-redes nas quais ambos os componentes se ordenam magneticamente [103] Nestes dois casos, foram realizados estudos teóricos detalhados sobre propriedades dinâmicas de tais estruturas [103-106]. Todavia, pouca atenção parece ter sido dedicada à propriedades estáticas de super-redes magnéticas cujos componentes apresentam ordem magnética via magnetismo localizado. Neste capítulo considera-se um modelo simples de uma super-rede magnética [veja figura (4.1.1)] que consiste de interfaces periódicas (descritas pelo modelo de Heisenberg anisotrópico), caracterizadas por um acoplamento ferromagnético $J_S = J(1 + \Delta)$ e por uma anisotropia $\eta \in [0, 1]$ no espaço de spin; $\eta = 1$ e $\eta = 0$ correspondem respectivamente aos limites de Ising e Heisenberg, intercaladas por um meio estratificado (caracterizado pela constante de acoplamento ferromagnético J).

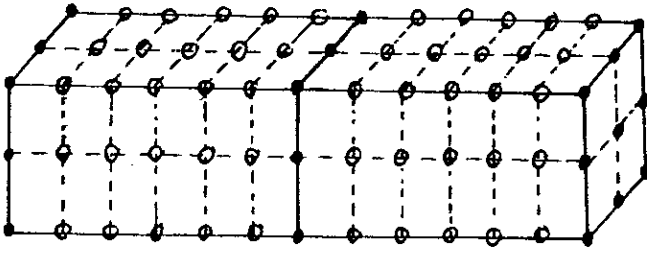


Figura 4.1.1: Modelo de super-rede magnética estudado neste capítulo.

Este sistema constitui uma generalização natural do problema de interfaces tratado por dos Santos et al. [107] .

Argumenta-se através do tratamento variacional introduzido no capítulo III que este sistema exhibe diferentes perfis de magnetização dependendo dos parâmetros (η, K^{-1}, Δ) , $K^{-1} = k_B T / J$, k_B é a constante de Boltzmann, bem como do número p de camadas intermediárias entre duas interfaces sucessivas. São obtidos também diagramas de fases. Outros modelos de super-redes magnéticas de interesse são sugeridos ao final, bem como um cálculo alternativo para o presente modelo no limite clássico.

4.2 Hamiltoniano do modelo e formalismo empregado

O modelo que consideramos para super-rede magnética pode ser descrito pelo Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J_s \sum_{\text{interfaces}} \left[(1-\eta) (\sigma_{\rho}^x \sigma_{\rho'}^x + \sigma_{\rho}^y \sigma_{\rho'}^y) + \sigma_{\rho}^z \sigma_{\rho'}^z \right] - J \sum_{\mathbf{l}} \sum_{\rho, \rho'} \sigma_{\mathbf{l}\rho}^z \sigma_{\mathbf{l}\rho'}^z -$$

$$-J \sum_{p,l} \sigma_{lp}^z \sigma_{l+lp}^z \quad (4.2.1)$$

onde σ^z são as matrizes de Pauli, p, p' se referem às coordenadas paralelas às interfaces, o primeiro termo do lado direito se refere às interfaces de Heisenberg spin-1/2, o segundo termo está relacionado com as interações de Ising nas p camadas intermediárias e o terceiro termo corresponde às interações de Ising entre camadas.

O procedimento adotado é essencialmente o método variacional introduzido na seção (3.2) do capítulo anterior. Consideramos por simplicidade no presente estudo três hamiltonianos tentativos distintos [confira relação (3.2.1)], a saber

$$(a) H_0 = - \sum_l \sum_p \gamma_{l,p} \sigma_{l,p}^z \quad (4.2.2)$$

com $\gamma_{l,p} = \gamma_l$, uma vez que dentro de cada camada l a magnetização é constante.

$$(b) H_0 = \sum_l \sum_{\substack{\text{cadeias} \\ \text{lineares}}} H_L^{(1)} \quad (4.2.3)$$

$$\text{onde } H_L^{(1)} = -J_1 \sum_i \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - \gamma^1 \sum_i \sigma_i^z \quad (4.2.4)$$

é agora o hamiltoniano de uma cadeia linear, com $J_1 = J$ nas camadas intermediárias e $J_1 = J_S$ nas interfaces. A segunda soma

em (4.2.3) se estende a todas as cadeias lineares paralelas às interfaces (e paralelas entre si numa mesma camada).

Nas duas aproximações acima [(a) e (b)], consideramos somente o limite de interfaces tipo Ising, o que corresponde a tomar $\eta=1$ no modelo (4.2.1).

$$(c) \quad H_0 = \sum_1^{(1)} H_0 \quad , \quad (4.2.5)$$

$$H_0^{(1)} = - \sum_{\text{pares}} J_1 \left[(1-\eta) (\sigma_1^x \sigma_2^x + \sigma_1^y \sigma_2^y) + \sigma_1^z \sigma_2^z \right] - \gamma_p^{(1)} (\sigma_1^z + \sigma_2^z) - \sum_{\substack{\text{spins} \\ \text{livres}}} \gamma_L^{(1)} \sigma_i^z$$

onde a primeira soma se estende à pares desconexos de spins ligados, situados numa camada, e a segunda soma leva em conta $N-2n$ spins livres, sendo N o número total de spins numa camada. Nas p camadas intermediárias $\eta=1$ e $J_1=J$ e nas interfaces $\eta^1 = \eta$ e $J_1 = J_S$. γ_L^1 e γ_p^1 são parâmetros variacionais (campos moleculares) determinados de acordo com o procedimento discutido na seção (3.2).

No caso (a) ,que corresponde à aproximação de CM usual, a magnetização pode ser escrita na forma :

$$m_1 = \tanh [2Km_2 + 4K(1+\Delta)m_1]$$

$$m_i = \tanh [K(m_{i-1} + m_{i+1} + 4m_i)] \quad (4.2.6)$$

Duas possibilidades devem ser consideradas, a saber, se p é (i) ímpar ou (ii) par. A cada caso corresponde uma condição de contorno específica, i.e.

$$(i) \quad m_{(p+1)/2+2} = m_{(p+1)/2}$$

$$(ii) \quad m_{p/2+2} = m_{p/2+1}$$

Devido à simetria do problema, é necessário incluir apenas i até $(p+1)/2+1$ no caso (i) e $p/2+1$ no caso (ii), o que significa considerar apenas um período da super-rede.

Para o hamiltoniano tentativo (b), a magnetização fica dada por:

$$m_i = \frac{\sinh(\beta \gamma_i)}{[\sinh^2(\beta \gamma_i) + \exp(-4\beta J_i)]^{1/2}} \quad (4.2.7)$$

$$\text{onde } \gamma_i = J m_{i-1} + J m_{i+1} + J_i (z-4) m_i \quad (z=6 \text{ em } 3d)$$

com $J_1 = J_s = J(1+\Delta)$, $J_2 = J$ e $J_{i+p+1} = J_i$ (condição de periodicidade).

Finalmente, para o caso (c), tem-se :

$$-2K m_2 - 3\beta \gamma_L^{(i)} + 4\beta \gamma_p^{(i)} = 0 \quad (4.2.8)$$

$$-K(m_{i-1} + m_{i+1}) - 3\beta \gamma_L^{(i)} + 4\beta \gamma_p^{(i)} = 0 \quad (i \geq 2) \quad (4.2.9)$$

com

$$m_1 = \tanh(\beta \gamma_L^{(i)}) = \frac{\sinh(2\beta \gamma_p^{(i)})}{\cosh(2\beta \gamma_p^{(i)}) + \exp[-2K(1+\Delta)] \cosh[2K(1+\Delta)(1-\eta)]}$$

$$\text{e } m_1 = \tanh(\beta \gamma_L^{(i)}) = \frac{\sinh(2\beta \gamma_p^{(i)})}{\cosh(2\beta \gamma_p^{(i)}) + \exp(-2K)} \quad (i > 1)$$

Próximo da transição, $m_1 \ll 1$ e no caso (c) tem-se adicionalmente que $\gamma_L^{(i)}, \gamma_P^{(i)} \ll 1$ ($i \geq 1$). A temperatura crítica para a super-rede que estamos considerando, com p camadas de Ising intermediárias pode ser determinada, dentro das aproximações utilizadas, através da equação geral expressa na forma de um determinante:

$$\langle \text{---} n \text{---} \rangle$$

$$\begin{vmatrix} A & B & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ a & b & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a & b & \dots & 0 & 0 & 0 \\ & & & \dots & & & \\ 0 & & & & a & b & a \\ 0 & & & & 0 & c & d \end{vmatrix} = 0 \quad (4.2.10)$$

onde n é ordem da matriz correspondente ao determinante (4.2.10). A, B, a, b, c e d são específicos para cada aproximação; c, d e n dependem ainda se p é (i) ímpar; neste caso $c=B, d=b$ e $n=(p+1)/2+1$, ou (ii) par, quando então $c=a, d=a+b$ e $n=p/2+1$.

Para a aproximação (a) tem-se:

$$A = 4K(1+\Delta)-1 ; B = 2K ; a = K ; b = 4K-1 ; \eta=1$$

Para a aproximação (b):

$$A = 2K \exp[2K(1+\Delta)](1+\Delta) - 1 ; B = 2K \exp[2K(1+\Delta)]$$

$$a = K \exp(2K) ; b = 2K \exp(2K)-1 ; \eta=1$$

Finalmente, para a aproximação (c) tem-se:

$$A = -1 + 2 \exp[-2K(1+\Delta)(1-\gamma)]$$

$$B = -2K ; B = -2K ; a = -K ; b = -1 + 2 \exp(-2K)$$

A equação (4.2.10) pode ser escrita numa forma mais apropriada, a saber:

$$A \det[(p+1)/2] - aB \det[(p+1)/2 - 1] = 0 \quad (p \text{ ímpar}) \quad (4.2.11)$$

$$A \det[p/2] - aB \det[p/2 - 1] = 0 \quad (p \text{ par}) \quad (4.2.12)$$

$$\text{onde } \det[i] = \begin{vmatrix} b & a & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ a & b & a & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & a & b & a \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & c & d \end{vmatrix}$$

$$\text{com } \det[2] = \begin{vmatrix} b & a \\ c & d \end{vmatrix} \quad \text{e} \quad \det[3] = \begin{vmatrix} b & a & 0 \\ a & b & a \\ 0 & c & d \end{vmatrix}$$

$$\text{De modo que } \det[i] = b \det[i-1] - a^2 \det[i-2], \quad i > 3 \quad (4.2.13)$$

No limite $p \rightarrow \infty$ (uma única interface), a matriz correspondente ao determinante da equação (4.2.10) se torna infinita. Neste caso, ambas as relações (4.2.11) e (4.2.12) juntamente com a relação (4.2.13) conduzem a uma equação envolvendo uma fração continuada:

$$A = \frac{aB}{b - \frac{a^2}{b - \frac{a^2}{\dots}}}$$

a qual pode ser determinada, apresentando a forma

$$A = \frac{2aB}{b - [b^2 - 4a^2]^{1/2}}$$

Esta relação fornece a temperatura crítica do sistema como função de $\Delta.T_C(\Delta)$ é idêntica à relação obtida, dentro das aproximações consideradas, para o problema de uma única interface, supondo-se um decaimento exponencial da magnetização no volume, como é usual nos tratamentos de campo médio de superfícies livres (sistemas semi-infinitos) e interfaces [77].

4.3 Resultados e discussão

A fim de podermos avaliar o procedimento variacional adotado, comparamos os resultados para o modelo de super-rede no limite de Ising ($\eta=1$) obtido através do cálculo usual de campo médio (CM), aproximação (a) da seção anterior, com os resultados da versão que leva em conta cadeias lineares nos planos das camadas [referida como ACL,

caso (b)], juntamente com os resultados fornecidos pela aproximação (c), designada por MV. Nos restringimos ao limite $p \rightarrow \infty$ apenas (uma única interface) uma vez que os resultados correspondentes refletem as tendências observadas para valores finitos de p (super-redes). Na figura (4.3.1) é apresentado um diagrama de fases para a temperatura (em unidades apropriadas) versus o parâmetro Δ , o qual está diretamente relacionado com a razão entre acoplamentos ($\Delta = J_S/J-1$).

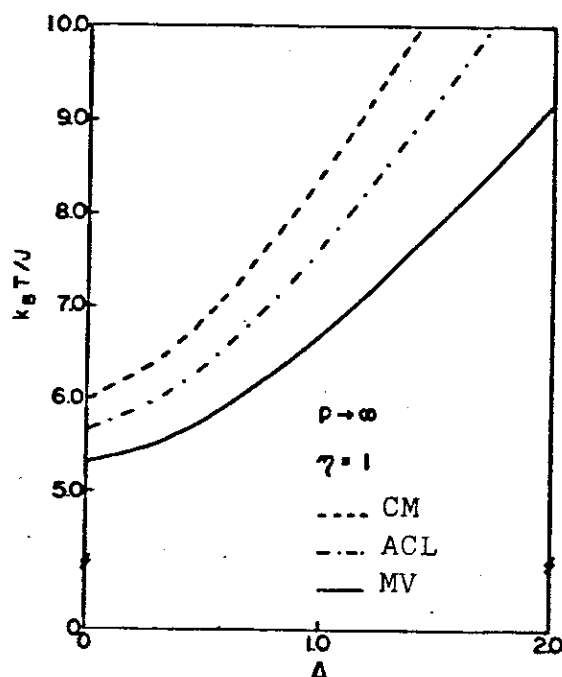


Figura 4.3.1: Temperatura crítica versus $\Delta = J_S / J - 1$ (limite de Ising, $\eta = 1$) correspondente a um sistema com uma única interface (acoplamento J_S).

Uma crescente precisão é observada ao se comparar os diagramas obtidos via CM, ACL e MV (nesta ordem). Uma vez que todos estes procedimentos são intrinsecamente cálculos de campo médio, é de se esperar que eles superestimem as interações entre spins. Todavia, em vista dos resultados mostrados na figura (4.3.1), é evidente que estes proce-

dimentos correspondem a aproximações cada vez mais precisas. As figuras (4.3.2) e (4.3.3), as quais exibem a magnetização versus distância ao longo da direção axial da estrutura (para $\Delta=2$), abaixo e acima da temperatura crítica de volume $T_c(0)$ [sistema de Ising 3d homogêneo, com acoplamento ferromagnético J], para todas as aproximações consideradas, ou seja $K^{-1}=5$ e 7, também confirmam esta tendência. Devemos salientar que o diagrama de fases para $p \rightarrow \infty$ corresponde a um limite inferior para diagramas de fase relativos a valores finitos de p e que nas três aproximações (CM, ACL e MV) o valor crítico da razão J_S/J , acima do qual a interface pode se ordenar sem que o sistema como um todo esteja ordenado, é 1, ao passo que o tratamento de grupo de renormalização no espaço real de dos Santos et. al. [107] fornece para esta razão o valor 1.13.

