

IVAN FREDERICO LUPIANO DIAS

TRATAMENTO VARIACIONAL DO MODELO XY INERCIAL
CLÁSSICO E QUÂNTICO UNI- E BI-DIMENSIONAL

Tese de

MESTRADO

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS

Rio de Janeiro

-1981-

A Arcênio e Dercy

A Mārcio

A Clāudia

AGRADECIMENTOS

- ao Prof. Constantino Tsallis pelo conhecimento transmitido e dedicada orientação;

- a Darly M.H. da Silva, Evaldo M.F. Curado, Sydney F. Machado, Aglaé C.N. Magalhães, Raimundo A.T. de Lima e Luciano R. da Silva pelo incentivo e pelas proveitosas discussões;

- à Helena S. Ferreira pelo eficiente trabalho de datilografia;

- à Darly M.H. da Silva pelo paciente trabalho de revisão;

- aos colegas e amigos do C.B.P.F. pelo apoio e colaboração;

- aos colegas e amigos da F.U.E.L.;

- a F.U.E.L.

- ao C.B.P.F.

RESUMO

Utiliza-se o Método Variacional para o estudo teórico de sistemas magnéticos uni e bidimensionais descritos pelo Hamiltoniano XY para spins com momento de inércia e interações entre primeiros vizinhos, considerando-se diversos tipos de anisotropia.

Analisa-se, principalmente, a influência do tratamento clássico ou quântico e da dimensionalidade sobre a existência de ordem de longo e de curto alcance e sobre a função de correlações a susceptibilidade e o espectro de m̃agnons. Compara-se os resultados obtidos neste trabalho com aqueles obtidos anteriormente para sistemas clássicos bidimensionais. Através de um amplo espectro de resultados, verificamos que o tratamento variacional constitui-se numa satisfatória descrição de transições de fase do tipo Thouless-Kosterlitz.

SUMMARY

The Variational Method is used for the theoretical study of one- and two-dimensional magnetic systems described by the first neighbour XY Hamiltonian for inertial spins, by considering several kinds of anisotropy.

We mainly analyze the influence of the quantum approach (compared to the classical one) and of the dimensionality on the existence of long and short range order of quantities like, functions of correlations, the susceptibility and the magnon spectrum. The results are compared with previous ones obtained in two-dimensional classic systems. Through of a board spectrum of results we verify that the variational treatment of phase transitions of the Thouless-Kosterlitz type.

SUMÁRIO

	<u>Pág.</u>
AGRADECIMENTOS	iii
RESUMO	iv
SUMMARY	v
LISTA DE FIGURAS	x
LISTA DE TABELAS	xi
INTRODUÇÃO	1
<u>CAPÍTULO I</u> - SISTEMAS MAGNÉTICOS	6
1.1 - MODELOS DE SISTEMAS MAGNÉTICOS	6
1.2 - SISTEMAS A BAIXAS DIMENSÕES	9
1.3 - MATERIAIS	11
<u>CAPÍTULO II</u> - ORDEM EM SISTEMAS A BAIXAS DIMENSÕES	14
2.1 - SISTEMAS UNIDIMENSIONAIS	14
2.2 - SISTEMAS BIDIMENSIONAIS	15
<u>CAPÍTULO III</u> - O MÉTODO VARIACIONAL E O MODELO XY	18
<u>CAPÍTULO IV</u> - MODELO XY UNIDIMENSIONAL PARA SPINS COM MOMENTO DE INÉRCIA	23
4.1 - CASO CLÁSSICO	23
4.1.1 - Isotrópico No Espaço dos Spins	23
4.1.1.1 - Modelo	23
4.1.1.2 - Tratamento	24
4.1.1.3 - Ordem de Longo Alcance	29
4.1.1.4 - Espectro de Māgnons	30
4.1.1.5 - Função de Correlações	30
4.1.1.6 - Susceptibilidade	31
4.1.2 - Sistema em Presença de um Campo Magnético Externo	32

4.1.2.1 - Modelo	32
4.1.2.2 - Espectro de M \ddot{a} gnons	33
4.1.2.3 - Ordem de Longo Alcance e Suscepti- bilidade	34
4.1.2.4 - Fun \tilde{c} o de Correla \tilde{c} oes	35
4.1.3 - Anisotropia Local no Espaço dos Spins	37
4.1.3.1 - Modelo	37
4.1.3.2 - Espectro de M \ddot{a} gnons	38
4.1.3.3 - Ordem de Longo Alcance, Fun \tilde{c} o de Correla \tilde{c} oes e Susceptibilidade....	38
4.1.4 - Anisotropia de Acoplamento no Espaço dos Spins	40
4.1.4.1 - Modelo	40
4.1.4.2 - Ordem de Longo Alcance, Espectro de M \ddot{a} gnons, Fun \tilde{c} o de Correla \tilde{c} oes e Susceptibilidade	41
4.2 - CASO QU \ddot{A} NTICO	41
4.2.1 - Isotr \ddot{o} pico no Espaço dos Spins	41
4.2.1.1 - Modelo	42
4.2.1.2 - Tratamento	42
4.2.1.3 - Ordem de Longo Alcance	47
4.2.1.4 - Espectro de M \ddot{a} gnons	48
4.2.1.5 - Fun \tilde{c} o de Correla \tilde{c} oes	48
4.2.1.6 - Susceptibilidade	50
4.2.2 - Sistema em Presen \tilde{c} a de um Campo Magn \ddot{e} tico Externo	52
4.2.2.1 - Modelo	52
4.2.2.2 - Ordem de Longo Alcance e Suscepti- bilidade	53
4.2.2.3 - Fun \tilde{c} o de Correla \tilde{c} oes	55
4.2.2.4 - Espectro de M \ddot{a} gnons	57
4.2.3 - Anisotropia Local no Espaço dos Spins	57
4.2.3.1 - Modelo	57
4.2.3.2 - Ordem de Longo Alcance, Fun \tilde{c} o de Correla \tilde{c} oes e Susceptibilidade....	57
4.2.3.3 - Espectro de M \ddot{a} gnons	59

4.2.4 - Anisotropia de Acoplamento no Espaço dos Spins	59
4.2.4.1 - Modelo	59
4.2.4.2 - Ordem de Longo Alcance, Espectro de Māgnons, Função de Correlações e Susceptibilidade	59
<u>CAPÍTULO V</u> - MODELO XY BIDIMENSIONAL PARA SPINS COM MOMENTO DE INÉRCIA	60
5.1 - ISOTRÓPICO NO ESPAÇO DOS SPINS	60
5.1.1 - Modelo	60
5.1.2 - Tratamento	61
5.1.3 - Ordem de Longo Alcance	69
5.1.4 - Espectro de Māgnons	69
5.1.5 - Função de Correlações	69
5.1.6 - Susceptibilidade	71
5.2 - SISTEMA EM PRESENÇA DE UM CAMPO MAGNÉTICO EXTERNO..	72
5.2.1 - Modelo	72
5.2.2 - Espectro de Māgnons	72
5.2.3 - Ordem de Longo Alcance e Susceptibilidade..	73
5.2.4 - Função de Correlações	76
5.3 - ANISOTROPIA LOCAL NO ESPAÇO DOS SPINS	77
5.3.1 - Modelo	77
5.3.2 - Ordem de Longo Alcance e Espectro de Māgnons	78
5.3.3 - Função de Correlações e Susceptibilidade...	79
5.4 - ANISOTROPIA DE ACOPLAMENTO NO ESPAÇO DOS SPINS	80
5.4.1 - Modelo	80
5.4.2 - Ordem de Longo Alcance, Espectro de Māgnons, Função de Correlações e Susceptibilidade...	81
<u>CAPÍTULO VI</u> - CONCLUSÃO	82
APÊNDICE A	88
APÊNDICE B	89

APÉNDICE C	90
APÉNDICE D	93
APÉNDICE E	96
APÉNDICE F	89
APÉNDICE G	100
BIBLIOGRAFIA	103

LISTA DE FIGURAS

<u>Fig.</u>	<u>Pág.</u>
1.2.1 - Calores específicos magnéticos do modelo de Ising com $s = 1/2$ para $d=1,2$ e 3 comparados com o resultado obtido pela Teoria de Campo Molecular	10
4.1.1.1.1 - Definição gráfica das variáveis angulares do modelo	24
4.1.1.2.2 - Evolução térmica do coeficiente de renormalização	28
4.1.1.2.3 - Evolução térmica de L	29
4.1.2.3.4 - Evolução térmica da magnetização	35
4.1.3.3.6 - Susceptibilidade isotérmica como função da temperatura..	39
4.2.1.2.7 - Comportamento do coeficiente de renormalização a $t=0$ em relação aos parâmetros do sistema	46
4.2.1.2.8 - Comportamento do coeficiente de renormalização com a temperatura	47
5.1.1.1 - Definição gráfica das variáveis do modelo	61
5.1.2.2 - Dependência do coeficiente de renormalização com os parâmetros do sistema	66
5.1.2.3 - Dependência térmica do coeficiente de renormalização ...	66
5.1.2.4 - Comportamento térmico de L	68
5.2.3.5 - Dependência da magnetização com o campo a t fixa	75
5.2.3.6 - Comportamento da magnetização com a temperatura na região $0 \leq t < h \ll 1$	75
5.2.3.7 - Comportamento da magnetização com a temperatura na região $0 < h < t \ll 1$	75
5.2.3.8 - Comportamento da magnetização com a temperatura	76

LISTA DE TABELAS

<u>Tab.</u>	<u>Pág.</u>
6.1 - Resultados para o cálculo a <u>uma dimensão</u> (Cap. IV) onde foram consideradas as aproximações $t \approx 0$, $q \rightarrow 0$, $R/a \rightarrow \infty$. As equações com asterisco são aquelas que contêm uma restrição que impede a solução ($h, \alpha = 0$; $m = 0$)	83-84
6.2 - Resultados para o cálculo a duas dimensões (Tsallis ⁽¹⁶⁾ e Cap. V) onde foram consideradas as aproximações $t \approx 0$, $q \rightarrow 0$ e $R/a \rightarrow \infty$	85-86

INTRODUÇÃO

HISTÓRICO

Um estudo mais sistemático de materiais magnéticos começa com o trabalho de Pierre Curie, em 1895, intitulado: "Propriedades Magnéticas dos Corpos a Diversas Temperaturas". Dividindo os corpos segundo as suas propriedades em diamagnéticos, paramagnéticos e ferromagnéticos a questão que se levantava então era sobre a natureza dos fenômenos que levavam a tal classificação. Faraday já tinha mostrado que a altas temperaturas o ferro perdia suas propriedades ferromagnéticas tornando-se paramagnético. Pesquisando uma série de substâncias Pierre Curie obtem que a susceptibilidade dos corpos diamagnéticos é independente da temperatura (pelo menos no intervalo considerado - até aproximadamente 1400°C) contrariamente aos corpos paramagnéticos que apresentam susceptibilidade inversamente proporcional a ela. Ele conclui que estes resultados favorecem às teorias que atribuem causas de natureza diferente ao magnetismo e ao diamagnetismo e que, ao contrário, as propriedades dos corpos ferromagnéticos e as dos corpos paramagnéticos estão intimamente ligadas. Esta transformação ferro-para foi o primeiro exemplo de um novo tipo de transição de fase que, entretanto, não foi interpretado como tal.

A primeira teoria a dar um tratamento microscópico a

um fenômeno de orientação e a ligá-lo a uma grandeza macroscópica foi proposta por Langevin em 1905 e se preocupava com o paramagnetismo que possuem certas substâncias constituídas de átomos portadores de momento magnético permanente e considerados independentes entre si. No limite apropriado (altas temperaturas) a fórmula de Langevin para a magnetização fica em perfeito acordo com os resultados experimentais de Pierre Curie relativos aos corpos paramagnéticos. Para os corpos ferromagnéticos, entretanto, a situação torna-se mais complexa por considerar as interações entre moléculas e interpretar, em particular, a existência de magnetização espontânea abaixo de uma certa temperatura T_c chamada temperatura de Curie.

P. Weiss em 1906 cria uma teoria que leva em conta as interações ferromagnéticas de uma maneira bastante simples: dado um momento magnético particular, sobre ele atuam dois campos, um campo magnético externo H agindo sobre a substância e um outro H_m produzido por todos os outros momentos magnéticos. Este campo interno Weiss batiza de Campo Molecular e supondo-o proporcional à magnetização da substância consegue calcular (em função de um parâmetro fenomenológico) a temperatura de Curie e a susceptibilidade paramagnética. O ferromagnetismo e o paramagnetismo já eram considerados dois estados distintos da mesma forma que o estado líquido e o estado gasoso (estudados fenomenologicamente por Van der Waals). Porém, como a passagem do ferromagnetismo ao paramagnetismo não se acompanhava de qualquer descontinuidade não era bem claro como tal transformação poderia ser uma mudança de fase. Começaram a surgir, entretanto, uma série de fenômenos apresentando o mesmo tipo de dificuldades como, por exemplo: no estudo das estruturas ordenadas em ligas

metálicas em que se tentava calcular o grau de ordem de uma liga (por exemplo o latão β CuZn) em função da temperatura, no estudo das propriedades do Hélio suprafluido, no estudo da supercondutividade e outros mais. Algumas tentativas no sentido de generalizar o conceito de mudança de fase, como a de Ehrenfest, foram feitas e levaram a um progresso substancial, porém foi com a noção de parâmetro de ordem, introduzida em 1937 por L. D. Landau⁽¹⁾, que ocorreu um avanço considerável no estudo das transições. Landau associava à passagem de uma fase à outra uma mudança nas propriedades de simetria e à esta mudança vinculou a noção de parâmetro de ordem. Esta grandeza física de caráter extensivo é nula na fase mais simétrica e não nula na fase menos simétrica. É possível classificar (ver Boccara⁽²⁾) as transições de duas maneiras:

- 1 - transições sem parâmetro de ordem;
- 2 - transições com parâmetro de ordem
 - se o parâmetro de ordem é descontínuo no ponto de transição, diz-se que a transição é de 1^a ordem
 - se o parâmetro de ordem é contínuo diz-se que a transição é de 2^a ordem.

Landau supôs que a energia livre fosse uma função analítica do parâmetro de ordem e da temperatura na vizinhança do ponto de transição. Esta hipótese levou conseqüentemente à anulação do parâmetro de ordem como $(T_0 - T)^{1/2}$ (sendo T_0 uma temperatura de transição qualquer), à descontinuidade do calor específico e à divergência como $(T - T_0)^{-1}$ da susceptibilidade relativa ao parâmetro de ordem, resultados estes idênticos aos obtidos pela teoria de Campo Molecular. A teoria de Landau trouxe

grandes contribuições, entretanto o aperfeiçoamento progressivo das teorias microscópicas de transições levou-nos a problemas que implicaram numa revisão de nossa compreensão destes fenômenos. As contradições com os resultados obtidos segundo a teoria de Landau manifestaram-se quando estudos de modelos a baixas dimensões evidenciaram isto, pela primeira vez, em 1944 no cálculo de Onsager⁽³⁾ da função de partição do modelo de Ising para uma rede quadrada, ferromagnética, com interações entre primeiros vizinhos e spin 1/2. Onsager obteve uma divergência logarítmica para o calor específico no ponto de transição (em contraste com a descontinuidade obtida no modelo de Landau) e para o mesmo modelo N. Yang⁽⁴⁾, em 1952, mostrou que o parâmetro de ordem se anula como $(T_0 - T)^{1/8}$ $\left\{ (T_0 - T)^{1/2}$ segundo o modelo de Landau) e Fisher⁽⁵⁾, em 1959, obteve para a susceptibilidade uma divergência do tipo $(T - T_0)^{-7/4}$ $\left\{ (T - T_0)^{-1}$ no modelo de Landau) T_0 é a temperatura de transição exata e é inferior em 43,3% à temperatura de transição calculada pelo método do campo molecular.

Estes resultados motivaram enormemente o surgimento, nos anos seguintes, de uma grande quantidade de trabalhos dedicados ao estudo das transições de 2^a ordem para os mais variados modelos a baixas e altas dimensões (ver por exemplo Domb & Green⁽⁶⁾).

No Capítulo I discutiremos a importância do estudo de sistemas magnéticos a baixas dimensões. No Capítulo II discutiremos uma série de resultados obtidos para os sistemas uni e bidimensionais que contribuíram para uma melhor compreensão dos fenômenos característicos de baixa dimensionalidade. A discussão de forma mais fundamentada do método variacional e do mode-

lo XY será realizada no Capítulo III. No Capítulo IV discutiremos, para sistemas unidimensionais, os casos clássico e quântico preocupados principalmente em ressaltar as diferenças e semelhanças no comportamento das grandezas de interesse. A discussão do caso quântico para sistemas bidimensionais é apresentada no Capítulo V e no Capítulo VI apresentamos as conclusões referentes ao trabalho e sugerimos algumas possíveis extensões. Os cálculos que poderiam comprometer a sequência do texto foram colocados em apêndices.

CAPÍTULO I

SISTEMAS MAGNÉTICOS

1.1 - MODELOS DE SISTEMAS MAGNÉTICOS

Há uma grande variedade de modelos de sistemas magnéticos que possibilitam soluções exatas e/ou aproximadas para o comportamento das grandezas termodinâmicas na vizinhança da transição. Consideremos inicialmente o Hamiltoniano para um modelo de elétrons localizados

$$H = - \sum_{ij} J_{ij} \left[(1+\alpha) S_i^z S_j^z + (1-\alpha) (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) \right] \quad (1.1.1)$$

onde os spins S_i estão localizados nos sítios i e são acoplados uns aos outros pela integral de "exchange" J_{ij} . Esta aproximação é muito boa para os elétrons da camada 4f dos terra-raras Ce, Pr, Nd, etc, onde uma camada 6s determina o raio atômico resguardando portanto os orbitais 4 (de raio menor) das influências dos átomos vizinhos⁽⁷⁾.

Fazendo $\alpha = 0$ obtemos em (1.1.1) o modelo de Heisenberg, $\alpha = -1$ nos leva ao modelo XY e $\alpha = 1$ ao modelo de Ising. O parâmetro de ordem em sistemas magnéticos é a magnetização espontânea m e pode-se notar que para o modelo de Ising, m é um escalar ("vetor" unidimensional), para o modelo XY um "vetor" bidimensional e para o modelo de Heisenberg um vetor tridimen -

sional. Podemos notar a enorme variedade de modelos pois além da dimensão do parâmetro de ordem (descrita por n) temos a escolher a dimensão da rede (d) além de podermos considerar, para cada modelo, o tamanho do spin, o número de coordenação (primeiros, segundos, etc, vizinhos) e o sinal da integral de "exchange" J_{ij} - positivo para um sistema ferromagnético e negativo para um antiferromagnético. Formas isomorfas destes hamiltonianos servem a outros sistemas além dos magnéticos. Por exemplo, o hamiltoniano Ising pode ser usado para descrever a transição líquido-gás em um gás de rede, bem como a separação de fases espontânea em fluídos binários e o ordenamento de ligas. O modelo XY é o análogo magnético de um fluído quântico e é portanto de relevância para o estudo de suprafluidez e supercondutividade.

Para um estudo um pouco mais detalhado, consideremos inicialmente o caso em que a integral de "exchange" é completamente isotrópica, isto é, $\alpha = 0$, o que nos leva ao modelo de Heisenberg:

$$H = - \sum_{ij} \left[J_{ij} \left(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z \right) \right]$$

Na prática, surgem propriedades anisotrópicas devido às fontes de anisotropia, tais como o campo cristalino e o campo magnético dipolar (e outras de menor relevância). Entretanto para cristais cujas propriedades magnéticas são determinadas pelo acoplamento de "exchange" devido particularmente a íons no estado S (Gd^{3+} , Eu^{2+} , Mn^{2+} , Fe^{3+}) a isotropia pode ser considerada ^(8,9). Isto pode ser visto mais diretamente considerando-se os íons mais simples Mn^{2+} e Fe^{3+} . Estes íons possuem cada um 5 elétrons de valência que têm spins paralelos devido à regra de Hund,

de modo que $s = 5/2$ e o momento orbital é nulo ($L = 0$), porque todos os orbitais d estão ocupados. O campo cristalino não atua diretamente sobre o spin mas sobre o momento orbital e seu efeito é o de produzir um grupo de níveis orbitais para cada íon magnético. Neste caso ($L = 0$), ele não apresenta praticamente nenhum efeito e a anisotropia porventura existente está associada a forças dipolares que em muitos casos são fracas e podem ser desprezadas. Nestas circunstâncias, o hamiltoniano Heisenberg é um bom modelo e muitos materiais como o $(\text{CH}_3)_4\text{N}_n\text{Cl}_3$ -(TMC) e o K_2NiF_4 são bem descritos por ele.

O Ni^{2+} - spin 1 - apresenta uma influência do campo cristalino que pode ser descrita como $A(S_i^z)^2$. Neste caso o hamiltoniano total fica:

$$H = - \sum_{ij} J_{ij} \left[S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z \right] + A \sum_i (S_i^z)^2 \quad (1.1.2)$$

Se $A > 0$ obtemos um modelo algumas vezes denominado Heisenberg planar e o efeito da anisotropia é colocar os spins preferencialmente em um plano. (O modelo XY- $\alpha = -1$ - pode ser obtido da eq. (1.1.2) fazendo $A \rightarrow \infty$). Como exemplo do modelo planar podemos considerar o C_sNiF_3 . O caso $\alpha = -1$, modelo XY, tem a vantagem de possuir uma solução dinâmica completa para $S = 1/2$ e a desvantagem de que as amostras experimentais são geralmente melhor descritas pelo modelo de Heisenberg planar⁽⁹⁾. Oportunamente voltaremos ao modelo XY. Se $A < 0$ obtemos um sistema tipo Ising, modelo que pode ser obtido simplesmente tomando $\alpha = 1$ na eq. (1.1.1). A maioria dos compostos com Co^{2+} incluindo o sistema quase unidimensional $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{NC}_5\text{H}_5$ são melhor descritos⁽⁵⁾ pelo modelo de Heisenberg. Comparando experiências em substân-

cias tipo Ising com a teoria vemos que em muitos casos não é possível discernir se as propriedades anisotrópicas são devidas a uma anisotropia na "exchange" ou ao campo cristalino. Contudo devemos ter em mente que há uma diferença fundamental entre as hipóteses, o que conduz a alguns resultados contrastantes.

A melhor descrição para um material pode também depender da faixa de temperaturas em que estamos trabalhando. Um grande número de compostos de Fe^{2+} (FeCl_2 , $\text{FeCl}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$) e Ni^{2+} ($\text{Ni}(\text{CN})_2 \cdot \text{NH}_3 \cdot \text{C}_6\text{H}_6$) mencionados como materiais tipo Ising apresentam a anisotropia de campo cristalino e a interação magnética frequentemente da mesma ordem de magnitude. Como consequência, a altas temperaturas comportam-se como compostos tipo Heisenberg com $s = 2$ e $s = 1$, respectivamente, enquanto a baixas temperaturas tornam-se fortemente anisotrópicos, possibilitando o tratamento com o modelo de Ising.

Há de considerar-se ainda modelos para sistemas com elétrons não localizados ou itinerantes, o que entretanto escapa ao objetivo deste trabalho.

1.2 - SISTEMAS A BAIXAS DIMENSÕES

Um dos interesses no estudo de sistemas a baixas dimensões reside na maior facilidade na obtenção de aproximações e/ou soluções exatas para o comportamento das grandezas termodinâmicas pois o tratamento matemático torna-se aí menos complexo. Outro interesse reside no dramático efeito da baixa dimensionalidade sobre as propriedades do sistema nas regiões vizinhas ao ponto de transição. Podemos ilustrar isto fazendo uma compara-

ção dos calores específicos teóricos para o modelo de Ising a $d = 1, 2$ e 3 para uma rede de spins $1/2$ com o previsto pela teoria de campo molecular (exato para $d \rightarrow \infty$) como pode ser visto na fig. 1.2.1⁽⁹⁾.

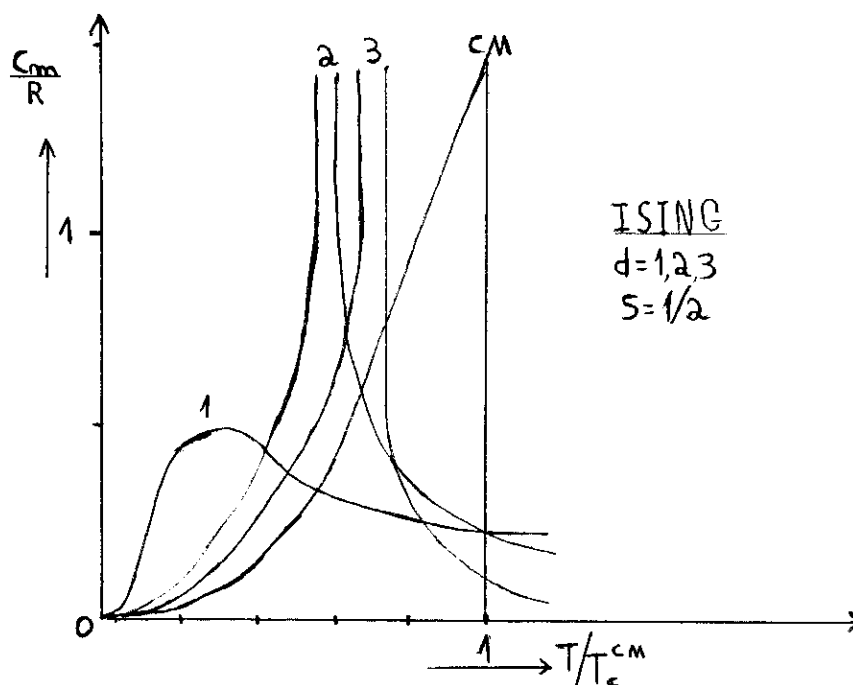


Figura 1.2.1 - Calores específicos magnéticos do modelo de Ising com $s = 1/2$ para $d = 1, 2$ e 3 comparados com o resultado obtido pela Teoria de Campo Molecular.

A curva para $d=1$ (exata) foi obtida por Ising⁽¹⁰⁾. A curva 2-d (exata) foi obtida por Onsager⁽³⁾ para uma rede quadrada. A curva 3-d reproduzida na fig. 1.2.1 é a calculada por Blöte e Huiskamp⁽¹¹⁾ e Blöte⁽¹²⁾, T_c^{CM} é a temperatura de transição de Curie ($T_c^{CM} = \frac{2z}{3} s(s+1)J/K$, na fig. 1.2.1: $s = 1/2$, $z = 2d$) que é a temperatura prevista pela Teoria de Campo Molecular. A previsão feita pela Teoria de Campo Molecular para o ponto de transição é muito alta; o calor específico mostra uma descontinuidade finita ao invés de divergir e é caracterizado ainda pela ausência de caudas de altas temperaturas (C_m é nulo para $T > T_c^{CM}$). A presença de tais caudas é devido às interações de curto alcan

ce, acima de T_c^{CM} , que não são consideradas pela teoria de Campo Molecular e são encontradas tanto em modelos teóricos mais sofisticados como em trabalhos experimentais. Podemos ver pela comparação, a diversas dimensionalidades, de T_c/T_c^{CM} e das caudas de alta temperatura, que a importância dos efeitos da ordem de curto alcance é grandemente reforçada pelo abaixamento da dimensão da rede. Para o modelo de Ising 2-d ainda ocorre uma transição que gera uma ordem de longo alcance a uma temperatura finita, entretanto T_c é inferior ao predito pelo Campo Molecular. Para o modelo de Ising 1-d, contudo, $T_c = 0$, isto é, a ordem de longo alcance só surge no estado fundamental. Claramente portanto, as deficiências da teoria de Campo Molecular são ressaltadas quando se abaixa a dimensionalidade e este é um dos aspectos que fazem com que sistemas uni e bidimensionais sejam objeto de grande interesse de estudo.

1.3 - MATERIAIS

A verificação experimental do comportamento das grandezas termodinâmicas em sistemas a baixas dimensões esbarra em grandes dificuldades desde que todos os sistemas reais são tridimensionais e o que podemos conseguir em termos de sistemas magnéticos de baixas dimensões são, no máximo, boas aproximações. Abaixo apresentamos alguns materiais e sistemas magnéticos e não magnéticos que foram desenvolvidos e que apresentam comportamento de baixa dimensionalidade.

Dimensionalidade 2: - Filmes de He sobre grafite

- Filmes de Ne
- Filmes supercondutores
- Camadas de compostos supercondutores :
NbSe₂, etc.
- Camadas de compostos magnéticos Rb₂MnF₄,
K₂NiF₄, K₂CoF₄, CoCl₂, etc.

- Dimensionalidade 1:
- He em tubos finos
 - Fios supercondutores
 - Supercondutores tipo II em campo magnético
 - Cadeias magnéticas: N(CH₃)₄MnCl₃ (TMMC),
K₂Pt(CN)₄Br_{0,3}, CsNiF₃, etc.

Dimensionalidade 0: Grânulos supercondutores.

Um material apresenta comportamento característico de baixa dimensionalidade devido a peculiaridades em sua estrutura cristalina e magnética que favorecem ou aumentam a interação ao longo de uma linha ou dentro de um plano. Ocorrem também casos em que a baixa dimensionalidade surge devido a considerações de simetria como no caso do K₂NiF₄ em que as interações interplanares mostram um cancelamento levando-os a um antiferromagnetismo bidimensional. O Ni pode ser substituído por Mn, Fe, Co; o K por Rb ou Cs e o F por Cl levando-nos a um grande número de exemplos com a mesma característica.

Em outros compostos podemos provocar o favorecimento da interação em um plano aumentando a distância intercamadas pela adição de camadas não magnéticas como, por exemplo, no caso do BaZnF₆ e dos compostos de cobre cuja fórmula geral é (C_jH_{2j+1}NH₃)₂ CuCl₄ (j = 0, 1, 2...). Estes sais podem ser vistos como derivados do (NH₄)₂CuCl₄ e consistem de camadas fer-

romagnéticas de Cu^{2+} separadas por duas camadas de grupos alquil-amônia não magnéticos. Podemos variar a distância entre os íons Cu^{2+} intercamadas, variando o j (ver fórmula geral mais acima), enquanto intracamadas a distância permanece praticamente a mesma. Interessante nesta série é podermos estudar várias propriedades como função da distância intercamadas e fazer, a partir daí, extrapolações para um sistema ideal 2-d (Bloemberger et al. (1970)⁽¹⁴⁾, de Jongh e Van Amstel (1970)⁽¹⁵⁾).

Desenvolvemos neste trabalho o estudo do modelo XY em sistemas magnéticos a uma dimensão – caso clássico e quântico – e a duas dimensões – caso quântico – dentro da aproximação dada pelo método variacional. A problemática referente a sistemas clássicos a duas dimensões já foi discutida por Tsalis⁽¹⁶⁾ com a utilização do método variacional numa aproximação a baixas temperaturas e em presença de vários tipos de anisotropia.

CAPÍTULO II

ORDEM EM SISTEMAS A BAIXAS DIMENSÕES

2.1 - SISTEMAS UNIDIMENSIONAIS

É de conhecimento geral que uma cadeia de spins com interações de curto alcance não mostra ordem de longo alcance (exceto eventualmente a $T = 0$) nem exibe nenhum tipo de transição de fase. Entretanto o interesse por sistemas magnéticos a uma dimensão é bastante grande visto que estes são os sistemas que possibilitam a maioria dos resultados exatos para fenômenos cooperativos (não necessariamente críticos).

Para o modelo de Ising a energia livre, o calor específico e a susceptibilidade em uma dimensão foram calculados para cadeias com spins $1/2$ por Ising⁽¹⁰⁾, com spins 1 por Obokata e Oguchi⁽¹⁷⁾, e com spins $3/2$ por Suzuki et al.⁽¹⁸⁾.

Para o modelo XY resultados exatos também foram obtidos por Lieb, Schultz e Mattis⁽¹⁹⁾ para uma cadeia de spins $1/2$. Eles estudaram detalhadamente o espectro e os auto-estados do hamiltoniano. Ainda para o modelo XY e cadeias com spin $1/2$, Katsura⁽²⁰⁾ calculou a função de partição exata e investigou as propriedades térmicas de uma cadeia infinita. Para cadeias com spin no limite clássico ($s = \infty$) temos os resultados obtidos por Wegner⁽²¹⁾.

Para o modelo de Heisenberg o comportamento termodinâmico em uma dimensão foi calculado por Fisher⁽²²⁾ para uma cadeia clássica ($s = \infty$) a campo nulo. Ainda para este modelo, um resultado exato para a curva da magnetização em função do campo aplicado à temperatura nula para spins $1/2$ foi obtida por Griffiths⁽²³⁾. Para temperaturas não nulas soluções aproximadas para o comportamento termodinâmico foram conseguidas por Bonner e Fisher⁽²⁴⁾ e Griffiths⁽²⁵⁾, calculando as propriedades de cadeias contendo um número finito e crescente de spins e daí extrapolando-as para a cadeia infinita. Para spins finitos e interação de "exchange" antiferromagnética até mesmo o estado fundamental é desconhecido, exceto para o caso especial de spin $1/2$ tratado por Bethe⁽²⁶⁾. Em todos os trabalhos citados comprova-se a inexistência de ordem de longo alcance. Uma maneira de se estabelecer ordem de longo alcance é através de um possível desvio da idealização dos sistemas 1-d devido à presença de acoplamento intercadeias não nulos. Outra maneira é estender o alcance da integral de "exchange" - J_{ij} - até o infinito.

2.2 - SISTEMAS BIDIMENSIONAIS

Sistemas unidimensionais e bidimensionais apresentam diferenças profundas entre o modelo menos isotrópico (Ising) e os modelos XY e Heisenberg. Para o modelo de Ising, basta mudarmos a dimensão de uma para duas para que surja ordem de longo alcance a uma determinada temperatura (finita) ($d > 1 \Rightarrow T_c \neq 0$). Para sistemas mais isotrópicos (XY e Heisenberg) a três dimen-

sões aparece ordem de longo alcance a temperaturas finitas. A impossibilidade de ordem de longo alcance em sistemas bidimensionais (não necessariamente magnéticos) já havia sido levantada por Peierls em 1935 que argumentava, por intermédio de um cálculo simples, que o movimento térmico dos fônons de grande comprimento de onda destruiria a ordem de um sólido bidimensional no sentido de que o desvio médio quadrático de um átomo de sua posição de equilíbrio (flutuação do parâmetro de ordem) aumentava logarithmicamente com o tamanho do sistema. A ausência de ordem de longo alcance na forma levantada por Peierls foi provada por Mermin⁽²⁷⁾, em 1968, utilizando um tratamento rigoroso. Argumentos similares, foram usados por Mermin e Wagner⁽²⁸⁾, para mostrar que não há magnetização espontânea a $T \neq 0$ em sistemas bidimensionais (para interações de curto alcance) com spins com mais de um grau de liberdade ($n > 1$), isto é, para hamiltonianos invariantes com relação a rotações dos spins. Eles mostraram que, para campo uniforme h suficientemente pequeno, a magnetização em duas dimensões é dada por:

$$m(h, t) \leq \text{cte} \left[t \ln |h| \right]^{-1/2}$$

Se $h \rightarrow 0$ vemos que não há magnetização espontânea a qualquer temperatura finita. Fisher e Jasnow⁽²⁹⁾ estenderam o argumento de Mermin-Wagner no sentido de que provaram a ausência de uma magnetização espontânea sem introduzir, necessariamente, o campo.

Na análise da susceptibilidade isotérmica a campo magnético nulo por meio das expansões em séries de altas temperaturas, Stanley e Kaplan⁽³⁰⁾ encontraram a susceptibilidade diver-

gindo a uma temperatura finita com a magnetização espontânea permanecendo nula. A inexistência de magnetização espontânea para $T \neq 0$ e a divergência da susceptibilidade não implicam necessariamente que uma transição de fase não ocorra, *não sendo incompatíveis*, desde que certas restrições sejam feitas sobre a dependência da função de correlações $\langle S_0 S_R \rangle$ com a distância R . Deve-se notar que não há argumento termodinâmico que exclua a possível ocorrência de um novo tipo de transição com as características acima. (Resultados similares são obtidos para a susceptibilidade oscilante ("staggered") de uma camada quadrática antiferromagnética.) A evidência deste tipo de transição é mais forte para o modelo XY do que para o modelo de Heisenberg, o que pode ser comprovado nos trabalhos de Stanley⁽³¹⁾ e Moore⁽³²⁾.

Kosterlitz e Thouless⁽³³⁾ apresentam argumentos em favor de uma definição diferente de ordem de longo alcance baseada não no comportamento da função de correlações a dois pontos mas no conjunto das propriedades do sistema. Eles introduzem um novo tipo de ordem de longo alcance (denominada "topológica") a qual pode existir em sólidos bidimensionais, superfluidos neutros e no modelo XY mas não em um supercondutor ou no modelo de Heisenberg isotrópico. Supondo que a ocorrência de uma transição de fase está conectada à existência de ordem de longo alcance topológica, conjectura-se que o modelo XY tem uma transição mas o modelo de Heisenberg não. Esta conjectura não parece estar em conflito com as evidências provenientes da análise das expansões em séries de potência a altas temperaturas de Stanley⁽³¹⁾ e Moore⁽³²⁾.

CAPÍTULO III

O MÉTODO VARIACIONAL E O MODELO XY

As grandes dificuldades matemáticas envolvidas em tentativas de tratamentos teóricos exatos levam-nos a interpretar a maior parte das transições dentro de um quadro de teorias que se apoiam em aproximações. O Método Variacional, do qual a teoria de Campo Molecular pode ser considerada um caso especial (como o seu equivalente a teoria de Bragg-Williams), enquadra-se nestas teorias aproximativas. Desenvolveremos aqui uma formulação que ressalte as suas principais características. Em um sistema o valor médio de uma grandeza física representada por um operador A é dada na forma:

$$\langle A \rangle = \text{Tr} \rho A$$

onde ρ é o operador densidade do sistema e $\text{Tr} \rho = 1$. Podemos escrever a energia livre F como:

$$F = \text{Tr} \rho H + \frac{1}{\beta} \text{Tr} \rho \ln \rho$$

onde H representa o Hamiltoniano do sistema.