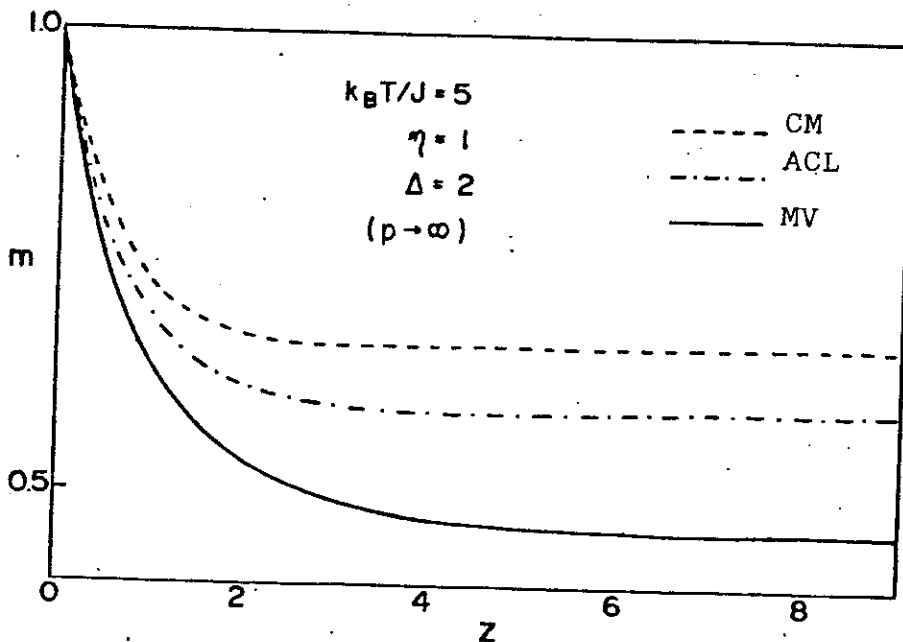


Figura 4.3.2: Decaimento da magnetização ao longo da direção z (axial), da interface para o volume segundo três aproximações ($T < T_c(0)$ = temperatura crítica do modelo de Ising 3d).

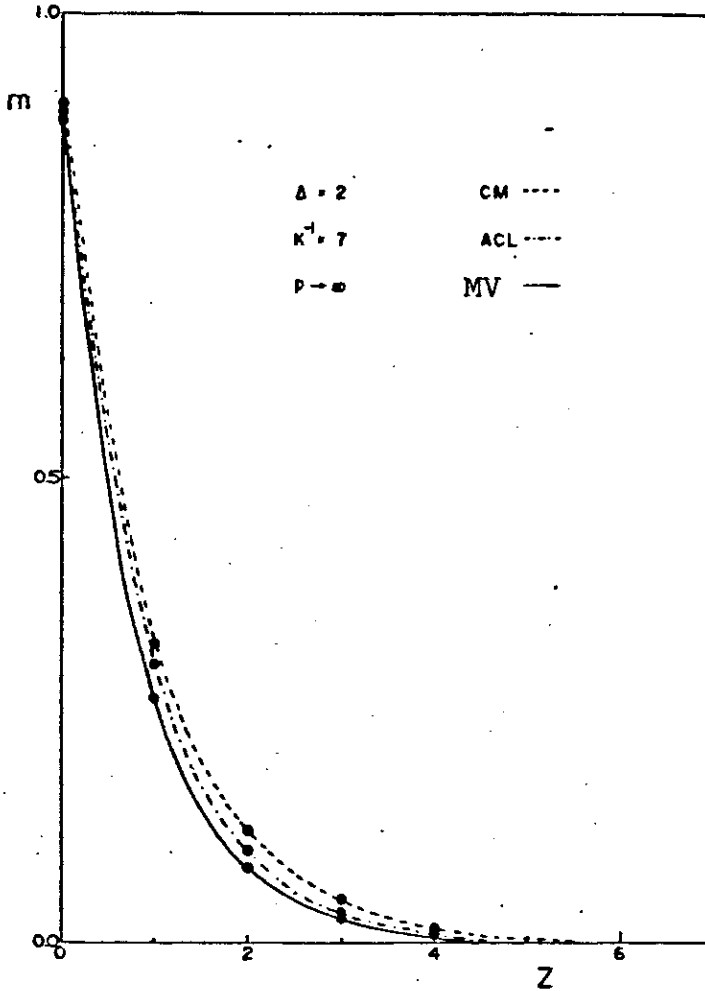


Figura 4.3.3:0 mesmo que na figura 4.3.2 acima para $T > T_c(0)$.

Como será discutido mais adiante para o caso anisotrópico ($\eta \neq 1$), os diagramas de fase para valores finitos de p se aproximam rapidamente do correspondente a p infinito quando p cresce. Também o limite de volume para a magnetização (correspondente a uma única interface) pode ser atingido já para valores finitos de p , significando que a magnetização pode decair quase do mesmo modo que no caso de p infinito. Os perfis de magnetização da super-rede apresentam assim um mínimo que pode se tornar bastante

pronunciado (magnetização constante), definindo uma "região de volume" nas camadas intermediárias.

No caso anisotrópico ($\eta \neq 1$), foi empregado apenas o tratamento variacional relativo à aproximação (c). Como é bem conhecido, não existe uma solução exata para o modelo de Heisenberg anisotrópico unidimensional, o que nos impede de utilizar a aproximação ACL neste caso. É de se esperar, todavia, em vista da discussão acima, que o procedimento MV represente uma aproximação razoável também neste caso.

Consideremos inicialmente o limite $p \rightarrow \infty$ (uma única interface). Na figura (4.3.4) são mostradas curvas para a temperatura crítica (normalizada) versus Δ .

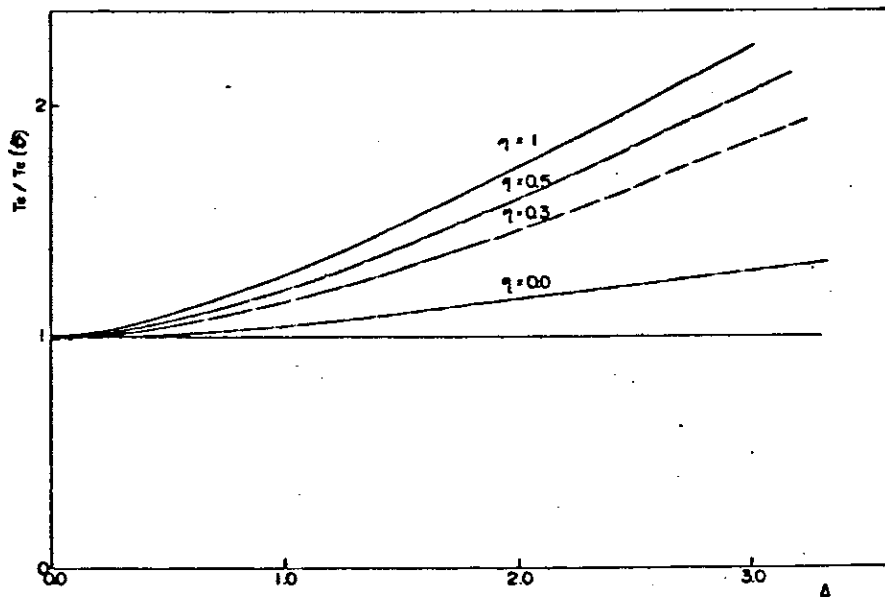


Figura 4.3.4: $T_c(\Delta)/T_c(0)$ vs. Δ para diferentes valores de anisotropia na interface.

A medida que o parâmetro de anisotropia decresce de $\eta=1$ (limite de Ising) para $\eta=0$ (limite de Heisenberg), a temperatura crítica diminui para um dado Δ . Isto é de se esperar, uma vez que para $\eta \neq 1$ flutuações (quânticas) adicionais são introduzidas, abaixando assim a temperatura crítica do sistema. É conveniente considerar conjuntamente as figuras (4.3.4) e (4.3.5), a qual exhibe os valores críticos de Δ versus η .

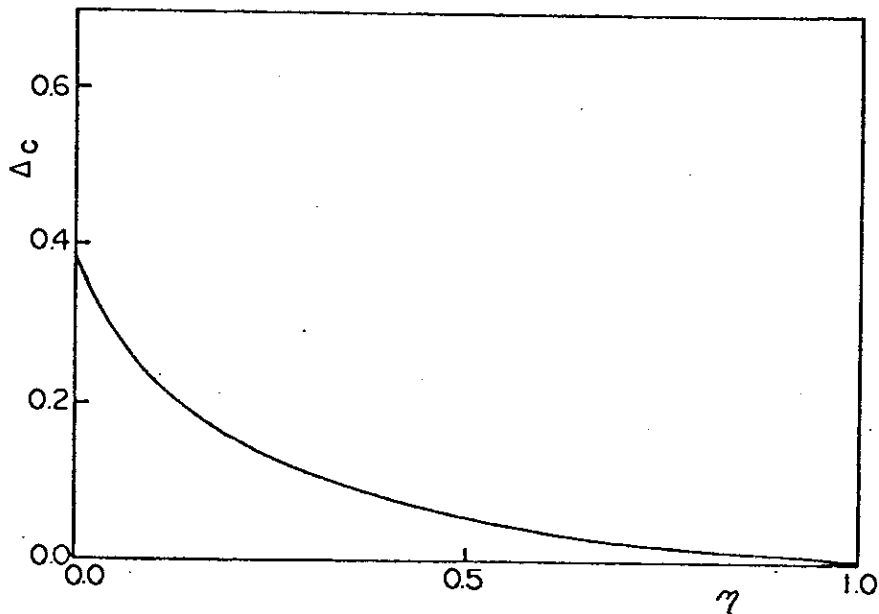


Figura 4.3.5: Valores críticos de Δ versus anisotropia (η).

Para um valor $\Delta > \Delta_c$ correspondente a um dado η , pode existir ordem magnética na interface mesmo que ela tenha desaparecido nos dois volumes. O cálculo para este modelo (uma única interface) através do grupo de renormalização no espaço real, realizado por dos Santos [107] forneceu um diagrama de fases com o qual o nosso se encontra qualita-

tivamente em concordância . Tanto naquele cálculo (veja também ERRATA [107]) como no presente tratamento Δ_c assume um valor finito no limite $\eta \rightarrow 0$. Comparando as curvas de Δ_c vs. η , observa-se que para $\eta \in [0,1]$, os valores de Δ_c obtidos por dos Santos et al. [107] se encontram acima dos obtidos aqui. Isto pode ser facilmente compreendido em vista de nosso cálculo ,com um nítido caráter de campo médio, ser menos preciso.

Para p finito (super-rede) tem-se somente uma única temperatura de ordenamento para o sistema. Neste caso, os valores de Δ_c para um dado η mostrados na fig.(4.3.5) representam situações em que a magnetização é uniforme no sistema. Para $\Delta > \Delta_c$, a magnetização nas interfaces de Heisenberg se torna superior a das p camadas de Ising intermediárias.

A transição p finito para p infinito é considerada na figura (4.3.6), onde são mostrados nas curvas de $T_c(\Delta)/T_c(0)$ versus Δ , para $\eta=0,5$, tomando-se $p=1, 3$ e ∞ .

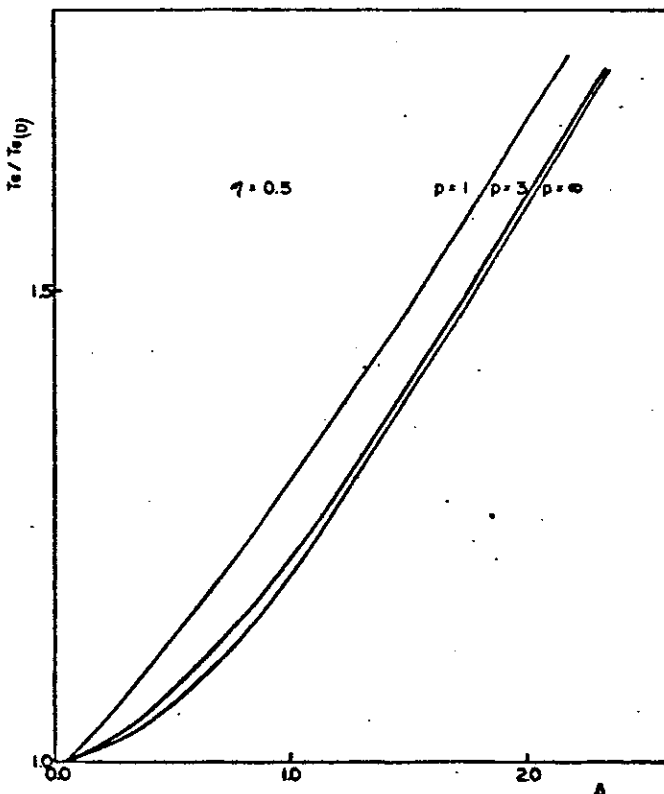


Figura 4.3.6: Diagrama de fases T vs. Δ ($\eta=0,5$) para diferentes valores do número p de camadas intermediárias entre duas interfaces (super-rede).

Nota-se claramente que as curvas críticas se aproximam rapidamente do caso limite $p \rightarrow \infty$, significando em certo sentido que a condição de "volume" já é atingida em super-redes compostas de algumas camadas de Ising intermediárias. Isto está mais explicitamente evidenciado nas figuras (4.3.7) e (4.3.8) onde são considerados perfis de magnetização (para apenas um período da super-rede) com números distintos de camadas de Ising intermediárias para $\eta=0.5$ e $\Delta=2$, abaixo ($K^{-1}=5$) e acima ($K^{-1}=7$) da temperatura crítica do modelo de Ising 3d com acoplamento J ($K^{-1}=5.34$).

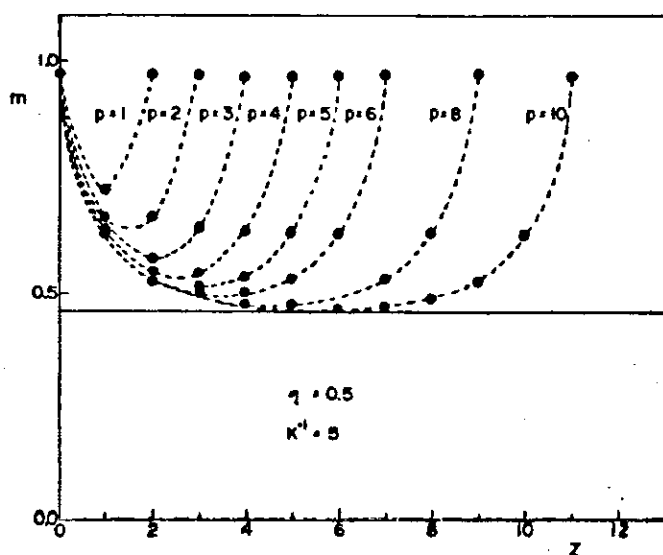


Figura 4.3.7: Perfil de magnetização (eixo axial) para diferentes valores de p , $T < T_c(0)$.

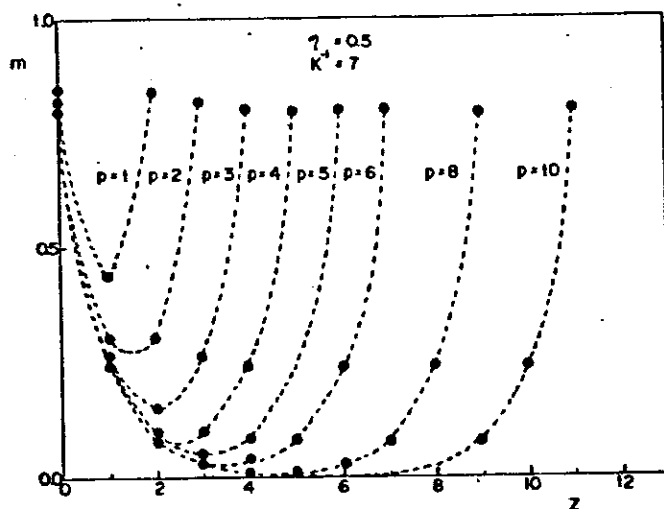


Figura 4.3.8: O mesmo que na fig. (4.3.7) para $T > T_c(0)$.