Podemos obter o operador densidade associado ao equilíbrio termodinâmico com um termostato à temperatura β^{-1} , minimizando a

energia livre, o que nos dá:

$$\rho = \frac{\exp(-\beta H)}{\text{Tr} \exp(-\beta H)}$$

portanto

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

onde $Z \equiv \text{Tr} \exp(-\beta H)$ é a função de partição. Em geral não sabemos tratar exatamente o sistema, isto é, não sabemos calcular exatamente a função de partição Z . O método variacional consiste na utilização de um sistema com o qual saibamos operar e a partir daí definir uma energia livre variacional. Definindo ρ_0 como

$$\rho_0 = \frac{\exp(-\beta H_0)}{\text{Tr} \exp(-\beta H_0)}$$

onde H_0 é o Hamiltoniano tentativa (ou variacional), podemos escrever a energia livre variacional como:

$$\bar{F} = F_0 + \text{Tr} \rho_0 (H - H_0)$$

sendo F_0 a energia livre do sistema descrito pelo Hamiltoniano H_0 . Pode-se mostrar⁽³⁴⁾ que, qualquer que seja o operador $\rho_0 \neq \rho$, a energia livre \bar{F} é sempre superior à energia livre exata, isto é:

$$F \leq \bar{F}$$

Esta propriedade justifica a minimização de \bar{F} em relação a to-

dos os parâmetros de H_0 . A cada operador ρ_0 pertencente a uma certa classe corresponde uma energia livre $\bar{F}(\rho_0)$. Para uma certa temperatura, o melhor operador densidade correspondente à classe é aquele que minimiza $\bar{F}(\rho_0)$ de maneira a aproximá-la o máximo possível da energia livre exata F .

O Método Variacional em Mecânica Estatística tem permitido, pela sua simplicidade, resoluções aproximadas de inúmeros problemas de Física Térmica a se ressaltar a resolução do modelo de Barden, Cooper, Schrieffer⁽³⁵⁾ para o fenômeno da supercondutividade. Tem sido também usado em várias oportunidades na discussão da evolução térmica da dinâmica de osciladores harmônicos em cristais e outros sistemas^(16,36,37,38,39,40,etc). Da Silva e Tsallis⁽⁴¹⁾ mostram que, pelo menos para o calor específico, susceptibilidade elétrica e frequência média de um oscilador anarmônico clássico com potencial do tipo X^{2n} (cuja solução exata é acessível) o modelo variacional fornece resultados muito satisfatórios.

A problemática da transição de fase no modelo de Heisenberg (e XY) bidimensional foi fortemente influenciada por dois trabalhos: o primeiro devido a Mermin-Wagner⁽²⁹⁾ onde se provou rigorosamente a impossibilidade da existência, a qualquer temperatura finita, de ordem de longo alcance em sistemas isotrópicos no espaço dos spins com interações de curto alcance, e o segundo devido a Stanley e Kaplan⁽³⁰⁾ que, para o mesmo tipo de modelo, sugeria a existência de uma temperatura crítica finita na qual a susceptibilidade isotérmica divergia. Ambos os trabalhos se referiam ao modelo de Heisenberg, entretanto, seus resultados se aplicam também ao modelo XY ($n=2$) bem como aos casos intermediários; não se aplicam, porém, ao modelo de Ising

(ver Hone e Richards⁽⁸⁾). Com relação ao modelo XY, Berezinskii mostrou que tanto o caso clássico⁽⁴²⁾ quanto o caso quântico⁽⁴³⁾ levam à extinção da ordem magnética de longo alcance, não implicando isto, necessariamente, na inexistência de uma transição de fase.

Utilizando uma lei gaussiana para o estudo da resposta a um campo magnético de uma estrutura nemática bidimensional, G. Sarma⁽⁴⁴⁾ obteve, também neste caso, resultados que comprovam a ausência de ordem de longo alcance, embora a baixas temperaturas ocorra uma resposta não linear à aplicação do campo. Tsallis⁽¹⁶⁾, dentro de um tratamento variacional, estuda o modelo XY no limite de spins infinitos (limite clássico) a baixas temperaturas, em presença de vários tipos de anisotropia no espaço cristalino e no espaço dos spins, em sistemas bidimensionais (ou quase bidimensionais). Para este modelo, Tsallis ilustra que não existe ordem de longo alcance a não ser em presença de anisotropia no espaço dos spins (teorema de Mermin-Wagner).

O comportamento do comprimento de correlação ξ para os diversos tipos de anisotropia comprova o acima citado:

$\xi \propto \frac{1}{h}$ - para anisotropia proveniente da aplicação de um campo magnético h .

$\xi \propto \frac{1}{\sqrt{\alpha}}$ - para uma anisotropia local α no espaço dos spins.

$\xi \propto \frac{1}{\sqrt{\alpha'}}$ - para anisotropia α' de acoplamento no espaço dos spins.

Vemos que a temperatura fixa e fonte de anisotropia (h, α, α') decrescente obtêm-se o mesmo resultado a divergência de ξ , ou seja, as flutuações correlacionam-se por grandes extensões destruindo assim a ordem de longo alcance.

Neste trabalho, estamos interessados em desenvolver

para o caso quântico a mesma discussão levada a efeito por Tsallis para o caso clássico. Aqui utilizamos um Hamiltoniano proposto por S.F. Edwards e P.W. Anderson ^(45,46), para o estudo teórico dos vidros de spin em que se considera um sistema descrito pelo modelo XY para spins com momento de inércia I .

CAPÍTULO IV

MODELO XY UNIDIMENSIONAL PARA SPINS COM MOMENTO DE INÉRCIA

4.1 - CASO CLÁSSICO

4.1.1 - Isotrópico no Espaço dos Spins

4.1.1.1 - Modelo

Consideremos um cristal unidimensional, cíclico, com N sítios, cujo parâmetro cristalino denotamos a . Escolhendo um destes sítios como origem cada ponto da rede fica determinado pelo índice inteiro i . Em cada sítio encontra-se um spin, com momento de inércia I , de comprimento $S \gg 1$ possibilitando-nos tratar o sistema no contexto da Mecânica Estatística Clássica. Os spins permanecem em um plano determinado por uma anisotropia infinita que impede-os de se orientarem na direção perpendicular a este plano (eixo Z). Se considerarmos além disso uma interação ferromagnética isotrópica do tipo XY entre sítios primeiros vizinhos teremos para Hamiltoniano do sistema ⁽⁴⁵⁻⁴⁶⁾:

$$\begin{aligned} H &= \sum_i \frac{L_i^2}{2I} - \frac{J}{S} \sum_i \left\{ S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y \right\} \quad J > 0 \\ &= \sum_i \frac{L_i^2}{2I} - J \sum_i \left\{ \cos(\theta_{i+1} - \theta_i) \right\} \quad (4.1.1.1.1) \end{aligned}$$

onde os ângulos θ_i , compreendidos no intervalo $0 \leq \theta \leq 2\pi$, estão definidos na fig. 4.1.1.1.1. L_i é o momento angular associada ao spin do sítio i .

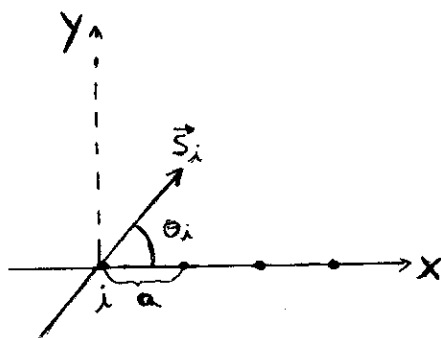


Figura 4.1.1.1.1 - Definição gráfica das variáveis angulares do modelo.

O intervalo considerado para θ : de 0 a 2π não apresenta qualquer transtorno se trabalhamos a baixas temperaturas

4.1.1.2 - Tratamento

Pelo teorema de Mermin-Wagner⁽²⁸⁾ não existe ordem magnética de longo alcance a nenhuma temperatura finita. Para o caso particular aqui tratado isto significa que se escolhermos (arbitrariamente) o eixo x como aquele para o qual é possível o ordenamento, a configuração $\theta_i \approx 0 \forall i$ (longo alcance) não é termodinamicamente estável. Isto, entretanto, não impede que $\theta_{i'} - \theta_i \approx 0 \forall i$ (curto alcance) se i e i' são primeiros vizinhos. Assim podemos, a menos de uma constante, aproximar o hamiltoniano (4.1.1.1.1) por:

$$H \approx H' = \sum_i \frac{L_i^2}{2I} + J \sum_i \left\{ (\theta_{i+1} - \theta_i)^2 \right\} \quad (4.1.1.2.2)$$

Definindo as seguintes transformações de Fourier

$$\theta_q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{iqR_i} \theta_i \quad (4.1.1.2.3)$$

$$L_q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{iqR_i} L_i \quad (4.1.1.2.3')$$

onde $q \in B$, $B \equiv \{q/|q| \leq \frac{\pi}{a}\}$ e $R_i = ia$, podemos reescrever H' como se segue

$$H' = \sum_q \frac{|L_q|^2}{2I} + J \sum_q (1 - \cos aq) |\theta_q|^2 \quad (4.1.1.2.2')$$

Este hamiltoniano descreve um conjunto de osciladores angulares harmônicos*, independentes, e o seu tratamento estatístico clássico não é complicado. Como não pretendemos tratar o hamiltoniano no (4.1.1.1.1) exatamente⁽²²⁾, (4.1.1.2.2') sugere um tipo conveniente de hamiltoniano variacional para um estudo aproximado. Propomos então:

$$H_0 = \sum_q \frac{L_q^2}{2I} + \sum_q c_q |\theta_q|^2 \quad (4.1.1.2.4)$$

onde os $\{c_q\}$ são, por razões de estabilidade, coeficientes reais estritamente positivos, a determinar em função de T . Em Mecânica Estatística Clássica, não é necessário – para obter uma melhor minimização de \bar{F} – renormalizar o momento angular já que a comutação entre L e θ possibilita-nos uma fatorização completa da lei de probabilidade. Em Mecânica Estatística Quântica, Tsallis e C.W. Furtado Valle⁽³⁶⁾ analisaram cuidadosamente este ponto com conclusão idêntica à do caso clássico. Esperamos que:

$$T \rightarrow 0 \implies c_q \rightarrow J(1 - \cos aq) \quad (4.1.1.2.5)$$

Para obtermos a energia livre de Helmholtz variacional, constru

*Para altas temperaturas as integrações nos intervalos $|\theta_q| \in (0, 2\pi)$ ou $|\theta_q| \in (0, \infty)$ podem introduzir diferenças significativas.

imos primeiramente a matriz densidade associada a H_0 :

$$\rho_0 = \frac{\exp(-\beta H_0)}{\text{Tr} \exp(-\beta H_0)}$$

da qual obtemos facilmente o princípio de equipartição:

$$c_q \langle |\theta_q|^2 \rangle_0 = \frac{K_B T}{2} \quad \forall q \quad (4.1.1.2.6)$$

$$\langle \frac{|L_q|^2}{2I} \rangle_0 = \frac{K_B T}{2} \quad \forall q \quad (4.1.1.2.6')$$

e a entropia (ver Apêndice A)

$$S_0 = K_B \langle \ln \rho_0 \rangle_0 = - \frac{K_B}{2} \sum_q \ln c_q + \text{cte}$$

Agora já podemos construir a energia livre variacional \bar{F} e, como já discutido no Capítulo III, devemos minimizar \bar{F} com respeito aos seus parâmetros variacionais, identificados aqui com os coeficientes $\{c_q\}$ (ou equivalentemente, com $\langle |\theta_q|^2 \rangle_0$, levando em conta as relações (4.1.1.2.6) e (4.1.1.2.6')). É conveniente fazermos um intervalo e introduzirmos duas propriedades da lei gaussiana que serão utilizadas com frequência ⁽¹⁶⁾:

$$\langle \cos(\vec{a} \cdot \vec{x}) \rangle_G = \exp - \frac{1}{2} \langle (\vec{a} \cdot \vec{x})^2 \rangle_G \quad (4.1.1.2.7)$$

$$\langle \text{sen}(\vec{a} \cdot \vec{x}) \rangle_G = 0$$

onde $\langle \dots \rangle_G$ denota a média com relação à lei de probabilidades gaussianas. Definindo:

$$\eta_q \equiv \langle |\theta_q|^2 \rangle_0$$

$$R_i^{i'} \equiv R_{i'} - R_i = (i' - i)a$$

$$K_i^{i'} \equiv K \equiv \langle \cos(\theta_{i'} - \theta_i) \rangle_0 = \exp \left[- \frac{1}{N} \sum_q (1 - \cos aq) \right] \eta_q$$

$$L_i^{i'} \equiv L \equiv \langle \cos(\theta_{i'} + \theta_i) \rangle_0 = \exp \left[- \frac{1}{N} \sum_q (1 + \cos aq) \eta_q \right]$$

$$m \equiv \langle \cos(\theta_i) \rangle_0 = \exp \left[- \frac{1}{2N} \sum_q \eta_q \right] = (K_i^{i'} L_i^{i'})^{1/4} = (KL)^{1/4}$$

$$t \equiv \frac{K_B T}{2J}$$

sendo m o parâmetro de ordem ferromagnético e K o coeficiente de renormalização da energia de acoplamento entre primeiros vizinhos, temos:

$$\bar{F} = - NJK + \frac{K_B T}{2} \sum_q \ln c_q \quad (*)$$

Da minimização de \bar{F} ($\frac{\partial \bar{F}}{\partial c_q} = 0 \forall q$) obtêm-se

$$c_q = JK(1 - \cos aq) \quad \forall q \in B \quad (4.1.1.2.8)$$

onde verificamos que $\lim_{t \rightarrow 0} c_q = J(1 - \cos aq)$ como se esperava de (4.1.1.2.5). O sistema de equações (4.1.1.2.8) determina $c_q(T)$ e também $\eta_q(T)$ se utilizarmos a relação (4.1.1.2.6). Substitu-

(*) A contribuição de $\sum_q \langle |L_q|^2 \rangle_0 / 2I >_0$, pelo princípio de equipartição é uma constante no que se refere aos parâmetros variacionais o que simplesmente desloca a origem da \bar{F} .

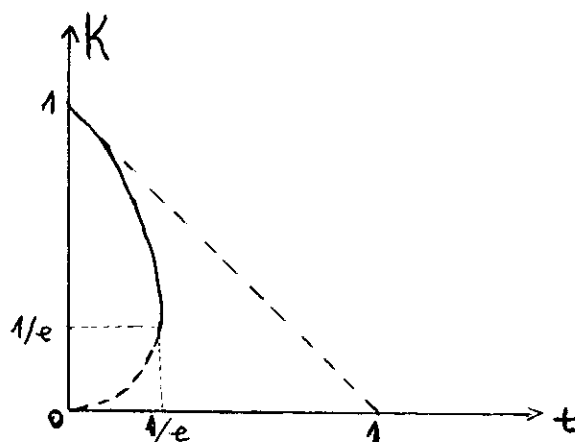
indo-se $\eta_q(T)$ em K obtêm-se

$$K \ln K = -t \quad (4.1.1.2.9)$$

O gráfico (fig. 4.1.1.2.2) representando a dependência térmica do coeficiente de renormalização K , mostra uma região onde não há sentido físico pois o calor específico (proporcional a $-\frac{dK}{dt}$) não pode ser negativo.

Figura 4.1.1.2.2 - Evolução térmica do coeficiente de renormalização.

Para a posterior obtenção de m é necessário calcularmos ainda



$$L = \exp - \frac{t}{K} \frac{a}{2\pi} \int_B \frac{1 + \cos aq}{1 - \cos aq} dq$$

onde utilizamos a relação (4.1.1.2.8) e o limite do quase contínuo, ou seja

$$\sum_q \rightarrow \frac{a}{2\pi} \int dq \quad \text{para } N \rightarrow \infty$$

Como em (16) definimos $L'(t, \epsilon)$ como:

$$L'(t, \epsilon) \equiv \exp - \frac{t}{K} \frac{a}{2\pi} \int_{B'} \frac{1 + \cos aq}{1 - \cos aq} dq$$

onde

$$B' \equiv \left\{ q/q \in B' \quad e \quad |q| > \epsilon \right\}$$

Obtemos

$$L'(t,0) = 0 \quad \forall t \neq 0$$

$$L'(0,\epsilon) = 1 \quad \forall \epsilon \neq 0$$

$$\lim_{t \rightarrow 0} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} L'(t,\epsilon) = 0$$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \lim_{t \rightarrow 0} L'(t,\epsilon) = 1$$

Para satisfazer o Terceiro Princípio da Termodinâmica é conveniente definirmos a função $L(t)$ como se segue:

$$L(t) = L'(t,0) = 0 \quad \forall t \neq 0$$

$$L(0) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \lim_{t \rightarrow 0} L'(t,\epsilon) = 1$$

como representado na fig. 4.1.1.2.3.

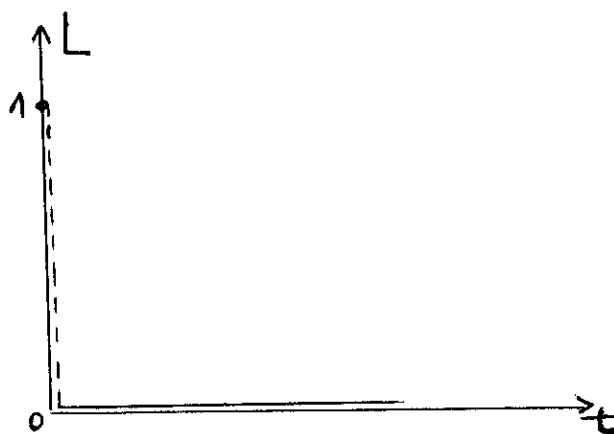


Figura 4.1.1.2.3 - Evolução térmica de L.

4.1.1.3 - Ordem de Longo Alcance

Considerando a relação $m = (KL)^{1/4}$ obtemos:

$m = 0$ se $t \neq 0$ (de acordo com o teorema de Mermin-Wagner)
 $m = 1$ se $t = 0$ (de acordo com o Terceiro Princípio da Termodinâmica).

Constatamos que não pode se estabelecer ordem de longo alcance, a temperaturas não nulas, no sistema.