Nota-se um mínimo acentuado da magnetização em ambos os casos já para um valor finito de p . Em particular, para $p > 10$ uma região de "volume" fica bem-definida e a super-rede se comporta como uma coleção de "interfaces isoladas" conectadas por um meio "volumétrico".

4.4 Conclusões

Neste capítulo considerou-se um caso especial de super-redes. Dentro do formalismo variacional, é ainda possível considerar super-redes magnéticas, nas quais em vez de uma única interface num período, existem q camadas de Heisenberg intercaladas por p camadas de Ising e assim obter, por exemplo, um perfil tipo "poço quadrado", do mesmo modo que nas super-redes convencionais (os acoplamentos de troca desempenhariam o papel dos "gaps" neste caso). As variações abruptas nos perfis de magnetização dependeriam então essencialmente de Δ (para uma dada temperatura, quanto maior Δ , mais bem-definidas as descontinuidades). No caso que tratamos, isto corresponderia a "picos" de magnetização periódicos, ao longo da direção axial da estrutura. Um modelo de super-rede magnética de nitido interesse teórico seria o de interfaces (e.g. de Heisenberg) com interações antiferro e as demais interações ferro. E de se esperar um

comportamento crítico bem rico, tendo em vista os resultados para o problema correlato de um sistema semi-infinito [108] .

Embora consideremos um modelo bem simples e , além disso, adotando um tratamento aproximado, acreditamos que nossos resultados principais continuem válidos em tratamentos mais elaborados do problema. Finalmente, devemos mencionar que para uma dimensionalidade mais baixa ($d=2$), o problema pode ser tratado dentro do formalismo adotado, exibindo resultados análogos exceto que, devido ao número reduzido de interações, a temperatura crítica se torna mais baixa e o sistema requer valores significativamente maiores de Δ para que possa exibir perfis de magnetização similares.

No limite de Ising ($\eta=1$), o modelo considerado neste capítulo também poderia ser tratado através do formalismo do GRM no mesmo espírito do cálculo realizado para o modelo ANNI no capítulo II (tiras infinitas), empregando-se a técnica da matriz transferência.

CAPITULO V

TEORIA DE ESCALA DE TAMANHO FINITO PARA O MODELO DE
ISING COM SPINS MISTOS ($1/2$ E 1) EM $2d$

5.1 Introdução

O modelo de Ising com spins mistos representa uma generalização do modelo usual de Ising (spin $1/2$), a qual possui uma simetria translacional mais baixa que a sua contraparte com um único tipo de spin. Este modelo, além de particularmente simples, tem se mostrado bem adaptado ao estudo de sistemas que exibem ferrimagnetismo uniaxial (Néel [109]). Outros modelos empregando spins mistos foram também propostos [110,111], sendo considerado na literatura o complexo $MnNi(EDTA).6H_2O$ como exemplo de um sistema descrito por spins mistos [112].

Na figura (5.1.1) abaixo estão representados para comparação arranjos de spins na rede quadrada, correspondentes ao modelo usual de Ising (figura B) e ao modelo de Ising com spins mistos (figura A). Na rede mostrada na figura A é evidente a existência de duas sub-redes, cujos vértices são ocupados por cada tipo de spin.



Figura 5.1.1: Arranjos de spins na rede quadrada. Circulos fechados e abertos representam spins $\sigma=1/2$ e $S=1$, respectivamente.

O hamiltoniano para o modelo de Ising com spins mistos é dado por

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_1 S_i \sigma_j \quad (5.1.1)$$

onde $S = 0, \pm 1$ e $\sigma = \pm 1/2$.

Um modelo mais geral a ser considerado, inclui interações extras entre spins pertencentes a cada sub-rede (veja figura 5.1.2), podendo incluir ainda um termo de anisotropia local associado aos spins $S_i=1$.



Figura 5.1.2: Interações entre spins segundos vizinhos, pertencentes a uma mesma sub-rede (linhas pontilhadas), incluídas num modelo mais geral do que o descrito em (5.1.1).

O hamiltoniano generalizado correspondente assume então a forma:

$$\mathcal{H} = -J_1 \sum_{\langle ij \rangle} S_i \sigma_j - J_2 \sum_{(k,l)} S_k S_l - J_3 \sum_{(k,l)} \sigma_k \sigma_l - J_4 \sum_k (S_k)^2 \quad (5.1.2)$$

onde o primeiro termo é o hamiltoniano apresentado em (5.1.1), o segundo e terceiro termos representam as interações entre spins mostradas nas figuras (5.1.2) A e B, respectivamente, e o quarto termo é a contribuição de anisotropia local associada aos spins $S=1$.

O problema de spins mistos com interações do tipo Ising foi estudado anteriormente por diferentes autores. Schofield e Bowers [113] foram os primeiros a realizar um cálculo de grupo de renormalização (GR) para o modelo (5.1.1) na rede quadrada, obtendo expoentes críticos em boa concordância com os sugeridos pela hipótese de universalidade. Iwashita e Uryū [114] empregaram o método de Bethe-Peierls para analisar o hamiltoniano (5.1.2) na rede quadrada, tendo observado que os termos extras ao modelo (5.1.1) presentes no hamiltoniano (5.1.4) influenciam consideravelmente a temperatura crítica. Yousif e Bowers [115] realizaram uma expansão em séries de altas temperaturas para o modelo (5.1.1) nas redes quadrada, CCC e cúbica simples, considerando o problema de spins mistos com $\sigma=1/2$ e S genérico ($S=1/2, 1, 3/2, 5, 10$ e 100), tendo determinado temperaturas críticas e expoentes que concordam com as idéias de universalidade. Recentemente, Verona de

Resende et al. [116] estudaram o modelo (5.1.2) nas redes quadrada e triangular através do grupo de renormalização de campo médio (GRCM), obtendo diagramas de fase e expoentes críticos, considerando diferentes valores para os parâmetros J_2 , J_3 e J_4 . O presente tratamento utiliza a teoria de escala de tamanho finito proposta por Nightingale [117] e empregada por vários autores no tratamento de diversos sistemas [118]. São obtidos diagramas de fase para o modelo (5.1.2) juntamente com expoentes críticos. É feita uma comparação com resultados anteriores e discutidos aspectos da aplicação do presente método no estudo do modelo.

5.2 Teoria de escala de tamanho finito

A teoria de escala de tamanho finito é um tratamento fenomenológico poderoso no estudo das propriedades críticas de sistemas que exibem fenômenos cooperativos. O método é particularmente útil por não gerar novos termos no hamiltoniano, ao contrário do que ocorre com outras técnicas de grupo de renormalização. A suposição básica do método (no contexto do formalismo da matriz transferência) é que ao se realizar a mudança de tamanho $L \rightarrow L'$ (o que corresponde a considerar duas tiras infinitas de larguras distintas) o comprimento de correlação muda como

$$\xi_L(k) = \frac{L}{L'} \xi_{L'}(k'), \quad k = J/k_B T \quad (5.2.1)$$

tornando-se em $T=T_c$

$$\frac{\xi_L(K_c)}{L} = \frac{\xi_{L'}(K_c)}{L'} \quad (5.2.2)$$

onde T_c representa uma estimativa para a temperatura crítica do sistema. A relação (5.2.1) é interpretada como uma relação de recorrência, o que permite também obter estimativas para expoentes críticos. Convém salientar que este procedimento, por envolver uma única relação de recorrência, gera um cruzamento contínuo (artificial) no caso de existir mais de um acoplamento no sistema, de modo análogo ao observado na aplicação do GRGM, visto anteriormente. Deve-se observar também que ξ_L apresenta valores finitos em $T=T_c$ ao contrário do que ocorre em sistemas infinitos. O presente tratamento, ao comparar comprimentos de correlação referentes a sistemas finitos com vistas a obter informações sobre a criticalidade de sistemas infinitos corresponde a um tratamento essencialmente fenomenológico, devendo conduzir a resultados cada vez mais precisos à medida que a largura das tiras infinitas consideradas for sucessivamente aumentada.

A expressão para o comprimento de correlação pode ser obtida de sua definição e dos resultados fornecidos pelo formalismo da matriz transferência no cálculo de funções de correlação de pares de spin. Para os casos considerados neste capítulo, o comprimento de correlação, ξ_L , é dado pela expressão usual [119].

$$\xi_L = \frac{1}{\ln(\lambda_1/\lambda_2)} \quad (5.2.4)$$

onde λ_1 e λ_2 designam o primeiro maior autovalor e o segundo maior autovalor da matriz transferência, respectivamente.

Considera-se a seguir, para fins ilustrativos, o cálculo de Z_L para o modelo (5.1.1) quando $L=1$, i.e. a tira infinita corresponde a uma linha. Neste caso, a matriz transferência pode ser construída de dois modos [veja figura (5.2.1)].

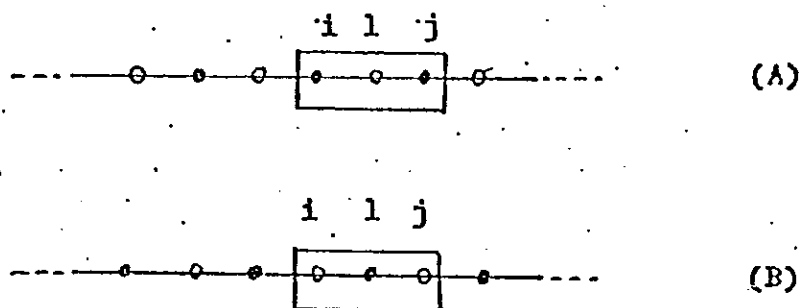


Figura 5.2.1 : Distintos "motivos" a partir dos quais a matriz transferência é construída.

No caso (A) a matriz transferência $T^{(A)}$ é construída a partir dos termos $\exp[K(\sigma_i S_1 + \sigma_j S_1)] = \exp[KS_1(\sigma_i + \sigma_j)]$ da função de partição ($K^{-1} = k_B T / J_1$). É possível neste caso realizar uma soma parcial em $S_1 (= -1, 0 \text{ e } 1)$, de modo que

$$T^{(A)} = \sum_1 \exp[KS_1(\sigma_i + \sigma_j)] = \exp[K(\sigma_i + \sigma_j)] + \exp[-K(\sigma_i + \sigma_j)] + 1.$$

A matriz transferência fica então:

$i \setminus j$	1/2	-1/2
1/2	$1 + e^K + e^{-K}$	3
-1/2	3	$1 + e^K + e^{-K}$

Que pode ser facilmente diagonalizada, fornecendo

$$\lambda_1^{(A)} = 4 + e^K + e^{-K} = 4 + 2\cosh(K)$$

$$\lambda_2^{(A)} = -2 + e^K + e^{-K} = -2 + 2\cosh(K)$$

Deste modo, o comprimento de correlação fica determinado:

$$\xi_{L=1} = \frac{1}{\ln[(\cosh(K)+2)/(\cosh(K)-1)]}$$

No caso (B), os termos a serem considerados são dados por $\exp[K(S_1 \sigma_1 + S_j \sigma_1)] = \exp[K \sigma_1 (S_1 + S_j)]$. Uma soma parcial em σ_1 ($= +1/2$) fornece $T_{ij} = \exp[K(S_1 + S_j)/2] + \exp[-K(S_1 + S_j)/2]$. A matriz transferência $T^{(B)}$ é portanto 3×3 , sendo dada por:

$i \setminus j$	-1	0	1
-1	$2\cosh(K)$	$\cosh(K/2)$	2
0	$\cosh(K/2)$	2	$\cosh(K/2)$
1	2	$\cosh(K/2)$	$2\cosh(K)$

A diagonalização desta matriz é imediata. Os autovalores são:

$$\lambda_1^{(B)} = 4 + 2\cosh(K)$$

$$\lambda_2^{(B)} = -2 + 2\cosh(K)$$

$$\lambda_3^{(B)} = 0$$

O comprimento de correlação determinado desta forma é portanto idêntico ao obtido através de $T^{(A)}$. O caso $L=1$, embora seja um caso particular, ilustra alguns aspectos do problema de diagonalização associado a tiras mais largas.

Por exemplo, ambas as matrizes $T(A)$ e $T(B)$ são simétricas tanto em relação à diagonal principal quanto em relação à diagonal secundária, o que permite algumas simplificações no problema de diagonalização (veja apêndice A). Convém salientar que, excluindo-se o caso $L=1$, apenas tiras com larguras $L=2,4,6,\text{etc}$ (i.e. L par) devem ser consideradas, pois somente nestes casos a invariância ($e \leftrightarrow o$) é observada nos "motivos" [veja figura (5.2.1)], a partir dos quais a matriz transferência é construída. Nos outros casos (L ímpar, $L \neq 1$) existem dois "motivos" distintos possíveis, como no caso $L=1$ ilustrado, os quais fornecem todavia valores diferentes para o comprimento de correlação. A medida que L cresce, a obtenção de expressões analíticas para ξ_L se torna uma operação extremamente complexa, sendo necessário recorrer-se a um tratamento numérico. O tamanho das matrizes representa o fator restritivo principal, pois elas crescem rapidamente com a largura das tiras infinitas, tornando o custo computacional proibitivo, exceto para um número limitado de tiras. Assim, nos restringimos no presente estudo aos casos $L=2,4$ e 6 .

5.3 Resultados e discussão

No tratamento do modelo (5.1.1) são consideradas cadeias abertas e cadeias com condições periódicas de contorno nas direções transversais. Na tabela (5.3.1) são apresentados os resultados obtidos para o modelo (5.1.1) na rede quadrada,

levando-se em conta diferentes relações L/L' , juntamente com o resultado de séries [115] e de um cálculo de GR [113] para comparação.

Tabela 5.3.1 : Resultados obtidos através da teoria de escala de tamanho finito para a temperatura crítica e o expoente térmico referentes ao modelo (5.1.1) na rede quadrada. O resultado de séries e de um cálculo de GR é incluído para comparação.

L/L'	$k_B T_c / J_1$	ν_T	
2/1	0,902	0,905	
4/2	1,084	0,98	<u>Cadeias abertas</u>
6/4	1,158	0,9988	
<hr/>			
4/2	1,21	0,955	
6/4	1,22	0,97	<u>Condições periódicas de contorno</u>
<hr/>			
-	0,975	1,1	<u>Séries [115]</u>
<hr/>			
-	0,728	1,005	<u>GR [113]</u>
<hr/>			

O cálculo empregando cadeias abertas fornece valores para T_c que indicam uma nítida convergência, embora para um valor acima do estimado através do cálculo de séries. Os sucessivos resultados para o expoente térmico evidenciam também uma rápida convergência. O valor $\nu_T = 0,9988$ obtido para $L/L' = 6/4$ se encontra em excelente concordância com o resultado exato, $\nu_T = 1$. No tratamento envolvendo cadeias com condições periódicas de contorno, observa-se também uma temperatura crítica acima da fornecida por séries [115]. 0

mesmo comportamento foi observado antes no tratamento do modelo de Ising usual através do presente método [73] para a sequência de pares de tiras $L=2, L'=1$ e $L=3, L'=2$, havendo uma convergência para a temperatura crítica exata ($T_c=2.269$) [120] para tiras mais largas ($L>4$). Assim, é de se esperar um comportamento semelhante para o presente modelo ao se considerar tiras mais largas ($L>6$). O expoente térmico, por outro lado, converge para o resultado exato, embora de modo menos satisfatório do que no caso anterior (cadeias abertas).

Cada interação extra ao modelo (5.1.1) presente no hamiltoniano (5.1.2) foi inicialmente considerada separadamente. Deste modo tomou-se J_2 não-nulo com J_3 e J_4 nulos e assim sucessivamente. Por conveniência computacional, levou-se em conta apenas a relação de escala $L/L'=4/2$, bem como cadeias abertas, uma vez que estas se mostraram as mais apropriadas no limite representado pelo modelo (5.1.1). Nas figuras (5.3.1) e (5.3.2) são apresentadas, respectivamente, o diagrama de fases obtido para o modelo (5.1.2) com $J_1, J_2 \neq 0$ e $J_3=J_4=0$, com J_2/J_1 no intervalo $[-1,1]$, e os valores correspondentes para o expoente térmico. O diagrama evidencia que para valores crescentes de $J_2>0$ a temperatura crítica aumenta quase linearmente dentro do intervalo considerado. O expoente térmico, por outro lado, apresenta um valor praticamente constante, estando em acordo com a hipótese de universalidade para o modelo. Para valores de $J_2/J_1<0$ crescentes em módulo, a temperatura crítica diminui,

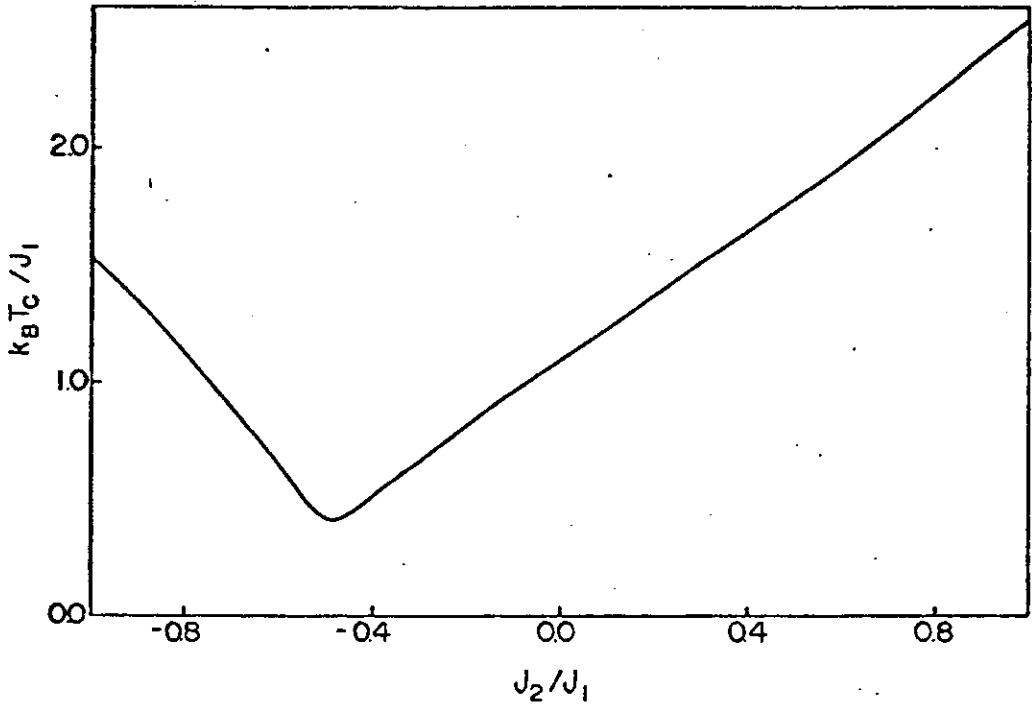


Figura 5.3.1: Diagrama de fases referente ao modelo (5.1.2) com $J_1, J_2 \neq 0$, $J_3, J_4 = 0$.

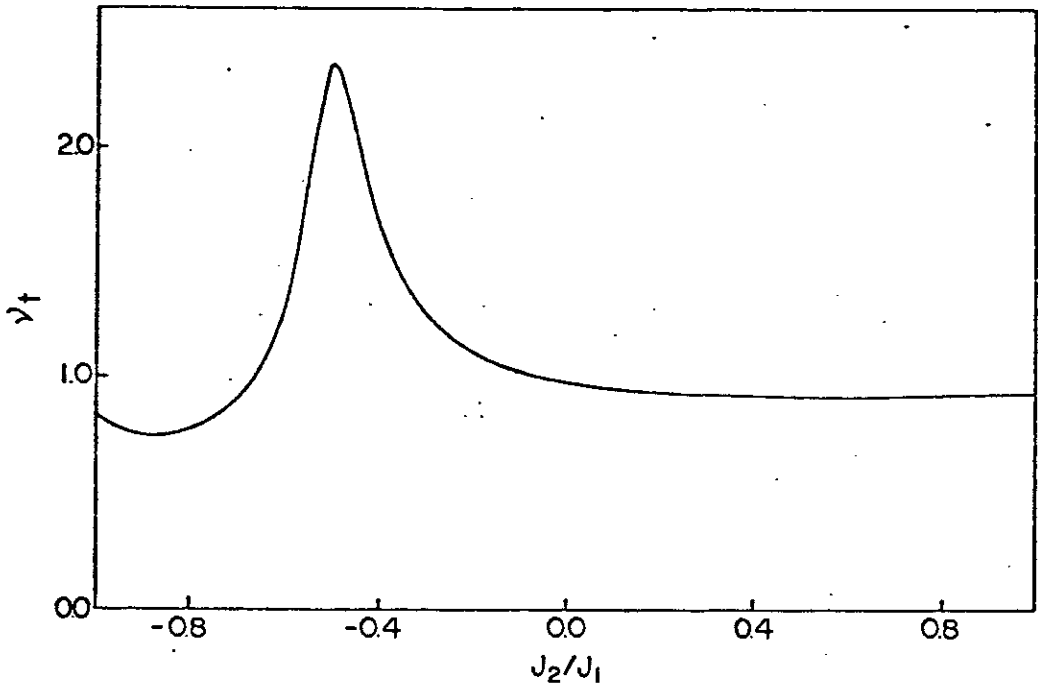


Figura 5.3.2: Expoentes térmicos correspondentes à linha crítica da fig. (5.3.1).

em virtude do caráter competitivo das interações J_1 , ferro, entre spins primeiros vizinhos, e J_2 , de caráter antiferro, entre spins segundos vizinhos, atingindo um mínimo em torno de $J_2/J_1 = -0,49$ e aumentando novamente, em consequência do predomínio da interação antiferro (J_2) para valores negativos de J_2/J_1 crescentes em módulo.

O expoente térmico, por sua vez, exibe um "calombo" pronunciado, com o máximo em torno de $J_2/J_1 = -0,49$. Geralmente, no contexto da teoria de escala de tamanho finito, a existência de tais "calombos" nas curvas do expoente como função de acoplamentos pode ser um indicio do aparecimento de um comportamento crítico distinto. No presente estudo não nos detemos todavia em uma análise mais pormenorizada da fase ou fases existentes na região de interações competitivas ($J_2/J_1 < 0$). Provavelmente nesta região exista um comportamento crítico bastante rico. No próximo capítulo são apresentadas algumas sugestões para a implementação de uma análise mais cuidadosa deste comportamento através da teoria de escala de tamanho finito.

O diagrama de fases aqui obtido pode ser comparado com o resultado de Iwashita e Uryū [114] via o tratamento de Bethe-Peierls. Este tratamento, como é bem conhecido, fornece, devido ao seu nítido caráter de campo médio, expoentes clássicos. Para $J_1, J_2 > 0$ há uma concordância qualitativa quanto ao comportamento de T_c , porém para $J_2/J_1 < 0$ aqueles autores não exibem um mínimo no diagrama de fases.

Na figura (5.3.3) é mostrado o diagrama de fases correspondente ao modelo (5.1.2) com $J_1, J_3 \neq 0$ e $J_2 = J_4 = 0$.

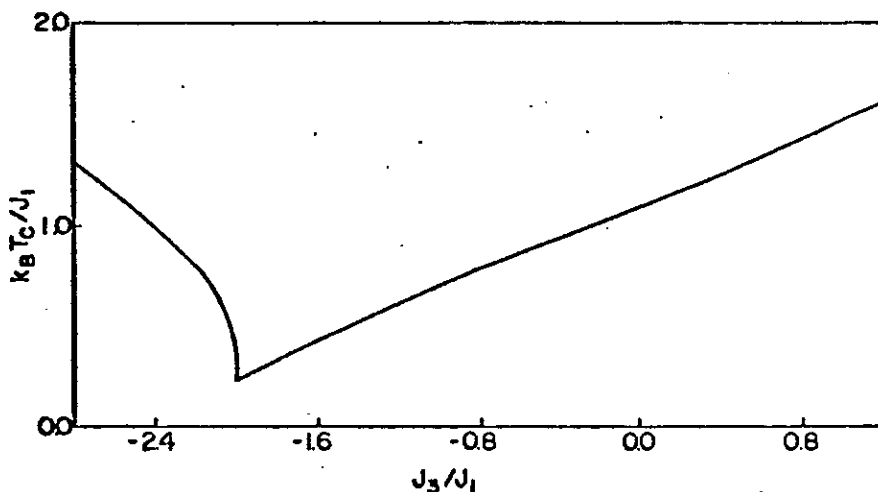


Figura 5.3.3: O mesmo que na fig. 5.3.1 com $J_1, J_3 \neq 0; J_2, J_4 = 0$.

Um comportamento análogo ao caso tratado acima ($J_2 \neq 0$) é observado aqui. Convém mencionar que o mínimo neste caso é mais pronunciado, o mesmo ocorrendo com o máximo em μ_T [fig.5.3.4)], comparado ao apresentado na fig. (5.3.2). Observações semelhantes às realizadas para o caso $J_2 \neq 0$ acima referentes ao comportamento do expoente térmico na região de interações competitivas também se aplicam aqui. Comparações análogas podem ser feitas em relação aos resultados de Iwashita e Uryū [14]. A localização do mínimo para T_C se dá em torno de $J_3 / J_1 = -2$, portanto para um valor maior (em módulo) desta relação que o valor correspondente para J_2 / J_1 do caso anterior. Este resultado é óbvio se for levado em conta que as interações extras aqui são entre spins $S=1$.

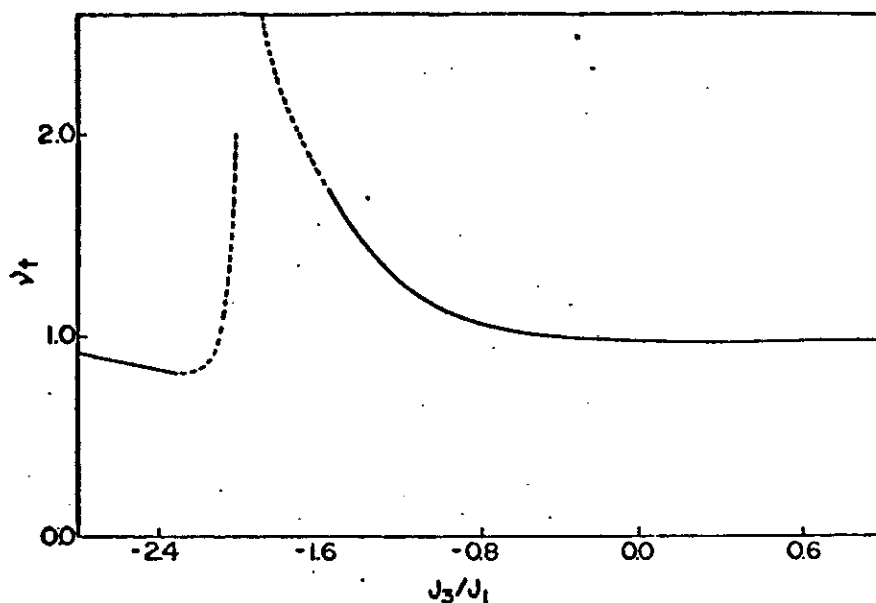


Figura 5.3.4:0 mesmo que na fig. 5.3.2 com $J_1, J_3 \neq 0$; $J_2 = J_4 = 0$.

No caso $J_1, J_4 \neq 0$; $J_2, J_3 = 0$, que corresponde a considerar apenas o termo de anisotropia local como contribuição extra ao hamiltoniano (5.1.1), foi obtido o diagrama de fases mostrado na figura (5.3.5). Para valores crescentes da razão J_4/J_1 a temperatura crítica cresce quase linearmente, porém de modo mais lento do que nos dois casos considerados acima (J_2 e $J_3 \neq 0$, respectivamente). O expoente térmico [fig. (5.3.6)], por outro lado, permanece praticamente constante. Para valores negativos crescentes em módulo de J_4/J_1 , a temperatura crítica decresce. O comportamento global do diagrama de fases se encontra assim em acordo com o obtido por Iwashita e Uryū [114]. O presente resultado contrasta toda-

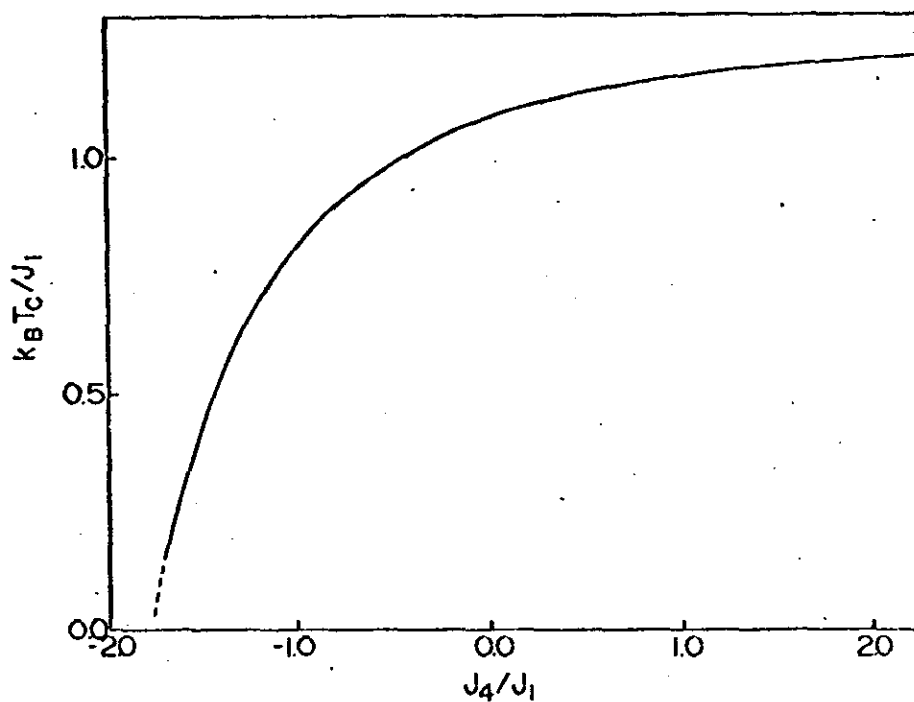


Figura 5.3.5:0 mesmo que na fig.(5.3.1) com $J_1, J_4 \neq 0$; $J_2 = J_3 = 0$

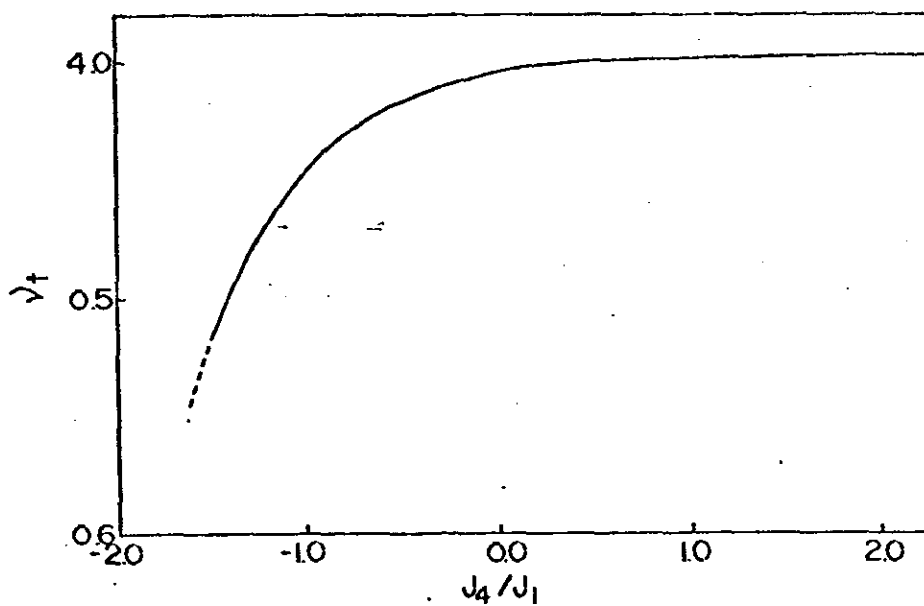


Figura 5.3.6:0 mesmo que na fig.(5.3.2) com $J_1, J_4 \neq 0$; $J_2 = J_3 = 0$

via com o fornecido pelo cálculo de Verona de Resende et al. [116] via o GRM, o qual indica que para valores negativos crescentes em módulo da razão J_4/J_1 , a temperatura crítica além de exibir uma diminuição, apresenta finalmente uma saturação, não evidente no presente cálculo (a menos, é claro, que corresponda a temperaturas muito baixas, não acessíveis ao tratamento numérico que realizamos). O comportamento do expoente térmico determinado por aqueles autores também difere do obtido aqui. Ao passo que Verona de Resende et al. [116] obtém um comportamento complexo para ν_T , a dependência deste expoente com J_4/J_1 aqui obtida é de uma diminuição contínua [veja figura (5.3.6)].