4.1.1.4 - Espectro de Mâgnons

A minimização da energia livre variacional leva-nos à eq. (4.1.1.2.8)

$$c_q = JK(1 - \cos aq) \sim \frac{JKa^2}{2} q^2 \quad \text{se } q \rightarrow 0$$

Para o modelo XY a uma ou duas dimensões Villain⁽⁴⁷⁾ estabeleceu que $c_q \propto \Omega_q^2$ onde Ω_q é a frequência de mágons do sistema. Este resultado persiste para spins com momento de inércia e portanto $\Omega_q \propto q$ se $q \rightarrow 0$. Para o modelo de Ising não temos mágons a nenhuma dimensão. Para o modelo de Heisenberg, podemos ver que $c_q \propto \Omega_q$ ^(47,48) obtendo-se $\Omega_q \propto q^2$ se $q \rightarrow 0$. Dependência semelhante à do modelo XY, utilizando o modelo de Heisenberg, é obtida por Cloiseaux e Pearson⁽⁴⁹⁾ para uma cadeia linear antiferromagnética.

4.1.1.5 - Função de Correlações

Como a duas dimensões⁽¹⁶⁾, podemos definir a função de correlações instantânea das flutuações do parâmetro de ordem a temperaturas finitas como se segue:

$$S(R) \equiv \langle (\cos \theta_{i,-m}) (\cos \theta_{i',-m}) \rangle_0 = \frac{1}{2} K_i^{i'}$$

$$= \frac{1}{2} \exp - \frac{t a}{K 2 \pi} \int_B \frac{1 - \cos(R_q)}{1 - \cos a q} dq$$

onde $m = 0$ e $L_i^{i'} = 0$ (desde que consideramos $t \neq 0$). No limite $R \gg a$ obtemos (ver Apêndice B)

$$S(R) \sim \gamma_1 \exp - \frac{t}{K} \frac{1}{a \pi} \int_0^{\pi/a} \frac{1 - \cos(R_q)}{q^2} dq$$

$$\sim \gamma_2 \left\{ \exp(-R/\xi) \right\} f_1(t)$$

onde $\xi \equiv \frac{a \pi K}{3t}$, $f_1(t) \equiv \exp \frac{t}{\pi^2 K}$, sendo γ_1, γ_2 números puros da ordem da unidade. A lei exponencial obtida para a função de correlações é típica do sistema em discussão bem como o comportamento do comprimento de correlação $\xi \propto \frac{1}{t}$ como comprovam outras abordagens teóricas: o modelo de Heisenberg clássico calculado exatamente por Fisher⁽²²⁾, o modelo XY clássico discutido por Wegner⁽²¹⁾, o modelo planar quântico anisotrópico discutido por Villain⁽⁵⁰⁾, e o modelo planar clássico discutido por Loveluck, S.W. Lovesey e S. Aubry⁽⁵¹⁾, todos coincidentes a baixas temperaturas. Um comportamento bastante diferente é encontrado para o modelo de Ising onde a baixas temperaturas $\xi \sim \frac{1}{2} \exp \frac{8|J|}{K_B T}$ (14). O resultado $\xi \rightarrow \infty$ se $t \rightarrow 0$ expressa exatamente o fato já bem conhecido de que sistemas unidimensionais não mostram qualquer ordem de longo alcance a temperaturas não nulas.

4.1.1.6 - Susceptibilidade

De maneira análoga à realizada em (16), definimos a

susceptibilidade reduzida

$$\chi_T \equiv \lim_{h \rightarrow 0} \left. \frac{\partial m}{\partial h} \right|_t = \frac{1}{4t} \sum_i S(R_i^{i'})$$

onde $\mu \equiv \mu_B g_L SH/J$, μ_B = magneton de Bohr, g_L = fator de Landé, H = campo magnético arbitrariamente escolhido paralelo ao eixo x . A contribuição principal a esta soma vem da região onde $R \gg a$ e portanto:

$$\chi_T \sim \frac{\gamma_2}{4t} \sum_i \exp - \frac{3t}{\pi K} \frac{|R_i^{i'}|}{a}$$

converge no limite considerado. Aproximando $\sum_i \sim \int dR$ temos:

$$\chi_T \propto \frac{1}{4t} \int \exp(-\frac{3t}{\pi K} \frac{R}{a}) dR \sim \frac{1}{t^2}$$

Portanto $\chi_T \rightarrow \infty$ como $1/t^2$ se $t \rightarrow 0$, como é esperado por Steiner, Villain e Windsor⁽⁵²⁾, desde que semelhante ao modelo de Heisenberg discutido por Fisher⁽²²⁾ que mostra este comportamento no limite considerado.

4.1.2 - Sistema em Presença de um Campo Magnético Externo

4.1.2.1 - Modelo

Em presença de um campo magnético paralelo ao eixo x podemos escrever o hamiltoniano do sistema como:

$$H = \sum_i \frac{L_i^2}{2I} - J \sum_i \left\{ \cos(\theta_{i+1} - \theta_i) + h \cos \theta_i \right\} \quad (4.1.2.1.10)$$

Definindo como anteriormente

$$H_0 = \sum_q \frac{|L_q|^2}{2I} + \sum_q c_q |\theta_q|^2$$

podemos construir a energia livre variacional

$$\bar{F} = - JN (K+hm) + \frac{K_B T}{2} \sum_q \ln c_q$$

A minimização de \bar{F} fornece

$$c_q = J \left[K(1 - \cos aq) + \frac{hm}{2} \right] \quad (4.1.2.1.11)$$

Substituindo na expressão definida para K em (4.1.1.2) e fazendo uso da eq. (4.1.1.2.6) generalizamos (4.1.1.2.9):

$$K \ln K + hm \ln m = - t \quad (4.1.2.1.12)$$

4.1.2.2 - Espectro de M \ddot{a} gnons

A rela \tilde{c} o (4.1.2.1.11) fornece

$$c_q = J \left[K(1 - \cos aq) + \frac{hm}{2} \right] \quad \forall q \in B$$

A diferen \tilde{c} a para o caso isotr \ddot{o} pico \acute{e} a apari \tilde{c} o de um "gap" para o vetor de onda nulo. A apari \tilde{c} o do "gap" quando da presen \tilde{c} a do campo magn \acute{e} tico \acute{e} esperada j \acute{a} que o campo destroi a invari \hat{a} nc

cia rotacional XY dos spins.

4.1.2.3 - Ordem de Longo Alcance e Susceptibilidade

Utilizando a eq. (4.1.2.1.11) podemos escrever para a magnetização

$$\begin{aligned}
 m &= \exp - \frac{ta}{4\pi} \int \frac{dq}{K(1-\cos aq) + \frac{hm}{2}} \\
 &= \exp - \frac{t}{2} \cdot \frac{1}{(Khm)^{1/2}} \cdot \frac{1}{\left(1 + \frac{hm}{4K}\right)^{1/2}} \quad (4.1.2.3.13)
 \end{aligned}$$

No limite $t \ll 1$, $h \ll 1$, de tal maneira que $K \approx 1$ temos:

$$\begin{aligned}
 \left. \frac{\partial m}{\partial h} \right|_t &= \frac{t}{4} \cdot \frac{m^{1/2}}{h^{3/2}} \cdot \frac{1}{\left[1 - \frac{t}{4} \frac{1}{(hm)^{1/2}}\right]} \\
 \left. \frac{\partial m}{\partial t} \right|_h &= - \frac{1}{2} \cdot \frac{m^{1/2}}{h^{1/2}} \cdot \frac{1}{\left[1 - \frac{t}{4} \frac{1}{(hm)^{1/2}}\right]}
 \end{aligned}$$

expressões que só apresentam resultados físicos aceitáveis, isto é, $\left. \frac{\partial m}{\partial h} \right|_t > 0$ e $\left. \frac{\partial m}{\partial t} \right|_h < 0$ na região:

$$m^{1/2} > \frac{t}{4h^{1/2}}$$

Esta relação estabelece uma restrição entre t e h que não é comum em cálculos da susceptibilidade. Assim, para $h \rightarrow 0$ saímos da região de solução para m , com efeito a análise da equação (4.1.2.3.13) mostra que o ponto ($m = 0$, $h = 0$) não a satis

faz. Sabemos que estas dificuldades não existem a duas dimensões ⁽¹⁶⁾. É oportuno lembrar que estas dificuldades também não existem para o caso isotrópico com h identicamente nulo. Para a variação da magnetização com a temperatura observamos que o campo magnético estabiliza a ordem de longo alcance o que pode ser visto na fig. 4.1.2.3.4. O limite de validade é dado pela igualdade

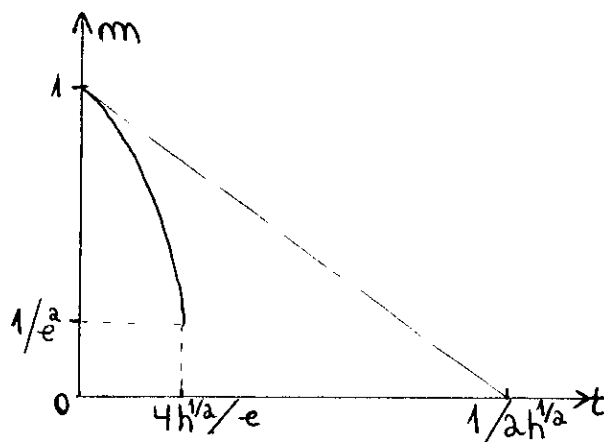


Figura 4.1.2.3.4 - Evolução térmica da magnetização.

$$m^{1/2} = \frac{t}{4h^{1/2}}$$

O valor da magnetização fazendo a substituição em (4.1.2.3.13) é $m = e^{-2}$ o que dá para a temperatura - $t = 4h^{1/2}/e$. Fazendo $h \rightarrow 0$ reobtemos a magnetização do caso isotrópico, desde que respeitemos sempre a restrição estabelecida anteriormente.

4.1.2.4 - Função de Correlações

A relação para a função de correlações estabelecida em (16) subsiste para o caso à uma dimensão, e portanto, podemos escrever

$$\begin{aligned} S(R) &= \langle (\cos\theta_i - m)(\cos\theta_{i'} - m) \rangle_0 = \langle \cos\theta_i \cos\theta_{i'} \rangle_0 - m^2 \\ &= m^2 (\cos h \langle \theta_i \theta_{i'} \rangle_0 - 1) \\ &\sim \frac{m^2}{2} \langle \theta_i \theta_{i'} \rangle_0^2 \end{aligned}$$

onde a equivalência é obtida no limite $R/a \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned}
 \langle \theta_i \theta_{i'} \rangle_0 &= \frac{t}{2} \frac{a}{\pi} \int_B \frac{\cos(Rq)}{K(1-\cos aq) + \frac{hm}{2}} dq \\
 &\sim \gamma_3 \frac{t}{K} \frac{2}{a\pi} \int_0^{\pi/a} \frac{\cos(Rq)}{q^2 + \frac{hm}{Ka^2}} dq \\
 &\sim \gamma_3 \frac{t}{K} \frac{\xi}{a} \exp(-R/\xi)
 \end{aligned}$$

onde $\xi \equiv a(K/hm)^{1/2}$ é o comprimento de correlação para as flutuações do parâmetro de ordem e γ_3 é um número puro da ordem da unidade. Para a função de correlações temos:

$$S(R) \propto t^2 \left(\frac{\xi}{a}\right)^2 e^{-2R/\xi}$$

Respeitando a restrição estabelecida em 4.1.2.3 entre t e h observamos a divergência de ξ quando a temperatura fixa o campo decresce ou quando a campo fixo a temperatura cresce. Isto implica em flutuações correlacionadas a longas distâncias destruindo a ordem de longo alcance. Comparando com o obtido a duas dimensões

$$S(R) \propto t^2 \left(\frac{\xi}{R}\right)^2 \exp(-2R/\xi)$$

vemos que a presença de R no denominador para este caso faz com que a função de correlações decaia mais rapidamente do que a uma dimensão, como é de se esperar.

4.1.3 - Anisotropia Local no Espaço dos Spins

4.1.3.1 - Modelo

Adicionamos ao hamiltoniano (4.1.1.1.1) o termo

$$- \frac{A}{S^2} \sum_i (S_i^x)^2 \quad (A \geq 0)$$

o qual é uma contribuição provinda do campo cristalino⁽⁵³⁾ que destrói a invariância rotacional do modelo XY. A menos de uma constante aditiva podemos escrever

$$H = \sum_i \frac{L_i^2}{2I} - J \sum_i \left\{ \cos(\theta_{i+1} - \theta_i) + \frac{\alpha}{2} \cos(2\theta_i) \right\} \quad (4.1.3.1.14)$$

onde $\alpha \equiv \frac{A}{J}$. Usando o hamiltoniano variacional definido pela eq. (4.1.1.2.4) pode-se calcular

$$\langle H \rangle_0 = \frac{NK_B T}{2} - JN \left(K + \frac{\alpha}{2} m^4 \right)$$

Construindo a energia livre variacional \bar{F} e minimizando obtemos:

$$c_q = J \left[K(1 - \cos aq) + \alpha m^4 \right] \quad \forall q \in B \quad (4.1.3.1.15)$$

e daí

$$K \ln K + 2\alpha m^4 \ln m = -t \quad (4.1.3.1.16)$$

Estas duas relações (4.1.3.1.15) e (4.1.3.1.16) generalizam (4.1.1.2.8) e (4.1.1.2.9), respectivamente.

4.1.3.2 - Espectro de Mãgnons

O termo de anisotropia introduzido no hamiltoniano cumpre um papel semelhante ao campo magnético, portanto, analogamente ao discutido em 4.1.2.2, surge um "gap" no espectro de mãgnons ($\Omega_q \propto c_q$) que tende a desaparecer com a diminuição da anisotropia ou com o aumento da temperatura.

4.1.3.3 - Ordem de Longo Alcance, Função de Correlações e Susceptibilidade

Analogamente a 4.1.2.3 obtemos para fracas anisotropias ($\alpha \ll 1$)

$$m \approx \exp - \frac{t}{2\sqrt{2}} \frac{1}{(K\alpha m^4)^{1/2}} \quad (4.1.3.3.17)$$

Surge na análise de m uma restrição entre t e α semelhante à restrição entre t e h estabelecida em 4.1.2.3

$$m^2 > \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{t}{\alpha^{1/2}}$$

que limita a região de resultados físicos aceitáveis para a magnetização m , ou seja, a região onde $\frac{\partial m}{\partial t} < 0$. A evolução térmica desse parâmetro é mostrada na fig. 4.1.3.3.5. Como no caso discutido em 4.1.2.3, temos o limite de validade que é dado por

$$m^2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{t}{\alpha^{1/2}}$$

obtendo-se para a magnetização, neste limite, o valor $m=e^{-1/2}$.

e para a temperatura - $t = \frac{(2\alpha)^{1/2}}{e}$. Fazendo $\alpha \rightarrow 0$ reobtemos o caso isotrópico.

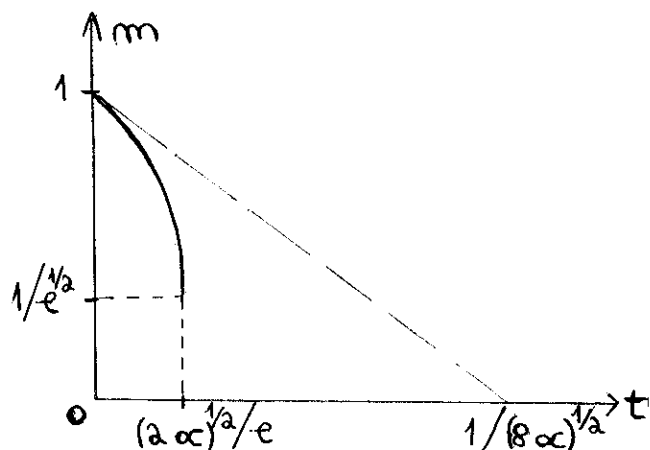


Figura 4.1.3.3.5 - Evolução térmica da magnetização.

No limite $R \gg \xi \equiv a(K/2\alpha m^4)^{1/2} \gg a$ obtemos para a função de correlações a expressão

$$S(R) \propto m^2 t^2 \left(\frac{\xi}{a}\right)^2 \exp(-2R/\xi)$$

E para a susceptibilidade isotérmica

$$\chi_T \propto \frac{1}{t} \int S(R) \propto m^2 t \xi^2 \int \exp(-2R/\xi) dR \propto m^2 t \xi^3 \propto \frac{t}{\alpha^{3/2} m^4}$$

Respeitando a restrição levantada anteriormente entre t e α , podemos representar a dependência da susceptibilidade isotérmica com a temperatura como indicado na fig. 4.1.3.3.6. A inclina

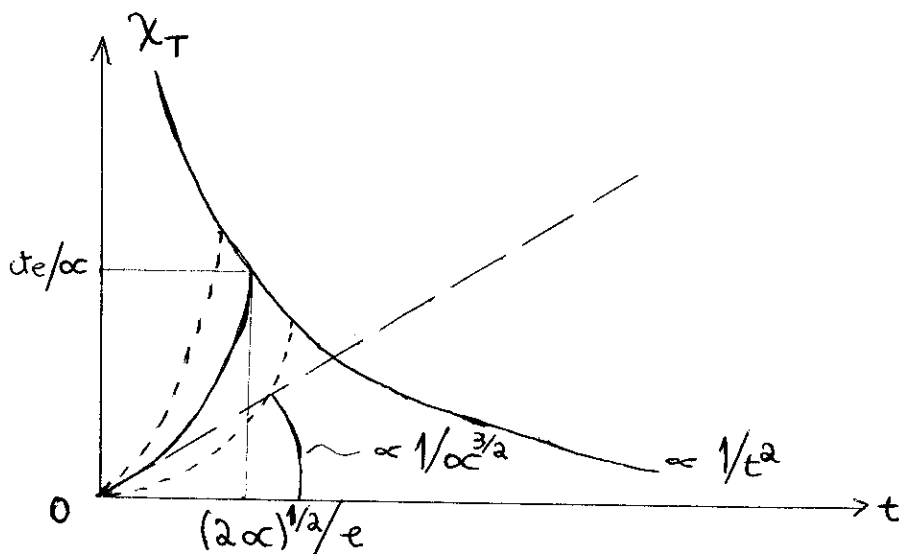


Figura 4.1.3.3.6 - Susceptibilidade isotérmica como função da temperatura.

ção da curva χ_T vs t é positiva em toda a região permitida e tende a infinito quando nos aproximamos do limite de validade. Neste ponto o valor da susceptibilidade é $\chi_T \propto \frac{1}{\alpha}$. Se fizermos $\alpha \rightarrow 0$ o valor de t que delimita a região permitida pela restrição diminui e a inclinação cresce rapidamente. É bom observar que para cada valor da anisotropia o valor máximo permitido para a susceptibilidade ($\chi_T = \text{cte}/\alpha$) se ajusta a um ponto de uma curva do tipo $1/t^2$ que é a dependência na temperatura obtida para a susceptibilidade no caso isotrópico.