Finalmente, o efeito conjunto das diversas interações examinadas acima separadamente foi considerado tendo em vista a determinação dos possíveis comportamentos críticos. Na figura (5.3.7) são apresentados os diagramas de fases correspondentes aos parâmetros $J_1/J_2=0,4$ e $J_3/J_2=0,4$ e $0,8$, respectivamente. No primeiro caso ($J_3/J_2 = 0,4$) observa-se a existência de uma pequena reentrância no diagrama de fases. Este resultado concorda qualitativamente com o obtido por Verona de Resende et Al. [116] com os mesmos valores de J_1/J_2 e J_3/J_2 , o qual apresenta todavia uma reentrância muito mais acentuada. No cálculo que realizamos, o efeito de reentrância desaparece quando se toma $J_1/J_2=0,4$ e $J_3/J_2=0,8$, como mostrado na figura (5.3.7). Este comportamento evidencia a complexidade do comportamento crítico exibido pelo modelo. Neste caso, ocorre uma saturação da temperatura, a partir de

um valor crítico (negativo) de J_4/J_2 . Este resultado não foi, ao que nos consta, descrito anteriormente na literatura no que se refere ao modelo considerado. Por outro lado, o expoente térmico exibe o comportamento mostrado na figura (5.3.8) para diferentes valores da razão J_4/J_2 .

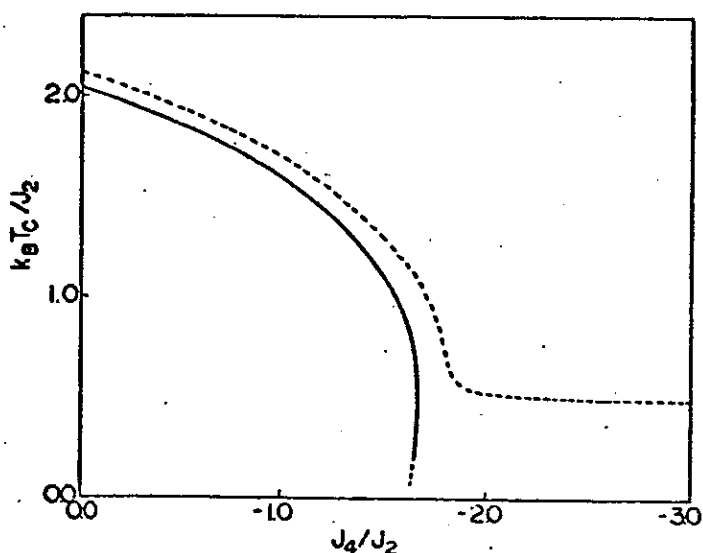


Figura 5.3.7 : Diagramas de fases correspondentes ao modelo (5.1.2). Linha cheia: $J_1/J_2=0.4$ e $J_3/J_2=0.4$; linha tracejada: $J_1/J_2=0.4$ e $J_3/J_2=0.8$.

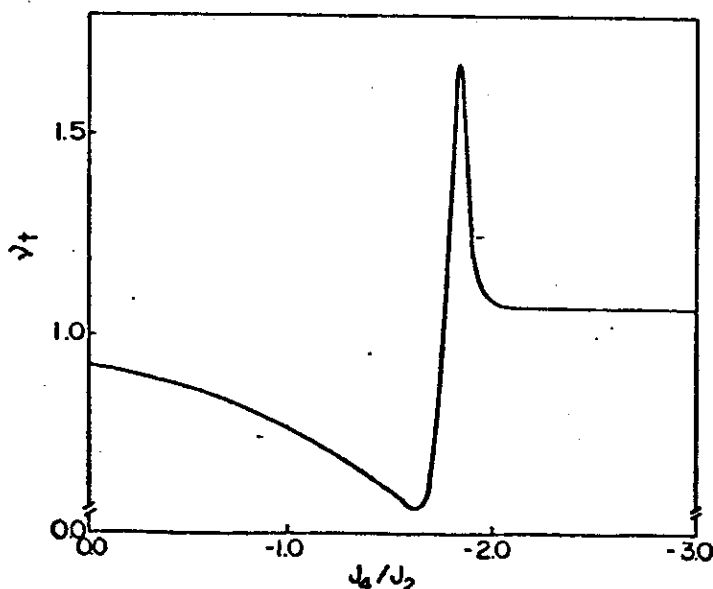


Figura 5.3.8: Expoente térmico referente à linha tracejada da fig. (5.3.7).

É nitido todavia a existência de um cruzamento. Em particular, para valores de $-J_4/J_2 > 2$, ν_T exibe um valor bem definido.

5.4 Conclusões

Foi empregada a teoria de escala de tamanho finito no estudo do modelo de Ising com spins mistos ($1/2$ e 1) na rede quadrada, levando-se em conta interações extras (J_2, J_3) entre spins segundos vizinhos referentes a cada uma das sub-redes existentes, mais um termo de anisotropia local (J_4). Considerou-se tiras infinitas de diferentes larguras para a versão mais simples do modelo ($J_2, J_3, J_4=0$), levando-se em conta (i) cadeias livres e (ii) cadeias com condições periódicas de contorno na direção transversal. Os resultados obtidos para T_c em (i) tendem a um valor próximo do resultado de séries [115], porém acima do mesmo, e o expoente térmico se aproxima rapidamente do valor exato. Já em (ii) a convergência é mais lenta e os resultados são menos satisfatórios.

Cada interação extra incluída no modelo (5.1.1) foi considerada separadamente, sendo também examinado o efeito conjunto das mesmas. Os diagramas de fases obtidos se encontram parcialmente em concordância com os de Iwashita e Uryū [114], obtidos através do tratamento de Bethe-Peierls. São observados mínimos nos diagramas da temperatura

critica nos casos $J_2 \neq 0$ e $J_3 \neq 0$, não encontrados nos diagramas daqueles autores, não obstante serem fisicamente esperados. A comparação dos presentes resultados com os de Verona de Resende et al. [116], obtidos via o GRCM, aponta a existência de algumas discrepâncias entre os dois tratamentos. Em especial, os cálculos aqui realizados para o modelo (5.1.1) com um termo de anisotropia local não fornecem a saturação para T_c obtida por Verona de Resende et al. Além disso, o efeito de reentrância observado por aqueles autores no estudo do modelo (5.1.2) com todas as interações presentes (J_1, J_2, J_3 e J_4) é muito mais acentuado do que o observado aqui. Além disso, o presente tratamento indica que para a escolha de parâmetros $J_1/J_2=0,4$; $J_3/J_2=0,8$, o efeito de reentrância desaparece, dando lugar a uma saturação em T_c .

Convém salientar que os presentes cálculos empregam cadeias infinitas com larguras ainda relativamente pequenas ($L=2$ e $L=4$). Embora no limite representado pelo modelo (5.1.1) os resultados obtidos para a temperatura crítica e, em especial para o expoente térmico, sejam satisfatórios quando se considera cadeias abertas, o mesmo não se pode dizer em relação a cadeias com condições periódicas de contorno para as larguras estudadas (spins das bordas laterais conectados). A eficácia proporcionada pelo método

ao se incluir tais condições deve se manifestar, no contexto do modelo examinado, ao se tomar cadeias mais largas do que as consideradas aqui. Convém observar que mesmo para tiras com larguras $L=6$ e $L'=4$ o expoente térmico fornecido pelo método levando-se em conta condições periódicas de contorno, por exemplo, é ainda pior do que o obtido com cadeias abertas considerando-se $L=4$ e $L'=2$. Deve-se ressaltar, contudo, que o esforço computacional envolvido na implementação de um cálculo adequado se torna então considerável, sendo proibitivo, face ao tamanho das matrizes transferência que devem ser consideradas.

CAPITULO VI

CONCLUSOES E COMENTARIOS GERAIS

No presente trabalho foram estudadas as propriedades críticas de diversos modelos de spins na rede, clássicos e quânticos, empregando-se para tal diferentes formalismos. O caráter destes formalismos é essencialmente fenomenológico, sendo seu emprego em grande parte justificado basicamente pelo fato de conduzirem a resultados fisicamente satisfatórios. A seguir é apresentado um sumário dos principais resultados obtidos nos capítulos anteriores, procurando-se relacionar aperfeiçoamentos aos referidos métodos e possíveis sistemas a serem estudados.

7.1 Capítulo I

Considera-se o papel da simetria e tamanho dos aglomerados utilizados no estudo da criticalidade do MIT com diluição nas ligações, em 2d e 3d, via o GRM. Observou-se que a simetria é um fator relevante na aplicação do formalismo a este modelo, afetando quantitativa e mesmo qualitativamente os resultados para os expoentes críticos, bem como os valo-

res críticos referentes à temperatura, campo transversal e concentração de ligações. Obteve-se um cruzamento extra para o expoente crítico associado à diluição na descontinuidade de Harris (linha AB, fig. 1.1.1), também verificada no presente tratamento. Propõe-se que se realize um cálculo de GR no espaço real mais preciso que o realizado por dos Santos [28] visando estabelecer a validade deste resultado.

A despeito dos diagramas de fases satisfatórios fornecidos pelo GRM, em vista dos cálculos relativamente simples (aglomerados pequenos), as estimativas para os acoplamentos e sobretudo expoentes críticos apresenta uma convergência lenta quando se considera aglomerados maiores. Recentemente, Slotte [121] apresentou uma nova proposta para o cálculo do fator de escala, que permite em muitos casos uma convergência mais rápida para os expoentes críticos. De acordo com este autor, em vez de se adotar o fator de escala usual $l=(N/N')^{1/d}$ (d: dimensionalidade), o qual leva em conta o número (N,N') de spins dos aglomerados, deveria se calcular um fator de escala (redes hiper-cúbicas) considerando-se o número de interações, incluindo as ligações com os campos efetivos circundantes. Slotte [121] distingue dois casos: aglomerados isotrópicos e aglomerados anisotrópicos (e.g. aglomerado de dois spins, tiras infinitas, etc). No primeiro caso, ele calcula L (tamanho do aglomerado) simplesmente contando o número de ligações ao longo de uma direção, já que todas as direções são equivalentes, incluindo as

ligações referentes aos campos efetivos. Para o segundo caso ele sugere a fórmula :

$$L = \left(\frac{1}{d} \sum_i L_i^{-2} \right)^{-1/2} ,$$

onde os L_i se referem a cada uma das direções (note que um aglomerado ,e.g. quadrado, pode ser isotrópico e anisotrópico dependendo da dimensão do sistema). Para um aglomerado de dois spins numa rede hipercúbica tem-se

$$L = 6[d/(9d-5)]^{1/2} .$$

Assim, no limite $d \rightarrow \infty$ $L=2$, que corresponde ao "tamanho" de um aglomerado de um único spin. Este procedimento propicia em muitos casos estimativas bem mais próximas dos valores exatos (quando disponíveis), sobretudo ao se tomar aglomerados isotrópicos crescentes [121] .

No contexto de nosso estudo do MIT, empregamos aglomerados isotrópicos e anisotrópicos. Os resultados obtidos são apresentados na tabela (7.1.1). Embora haja uma melhora nos resultados , ela não é tão apreciável como a obtida por Slotte para o modelo de Ising [121] devido à limitação do tamanho dos aglomerados (quanto maiores, mais oneroso o cálculo computacional, devido ao caráter quântico do modelo). A proposta de Slotte, que representa uma entre as várias escolhas possíveis para o fator de escala, não afeta todavia o caráter dos cruzamentos, já que a correção que ela introduz nos expoentes corresponde a uma constante multiplicativa.

Tabela 6.1.1 : Valores de expoentes de acordo com a prescrição de Slotte [121]. AE= antiga estimativa (capítulo I); NE= nova estimativa.

	Aglomerados	g=0 p=1		K=∞ p=1		K=∞ g=0		K=∞ p=p _c	
		AE	NE	AE	NE	AE	NE	AE	NE
rede quadrada*	--	ν_T		ν_g		ν_p		ν_p	
	--	AE	NE	AE	NE	AE	NE	AE	NE
	N ₁ , N ₂	1,67	0,78	1,43	0,67	1,55	0,73	1,55	0,73
	N ₂ , S ₄	1,28	0,9	1,03	0,72	1,29	0,9	1,1	0,77
rede** cúbica	N ₁ , N ₂	1,54	0,68	1,41	0,63	1,45	0,66	1,45	0,66
	N ₂ , S ₄	1,26	0,7	1,15	0,64	1,27	0,71	1,20	0,67

* veja também os resultados apresentados na tab. 1.3.2.1 (outros métodos) - capítulo I, pág.27.