4.1.4 - Anisotropia de Acoplamento no Espaço dos Spins

4.1.4.1 - Modelo

Consideremos agora o hamiltoniano

$$H = \sum_i \frac{L_i^2}{2I} - \frac{J_x}{S^2} \sum_i \{S_i^x S_{i+1}^x\} - \frac{J_y}{S^2} \sum_i \{S_i^y S_{i+1}^y\}$$

onde $J_x \geq J_y > 0$. Esta forma de anisotropia vem de um tipo de contribuição menos frequente que a considerada em 4.1.3 mas associada também ao campo cristalino⁽⁵³⁾. Podemos escrever o hamiltoniano como se segue

$$H = \sum_i \frac{L_i^2}{2I} - J \sum_i \left\{ \cos(\theta_{i+1} - \theta_i) + \alpha \cos(\theta_{i+1} + \theta_i) \right\} \quad (4.1.4.1.18)$$

onde $J \equiv \frac{J_x + J_y}{2}$ e $\alpha \equiv \frac{1}{2} \frac{(J_x - J_y)}{J}$

Usando o hamiltoniano variacional definido pela eq. (4.1.1.2.4) chega-se a

$$\langle H \rangle_0 = \frac{NK_B T}{2} - JN \overline{[K + \alpha L]}$$

Construindo a energia livre variacional e minimizando obtemos:

$$c_q = J \overline{[K(1 - \cos aq) + \alpha L(1 + \cos aq)]} \quad \forall q \in B \quad (4.1.4.1.19)$$

e daí:

$$K \ell_n K + \alpha L \ell_n L = -t \quad (4.1.4.1.20)$$

Com isso generalizamos (4.1.1.2.8) e (4.1.1.2.9) como sucedeu também com a anisotropia local em 4.1.3.

4.1.4.2 - Ordem de Longo Alcance, Espectro de M \ddot{a} gnons, Função de Correlações e Susceptibilidade

Os resultados são análogos aos obtidos em 4.1.3 com um comprimento de correlação dado por

$$\xi \equiv a(K/8\alpha L)^{1/2}$$

Não consideramos anisotropias cristalinas visto que o teorema de Mermin-Wagner aplica-se somente a sistemas isotrópicos no espaço dos spins, a anisotropia cristalina portanto não interfere na discussão realizada neste trabalho.

4.2 - CASO QU \ddot{A} NTICO

4.2.1 - Isotrópico no Espaço dos Spins

4.2.1.1 - Modelo

Consideremos um cristal unidimensional com as mesmas características que as descritas para o caso clássico em 4.1.1.1. Supondo os spins com comprimento S qualquer podemos tratar o sistema com o método variacional em Mecânica Estatística Quântica utilizando o mesmo hamiltoniano proposto para o caso clássico. Portanto podemos escrever

$$H = \sum_i \frac{L_i^2}{2I} - \frac{J}{S^2} \sum_i \left\{ S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y \right\} \quad (4.2.1.1.21)$$

onde L_i é o operador momento angular canonicamente conjugado a θ_i (ver fig. 4.1.1.1.1). Podemos reescrever o hamiltoniano na forma

$$H = \sum_i \frac{L_i^2}{2I} - J \sum_i \left\{ \cos(\theta_{i+1} - \theta_i) \right\}$$

4.2.1.2 - Tratamento

Como em 4.1.1.2 as configurações mais frequentes são aquelas nas quais $\theta_{i+1} - \theta_i \approx 0 \quad \forall i$ e que não caracterizam necessariamente ordem de longo alcance. Assim podemos aproximar o hamiltoniano como no caso clássico:

$$H \approx H' = \sum_i \frac{L_i^2}{2I} + \frac{J}{2} \sum_i \left\{ (\theta_{i+1} - \theta_i)^2 \right\} \quad (4.2.1.2.2.2)$$

Este é o hamiltoniano de um conjunto de N osciladores angulares harmônicos acoplados. Com as transformações:

$$\theta_q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{iqR_i^{i'}} \theta_i \quad (4.2.1.2.23)$$

$$L_q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{iqR_i^{i'}} L_i \quad (4.2.1.2.23')$$

temos:

$$H' = \sum_q \frac{|L_q|^2}{2I} + J \sum_q (1 - \cos aq) |\theta_q|^2 \quad (4.2.1.2.24)$$

Este é o hamiltoniano de um conjunto de N osciladores angulares harmônicos independentes e o seu tratamento em Mecânica Estatística Quântica é conhecido⁽⁵⁴⁾. Para o tratamento que nos propomos a fazer consideramos o hamiltoniano variacional

$$H_0 = \sum_q \frac{|L_q|^2}{2I} + \sum_q c_q |\theta_q|^2 \quad (4.2.1.2.25)$$

A matriz densidade é dada por

$$\rho_0 = \frac{\exp(-\beta H_0)}{\text{Tr} \exp(-\beta H_0)}$$

e o princípio de equipartição fica:

$$c_q \langle |\theta_q|^2 \rangle_0 = \frac{\hbar}{4} \left(\frac{c_q}{I}\right)^{1/2} \cot h \left[\frac{\beta \hbar}{2} \left(\frac{c_q}{I}\right)^{1/2} \right] \quad (4.2.1.2.26)$$

$$\frac{\langle |L_q|^2 \rangle_0}{2I} = \frac{\hbar}{4} \left(\frac{c_q}{I}\right)^{1/2} \cot h \left[\frac{\beta \hbar}{2} \left(\frac{c_q}{I}\right)^{1/2} \right] \quad (4.2.1.2.27)$$

A função de partição é dada por⁽⁵⁴⁾:

$$Z_0 = \prod_q \frac{1}{2 \sinh \left[\frac{\beta \hbar}{2} \left(\frac{c_q}{I} \right)^{1/2} \right]}$$

e a entropia

$$S_0 = K_B \beta \sum_q \left\{ \frac{\hbar}{2} \left(\frac{c_q}{I} \right)^{1/2} \coth \left[\frac{\beta \hbar}{2} \left(\frac{c_q}{I} \right)^{1/2} \right] \right\} -$$

$$- K_B \sum_q \left\{ \ell n \sinh \left[\frac{\beta \hbar}{2} \left(\frac{c_q}{I} \right)^{1/2} \right] \right\} + \text{cte.}$$

Como as propriedades da lei gaussiana citadas nas relações (4.1.1.2.7) persistem no caso quântico⁽⁵⁵⁾ e as definições introduzidas em 4.1.1.2 para t , η , K , L , m não se alteram podemos construir a energia livre variacional:

$$\bar{F} = - \sum_q \frac{\hbar}{4} \left(\frac{c_q}{I} \right)^{1/2} \coth \left[\frac{\beta \hbar}{2} \left(\frac{c_q}{I} \right)^{1/2} \right] -$$

$$- NJK + \frac{1}{\beta} \sum_q \ell n \sinh \left[\frac{\beta \hbar}{2} \left(\frac{c_q}{I} \right)^{1/2} \right]$$

A minimização da energia livre nos dá

$$c_q = JK(1 - \cos aq) \quad (4.2.1.2.28)$$

Substituindo nas relações do princípio de equipartição (4.2.1.2.26) temos

$$n_q = \frac{1}{4} \left(\frac{\hbar^2}{JKI} \right)^{1/2} \frac{1}{(1 - \cos aq)^{1/2}} \coth \left[\frac{\beta \hbar}{2} \left(\frac{JK}{I} \right)^{1/2} (1 - \cos aq)^{1/2} \right]$$

E daí, obtemos para K a expressão

$$K = \exp \left\{ - \frac{1}{4} \left(\frac{\hbar^2}{JKI} \right)^{1/2} \frac{a}{2\pi} \int (1 - \cos aq)^{1/2} \coth \left[\frac{1}{4} \left(\frac{\hbar^2 K}{JI} \right)^{1/2} \frac{(1 - \cos aq)^{1/2}}{t} \right] dq \right\} \quad (4.2.1.2.29)$$

onde utilizamos no limite do quase-contínuo

$$\frac{1}{N} \sum_q \rightarrow \frac{a}{2\pi} \int dq \quad \text{se } N \rightarrow \infty$$

Adicionando e subtraindo a unidade a $\coth[\dots]$ na integral obtém-se

$$K = \left\{ \exp \left[- \frac{1}{4} \left(\frac{\hbar^2}{JKI} \right)^{1/2} \frac{a}{2\pi} \int_B (1 - \cos aq)^{1/2} dq \right] \right\} \times \\ \times \left\{ \exp \left[- \frac{1}{4} \left(\frac{\hbar^2}{JKI} \right)^{1/2} \frac{a}{2\pi} \int_B (1 - \cos aq)^{1/2} \left[\coth \left[\frac{1}{4} \left(\frac{\hbar^2 K}{JI} \right)^{1/2} \frac{(1 - \cos aq)^{1/2}}{t} \right] - 1 \right] dq \right] \right\}$$

Para $t = 0$

$$K(0) = \exp \left[- \frac{1}{4} \left(\frac{\hbar^2}{JK(0)I} \right)^{1/2} \frac{a}{2\pi} \int_B (1 - \cos aq)^{1/2} dq \right]$$

o que nos dá

$$K(0)^{1/2} \ln K(0) = - \frac{1}{\sqrt{2} \pi} \left(\frac{\hbar^2}{JI} \right)^{1/2} \quad (4.2.1.2.30)$$

O comportamento do coeficiente de renormalização à temperatura nula em função dos parâmetros do sistema é mostrado na figura 4.2.1.2.7 e da análise de (4.2.1.2.30) podemos estabelecer o limite de validade do tratamento

$$0 \leq \frac{1}{\sqrt{2} \pi} \left(\frac{\hbar^2}{JI} \right)^{1/2} < \frac{2}{e}$$

ou

$$0 \leq \left(\frac{\hbar^2}{JI} \right)^{1/2} \leq 3,27$$

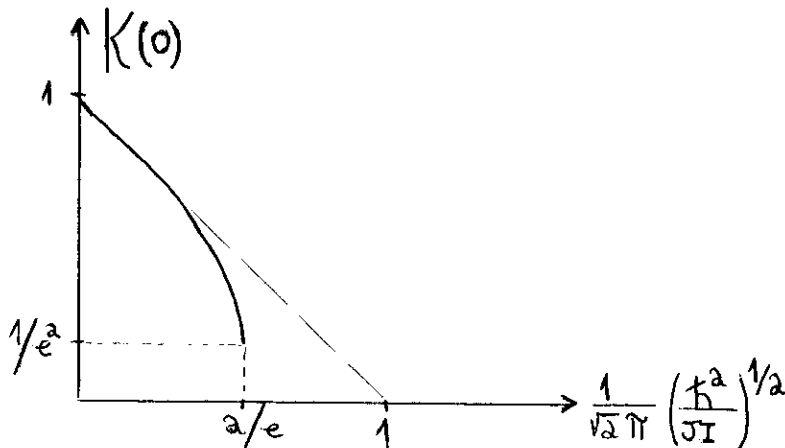


Figura 4.2.1.2.7 - Comportamento do coeficiente de renormalização a $t = 0$ em relação aos parâmetros do sistema.

Edwards⁽⁴⁵⁾ obteve para a relação entre os parâmetros J, I do sistema e

a constante de Planck o valor $\frac{\hbar^2}{JI} = \frac{8}{e}$ o que se ajusta perfeitamente dentro dos limites de validade considerados logo acima.

Para temperaturas finitas porém próximas de zero e considerando-se $q \approx 0$, temos:

$$K \sim K(0) \exp - \frac{\gamma_4}{\frac{\pi}{4\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar^2}{JI} \right)^{1/2} K^{3/2}} \cdot t^2 \quad (4.2.1.2.31)$$

onde $K(0)$ engloba agora todas as constantes surgidas do desenvolvimento para $q \approx 0$ e $\gamma_4 = \int_0^\infty [\coth(x) - 1] dx$ - o limite superior surge considerando-se $t \rightarrow 0$. Fazendo o desenvolvimento da exponencial para pequenas temperaturas observamos que o tratamento quântico dá uma inclinação nula para K se $t \rightarrow 0$ - o que se ajusta ao Terceiro Princípio da Termodinâmica no sentido de anular o calor específico $(\alpha = \frac{dK}{dt})$ à temperatura nula. O comportamento de K a baixas temperaturas é mostrado na figura

4.2.1.2.8. O valor estimado para $K(0)$ (inferior à unidade) deve-se ao fato de que no tratamento quântico as flutuações não se anulam mesmo no estado fundamental. A dependência do calor es-

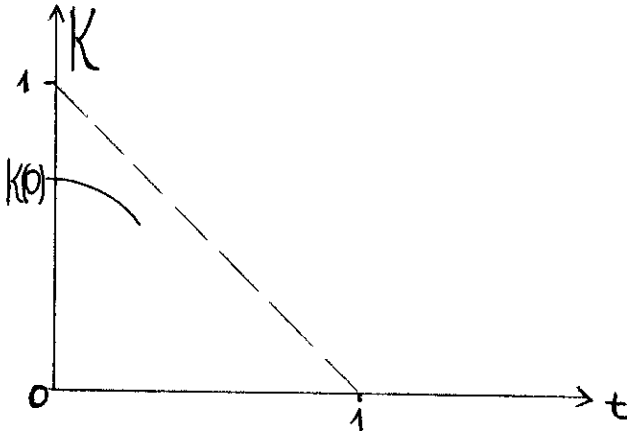


Figura 4.2.1.2.8 - Comportamento do coeficiente de renormalização com a temperatura.

pecífico com a temperatura $-c \propto -\frac{dK}{dt} \propto t$ é típica de sistemas unidimensionais de osciladores.

Calculamos ainda

$$L = \exp \left\{ -\frac{1}{4} \left(\frac{\hbar^2}{JKI} \right)^{1/2} \frac{a}{2\pi} \int \frac{1 + \cos aq}{(1 - \cos aq)^{1/2}} \coth \left[\frac{1}{4} \left(\frac{\hbar^2 K}{JI} \right)^{1/2} \frac{(1 - \cos aq)^{1/2}}{t} \right] dq \right\}$$

Para $t = 0$ temos

$$L(0) = \exp - \frac{1}{4} \left(\frac{\hbar^2}{JK(0)I} \right)^{1/2} \int_B \frac{1 + \cos aq}{(1 - \cos aq)^{1/2}} dq$$

$$= 0$$

Para temperaturas finitas porém próximas de zero podemos considerar $K(t) \approx K(0)$ e devido à monotonia da $\coth[\dots]$ concluímos que $L(t) = 0$. Daí:

$$L(t) = 0 \quad \forall t$$

4.2.1.3 - Ordem de Longo Alcance

Tendo em conta a relação $m = (KL)^{1/4}$ obtemos

$$m(t) = 0 \quad \forall t$$

Podemos explicar a ausência de ordem de longo alcance mesmo para o estado fundamental como devida às flutuações residuais possíveis pelo tratamento quântico. Voltaremos a esta questão na Seção 4.2.1.5.

4.2.1.4 - Espectro de Mágons

A relação (4.2.1.2.28) nos conduz a

$$c_q = JK(1-\cos aq) \sim \frac{JKa^2}{2} q^2 \quad \text{se } q \rightarrow 0$$

Obtemos, portanto, como era de se esperar⁽⁴⁸⁾, a mesma relação que a obtida para a frequência de mágons no caso clássico. A única diferença reside no comportamento de K em cada caso.

4.2.1.5 - Função de Correlações

Como em 4.1.1.5, temos:

$$S(R) = \frac{1}{2} K_i^{i'}$$

$$= \frac{1}{2} \exp \left\{ -\frac{1}{4} \left(\frac{\hbar^2}{JKI} \right)^{1/2} \frac{a}{2\pi} \int_B \frac{1-\cos(Rq)}{(1-\cos aq)^{1/2}} \coth \left[\frac{1}{4} \left(\frac{\hbar^2 K}{JI} \right)^{1/2} \frac{(1-\cos aq)^{1/2}}{t} \right] dq \right\}$$

Para $t = 0$ temos

$$S(R) = \frac{1}{2} \exp - \frac{1}{4} \left(\frac{\hbar^2}{JK(0)I} \right)^{1/2} \frac{a}{2\pi} \int_B \frac{1-\cos(Rq)}{(1-\cos aq)^{1/2}} dq$$

e no limite $R \gg a$ (processo semelhante ao efetuado no Apêndice B)

$$S(R) \sim \gamma_5 \left(\frac{a}{R}\right)^\Delta$$

onde γ_5 é um número puro da ordem da unidade e

$$\Delta = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{\hbar^2}{JK(0)I}\right)^{1/2} \quad (4.2.1.5.32)$$

Com este resultado temos

$$\lim_{R \rightarrow \infty} S(R) = 0$$

o que nos permite concluir pela ausência de ordem de longo alcance mesmo para o estado fundamental. Resultados similares foram obtidos por McCoy⁽⁵⁶⁾ para a função de correlações do modelo XY isotrópico com spins 1/2 onde $\Delta = 0,5$ e por Villain para cadeias planares a baixas temperaturas e spins grandes, onde $\Delta = 0,45$. Com a estimativa dada por Edwards para \hbar^2/JI obtemos, através de (4.2.1.5.32), $\Delta = 0,37$; resultado condizente com os modelos citados logo acima e que reforça a validade do tratamento empregado.

Para $t \neq 0$ (ver Apêndice C)

$$S(R) \sim \gamma_6 \left\{ \arctang \left[\frac{t}{\frac{1}{4\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar^2 K}{JI}\right)^{1/2}} \right] \right\} \frac{1}{\sqrt{2} \pi} \left(\frac{\hbar^2}{JKI}\right)^{1/2} \cdot \left\{ \exp -R/\xi \right\} \cdot f_2(t)$$

onde γ_6 é um número puro da ordem da unidade, $\xi \equiv a\pi K/3t$ e

$$f_2(t) \equiv \exp \left\{ \frac{1}{2\pi K} \frac{t}{\operatorname{arctg} \left[\frac{t}{\frac{1}{4\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar^2 K}{J I} \right)^{1/2}} \right]} - \frac{1}{24\pi} \frac{\hbar^2}{J I} \frac{1}{t} \cdot \operatorname{arctg} \left[\frac{t}{\frac{1}{4\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar^2 K}{J I} \right)^{1/2}} \right]} \right\}$$

e

$$f_2(t) \sim \exp - \frac{5}{24\pi\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar^2}{J K I} \right)^{1/2} \quad \text{se } t \rightarrow 0$$

Para $t \rightarrow 0$

$$S(R) \sim \gamma_7 t^{\Delta_1} \exp(-R/\xi)$$

onde $\Delta_1 \equiv \frac{1}{\sqrt{2}\pi} \left(\frac{\hbar^2}{J K I} \right)^{1/2}$ e repete-se o comportamento, em R, obtido no caso clássico. Se tomarmos agora o limite $\hbar \rightarrow 0$ reobtemos integralmente o caso clássico. $\xi \propto \frac{1}{t}$ expressa o fato que tanto em clássica como em quântica sistemas unidimensionais não mostram ordem de longo alcance para temperaturas finitas. A diferença básica de um caso para outro surge à medida que nos aproximamos do zero absoluto.