**o mesmo em relação à tab. 1.4.1 (capítulo I), pág.33.

Uma das limitações inerentes ao GRM consiste no fato deste formalismo fornecer apenas uma única relação de recorrência. Isto acarreta cruzamentos contínuos artificiais. Para contornar esta dificuldade, sugerimos a prescrição seguinte. Considera-se uma grandeza não crítica do modelo (no caso do MIT, a componente x da magnetização). Introduce-se então uma relação de escala extra para estas grandezas, referentes a dois aglomerados distintos (por exemplo, um aglomerado de um spin e outro de dois spins, para o modelo na rede quadrada). No caso do MIT isto corresponderia a supor que

$$m_1^x = \epsilon m_2^x$$

(7.1.1)

Um ponto fixo óbvio para este modelo é $K=\infty, g=0$. Neste caso $m_1^x = m_2^x = 0$, e a equação (7.1.1) é trivialmente satisfeita. Por outro lado, a relação de recorrência usual, fornecida pelo GRGM

$$\left. \frac{\partial m_1^z}{\partial b'} \right|_{b'=0} = \left. \frac{\partial m_2^z}{\partial b} \right|_{b=0} \quad (7.1.2)$$

estabelece outro ponto fixo, a saber $g=g_c, T=0$. A equação (7.1.1) só é satisfeita neste caso para um valor de $\epsilon \neq 1$ (teoricamente ϵ deveria ser igual à unidade, uma vez que m^x é uma grandeza não crítica). O valor de ϵ todavia deve ser próximo de 1. A medida que o tamanho dos aglomerados for aumentado, ϵ deve se aproximar da unidade. Com isto obtém-se um diagrama de fluxos e o cruzamento automaticamente deixa de ser contínuo. Seria interessante implementar esta proposta para modelos quânticos como o MIT e o modelo de Heisenberg, a fim de testar sua consistência. Outra possibilidade seria, por exemplo, considerar uma relação suplementar entre as derivadas segundas $\left. \frac{\partial^2 m_1}{\partial b^2} \right|_{b=0}$ e $\left. \frac{\partial^2 m_2}{\partial b'^2} \right|_{b'=0}$ relativas aos aglomerados mencionados. Todavia, é crucial verificar se o procedimento adotado conduz a resultados fisicamente corretos.

7.2 Capítulo II

Foi realizado um estudo do modelo ANNNI via o GRGM, adotando-se para aglomerados uma linha infinita de spins e uma

cadeia dupla. Obteve-se boas estimativas para a linha paramagnética crítica em 2d e 3d, comparadas às fornecidas pelos cálculos de campo médio, bem como estimativas para o expoente térmico em 2d. Alguma informação sobre fases moduladas a baixas temperaturas é obtida em 2d, certamente devido ao fato de um dos aglomerados ser bidimensional. O caráter de campo médio inerente do GRM conduz a um ponto de Lifshitz artificial em 2d. Argumenta-se que o presente cálculo é o mais exequível para o modelo ANNNI via o GRM, já que inexiste uma relação óbvia entre a magnetização por spin e a susceptibilidade para tiras mais largas. Além disso, é de se esperar uma convergência muito lenta, considerando-se resultados anteriores levando em conta uma tira tripla no limite correspondente ao modelo de Ising [73]

7.3 Capítulo III

São tratados diferentes sistemas de spins semi-infinitos. Supõe-se que as interações entre spins na superfície "livre" sejam descritas por modelos quânticos (MIT, Heisenberg spin-1/2 e 1) e no volume por um modelo clássico (Ising, spin-1/2 e 1). Além dos efeitos quânticos, considera-se a influência da diluição nas ligações da superfície na criticalidade do sistema. O formalismo variacional empregado, baseado na desigualdade de Bogoliubov, é de fácil implementação e conduz, na maioria dos casos a

resultados fisicamente corretos e quantitativamente satisfatórios comparados aos fornecidos por outros formalismos de campo médio e cálculos de GR, no que se refere a diagramas de fase. O mesmo formalismo pode ser a princípio aplicado a sistemas semi-infinitos com a superfície descrita por um modelo clássico e o volume por um modelo quântico, ou ambos descritos por modelos quânticos. Neste particular, o formalismo fornece, para um sistema semi-infinito descrito pelo modelo de Heisenberg anisotrópico, com anisotropias distintas na superfície (η_s) e no volume (η_v) um valor finito para a relação de acoplamentos J_s/J ($=1.81$) no limite $\eta_s = \eta_v = 0$ (a fase ferromagnética superficial desapareceria para valores menores desta razão). Este comportamento contrasta com os resultados de Selzer e Majlis [99], os quais sugerem a existência de um valor crítico $\eta_s = \eta_c$, positivo e finito, abaixo do qual a fase ferromagnética superficial inexistente. Por outro lado, argumentos baseados em um cálculo de grupo de renormalização no espaço real de Mariz et al. [100], levando em consideração o teorema de Mermin e Wagner [101] conduzem ao resultado $\Delta_c \rightarrow \infty$ apenas quando $\eta_s = \eta_v = 0$. O presente tratamento forçosamente viola o teorema de Mermin e Wagner devido ao seu caráter de campo médio. Isto explica porque se obtêm um valor finito para Δ_c no limite $\eta_s = \eta_v = 0$.

7.4 Capítulo IV

Foi estudada a criticalidade de um modelo de super-rede magnética constituída de interfaces periódicas de Heisenberg (acoplamento J_S , anisotropia $\eta \in [0,1]$) intercaladas por um meio estratificado de Ising (acoplamento J). Considera-se diversas aproximações (todas cálculos de campo médio) para tratar o modelo, levando-se em conta diferentes periodicidades. Especial atenção foi dada ao limite de uma única interface (periodicidade infinita) já que os diagramas de fase rapidamente se aproximam do obtido para este sistema quando o número de camadas intermediárias (Ising) aumenta. Diferentes perfis de magnetização são analisados, sendo sugeridos outros modelos de super-redes, incluindo sistemas de baixa dimensionalidade, também passíveis de serem tratados segundo o mesmo procedimento. É mencionada a necessidade de cálculos mais precisos (e.g. de GR) para verificar a validade dos resultados obtidos.

7.5 Capítulo V

O modelo de Ising com spins mistos ($1/2$ e 1) na rede quadrada é estudado mediante a teoria de escala de tamanho finito dentro do enfoque do formalismo da matriz transferencial. Diferentes interações extras entre spins pertencentes a uma mesma sub-rede são introduzidas, incluindo um termo de anisotropia local. O efeito de cada uma dessas interações é considerado separadamente, bem como seu efeito conjunto.

Obtêm-se temperaturas críticas e expoentes térmicos, que são comparados aos valores referentes a cálculos de séries [115] e de GR [113] no caso mais simples (i.e. sem interações extras), observando-se uma boa concordância com os resultados de séries. Em especial, para tiras (cadeias abertas) com a relação de escala $L/L'=6/4$, obtêm-se um valor para o expoente térmico em excelente concordância com o valor exato. Emprega-se tiras (cadeias abertas) com a relação de escala $L/L'=4/2$ para tratar os demais casos, verificando-se uma boa concordância com os resultados existentes na literatura, bem como novos resultados referentes aos diagramas de fases, não previamente discutidos.

Nos casos em que, além da interação entre primeiros vizinhos (spins mistos), se considera a interação entre segundos vizinhos mais próximos (spins do mesmo tipo, em uma das sub-redes), observa-se um "calombo" pronunciado no expoente térmico correspondente à linha paramagnética do diagrama de fases obtido (temperatura normalizada versus razão entre acoplamentos), quando as interações presentes são competitivas. Tendo em vista que geralmente tais "calombos" podem representar um novo comportamento crítico e que o presente estudo não contempla a natureza da(s) fase(s) na região de interações competitivas, é de grande interesse realizar um estudo mais pormenorizado do assunto. A teoria de escala de tamanho finito pode ser também empregada para determinar a existência de pontos tricríticos (se for este o

caso), introduzindo-se para tal a noção de comprimento de persistência [122-123], definido como:

$$\hat{\xi}_L = 1/\ln(|\lambda_1/\lambda_3|)$$

onde λ_1 e λ_3 são, respectivamente, o maior autovalor e o terceiro maior autovalor (em módulo) da matriz transferência correspondente à tira infinita com L spins na direção transversal. A localização do ponto tricrítico é dada pela interseção das curvas $\hat{\xi}_L/L$ versus temperatura, relativas a tiras distintas (diferentes valores de L). A análise dos expoentes críticos no presente contexto é feita através de um procedimento que permite determinar, além dos próprios expoentes, as direções de escala [123-124].

São também observadas discrepâncias em alguns casos em relação aos resultados de GRCM de Verona de Resende et.al. [116] (ausência de saturação da temperatura, quando o termo extra ao modelo (5.1.1) é a anisotropia local, presente em [116]; pequena reentrância no diagrama de fases comparada à obtida por Verona de Resende et.al. [116] usando os mesmos parâmetros, quando todas as interações propostas são consideradas). Menciona-se, finalmente, a dificuldade de se implementar adequadamente cálculos que evidenciem a eficácia do uso de cadeias com condições periódicas de contorno na direção transversal face ao elevado custo computacional envolvido na obtenção de autovalores das matrizes transferência.

APENDICE A

Neste apêndice são delineados os procedimentos empregados na diagonalização das matrizes envolvidas no estudo do modelo de Ising com campo transverso e diluição nas ligações.

A obtenção de autovalores e autovetores de hamiltonianos do MIT relativos a aglomerados com a simetria da rede (triângulos, quadrados e hexágonos em $2d$, respectivamente) pode ser feita através de dois procedimentos distintos. Um deles, menos elegante, mas todavia efetivo, consiste em diagonalizar numericamente as matrizes dos hamiltonianos correspondentes (de ordens 8, 16 e 64, respectivamente) através de rotinas padrões para diagonalização de matrizes simétricas, uma vez que os hamiltonianos são hermitianos. Existe um truque que facilita consideravelmente o cálculo numérico, ligado ao fato de que as matrizes consideradas são simétricas tanto em relação à diagonal principal quanto em relação à diagonal secundária. Neste caso, a transformação unitária U , definida por

$$U=U^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{matrix} \left[\begin{array}{cccccccc} +1 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & +1 \\ 0 & +1 & \dots & \dots & \dots & \dots & +1 & 0 \\ & & \dots & & & & & \\ & & & +1 & +1 & & & \\ & & & +1 & -1 & & & \\ & & & & \dots & & & \\ 0 & +1 & \dots & \dots & \dots & \dots & -1 & 0 \\ +1 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & -1 \end{array} \right] \end{matrix} \quad \begin{matrix} \text{(p par)} \\ \text{(A1)} \end{matrix}$$

permite transformar as matrizes originais em dois blocos com a metade da ordem da matriz inicial.

Uma vez diagonalizadas as matrizes assim transformadas, para um valor arbitrário não nulo de g ($g = \Omega/J$, onde Ω é o campo transverso e J o acoplamento entre spins primeiros vizinhos), é possível, por simples inspeção dos autovetores, estabelecer quais os blocos existentes e, com isto, tratar analiticamente o problema de diagonalização destes blocos. Neste caso, os coeficientes referentes aos autovetores, relativos à base de partida, podem ser obtidos através da matriz \mathcal{H} do problema original (agora escrita com g genérico) e usando-se a definição usual de autovetores, a saber

$$\mathcal{H} | \lambda \rangle = \lambda | \lambda \rangle \quad , \text{ onde } \mathcal{H} = \mathcal{H}(g) \text{ e } \lambda \equiv \lambda(g) \quad (A2)$$

É interessante escrever os coeficientes da representação (base) de partida em termos de λ , e normalizar os autovetores. Isto facilita consideravelmente os cálculos numéricos para obtenção dos valores críticos da temperatura e campo transverso, e respectivos expoentes críticos. Os autovalores $\lambda(g)$ são então as raízes características de cada bloco. Este é, essencialmente, um cálculo tipo "força bruta" e funciona bem quando as matrizes envolvidas podem ser bloco diagonalizadas, o que, quase sempre, corresponde à existência de simetrias básicas no problema. O emprego da teoria de grupos explora estas simetrias (no caso, o grupo pontual do triângulo, quadrado e hexágono, respectivamente) de uma maneira elegante. O uso de tabelas de caracteres permite obter uma "boa" representação de partida, que, se não bloco dia

gonaliza completamente as matrizes envólvidas (representação irredutível), pelo menos facilita consideravelmente os cálculos. Este procedimento funciona muito bem quando existem simetrias óbvias no problema. Já no caso em que se introduz diluição nas ligações, ocorre uma quebra de simetria que reduz drasticamente a eficácia do método. Nos casos considerados, todavia, a maior dificuldade de diagonalização se concentra nas configurações referentes ao caso puro, que são as mais simétricas. Para configurações com ausência de ligações (diluição) os hamiltonianos podem ser diagonalizados através do procedimento tipo "força bruta" exposto, o qual, conforme assinalado, permite obter expressões analíticas para autovalores e autovetores em termos dos parâmetros do hamiltoniano original. A obtenção destas expressões é particularmente conveniente quando se deseja calcular, por exemplo, o expoente ν_g , relativo ao campo transversal, cujo cálculo envolve derivadas em relação a g , as quais não puderam ser obtidas numericamente com boa precisão, especialmente para grandes aglomerados.

Nas tabelas A1 e A2 abaixo transcrevemos os autovalores e autovetores dos hamiltonianos do MIT referentes aos aglomerados triangular e quadrado ⁽²⁸⁾, respectivamente. Para aglomerados maiores as expressões se tornam numerosas e grandes e são omitidas neste apêndice.

TABELA A1 : Autovalores e autovetores relativos ao hamiltoniano

$$\mathcal{H} = - \sigma_1^z \sigma_2^z - \sigma_2^z \sigma_3^z - \sigma_3^z \sigma_1^z - g (\sigma_1^x + \sigma_2^x + \sigma_3^x)$$

$$|i\rangle = A_i^{-1/2} (a_{i1}|+++ \rangle + a_{i2}|+-+ \rangle + a_{i3}|++- \rangle + a_{i4}|-++ \rangle + a_{i5}|--+ \rangle + a_{i6}|+- - \rangle + a_{i7}|-+- \rangle + a_{i8}|--- \rangle); A_i = \sum a_{ij}^2$$

Tab.A1

i	Autovalor e_i	a_{i1}	a_{i2}	a_{i3}	a_{i4}	a_{i5}	a_{i6}	a_{i7}	a_{i8}
1	$-(1+g)+2(1-g+g^2)^{1/2}$	$-\frac{3g}{3+e_1}$	1	1	1	1	1	1	a_{i4}
2	$-(1+g)-2(1-g+g^2)^{1/2}$	$-\frac{3g}{3+e_2}$	1	1	1	1	1	1	a_{i4}
3	$-(1-g)+2(1+g+g^2)^{1/2}$	$-\frac{3g}{3+e_3}$	1	1	1	-1	-1	-1	$-a_{i4}$
4	$-(1-g)-2(1+g+g^2)^{1/2}$	$-\frac{3g}{3+e_4}$	1	1	1	-1	-1	-1	$-a_{i4}$
5	$1+g$	0	-2	1	1	1	1	-2	0
6	$1+g$	0	0	-1	1	-1	1	0	0
7	$1-g$	0	-2	1	1	-1	-1	2	0
8	$1-g$	0	0	1	-1	-1	1	0	0

Tabela A2: Autovalores e autovetores referentes ao Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = -\sigma_1^z \sigma_2^z - \sigma_2^z \sigma_3^z - \sigma_3^z \sigma_4^z - \sigma_4^z \sigma_1^z - g(\sigma_1^x + \sigma_2^x + \sigma_3^x + \sigma_4^x)$$

$$|i\rangle = (A_i)^{-1/2} \{ a_i |i::\rangle + PC |i::\rangle + d |i::\rangle + f |i::\rangle + PO |i::\rangle + M |i::\rangle \}$$

onde $A_i = a_i^2 + 4b_i^2 + 4c_i^2 + 2d_i^2 + 4f_i^2 + 4g_i^2 + h_i^2$, $i = 0, 1, 2, 3, 4, 5$