4.2.1.6 - Susceptibilidade

Como definido em 4.1.1.6

$$\chi_T \equiv \frac{1}{4t} \int_1^{\infty} S(R_i^{i'}) \quad (*)$$

(*) Uma rápida justificativa para a utilização desta expressão no caso quântico reside no fato de que o comportamento para distâncias macroscópicas, mesmo a baixas temperaturas, não é alterado substancialmente tratando o sistema quer clássica ou quanticamente.

$$\begin{aligned} &\sim \frac{\gamma_7}{4} t^{\Delta_1-1} \sum_i \exp\left(-\frac{|R_i^i|}{\xi}\right) \\ &\sim t^{\Delta_1-1} \int_{R_0}^{\infty} \exp\left(-\frac{3t}{\pi K} \frac{R}{a}\right) dR \\ &\sim t^{\Delta_1-2} \end{aligned}$$

O comportamento da susceptibilidade é determinado, segundo a definição de Δ_1 em 4.2.1.5, pelas relações

$$\begin{aligned} \Delta_1-2 > 0 &\iff K^{1/2} < \frac{1}{2\sqrt{2}\pi} \left(\frac{\hbar^2}{J_1}\right)^{1/2} \\ \Delta_1-2 = 0 &\iff K^{1/2} = \frac{1}{2\sqrt{2}\pi} \left(\frac{\hbar^2}{J_1}\right)^{1/2} \\ \Delta_1-2 < 0 &\iff K^{1/2} > \frac{1}{2\sqrt{2}\pi} \left(\frac{\hbar^2}{J_1}\right)^{1/2} \end{aligned}$$

Note-se que para $\hbar \rightarrow 0$ reobtemos o comportamento clássico discutido em 4.1.1.6, onde $\chi_T \sim 1/t^2$. No intervalo de temperaturas que trabalhamos podemos considerar $K \approx K(0)$ e reportando-nos à discussão efetuada em 4.2.1.4 (ver fig. 4.2.1.2.7), podemos concluir que a única solução fisicamente possível é $\Delta_1-2 < 0$. Isto nos dá a susceptibilidade divergente para $t \rightarrow 0$.

O comportamento do parâmetro de ordem — $m(t) = 0 \forall t$ — e da susceptibilidade — $\chi_T \rightarrow \infty$ para $t \rightarrow 0$ — sugere a existência no modelo unidimensional de um tipo de transição de curto alcance, com o zero absoluto fazendo o papel de temperatura crítica, similar à obtida em modelos bidimensionais, observando-se que as flutuações provindas do tratamento quântico não

permitem ordem de maior alcance no sistema.

4.2.2 - Sistema em Presença de um Campo Magnético Externo

4.2.2.1 - Modelo

Em presença de um campo magnético paralelo ao eixo x podemos escrever o hamiltoniano (ver 4.1.2.1) do sistema como:

$$H = \sum_i \frac{L_i^2}{2I} - J \sum_i \left\{ \cos(\theta_{i+1} - \theta_i) + h \cos \theta_i \right\}$$

Propondo, como anteriormente, um hamiltoniano variacional na forma

$$H_0 = \sum_q \frac{|L_q|^2}{2I} + \sum_q c_q |\theta_q|^2$$

obtemos a energia livre variacional

$$\begin{aligned} \bar{F} = & - \sum_q \frac{\hbar}{4} \left(\frac{c_q}{I}\right)^{1/2} \coth \left[\frac{\beta \hbar}{2} \left(\frac{c_q}{I}\right)^{1/2} \right] - \\ & - JN(K+hm) + K_B T \sum_q \ln \sinh \left[\frac{\beta \hbar}{2} \left(\frac{c_q}{I}\right)^{1/2} \right] \end{aligned}$$

A condição de minimização nos dá:

$$c_q = J \left[K(1 - \cos aq) + \frac{hm}{2} \right] \quad (4.2.2.1.33)$$

4.2.2.2 - Ordem de Longo Alcance e Susceptibilidade

Para a magnetização reduzida temos

$$m = \exp - \frac{1}{8} \left(\frac{\hbar^2}{J\Gamma} \right)^{1/2} \frac{a}{2\pi} .$$

$$\cdot \int_B \frac{1}{\left[K(1-\cos aq) + \frac{hm}{2} \right]^{1/2}} \coth \left[\frac{\beta \hbar}{2} \left(\frac{J}{\Gamma} \right)^{1/2} \left(K(1-\cos aq) + \frac{hm}{2} \right)^{1/2} \right] dq$$

Para $t = 0$ temos

$$m(0, h) = \exp - \frac{1}{8} \left(\frac{\hbar^2}{J\Gamma} \right)^{1/2} \frac{a}{2\pi} \int \frac{1}{\left[K(1-\cos aq) + \frac{hm}{2} \right]^{1/2}} dq$$

$$\sim \gamma_8 \exp - \frac{1}{4\sqrt{2}\pi} \left(\frac{\hbar^2}{JK\Gamma} \right)^{1/2} \int_0^{\pi/2} \frac{dx}{\left[x^2 + \frac{hm}{4K} \right]^{1/2}}$$

$$\sim \gamma_9 \left[h m(0, h) \right]^{\Delta_2(0)}$$

onde γ_8, γ_9 são números puros da ordem da unidade e $\Delta_2(t) \equiv \frac{1}{8\pi\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar^2}{JK\Gamma} \right)^{1/2}$. Da expressão acima podemos tirar

$$m(0, h) \sim h \left(\Delta_2(0) / 1 - \Delta_2(0) \right) \quad (4.2.2.2.34)$$

E daí para a susceptibilidade

$$\begin{aligned} \chi_0 &= \lim_{h \rightarrow 0} \left. \frac{\partial m(0, h)}{\partial h} \right|_{T=0} \\ &\sim \lim_{h \rightarrow 0} \left\{ \frac{\Delta_2(0)}{1 - \Delta_2(0)} \right\} \cdot h \left[-1 + 2\Delta_2(0) / 1 - \Delta_2(0) \right] \end{aligned}$$

O comportamento da susceptibilidade vai depender da constante $\Delta_2(0)$. Para $T = 0$ temos um limite de validade para o modelo, estabelecido em 4.2.1.2. Como $\hbar \ll 1$ podemos tomar este limite como referência e ele só é respeitado para $0 < \Delta_2(0) < \frac{1}{4}$. Isto nos leva a um expoente negativo para \hbar e portanto

$$\chi_0 = \infty \quad \text{para} \quad T = 0 \quad (\text{ou } t = 0)$$

Considerando a magnetização $m(0, \hbar)$ dada na relação (4.2.2.2.34) e fazendo agora $\hbar \rightarrow 0$, observamos novamente a anulação desta mesma temperatura nula. O campo magnético portanto induz ordem de longo alcance à temperatura nula. Para $T \neq 0$ ($t \neq 0$) e considerando $\hbar \ll t$ temos:

$$m \sim \gamma_{10} \exp - \frac{1}{4\sqrt{2}\pi} \left(\frac{\hbar^2}{JKI} \right)^{1/2} \int_0^{\pi/2} \frac{1}{(x^2 + \frac{\hbar m}{4K})^{1/2}} \cdot \\ \cdot \coth \left[\frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar^2 K}{JI} \right)^{1/2} \frac{1}{t} (x^2 + \frac{\hbar m}{4K})^{1/2} \right] dx$$

Dividindo-se a integral de modo a que se possa expandir a $\coth[\dots]$ obtemos para pequenas temperaturas (ver Apêndice D):

$$m \sim \gamma_{11} t^{2\Delta_2(t)} \left\{ \exp - \frac{t}{2(K\hbar m)^{1/2}} \right\} f_3(t)$$

onde γ_{10}, γ_{11} são números puros da ordem da unidade e $f_3(t) \equiv \exp - \frac{\sqrt{2}}{24} (\hbar^2/JKI)^{1/2}$. Para $\hbar \rightarrow 0$ reobtemos o caso clássico. Fixando a temperatura podemos considerar

$$m \sim \gamma_{12} \exp - \frac{t}{2(Khm)^{1/2}}$$

expressão semelhante ã obtida em 4.1.2.3. Ressurge aqui a mesma dificuldade de anteriormente com uma restrição entre t e h que determina uma região de soluções para m . A expressão obtida para a magnetização m foi alcançada fazendo $h \ll t$. Para alcançar a região de soluções de m teríamos que fazer $t \rightarrow 0$ o que representaria desde logo uma incoerência com a própria expressão obtida para m em vista da aproximação considerada.

4.2.2.3 - Função de Correlações

Como em 4.1.2.4

$$S(R) \sim \frac{m^2}{2} \langle \theta_i \theta_{i'} \rangle_0^2$$

onde

$$\begin{aligned} \langle \theta_i \theta_{i'} \rangle_0 &= \frac{1}{4} \left(\frac{h^2}{J\Gamma} \right)^{1/2} \frac{a}{2\pi} \int_B \frac{\cos(Rq)}{\left[K(1-\cos aq) + \frac{hm}{2} \right]^{1/2}} \cdot \\ &\cdot \coth \left[\frac{\beta h}{2} \left(\frac{J}{\Gamma} \right)^{1/2} \left[K(1-\cos aq) + \frac{hm}{2} \right]^{1/2} \right] dq \end{aligned}$$

Para $T = 0$ (ver Apêndice E)

$$\langle \theta_i \theta_{i'} \rangle_0 = \frac{1}{4} \left(\frac{h^2}{J\Gamma} \right)^{1/2} \frac{a}{2\pi} \int_0^{\pi/a} \frac{\cos(Rq)}{\left[K \cdot (1-\cos aq) + \frac{hm}{2} \right]^{1/2}} dq$$

$$\begin{aligned} &\sim \gamma_{13} \frac{1}{\sqrt{2}\pi} \left(\frac{\hbar^2}{JKI}\right)^{1/2} \int_0^{\pi\xi/a} \frac{\cos(R/\xi x)}{(x^2+1)^{1/2}} dx \\ &\sim \gamma_{14} \left(\frac{\xi}{R}\right)^{1/2} \exp(-R/\xi) \end{aligned}$$

Isto leva a

$$S(R) \propto \frac{\xi}{R} \exp(-2R/\xi)$$

onde γ_{13}, γ_{14} são números puros da ordem da unidade e $\xi \equiv \equiv a(K/\hbar m)^{1/2}$. A ressaltar a semelhança com a função de correlações obtida para o caso clássico a duas dimensões ⁽¹⁶⁾ para temperaturas diferentes de zero. Se o campo decresce obtemos a divergência de ξ , isto é, as flutuações ficam correlacionadas a grandes distâncias destruindo a ordem.

Para $T \neq 0$

$$\langle \theta_i \theta_{i'} \rangle_0 \sim \gamma_{15} \frac{1}{2\sqrt{2}\pi} \left(\frac{\hbar^2}{JKI}\right)^{1/2} \int_0^{\pi\xi/a} \frac{\cos(R/\xi x)}{(x^2+1)^{1/2}} \coth \left[\frac{1}{4\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar^2 K}{JI}\right)^{1/2} \frac{a}{\xi} \frac{(x^2+1)^{1/2}}{t} \right] dx$$

Considerando $\hbar \ll t, R \gg \xi \gg a$ temos (ver Apêndice E):

$$S(R) \sim \gamma_{16} t^2 \left(\frac{\xi}{a}\right)^2 \exp(-2R/\xi)$$

onde γ_{15}, γ_{16} são números puros da ordem da unidade. Reobtemos, como era de se esperar para grandes distâncias ^(42,43), o comportamento clássico discutido em 4.1.2.4 para a função de correlações. No entanto a aproximação $\hbar \ll t$ feita para se chegar a este resultado nos coloca fora da região de solução para m e as expressões para a função de correlações têm somente valor formal.

4.2.2.4 - Espectro de Mágns

Podemos nos reportar à discussão efetuada em 4.1.1.2. A única diferença do caso clássico para o caso quântico reside no comportamento de K.

4.2.3 - Anisotropia Local no Espaço dos Spins

4.2.3.1 - Modelo

Como em 4.1.3.1 adicionamos ao hamiltoniano (4.1.1.1) o termo $-\frac{A}{S^2} \sum_i (S_i^x)^2$ ($A \geq 0$) e podemos a menos de uma constante aditiva escrever

$$H = \sum_i \frac{L_i^2}{2I} - J \sum_i \left\{ \cos(\theta_{i+1} - \theta_i) + \frac{\alpha}{2} \cos(2\theta_i) \right\}$$

onde $\alpha \equiv A/J$. Procedemos como nos cálculos anteriores, isto é, definindo um hamiltoniano variacional, construindo a energia livre \bar{F} e minimizando $-\frac{\partial \bar{F}}{\partial c_q} = 0 \quad \forall q$ - obtemos:

$$c_q = J \left[K(1 - \cos aq) + \alpha m^4 \right]$$

4.2.3.2 - Ordem de Longo Alcance, Função de Correlações e Susceptibilidade

Analogamente a 4.2.2.2 obtemos para $t = 0$ e pequenos valores da anisotropia

$$m(0, \alpha) \propto \alpha \frac{\Delta_3(0)}{1 - \Delta_3(0)}$$

onde $\Delta_3(t) \equiv \frac{1}{8\sqrt{2}\pi} \left(\frac{\hbar^2}{JKI}\right)^{1/2}$ (difere de $\Delta_2(t)$ pelo fato de terem as fontes de anisotropia diferentes). No intervalo de valores da anisotropia considerado ($\alpha \ll 1$) podemos aproximar $K \approx K$ (isotrópico) e com isto temos na região de validade da teoria que $0 < \Delta_3(0) < \frac{1}{4}$. Para $t \neq 0$ e fracas anisotropias ($\alpha \ll t$) obtemos

$$m \sim \gamma_{17} t^{2\Delta_3(t)} \left\{ \exp - \frac{t}{2(K\alpha m^4)^{1/2}} \right\} f_4(t)$$

onde γ_{17} é um número puro da ordem da unidade e $f_4(t) \equiv \exp - \frac{\sqrt{2}}{4} \left(\frac{\hbar^2}{JKI}\right)^{1/2}$. A discussão a se levar aqui é similar à de 4.2.2.2 onde substituímos o campo magnético (h) por outra fonte de anisotropia no espaço dos spins (α).

A função de correlações fica, no limite $t \rightarrow 0$, dada por:

$$S(R) \sim m^2 \frac{\xi}{R} \exp(-2R/\xi)$$

e no limite de fracas anisotropias; \tilde{a} temperatura fixa:

$$S(R) \sim m^2 t^2 \left(\frac{\xi}{a}\right)^2 \exp-2R/\xi$$

onde $\xi \equiv a(K/2\alpha m^4)^{1/2}$. Para o primeiro caso - limite de $t \rightarrow 0$ - se fazemos decrescer a anisotropia, ξ diverge e as flutuações de origem quântica destroem a ordem de longo alcance que se instalou a $t = 0$. Para o segundo caso - t fixo $\alpha \ll t$ - como já discutido em 4.2.2.3 a aproximação de fracas anisotropias nos coloca fora da região de validade da teoria. As expressões da função da correlações e da susceptibilidade terão neste caso,

valor simplesmente formal.

4.2.3.3 - Espectro de Magnons

Ver 4.1.3.2.

4.2.4 - Anisotropia de Acoplamento no Espaço dos Spins

4.2.4.1 - Modelo

Como discutido em 4.1.4.1, temos o hamiltoniano

$$H = \sum_i \frac{L_i^2}{2I} - J \sum_i \left\{ \cos(\theta_{i+1} - \theta_i) + \alpha \cos(\theta_{i+1} + \theta_i) \right\}$$

o que nos leva, seguindo passos ja descritos anteriormente a:

$$c_q = J \left[K(1 - \cos aq) + \alpha L(1 + \cos aq) \right] \quad \forall q \in B$$

4.2.4.2 - Ordem de Longo Alcance, Espectro de Magnons Função de Correlaoes e Susceptibilidade

Os resultados sao analogs aos obtidos em 4.2.3, com um comprimento de correlaao dado por

$$\xi \equiv a(K/8\alpha L)^{1/2}$$

Como ja mencionado em 4.1.4.2, nao consideramos anisotropias cristalinas. A discussao de alguns aspectos mais gerais com relaao aos resultados obtidos neste capitulo sao deixados para a Conclusao.

CAPÍTULO V

MODELO XY BIDIMENSIONAL PARA SPINS COM MOMENTO DE INÉRCIA

Discutiremos aqui apenas o caso quântico visto que a consideração de spins com momento de inércia para o caso clássico não implica em alteração relevante para o cálculo, como pode ser verificado do estudo do sistema unidimensional em 4.1. Para efeito de comparação podemos, portanto, referirmo-nos ao trabalho de Tsallis ⁽¹⁶⁾.

5.1 - ISOTRÓPICO NO ESPAÇO DOS SPINS

5.1.1 - Modelo

Consideremos um cristal bidimensional, cíclico, com N sítios, cujo parâmetro cristalino denotamos a . Todo ponto da rede fica determinado, em relação a um sítio arbitrariamente escolhido como origem, pelos índices inteiros (i,j) . Para o tratamento em Mecânica Estatística Quântica reportamo-nos às considerações efetuadas em 4.2.1.1 escrevendo o hamiltoniano que se segue:

$$H' = \sum_{\vec{q}} \frac{|L_{\vec{q}}|^2}{2I} + \frac{J}{2} \sum_{\vec{q}} \left[2 - \cos(aq_x) - \cos(aq_y) \right] |\theta_{\vec{q}}|^2 \quad (5.1.2.2')$$

Este é o hamiltoniano de um conjunto de N osciladores harmônicos independentes a duas dimensões. Para o tratamento aproximado com o método variacional propomos um hamiltoniano de teste (ou variacional) do tipo:

$$H_0 = \sum_{\vec{q}} \frac{|L_{\vec{q}}|^2}{2I} + \sum_{\vec{q}} c_{\vec{q}} |\theta_{\vec{q}}|^2 \quad (5.1.2.3)$$

A matriz densidade associada a H_0 é dada por:

$$\rho_0 = \frac{\exp(-\beta H_0)}{\text{Tr} \exp(-\beta H_0)}$$

e o princípio de equipartição fica

$$c_{\vec{q}} \langle |\theta_{\vec{q}}|^2 \rangle_0 = \frac{\hbar}{4} \left(\frac{c_{\vec{q}}}{I} \right)^{1/2} \coth \left[\frac{\beta \hbar}{2} \left(\frac{c_{\vec{q}}}{I} \right)^{1/2} \right] \quad (5.1.2.4)$$

$$\frac{\langle |L_{\vec{q}}|^2 \rangle_0}{2I} = \frac{\hbar}{4} \left(\frac{c_{\vec{q}}}{I} \right)^{1/2} \coth \left[\frac{\beta \hbar}{2} \left(\frac{c_{\vec{q}}}{I} \right)^{1/2} \right] \quad (5.1.2.4')$$

Com a função de partição dada por ⁽⁵⁴⁾

$$Z_0 = \prod_{\vec{q}} \frac{1}{2 \sinh \left[\frac{\beta \hbar}{2} \left(\frac{c_{\vec{q}}}{I} \right)^{1/2} \right]}$$

podemos construir a energia livre variacional de Helmholtz e a partir daí, minimizá-la em relação aos seus parâmetros variacionais, como efetuado a uma dimensão.