(a) Representação A1

i	Autovalor e_i	a_i	b_i	c_i	d_i	f_i	h_i
0	$-\{8[1 + g^2 + (1 + g^4)^{1/2}]\}^{1/2}$	1	$-(e_0 + 4)/4g$	$(e_0 + 4)/e_0$	$(e_0 + 4)/(e_0 - 4)$	$-b_0$	$-a_0$
1	$-\{8[1 + g^2 - (1 + g^4)^{1/2}]\}^{1/2}$	$-4g/(4 + e_1)$	1	$-4g/e_1$	$4g/(4 - e_1)$	$-b_1$	$-a_1$
2	$\{8[1 + g^2 + (1 + g^4)^{1/2}]\}^{1/2}$	$(e_2 - 4)/(e_2 + 4)$	$(4 - e_2)/4g$	$(e_2 - 4)/e_2$	1	$-b_2$	$-a_2$
3	$\{8[1 + g^2 - (1 + g^4)^{1/2}]\}^{1/2}$	$-4g/(4 + e_3)$	1	$-4g/e_3$	$4g/(4 - e_3)$	$-b_3$	$-a_3$
4	$-2\{(1 + g^2)^{1/2} + 1\}$	1	$-g/e_4$	0	0	$-b_4$	$-a_4$
5	$2\{(1 + g^2)^{1/2} - 1\}$	$-e_5/g$	1	0	0	$-b_5$	$-a_5$

(b) Representação B1

$$|6\rangle = \{ |i::\rangle + |i::\rangle - |i::\rangle - |i::\rangle \} \quad e_6 = 0$$

TAB. A2 (continuação)

(c) Representação B2

$$|i\rangle = A_i^{-1/2} \{ a_i |i\rangle + |i\rangle - |i\rangle - |i\rangle \} + b_i \{ |i\rangle + |i\rangle - |i\rangle - |i\rangle \} + c_i \{ |i\rangle - |i\rangle \}$$

onde $A_i = 4a_i^2 + 4b_i^2 + 2c_i^2$, $i = 7, 9$

i	Autovalor	e_i	a_i	b_i	c_i
7	0		1	1	0
8	$-2[(1+g^2)^{1/2} - 1]$		1	-1	$-c_i/g$
9	$2[(1+g^2)^{1/2} + 1]$		$-g/c_i$	g/c_i	1

(d) Representação E

$$|i\rangle = A_i^{-1/2} \{ a_{i1} |i\rangle + a_{i2} |i\rangle + a_{i3} |i\rangle + a_{i4} |i\rangle + a_{i5} |i\rangle + a_{i6} |i\rangle + a_{i7} |i\rangle$$

$$+ a_{i8} |i\rangle + a_{i9} |i\rangle + a_{i10} |i\rangle + a_{i11} |i\rangle + a_{i12} |i\rangle \}$$

onde $A_i = \sum_{j=1}^{12} a_{ij}^2$, $i = 10, 15$.

i	Autovalor	e_i	a_{i1}	a_{i2}	a_{i3}	a_{i4}	a_{i5}	a_{i6}	a_{i7}	a_{i8}	a_{i9}	a_{i10}	a_{i11}	a_{i12}
10	0		1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	0	0	0	0
11	0		-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	0	0	0	0
12 + 2g			1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	2	-2	0	0
13 + 2g			-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	0	0	-2	2
14 - 2g			1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-2	2	0	0
15 - 2g			-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	0	0	2	-2

APENDICE B

Neste Apêndice delineamos brevemente o cálculo da susceptibilidade magnética para o modelo ANNNI na cadeia dupla. A expressão correspondente para a cadeia linear já foi apresentada anteriormente [48].

Observamos inicialmente que a cadeia dupla (Figura B1) é, neste caso, topologicamente equivalente a uma estrutura tridimensional, com um comprimento infinito ao longo de uma direção, conforme mostrado na figura B2. Nesta figura, J_1 e J_2 representam, respectivamente, as constantes de acoplamento entre primeiros e segundos vizinhos mais próximos da cadeia dupla original (Figura B1).

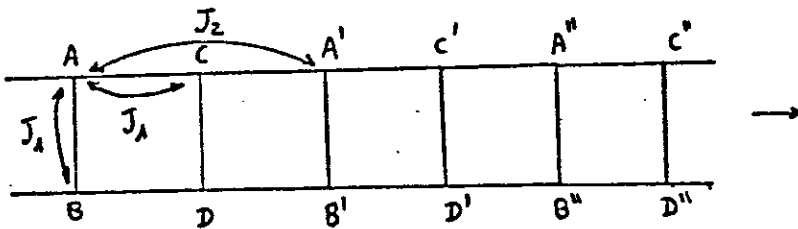


Figura B1: Cadeia dupla infinita (Modelo ANNNI).

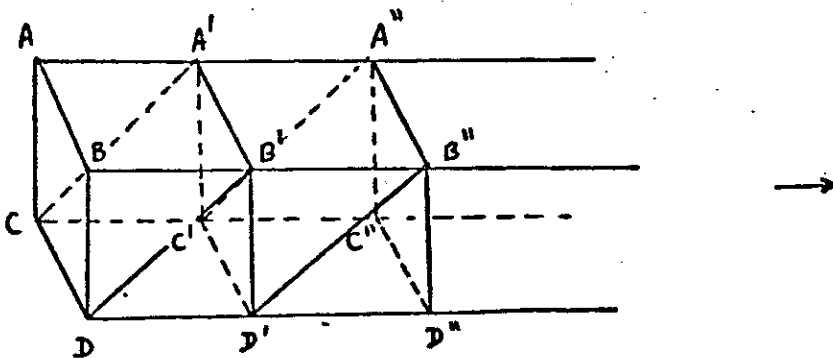


Figura B2: Estrutura tridimensional topologicamente equivalente à cadeia dupla acima

$$\langle S_i^A S_{i+r}^B \rangle = h_1^{-N} \text{Tr}(h^{N-r} V^A h^r V^{B,B}) \quad (0 \leq r < N \rightarrow \infty)$$

(função de autocorrelação e envolvendo pares de spins "A" e "B"), onde $h = R T R^{-1}$, $V^{A,B} = R S^{A,B} R^{-1}$ e R é a matriz que diagonaliza a matriz transferência T , cujo maior autovalor denotamos por h_1 . Expressões similares envolvendo spins "A", "B", "C" e "D" podem ser também definidas. Para $r < 0$, as funções de correlação apropriadas correspondentes, por exemplo, aos pares (A,B) e (A,C) são $\langle S_i^B S_{i+|r|}^A \rangle$ e $\langle S_i^C S_{i+|r|}^A \rangle$, respectivamente. O mesmo vale para as demais pares de spins.

A transformada de Fourier da susceptibilidade é obtida somando-se todas as contribuições devido às funções de correlação de pares de spin multiplicadas por $\exp(\pm i q d)$, onde q é a componente do vetor de onda ao longo da direção axial, d é a distância ao longo desta direção que na cadeia original (Figura B1) corresponde a r (Figura B2) e o sinal + (-) se refere a $r > 0$ ($r < 0$). Observe a correspondência:

$$r_{AA} = 0 \rightarrow d_{AA} = 0$$

$$r_{AA'} = 1 \rightarrow d_{AA'} = 2$$

$$r_{AC} = 0 \rightarrow d_{AC} = 1$$

$$r_{AC'} = 1 \rightarrow d_{AC'} = 3$$

$$r_{AD'} = 2 \rightarrow d_{AD'} = 5, \text{ etc.}$$

BIBLIOGRAFIA

- [1]-Moriya,T. - "Spin Fluctuations and an Unified Picture of Magnetism " - em "Electron Correlation and Magnetism in Narrow-Band Systems" , Ed. T. Moriya, Springer Series in Solid State Sciences vol. 29 (1981), 2.
- [2]-Valadares,E.C. ; Plascak,J.A. -"Diluted transverse Ising model within the mean field renormalization group"-Phys. Lett. 114 A (1986), 95.
- [3]-Valadares,E.C. - "O modelo de Ising com campo transverso segundo o grupo de renormalização de campo médio" - 37.^a Reunião Anual da SBPC - Belo Horizonte,MG (1985).
- [4]-Valadares,E.C. ;Plascak;J.A.-"Mean-field renormalization group approach for the axial next-nearest-neighbour Ising model" - J.Phys.A: Math.Gen. 20 (1987) , no prelo.
- [5]-Valadares,E.C. - "Estudo do modelo ANNNI via o grupo de renormalização de campo médio" - IX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, Poços de Caldas-MG, 1986.
- [6]-de Gennes;P.G. - "Collective motions of hydrogen bonds"- Solid State Comm. 1 (1963), 132.

- [7]-Stinchcombe, R.B. - "Ising model in a trasverse field: I. basic theory" - J.Phys.C:Solid State Phys. 6 (1973), 2459.
- [8]-Amati, D. ; Le Bellac, M.; Marchesini, G. - "Reggean field theory for $(O) > 1$ " - Nucl.Phys.B 112 (1976), 107.
- [9]-Fradkin, E.; Susskind, L. - "Order and disorder in gauge systems and magnets" - Phys.Rev. D 17 (1978) ,2637.
- [10]-Pfeuty, P. - "The One-Dimensional Ising Model with a transverse Field" - Ann.Phys. NY 57 (1970), 79.
- [11]-Lieb, E.H.; Schultz, T.; Mattis, D.C. - "Two soluble models of an antiferromagnetic chain" - Ann.Phys. NY 16 (1961), 407.
- [12]-Suzuki, M. - "Relationship between d-Dimensional Quantal Spin Systems and (d+1)-Dimensional Ising Systems"-Prog. Teor. Phys. 56 (1976), 1454.
- [13]-Harris, A.B. - "Upper bounds for the transition temperatures of generalized Ising models" - J.Phys.C:Solid State Phys. 7 (1974), 3082.
- [14]-Elliot, R.J. - "Phenomenological discussion of magnetic ordering in the heavy rare-earth metals " - Phys.Rev. 124

(1961), 346.

[15]-Hornreich, R.M. ; Luban,M. ; Shtrikman, S. - " Critical behavior at the onset of k-space instability on the line" - Phys. Rev. Lett. 35 (1975), 1678.

[16]-Salinas,S.R. -"Introduction to critical and multicritical phenomena" - VII Brazilian Symposium on theoretical physics ; Eds. Juan A.Mignaco e Ronald C. Shellard ,Rio de Janeiro (1982).

[17]-Fisher,P. ;Lebech, B. ; Meier,G. ; Rainford; B.D.;Vogt, O. - " Magnetic phase transitions of CeSb : I. Zero applied magnetic field" - J. Phys.C : Solid State Phys. 11 (1978), 345.

[18]-von Boehm, J. ; Bak, P. - "Devil's stairs and the commensurate-commensurate transitions in CeSb " -Phys.Rev. Lett. 42 (1979) , 122.

[19]-Becerra,C.C. ; Shapira, Y. ; Oliveira Jr. ,N.F. ;Chang, T.S. - "Lifshitz point in MnP" - Phys Rev. Lett. 44 (1980),1692.

[20]-Esaki,L. - "A bird's eye view on the evolution of semiconductor superlattices and quantum wells" - IEEE Journal of Quantum Electronics, QE 22 (1986), 1611.

- [21]-Kolodziejewski, L.A. ; Bonsett, T.C. ; Gunshor, R.L. ; Datta, S. ; Bylsma, R.B. ; Becker, W. M. ; Otsuka, N. - "Molecular beam epitaxy of diluted magnetic semiconductor ($Cd_{1-x}Mn_xTe$) superlattices"-Appl. Phys.Lett. 45 (1984), 440.
- [22]-Kolodziejewski, L.A. ; Gunshor, R.L. ; Otsuka, N. ; Gu, B.P.; Hefetz, Y. ; Nurmikko, A.V. - " Use of RHEED oscillations for the growth of 2d magnetic semiconductor superlattices (MnSe/ZnSe)" - J.Crystal Growth 81 (1987), 491.
- [23]-Jonker, B.T. ; Krebs, J.J. ; Prinz, G.A. ; Qadri, S.B. - "MBE growth of single crystal -Fe films on ZnSe (001) and (110)" - J. Crystal Growth 81 (1987), 524.
- [24]-Heinrich, B. ; Arrot, A.S. ; Cochran, J.F. ; Liu, C. ; Myrthe, K. - " Ferromagnetic resonance in ultrahigh vacuum : Effect of epitaxial overlayers on Fe" - J.Vac. Sci. Technol. A 4 (1986), 1376.
- [25]-Elliot, R.J. ; Saville, I.D. - " The dilute Ising model in a transverse field" - J.Phys.C : Solid State Phys. 7 (1974), 4293.
- [26]-Lage, E.J.S. , R.B. - D. Phil. Thesis Oxford University (1976).

- [27]-Stinchcombe, R.B. - " Diluted quantum transverse Ising model" - J. Phys. C :Solid State Phys. 14 (1981), L263.
- [28]-dos Santos, R.R. - "The pure and diluted quantum transverse Ising model " - J. Phys. C : Solid State Phys. 15 (1982), 3141.
- [29]-Saxena, V.K. - "Effect of dilution on phase transitions in a transverse Ising model " - Phys. Rev. B 27 (1983), 6884.
- [30]-Plascak, J.A. - "Thermodynamical properties of the diluted transverse Ising model with anisotropic coupling constants" - Phys.Status Solidi b 120 (1983), 215.
- [31]-Indekeu, J.O. ; Maritan, A. ;Stella, A.L. - "Renormalization Group recursions by mean-field approximations" - J. Phys. A: Math.Gen. 15 (1982), L291.
- [32]-Droz, M. ; Maritan, A. ; Stella, A.L. - "Mean field renormalization group for disordered systems" -Phys.Lett.92A (1982), 287.
- [33]-Plascak, J.A. - " Mean field renormalization group for the disordered transverse Ising model" -J.Phys.A :Math. Gen. 17 (1984), L279.

- [34]-Niemeijer, Th. ; von Leeuwen, J.M.J. - "Phase Transitions and Critical Phenomena" vol. 6, Eds. C. Domb e M. S. Green (New York:Academic Press) (1985), 425.
- [35]-Yeomans, J.M. ; Stinchcombe,R.B. - "Critical properties of site- and bond-diluted Ising ferromagnets" - J.Phys. C : Solid State Phys. 12 (1979) , 347.
- [36]-Penson;K.A. ; Jullien, R. ; Pfeuty, P. - "Zero-temperature renormalization-group method for quantum systems. III. Ising model in a transverse field in two dimensions" - Phys.Rev. B 19 (1979), 4653.
- [37]-Wannier, G.H. - "The statistical problem in cooperative phenomena" - Rev. Mod. Phys. 17 (1945), 550.
- [38]-Yanase,A. ;Takehige Y. e Suzuki,M. - "Critical Behaviour of the Susceptibility of the Ising Model with a Transverse Field" - J.Phys. Soc. Japan 41 (1976), 1108.
- [39]-Yanase,A. - "Correlation Index of the Ising Model with a transverse field" - J.Phys.Soc. Japan 42 (1977),1816.
- [40]-Sykes, M.F. ; Essam, J.W. - "Exact critical percolation probabilities for site and bond problems in two dimensions" - J. Math. Phys. 5 (1964), 117.

- [411]-Dunn,A.G. ; Essam, J.W. ; Ritchie, D.S. - " Series expansion study of the pair connectedness in bond percolation " - J.Phys. C : Solid State Phys. 8 (1975),4219.
- [42]-Pfeuty, P. ; Elliot, R.J. - " The Ising model with a transverse field - II. ground state properties " - J. Phys. C: Solid State Phys. 4 (1971), 2370.
- [43]-den Nijs, M.P.M. - " A relation between the temperature exponents of the eight-vertex and q-state Potts model"- J. Phys. A: Math. Gen. 12 (1979) ,1857.
- [44]-de Alcantara Bonfim, O.F. ; SA Barreto, F.C. ; Marco A. de Moura - " Two-step renormalisation group for Ising systems " - J. Phys. C : Solid State Phys. 17 (1984), L599.
- [45]-Domb,C. -em "Phase Transitions and Critical Phenomena", vol. 3 , Eds. C. Domb e M.S. Green (London : Academic) (1974).
- [46]-Le Guillou,J.C. ;Zinn-Justin ,J. -" Critical exponents from field theory" - Phys. Rev. B 21 (1980), 3976.
- [47]-Sykes, M.F. ;Gaunt,D.S. ; Glen, M. - "Percolation processes in three dimensions" - J. Phys. A: Math. Gen. 9

(1976), 1705.

- [48]-Stephenson, J. - "Two one-dimensional Ising models with disorder points" - Can. J. Phys. 48 (1970) , 1724.
- [49]-Hornreich, R.M. - " The Lifshitz point : phase diagrams and critical behavior " - J. Magn. Mater. 15-18 (1980), 387.
- [50]-Redner, S. ; Stanley, H.E. - "Helical order and its onset at the Lifshitz point" - Phys. Rev. B 16 (1977), 4901.
- [51]-Oitmaa, J. - "A high temperature series study of the ANNNI model in two and three dimensions" - J. Phys. A : Math. Gen. 18 (1985) , 365.
- [52]-Selke, W. - " Monte Carlo calculations near a uniaxial Lifshitz point" - Z. Phys. B 29 (1978), 133.
- [53]-Fisher, M.E. ; Selke, W. - "Infinitely many commensurate phases in a simple Ising model " - Phys. Rev. Lett. 44 (1980), 1502.
- [54]-Selke, W. ; Fisher, M.E. - " Monte Carlo study of the spatially modulated phase in an Ising model"- Phys. Rev. B 20 (1979) , 257.

- [55]-Szpilka, A.M. ;Fisher, M.E. - "Domain-wall interactions and spatially modulated phases" - Phys. Rev. Lett. 57 (1986), 1044.
- [56]-Bak,P. ;von Boem,J. -"Ising model with solitons,phasons and "the devil's staircase"" - Phys. Rev. B 21 (1980), 5297.
- [57]-Yokoi, C.S.O. ; Coutinho Filho, M.D. ; Salinas, S.R. - "Ising model with competing axial interactions in the presence of a field: a mean-field treatment" -Phys.Rev. B 24 (1981) ,4047.
- [58]-Bak,P. - "Commensurate phases,incommensurate phases and the devil's staircase" - Rep.Prog.Phys. 45 (1982), 587.
- [59]-Selke, W. ;Duxbury,P.M. - "The mean field theory of the three-dimensional ANNNI model" -Z.Phys. B 57 (1984),49.
- [60]-Selke, W.; Fisher, M.E. - "Two-dimensional Ising models with competing interactions - a Monte Carlo study" - Z. Phys. B 40 (1980) , 71.
- [61]-Rujan, P.- "Critical Behavior of two-dimensional models with spacially modulated phases : analytic results" - Phys. Rev. B 24 (1981), 6620.

- [62]-Peschel,I. ;Emery, V.J. - "Calculation of spin correlations in two-dimensional Ising systems from one-dimensional kinetic models" - Z.Phys. B 43 (1981), 241.
- [63]-Villain,J. ;Bak, P. -"Two-dimensional Ising models with competing interactions: floating phase,walls and dislocations" - J. Phys. (Paris) 42 (1981) ,657.
- [64]-Selke, W. - "Finite-size behaviour of the two-dimensional ANNNI model" - Z. Phys. B 43 (1981), 335.
- [65]-Beale,P.D. ; Duxbury, P.M. ; Yeomans, J. - "Finite-size scaling of two-dimensional axial next-nearest-neighbor Ising models " - Phys. Rev. B 31 ,7166.
- [66]-Finel,A. ; de Fontaine,D. - "The two-dimensional ANNNI model in the CVM approximation " - J. Stat. Phys. 43 (1986), 645.
- [67]-Marsh, J.S. - " Ising-chain statistics"- Phys. Rev. 145 (1966),251.
- [68]-Kubo,R. - "Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes I. General Theory and Simple Applications to Magnetic and Conduction Problems" - J. Phys. Soc. of Japan 12 (1957); 570.

- [69]-Scalapino, D.J. ; Imry, Y. ; Picus, P. - " Generalized Ginzburg-Landau theory of pseudo-one-dimensional systems" - Phys. Rev. B 11 (1975) , 2042.
- [70]-Pires, A.S.T. ; Silva, N.P. ; Franco, B.J.O. - " A linear chain approximation to the Ising model with competing interactions" - Phys. Status Solidi (b) 114 (1982), K63.
- [71]-Tomé, Tânia; Salinas; S.R. - " New mean-field calculations for the phase diagram of the ANNNI model " - Rev. Bras. Fis. 17 (1987), 39.
- [72]-Kaski, K. ; Selke, W. - "Monte Carlo coarse graining for the three-dimensional axial next-nearest-neighbor Ising model" - Phys. Rev. B 31 (1985), 3128.
- [73]-Plascak, J.A. ; Silva, N.P. - "Mean-field renormalization group study of the anisotropic Ising model" - J. Phys. C: Solid State Phys. 19 (1986) ,4493.
- [74]-Slotte, P.A. - "Mean-field renormalization group transformations for the triangular Ising antiferromagnet" - J. Phys. A: Math. Gen. 17 (1984), L85.
- [75]-Plascak, J.A. ; Sá Barreto, F.C. - " Critical properties of the Ashkin-Teller model from the mean-field renormalization group approach" - J. Phys. A : Math. Gen. 19

(1986), 2195.

- [761]-Pesch, W. ; Kroemer;J. - " Transfer matrix analysis of the two-dimensional ANNNI model" - Z.Phys. B 59 (1985), 317.
- [771]-Binder, K. - em "Phase Transitions and Critical Phenomena", vol. 8 , Eds. C. Domb e J.L. Lebowitz (London: Academic) (1983).
- [781]-Diehl ,H.W. - "Field-theoretical Approach to Critical Behaviour at Surfaces" - em "Phase Transitions and Critical Phenomena",vol.10, Eds. C.Domb e J.L.Lebowitz (1986),76.
- [791]-Tsallis,C. - "Influence of Dilution and Nature of the Interaction on Surface and Interface Magnetism" - em "Magnetic Properties of Low-Dimensional Systems", Ed. L.M. Falicov e J.L. Moran-López (Springer-Verlag 1986) ,98.
- [801]-Binder,K. ; Hohenberg,P.C. - "Surface effects on magnetic phase transitions" - Phys.Rev B 9 (1974), 2194.
- [811]-Tamura,I. ; Sarmiento,E.F. ; Fittipalti;I.P. ;Kaneyoshi, T. - "Magnetic properties of the Ising model with a free surface" - Phys. Stat. SSol. (b) 118 (1983), 409.

- [82]-Burkhard,T.W. ;Eisenriegler,E. - "Renormalization-group approach to the Ising model with a free surface" -Phys. Rev. B 16 (1977), 3213.
- [83]-ibid.- "Renormalization-group approach to surface critical behavior in the Ising model" -Phys.Rev.B 17 (1978), 318.
- [84]-Binder,K. ; Landau,D.P. - " Multicritical phenomena at surfaces" - Surf.Sci. 61 (1976), 577.
- [85]-ibid. - "Crossover scaling and critical behavior at the "surface-bulk" multicritical point " - Phys.Rev. Lett. 52 (1984), 318.
- [86]-Cottam, M.G.- "Surface excitations for the Ising model in a transverse field" - Solid State Comm. 45 (1983), 771.
- [87]-Tamura, I. ;Sarmiento, E. F. ; Kaneyoshi, T. - " Surface magnetism of a transverse Ising model with a disordered surface" - J.Phys.C: Solid State Phys. 17 (1984), 3207.
- [88]-Mills,D.L. - "Surface Effects in Magnetic Crystals near the Ordering Temperature" - Phys.Rev B 3 (1971), 3887.
- [89a] - Costa,U.M.S. ; Tsallis,C. e Sarmiento,E.F. - "Criticality of the semi-infinite Potts ferromagnet: a renormalisation group approach" - J.Phys. C:Solid State Phys. 18 (1985),5749.

- [89b]-Costa,U.M.S.;Mariz,A.M e Tsallis,C. - "Anisotropic Heisenberg surface on semi-infinite Ising ferromagnet: renormalization group treatment" - J. Physique Lett. 16 (1985), L851.
- [90]-Néel, L. - " Anisotropie magnétique superficielle et surstructures d'orientation" -J.Phys. Radium 15 (1954), 225.
- [91]-Takayama,H. ;Bohnen,K. -P. ;Fulde,P. -"Magnetic surface anisotropy of transition metals" -Phys.Rev.B 14 (1976), 2287.
- [92]-Gradmann,V. - "Ferromagnetism near surfaces and in thin films" - Appl. Phys.(Germany) 3 (1974), 161.
- [93]-Falk ,H. -"Inequalities of J.W.Gibbs" - Am. J. Phys. 38 (1970), 854.
- [94]-Ferreira,L.G. ;Salinas,S.R. ;Oliveira,M.J. - " On a variational procedure for obtaining the thermodynamic properties of statistical models" - Phys.Stat. Sol. (b) 83 (1977), 229.
- [95]-Plascak,J.A.;Salinas,S.R. - "Tunnelling model for quasi-one-dimensional hydrogen-bonded crystals" - Phys.Stat. Sol. (b) 113 (1982), 367.

- [96]-Plascak,J.A.- "Critical behaviour at surfaces:variational approach for the free energy " -J.Phys.A: Math.Gen. 17 (1984), 1919.
- [97]-De Carvalho,A.V. ; Salinas,S.R. - " Theory of the phase transition in the quasi-one-dimensional hydrogen-bonded ferroelectric crystal $PbHPO_4$ " - J.Phys.Soc.of Japan 44 (1978), 238.
- [98]-Kaneyoshi,T. ;Tamura,I. Sarmiento, E.F. - "Surface magnetic properties of the Ising model with a diluted surface" - Phys.Rev. B 28 (1983), 6491.
- [99]-Selzer,S. ; Majlis,N. - " Effects of surface exchange anisotropy in Heisenberg ferromagnetic insulators " - Phys.Rev B 27 (1983), 544.
- [100]-Mariz, A.M. ;Costa,U.M.S. e Tsallis,C. - "Influence of the Interaction Anisotropy on the Appearance of Surface Magnetism" - Europhys. Lett. 3 (1987), 27.
- [101]-Mermin, N.D. e Wagner,H. - "Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional Isotropic Heisenberg Models" -Phys.Rev. Lett. 17 (1966), 1133.
- [102]-Kwo,J.;Gyory,E.M. ;McWhan,D.B. ;Hong,M. ;DiSalvo,F.J.;

Vettier,C.;Bower,J.E. - " Magnetic and structural properties of single-crystal rare-earth Gd-Y superlattices - Phys. Rev. Lett. 55 (1985) , 1402.

[103]-Hinchey,L.L. ;Mills,D.L. - "Magnetic properties of superlattices formed from ferromagnetic and antiferromagnetic materials" - Phys.Rev B 33 (1986), 3329.

[104]-Camley, R.E. ;Rahman,T.S. ;Mills,D.L.- "Magnetic excitations in layered media :spin waves and the lightscattering spectrum" - Phys.Rev. B 27 (1983), 261.

[105]-Grunberg, P. ; Mika,K.- "Magnetostatic spin-wave modes of a ferromagnetic multilayer" -Phys.Rev B 27 (1983) , 2955.

[106]-Albuquerque,E.L. ;Fulco,P.;Sarmiento, E.F. ;Tilley,D.R. -" Spin waves in a magnetic superlattice " - Solid State Comm. 58 (1986), 41.

[107]-dos Santos;R.J.V. ;Sarmiento,E.F. ; Tsallis,C. ; Costa, U.M.S. - " Anisotropic Heisenberg interface between Ising bulk ferromagnets : A renormalization-group approach " - Phys. Rev. B 33 (1986), 1741. Veja também ERRATA : Phys.Rev. B 34 (1986), 2008.

[108]-Sarmiento,E.F. ;Tsallis,C. -"Surface ferro (or antifer-

ro) magnetism in bulk antiferro (or ferro) magnets:Renormalization Group Analysis" - J. Physique 47 (1986), 1115.

[109]-Néel, L. - "Propriétés magnétiques des ferrites;ferri-magnétisme et antiferromagnétisme " -Ann. Phys.(Paris) 3 (1948), 137.

[110]-Iwashita,T. ;UryuN. - "Effects of the uniaxial anisotropy on the Curie temperature of the anisotropic Heisenberg ferromagnet with mixed spins $S=1/2$ and $S=1$ " - Phys. Lett. 106 A (1984), 432.

[111]-ibid.- "The effect of the biquadratic exchange interaction on the Curie temperature of the mixed Ising ferro magnet" - Phys. Lett. 96 A (1983), 311.

[112]-Drillon,M. ;Coronado,E. ;Beltran,D ;Georges,R.- "Classical treatment of a Heisenberg linear chain with spin alteration;Application to the $MnNi(EDTA).6H_2O$ complex" - Chem. Phys. 79 (1983), 449.

[113]-Schofield, S.L. ;Bowers; R.G. - "Renormalization group calculations on a mixed-spin system in two dimensions" - J. Phys. A : Math. Gen. 13 (1980), 3697.

[114]-Iwashita,T. ;Uryu N. - " The Curie temperature of the

two-dimensional quadratic Ising ferromagnet with mixed spins of $S=1/2$ and $S=1$ " - J. Phys. Soc. of Japan 53 (1984), 721.

[115]-Yousif, B.Y. ; Bowers, R.G. - "High-temperature series expansion studies of mixed spin- $1/2$ -spin- S Ising models" - J. Phys. A : Math. Gen. 17 (1984), 3389.

[116]-Verona de Resende,H.F. ;Sa Barreto,F.C. ;Plascak,J.A - " Renormalization group treatment of the mixed-spin system in d-dimensional lattices" - a ser publicado.

[117]-Nightingale,M.P. - "Scaling theory and finite systems" -Physica 83 A (1976), 561.

[118]-Barber,M.N. - em "Phase Transitions and Critical Phenomena" - vol. 8 ,Eds. C. Domb e J.Lebowitz (Academic Press,New York).

[119]-Domb, C. - " On the Theory of Cooperative Phenomena in Crystals" - Adv. in Phys. 9 (1960), 149.

[120]-Onsager, L. - " Crystal Statistics: A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition " - Phys. Rev. 65 (1944), 117.

[121]-Slotte,P.A. -"Lenght Scaling in MFRG"- a ser publicado.

- [122]-Rikvoldt, P.A.; Kinzel, W.; Gunton, J.D. e Kaski, K.
-"Finite-size-scaling study of a two-dimensional lattice-gas model with a tricritical point" - Phys.Rev. B 28 (1983),2686.
- [123]-Beale, P.D. - "Finite-size-scaling at an Ising tricritical point" - J. Phys. A: Math.Gen. 17 (1984), L335.
- [124]-Barber, M.N. - "Phenomenological renormalization and scaling fields" - Phys. Rev B 27 (1983), 5879.