As propriedades da lei gaussiana dadas na eq. (4.1.1.2.7) – cuja aplicação é justificada no caso quântico por Landau, Lifschitz ⁽⁵⁵⁾ – somadas às definições

$$\eta_{\vec{q}} \equiv \langle |\theta_{\vec{q}}|^2 \rangle_0$$

$$\vec{R}_{i,j}^{i',j'} \equiv \vec{R}_{i',j'} - \vec{R}_{i,j}$$

$$K_{i,j}^{i',j'} \equiv \langle \cos(\theta_{i',j'} - \theta_{i,j}) \rangle_0 = \exp \left[- \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} (1 - \cos \vec{q} \cdot \vec{R}_{i,j}^{i',j'}) \eta_{\vec{q}} \right]$$

$$K_x \equiv K_{ij}^{1+i,j} = \exp \left[- \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \left\{ 1 - \cos(aq_x) \right\} \eta_{\vec{q}} \right]$$

$$K_y \equiv K_{ij}^{i,j+1} = \exp \left[- \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \left\{ 1 - \cos(aq_y) \right\} \eta_{\vec{q}} \right]$$

$$K \equiv (K_x K_y)^{1/2} = \exp \left[- \frac{1}{2N} \sum_{\vec{q}} \left\{ 2 - \cos(aq_x) - \cos(aq_y) \right\} \eta_{\vec{q}} \right]$$

$$L_{ij}^{i',j'} \equiv \langle \cos(\theta_{i',j'} + \theta_{i,j}) \rangle_0 = \exp \left[- \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \left\{ 1 - \cos(\vec{q} \cdot \vec{R}_{ij}^{i',j'}) \right\} \eta_{\vec{q}} \right]$$

$$L_x \equiv L_{i,j}^{1+i,j} \qquad L_y \equiv L_{ij}^{i,j+1} \qquad L \equiv (L_x L_y)^{1/2}$$

$$m \equiv \langle \cos(\theta_{ij}) \rangle_0 = \exp \left[- \frac{1}{2N} \sum_{\vec{q}} \eta_{\vec{q}} \right] = \left(K_{i,j}^{i',j'} L_{ij}^{i',j'} \right)^{1/4} = (KL)^{1/4}$$

$$t \equiv \frac{K_B T}{4J}$$

onde usamos

$$\langle (\theta_{ij} \pm \theta_{i',j'})^2 \rangle_0 = \frac{2}{N} \sum_{\vec{q}} \left\{ 1 \pm \cos(\vec{q} \cdot \vec{R}_{ij}^{i',j'}) \right\} \eta_{\vec{q}}$$

e lembrando que m é o parâmetro de ordem ferromagnético e K_x (K_y) é o coeficiente de renormalização da energia de acoplamento -

valor simplesmente formal.

4.2.3.3 - Espectro de M \ddot{a} gnons

Ver 4.1.3.2.

4.2.4 - Anisotropia de Acoplamento no Espaço dos Spins

4.2.4.1 - Modelo

Como discutido em 4.1.4.1, temos o hamiltoniano

$$H = \sum_i \frac{L_i^2}{2I} - J \sum_i \left\{ \cos(\theta_{i+1} - \theta_i) + \alpha \cos(\theta_{i+1} + \theta_i) \right\}$$

o que nos leva, seguindo passos j \acute{a} descritos anteriormente a:

$$c_q = J \left[K(1 - \cos aq) + \alpha L(1 + \cos aq) \right] \quad \forall q \in B$$

4.2.4.2 - Ordem de Longo Alcance, Espectro de M \ddot{a} gnons Fun \tilde{c} o de Correla \tilde{c} es e Susceptibilidade

Os resultados s \tilde{a} o an \tilde{a} logos aos obtidos em 4.2.3, com um comprimento de correla \tilde{c} o dado por

$$\xi \equiv a(K/8\alpha L)^{1/2}$$

Como j \acute{a} mencionado em 4.1.4.2, n \tilde{a} o consideramos anisotropias cristalinas. A discuss \tilde{a} o de alguns aspectos mais gerais com rela \tilde{c} o aos resultados obtidos neste cap \tilde{t} ulo s \tilde{a} o deixados para a Conclus \tilde{a} o.

CAPÍTULO V

MODELO XY BIDIMENSIONAL PARA SPINS COM MOMENTO DE INÉRCIA

Discutiremos aqui apenas o caso quântico visto que a consideração de spins com momento de inércia para o caso clássico não implica em alteração relevante para o cálculo, como pode ser verificado do estudo do sistema unidimensional em 4.1. Para efeito de comparação podemos, portanto, referirmo-nos ao trabalho de Tsallis⁽¹⁶⁾.

5.1 - ISOTRÓPICO NO ESPAÇO DOS SPINS

5.1.1 - Modelo

Consideremos um cristal bidimensional, cíclico, com N sítios, cujo parâmetro cristalino denotamos a . Todo ponto da rede fica determinado, em relação a um sítio arbitrariamente escolhido como origem, pelos índices inteiros (i,j) . Para o tratamento em Mecânica Estatística Quântica reportamo-nos às considerações efetuadas em 4.2.1.1 escrevendo o hamiltoniano que se segue:

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{ij} \frac{L_{ij}^2}{2I} - \frac{J}{S^2} \sum_{ij} \left\{ \left(S_{i,j}^x S_{i+1,j}^x + S_{i,j}^y S_{i+1,j}^y \right) + \left(S_{i,j}^x S_{i,j+1}^x + S_{i,j}^y S_{i,j+1}^y \right) \right\} \\
 &= \sum_{ij} \frac{L_{ij}^2}{2I} - J \sum_{ij} \left\{ \cos(\theta_{i+1,j} - \theta_{ij}) + \cos(\theta_{i,j+1} - \theta_{ij}) \right\} \quad (5.1.1.1)
 \end{aligned}$$

As variáveis pertinentes ao modelo estão definidas na fig. 5.1.1.1^(*) e satisfazem as relações estabelecidas em 4.1.1.1.

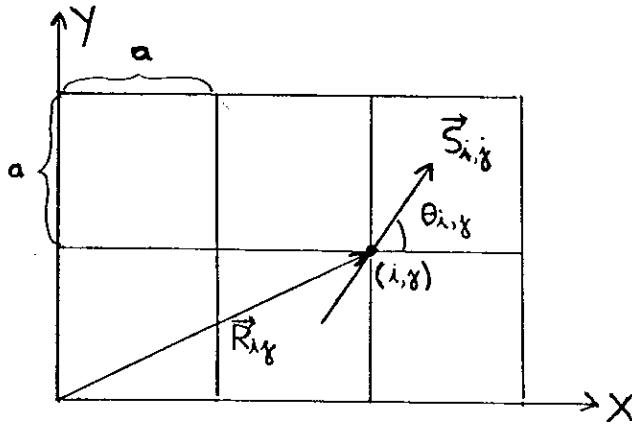


Figura 5.1.1.1 - Definição gráfica das variáveis do modelo.

5.1.2 - Tratamento

O tratamento é idêntico ao efetuado em 4.2.1.2 com as alterações decorrentes de lidarmos agora com um sistema bidimensional. Assim, para $T \approx 0$ temos

$$H \approx H' = \sum_{i,j} \frac{L_{ij}^2}{2I} + \frac{J}{2} \sum_{ij} \left\{ (\theta_{i+1,j} - \theta_{i,j})^2 + (\theta_{i,j+1} - \theta_{i,j})^2 \right\} \quad (5.1.2.2)$$

Com as transformações dadas pelas equações (4.1.1.2.3) e (4.1.1.2.3'), obtemos

^(*) A fig. 5.1.1.1 sugere que o plano definido para os spins deve estar sobreposto ao plano da rede cristalina, entretanto, isto não é necessário.

$$H' = \sum_{\vec{q}} \frac{|L_{\vec{q}}^+|^2}{2I} + \frac{J}{2} \sum_{\vec{q}} \left(2 - \cos(aq_x) - \cos(aq_y) \right) |\theta_{\vec{q}}^+|^2 \quad (5.1.2.2')$$

Este é o hamiltoniano de um conjunto de N osciladores harmônicos independentes a duas dimensões. Para o tratamento aproximado com o método variacional propomos um hamiltoniano de teste (ou variacional) do tipo:

$$H_0 = \sum_{\vec{q}} \frac{|L_{\vec{q}}^+|^2}{2I} + \sum_{\vec{q}} c_{\vec{q}}^+ |\theta_{\vec{q}}^+|^2 \quad (5.1.2.3)$$

A matriz densidade associada a H_0 é dada por:

$$\rho_0 = \frac{\exp(-\beta H_0)}{\text{Tr} \exp(-\beta H_0)}$$

e o princípio de equipartição fica

$$c_{\vec{q}}^+ \langle |\theta_{\vec{q}}^+|^2 \rangle_0 = \frac{\hbar}{4} \left(\frac{c_{\vec{q}}^+}{I} \right)^{1/2} \coth \left[\frac{\beta \hbar}{2} \left(\frac{c_{\vec{q}}^+}{I} \right)^{1/2} \right] \quad (5.1.2.4)$$

$$\frac{\langle |L_{\vec{q}}^+|^2 \rangle_0}{2I} = \frac{\hbar}{4} \left(\frac{c_{\vec{q}}^+}{I} \right)^{1/2} \coth \left[\frac{\beta \hbar}{2} \left(\frac{c_{\vec{q}}^+}{I} \right)^{1/2} \right] \quad (5.1.2.4')$$

Com a função de partição dada por ⁽⁵⁴⁾

$$Z_0 = \prod_{\vec{q}} \frac{1}{2 \sinh \left[\frac{\beta \hbar}{2} \left(\frac{c_{\vec{q}}^+}{I} \right)^{1/2} \right]}$$

podemos construir a energia livre variacional de Helmholtz e a partir daí, minimizá-la em relação aos seus parâmetros variacionais, como efetuado a uma dimensão.

As propriedades da lei gaussiana dadas na eq. (4.1.1.2.7) - cuja aplicação é justificada no caso quântico por Landau, Lifschitz ⁽⁵⁵⁾ - somadas às definições

$$\eta_{\vec{q}} \equiv \langle |\theta_{\vec{q}}|^2 \rangle_0$$

$$\vec{R}_{i,j}^{i',j'} \equiv \vec{R}_{i',j'} - \vec{R}_{i,j}$$

$$K_{i,j}^{i',j'} \equiv \langle \cos(\theta_{i',j'} - \theta_{i,j}) \rangle_0 = \exp \left[-\frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} (1 - \cos(\vec{q} \cdot \vec{R}_{i,j}^{i',j'})) \eta_{\vec{q}} \right]$$

$$K_x \equiv K_{ij}^{1+i,j} = \exp \left[-\frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \left(1 - \cos(aq_x) \right) \eta_{\vec{q}} \right]$$

$$K_y \equiv K_{ij}^{i,j+1} = \exp \left[-\frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \left(1 - \cos(aq_y) \right) \eta_{\vec{q}} \right]$$

$$K \equiv (K_x K_y)^{1/2} = \exp \left[-\frac{1}{2N} \sum_{\vec{q}} \left(2 - \cos(aq_x) - \cos(aq_y) \right) \eta_{\vec{q}} \right]$$

$$L_{ij}^{i',j'} \equiv \langle \cos(\theta_{i',j'} + \theta_{i,j}) \rangle_0 = \exp \left[-\frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \left(1 - \cos(\vec{q} \cdot \vec{R}_{i,j}^{i',j'}) \right) \eta_{\vec{q}} \right]$$

$$L_x \equiv L_{i,j}^{1+i,j} \qquad L_y \equiv L_{i,j}^{i,j+1} \qquad L \equiv (L_x L_y)^{1/2}$$

$$m \equiv \langle \cos(\theta_{ij}) \rangle_0 = \exp \left[-\frac{1}{2N} \sum_{\vec{q}} \eta_{\vec{q}} \right] = \left(K_{i,j}^{i',j'} L_{i,j}^{i',j'} \right)^{1/4} = (KL)^{1/4}$$

$$t \equiv \frac{K_B T}{4J}$$

onde usamos

$$\langle (\theta_{ij} \pm \theta_{i',j'})^2 \rangle_0 = \frac{2}{N} \sum_{\vec{q}} \left(1 \pm \cos(\vec{q} \cdot \vec{R}_{i,j}^{i',j'}) \right) \eta_{\vec{q}}$$

e lembrando que m é o parâmetro de ordem ferromagnético e K_x (K_y) é o coeficiente de renormalização da energia de acopla -

mento entre primeiros vizinhos que se encontram sobre uma mesma linha (coluna), obtemos

$$\bar{F} = - \frac{\hbar}{4} \sum_{\vec{q}} \left(\frac{c_{\vec{q}}}{I} \right)^{1/2} \coth \left[\frac{\beta \hbar}{2} \left(\frac{c_{\vec{q}}}{I} \right)^{1/2} \right] - 2NJK +$$

$$+ K_B T \sum_{\vec{q}} \ln \sinh \left[\frac{\beta \hbar}{2} \left(\frac{c_{\vec{q}}}{I} \right)^{1/2} \right]$$

A condição de minimização $-\frac{\partial \bar{F}}{\partial c_{\vec{q}}} = 0 \forall q$ - implica em que

$$c_{\vec{q}} = JK \left[2 - \cos(aq_x) - \cos(aq_y) \right] = \frac{K_B T}{2\eta_{\vec{q}}} \quad \forall q \in B \quad (5.1.2.5)$$

Substituindo $c_{\vec{q}}$ na expressão que define K, obtemos

$$K = \exp \left\{ - \left(\frac{\hbar^2}{JKI} \right)^{1/2} \frac{a^2}{32\pi^2} \right\} \left\{ \left[2 - \cos(aq_x) - \cos(aq_y) \right]^{1/2} \right.$$

$$\left. \times \coth \left[\frac{1}{8} \left(\frac{\hbar^2 K}{JI} \right)^{1/2} \left[2 - \cos(aq_x) - \cos(aq_y) \right]^{1/2} \right] d\vec{q} \right\} \quad (5.1.2.6)$$

onde utilizamos no limite do quase contínuo

$$\sum_{\vec{q}} \rightarrow \frac{a^2}{4\pi^2} \iint d\vec{q} \quad \text{se } N \rightarrow \infty$$

Na eq. (5.1.2.6) adicionando e subtraindo a unidade a $\coth[\dots]$ na integral obtém-se:

$$K = K(0) \exp \left\{ - \left(\frac{\hbar^2}{JKI} \right)^{1/2} \frac{a^2}{32\pi^2} \right\} \int_B \left[2 - \cos(aq_x) - \cos(aq_y) \right]^{1/2} \times$$

pende do sistema com que estamos trabalhando. Para $t \rightarrow 0$ obtemos um calor específico $C \propto -\frac{dK}{dt} \propto t^2$, característico de sistemas bidimensionais de osciladores harmônicos acoplados. No limite $t \rightarrow 0$, a inclinação de K é nula, o que se ajusta ao Terceiro Princípio da Termodinâmica.

Para posterior cálculo de m devemos calcular ainda:

$$L = \exp \left\{ -\left(\frac{\hbar^2}{JKI}\right)^{1/2} \frac{a^2}{32\pi^2} \iint_B \frac{2+\cos(aq_x)+\cos(aq_y)}{(2-\cos aq_x-\cos aq_y)^{1/2}} \times \right. \\ \left. \times \coth \left[\frac{1}{8} \left(\frac{\hbar^2 K}{JI}\right)^{1/2} \frac{(2-\cos(aq_x)-\cos(aq_y))^{1/2}}{t} \right] d\vec{q} \right\}$$

Para $t = 0$

$$L(0) = \exp \left\{ -\left(\frac{\hbar^2}{JK(0)I}\right)^{1/2} \frac{a^2}{32\pi^2} \iint_B \frac{2+\cos(aq_x)+\cos(aq_y)}{(2-\cos(aq_x)-\cos(aq_y))^{1/2}} d\vec{q} \right\}$$

Desenvolvendo os cossenos para $q_x, q_y \approx 0$ e fazendo uma mudança de variáveis, obtemos

$$L(0) \sim \gamma_2 \exp \left\{ -\frac{0,18}{4\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar^2}{JK(0)I}\right)^{1/2} \right\}$$

onde γ_2 é um número puro da ordem da unidade. Para $t \neq 0$ de finimos $L'(t, \epsilon)$ conforme o efetuado no ítem 4.1.1.2.

$$L'(t, \epsilon) \equiv \exp \left\{ -\left(\frac{\hbar^2}{JKI}\right)^{1/2} \frac{a^2}{32\pi^2} \iint_{B'} \frac{2+\cos(aq_x)+\cos(aq_y)}{(2-\cos(aq_x)-\cos(aq_y))^{1/2}} \times \right.$$

$$\times \coth \left[\frac{1}{8} \left(\frac{\hbar^2 K}{J I} \right)^{1/2} \frac{(2 - \cos(aq_x) - \cos(aq_y))^{1/2}}{t} \right] d\vec{q} \left. \vphantom{\frac{1}{8}} \right\}$$

onde $B' \equiv \{\vec{q} | \vec{q} \in B \text{ e } |\vec{q}| > \epsilon\}$

Obtemos, desenvolvendo para $q_x, q_y \approx 0$

$$\lim_{t \rightarrow 0} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} L'(t, \epsilon) = 0$$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \lim_{t \rightarrow 0} L'(t, \epsilon) \sim \gamma_2 \exp \left\{ - \frac{0,18}{4 \sqrt{2}} \left(\frac{\hbar^2}{JK(0)I} \right)^{1/2} \right\}$$

Para satisfazer o Terceiro Princípio da Termodinâmica, convém de finir $L(t)$ da seguinte maneira:

$$L(t) = L'(t, 0) = 0 \quad \forall t \neq 0$$

$$L(0) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \lim_{t \rightarrow 0} L'(t, \epsilon) \sim \gamma_2 \exp \left\{ - \frac{0,18}{4 \sqrt{2}} \left(\frac{\hbar^2}{JK(0)I} \right)^{1/2} \right\}$$

O comportamento de L com a temperatura é mostrado na fig.5.1.2.4.

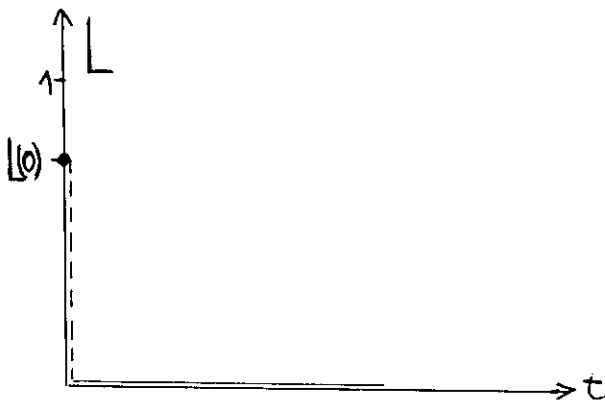


Figura 5.1.2.4 - Comportamento térmico de L .

O fato de $K(0) < 1$, $L(0) < 1$ vem do tratamento quântico que permite oscilações mesmo no estado fundamental.

5.1.3 - Ordem de Longo Alcance

5.1.3 - Ordem de Longo Alcance

Tendo em conta a relação $m = (KL)^{1/4}$ temos $m = 0$ se $t \neq 0$ de acordo com o teorema de Mermin-Wagner e

$$m \sim \gamma_3 \exp - \frac{1,25}{16\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar^2}{JK(0)T} \right)^{1/2}$$

se $t = 0$ de acordo com o Terceiro Princípio da Termodinâmica, levando em conta que o ordenamento fica limitado devido à natureza quântica do caso sob análise. Constatamos a ausência de ordem de longo alcance a qualquer temperatura não nula. A duas dimensões as oscilações permitidas no estado fundamental não destroem totalmente a ordem de longo alcance, como ocorre a uma dimensão, reduzindo porém a magnetização quando comparada ao caso clássico onde $m = 1$ para $t = 0$.

5.1.4 - Espectro de Mágns

A eq. (5.1.2.5) nos conduz a

$$c_{\vec{q}} = JK(2 - \cos a q_x - \cos a q_y) \sim \frac{JKa^2}{2} q^2 \quad \text{se } q \rightarrow 0$$

O tratamento quântico portanto, da mesma forma que o clássico, a uma ou duas dimensões, leva ao mesmo tipo de espectro para os mágns com $\Omega_{\vec{q}} \propto q$ se $q \rightarrow 0$, o que era de se esperar⁽⁴⁸⁾.

5.1.5 - Função de Correlações

Como para o caso clássico:

$$\begin{aligned}
 S(R) &= \frac{1}{2} K_{ij}^{i'j'} \\
 &= \frac{1}{2} \exp \left\{ - \left(\frac{\hbar^2}{JKI} \right)^{1/2} \frac{a^2}{32\pi^2} \iint \frac{1 - \cos(\vec{R} \cdot \vec{q})}{(2 - \cos(aq_x) - \cos(aq_y))^{1/2}} \times \right. \\
 &\quad \left. \times \coth \left[\frac{1}{8} \left(\frac{\hbar^2 K}{JI} \right)^{1/2} \frac{(2 - \cos(aq_x) - \cos(aq_y))^{1/2}}{t} \right] d\vec{q} \right\}
 \end{aligned}$$

No limite $R \gg a$ temos (ver Apêndice F)

$$S(R) \sim \gamma_4 \left[\text{arctang} \left(\frac{t}{\Delta} \right) \right]^{-\eta} e^{-\eta} \left(\frac{a}{R} \right)^\eta f_1(t)$$

onde γ_4 é um número puro da ordem da unidade,

$$\begin{aligned}
 \eta \equiv \frac{2t}{\pi K} \quad , \quad f_1(t) \equiv \exp \left\{ - \frac{1}{192\pi} \frac{\hbar^2}{JI} \text{arctang} \left(\frac{t}{\Delta} \right) - \frac{\sqrt{2}}{8} \left(\frac{\hbar^2}{JKI} \right)^{1/2} \right. \\
 \left. + \frac{\sqrt{2}}{\pi} \left(\frac{\hbar^2}{JKI} \right)^{1/2} \text{arctang} \left(\frac{t}{\Delta} \right) \right\} \sim \exp \left\{ - \frac{\sqrt{2}}{8} \left(\frac{\hbar^2}{JK(0)I} \right)^{1/2} \right\} \text{ se } t \rightarrow 0
 \end{aligned}$$

$$e \quad \Delta \equiv \frac{1}{8\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar^2 K}{JI} \right)^{1/2} .$$

Fazendo $\hbar \rightarrow 0$ reobtem-se o caso clássico. Se fixamos a temperatura podemos considerar

$$S(R) \propto \left(\frac{a}{R} \right)^\eta$$

Obtemos, como no caso clássico, o resultado pouco usual de uma lei de potência para a função de correlações. Apesar de sistemas a baixas temperaturas serem essencialmente quânticos o com-

portamento, devido à aproximação considerada $- R \gg a -$, não difere substancialmente do caso clássico (42,43). O expoente η é o mesmo obtido no caso clássico com a peculiaridade do comportamento de K com a temperatura proporcionar, neste caso, uma maior inclinação para η no limite $t \rightarrow 0$.

5.1.6 - Susceptibilidade

Como no ítem 4.1.1.6

$$\chi_T = \frac{1}{4t} \sum_{i'j'} S(R_{ij}^{i'j'})$$

$$\frac{\gamma_5}{4t} \sum_{i'j'} \left(\frac{a}{|R_{ij}^{i'j'}|} \right)^{\frac{2t}{\pi K}}$$

A contribuição principal a esta soma vem da região onde $|R_{ij}^{i'j'}| \gg a$ e portanto :

$$\chi_T = +\infty \quad \text{para } t < t_{cr}$$

$$\chi_T = \text{finito} \quad \text{para } t > t_{cr}$$

desde que em todo o desenvolvimento efetuado trabalhamos com temperaturas muito pequenas de tal modo que $t/\pi K < 1$. Neste caso não temos um sistema de equações, como no caso clássico, que determine t_{cr} . Obtemos uma divergência para χ_T a t finito como foi observado por Stanley e Kaplan para $n = 2$ e sistemas isotrópicos bidimensionais.

5.2 - SISTEMA EM PRESENÇA DE UM CAMPO MAGNÉTICO EXTERNO

5.2.1 - Modelo

Em presença de um campo magnético externo paralelo ao eixo x podemos escrever o hamiltoniano como se segue:

$$H = \sum_{ij} \frac{L_{ij}^2}{2I} - J \sum_{ij} \left\{ \cos(\theta_{1+i,j} - \theta_{ij}) + \cos(\theta_{i,j+1} - \theta_{ij}) + h \cos \theta_{ij} \right\}$$

Propondo, como anteriormente, um hamiltoniano variacional construímos a energia livre variacional

$$\begin{aligned} \bar{F} = & - \frac{\hbar}{4} \sum_{\vec{q}} \left(\frac{c_{\vec{q}}}{I} \right)^{1/2} \coth \left[\frac{\beta \hbar}{2} \left(\frac{c_{\vec{q}}}{I} \right)^{1/2} \right] - NJ(K_x + K_y + hm) + \\ & + \frac{1}{\beta} \sum_{\vec{q}} \ln \sinh \left[\frac{\beta \hbar}{2} \left(\frac{c_{\vec{q}}}{I} \right)^{1/2} \right] \end{aligned}$$

Minimizando \bar{F} , obtemos:

$$c_{\vec{q}} = J \left[K_x \left(1 - \cos(aq_x) \right) + K_y \left(1 - \cos(aq_y) \right) + \frac{hm}{2} \right] \quad \forall q \in B \quad (5.2.1.9)$$

5.2.2 - Espectro de Mágns

Segundo a eq. (5.2.1.9) a diferença em relação ao caso isotrópico é a aparição de um "gap" para o vetor de onda nulo no espectro de mágns. A diferença do caso clássico para o caso quântico deve-se à influência das oscilações no coeficiente de renormalização K e na magnetização. A discussão se processa exatamente como a uma dimensão.

5.2.3 - Ordem de Longo Alcance e Susceptibilidade

A eq. (5.2.1.9) nos conduz, para a magnetização, à seguinte expressão:

$$m = \exp \left\{ - \left(\frac{\hbar^2}{JKI} \right)^{1/2} \frac{a^2}{32\pi^2} \right\} \int_B \frac{1}{\left[K_X(1-\cos(aq_X)) + K_Y(1-\cos(aq_Y)) + \frac{hm}{2} \right]^{1/2}} \times \\ \times \coth \left[\frac{g\hbar}{2} \left(\frac{J}{I} \right)^{1/2} \left[K_X(1-\cos(aq_X)) + K_Y(1-\cos(aq_Y)) + \frac{hm}{2} \right]^{1/2} \right] d\vec{q} \left. \right\}$$

No limite $t \ll 1$, $h \ll 1$ podemos escrever

$$m \sim \gamma_6 \exp \left\{ - \left(\frac{\hbar^2}{JKI} \right)^{1/2} \frac{\sqrt{2}}{16} \int_0^\pi \frac{1}{(r^2 + \frac{hm}{K})^{1/2}} \times \right. \\ \left. \times \coth \left[\frac{1}{8\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar^2 K}{JI} \right)^{1/2} \frac{1}{t} (r^2 + \frac{hm}{K})^{1/2} \right] r dr \right\}$$

onde fizemos $K_X \approx K_Y = K$ e γ_6 é um número puro da ordem da unidade. Resolvendo a integral obtemos:

$$m \sim \gamma_6 \left\{ \frac{\sinh \left[\frac{1}{8\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar^2}{JI} \right)^{1/2} \frac{(hm)^{1/2}}{t} \right]}{\sinh \left[(\pi^2 + \frac{hm}{K})^{1/2} \frac{1}{8\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar^2 K}{JI} \right)^{1/2} \frac{1}{t} \right]} \right\}^{\frac{t}{\pi K}}$$

Para $0 < h < t \ll 1$ e fazendo as aproximações adequadas temos

$$m \sim \gamma_7 (hm)^{\frac{t}{2\pi K}} f_2(t)$$

onde γ_7 é um número puro da ordem da unidade e

$$f_2(t) \equiv \left\{ \frac{1}{8\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar^2}{JI} \right)^{1/2} \frac{1}{\sinh \frac{\pi}{8\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar^2 K}{JI} \right)^{1/2} \frac{1}{t}} \right\}^{\frac{t}{\pi K}} \sim \exp - \frac{1}{8\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar^2}{JK(0)I} \right)^{1/2}$$

para $t \rightarrow 0$

Fixando t , podemos considerar

$$m \propto \hbar^{\left(\frac{t}{2\pi K - t} \right)} \quad (5.2.3.10)$$

Este resultado é similar ao do caso clássico ⁽¹⁶⁾, diferindo somente por constantes. Temos portanto para a susceptibilidade:

$$\chi_T = \lim_{\hbar \rightarrow 0} \left. \frac{\partial m}{\partial \hbar} \right|_t = +\infty \quad \text{para } t < t_{cr}$$

onde t_{cr} já foi discutido no caso isotrópico.

Para $0 \leq t < \hbar \ll 1$, considerando $K(t)$ dado pelo calculado para o caso isotrópico e fazendo as aproximações adequadas temos

$$m \sim m(0) \exp - \frac{1}{4\pi\sqrt{2}} \frac{\gamma_1}{K^2(0)} t^3 \quad (5.2.3.11)$$

onde

$$m(0) \equiv \gamma_7 \exp - \frac{1}{8\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar^2}{JK(0)I} \right)^{1/2},$$

γ_7 uma constante da ordem da unidade e γ_1 definido em 5.1.2. A diferença essencial no caso quântico surge no comportamento da magnetização a baixas temperaturas: para $t \rightarrow 0$ a inclinação de m é nula. O comportamento da magnetização em função do campo

magnético pode ser visto na fig. 5.2.3.5. Para o comportamento da magnetização com a temperatura temos duas regiões a considerar: $0 \leq t < h \ll 1$ e $0 < h < t \ll 1$. Fixando o campo: o comportamento a temperaturas inferiores ao campo é dado pela eq. (5.2.3.11); para temperaturas superiores ao campo é dado pela eq. (5.2.3.10). Ambos estão expostos nas figs. 5.2.3.6 e 5.2.3.7 respectivamente.

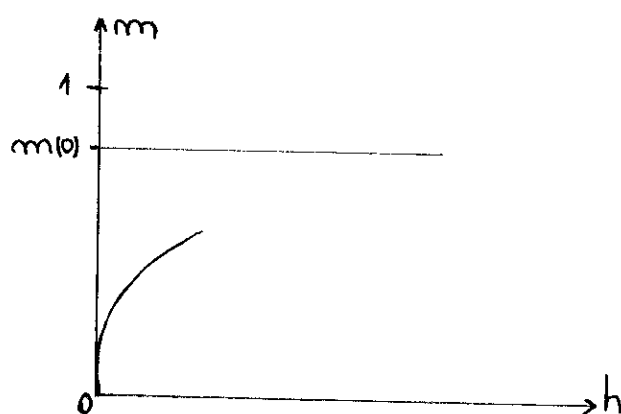


Figura 5.2.3.5 - Dependência da magnetização com o campo a t fixa.

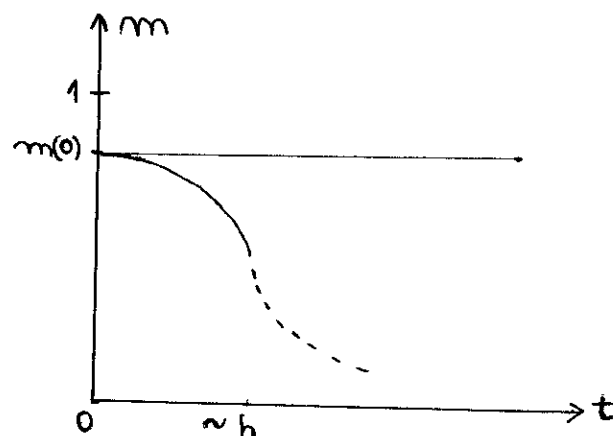


Figura 5.2.3.6 - Comportamento da magnetização com a temperatura na região $0 \leq t < h \ll 1$.

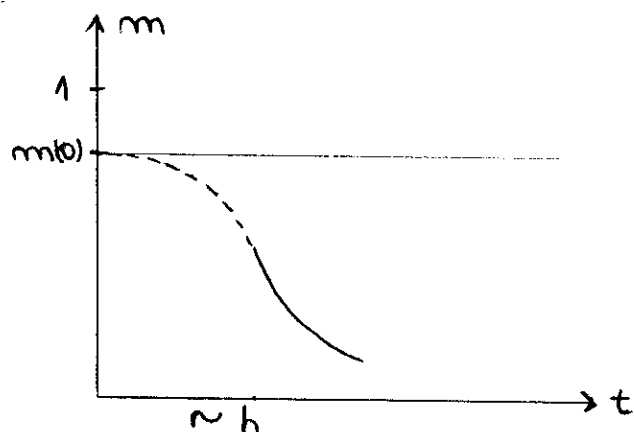


Figura 5.2.3.7 - Comportamento da magnetização com a temperatura na região $0 < h < t \ll 1$.

Para $h \rightarrow 0$ reobtemos o caso isotrópico resguardando, porém, na região onde $0 \leq t < h$, o comportamento característico do tratamento quântico para baixas temperaturas (ver fig. 5.2.3.8). Na fig. 5.2.3.8 representamos o comportamento da magnetização com a temperatura em toda a fai

xa considerada ($t < h$, $t > h$) e ilustramos o efeito da diminuição do campo.

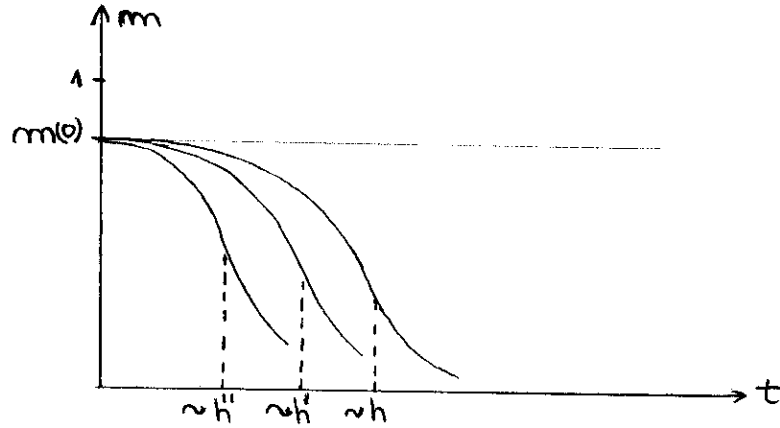


Figura 5.2.3.8 - Comportamento da magnetização com a temperatura.

5.2.4 - Função de Correlações

Temos, para $R/a \rightarrow \infty$ (16):

$$S(R) \sim \frac{m^2}{2} \langle \theta_{ij} \theta_{i'j'} \rangle_0^2$$

Neste caso:

$$\langle \theta_{ij} \theta_{i'j'} \rangle_0 = \left(\frac{\hbar^2}{JT} \right)^{1/2} \frac{a^2}{16\pi^2} \int_B \frac{\cos(\vec{R} \cdot \vec{q})}{\left[K_X(1-\cos(aq_X)) + K_Y(1-\cos(aq_Y)) + \frac{\hbar m}{2} \right]^{1/2}} \times$$

$$\coth \left[\frac{\beta \hbar}{2} \left(\frac{J}{T} \right)^{1/2} \left[K_X(1-\cos(aq_X)) + K_Y(1-\cos(aq_Y)) + \frac{\hbar m}{2} \right]^{1/2} \right] d\vec{q}$$

Para $T \approx 0$ ou na região $0 \leq t < h \ll 1$ temos (ver Apêndice G)

$$\langle \theta_{ij} \theta_{i'j'} \rangle_0 \sim \gamma_8 \frac{a}{R} \exp\left(-R/\xi(0)\right)$$

onde $\xi(t) \equiv a \left\{ K(t)/hm(t) \right\}^{1/2}$ e γ_8 é um número puro da ordem da unidade. Daí:

$$S(R) \propto \left(\frac{a}{R}\right)^2 \exp(-2R/\xi)$$

Se fixamos a temperatura e trabalhamos na região $0 < h < t \ll 1$ temos:

$$\langle \theta_{ij} \theta_{i'j'} \rangle_0 \sim \gamma_9 t \left\{ \frac{\xi(t)}{R} \right\}^{1/2} \exp\left\{-R/\xi(t)\right\}$$

onde γ_9 é um número puro da ordem da unidade e daí:

$$S(R) \propto t^2 \frac{\xi(t)}{R} \exp\left\{-2R/\xi(t)\right\}$$

O comportamento da função de correlações à temperatura nula difere do caso clássico devido às flutuações permitidas pelo tratamento quântico. Para temperaturas não nulas o comportamento da função de correlações é similar ao do caso clássico e temos, para campos crescentes à temperatura fixa ou para temperaturas crescentes a campo fixo, a divergência de ξ , o que implica na destruição da ordem de longo alcance.

5.3 - ANISOTROPIA LOCAL NO ESPAÇO DOS SPINS

5.3.1 - Modelo

Adicionamos à eq. (5.1.1.1) o termo

$$- \frac{A}{S^2} \sum_{ij} (S_{ij}^x)^2 \quad (A \geq 0)$$

o qual é uma contribuição à energia provinda do campo cristalino e a menos de uma constante, podemos escrever

$$H = \sum_{ij} \frac{L_{ij}^2}{2I} - J \sum_{ij} \left\{ \cos(\theta_{1+i,j} - \theta_{ij}) + \cos(\theta_{i,j+1} - \theta_{ij}) + \frac{\alpha}{2} \cos(2\theta_{ij}) \right\}$$

onde $\alpha \equiv A/J$. Com o mesmo hamiltoniano variacional proposto na eq. (5.1.2.3) podemos construir a energia livre variacional \bar{F} e com a condição de minimização $-\frac{\partial \bar{F}}{\partial c_{\vec{q}}} = 0 \quad \forall \vec{q}$ - obtemos

$$c_{\vec{q}} = J \left[K_x \left[1 - \cos(aq_x) \right] + K_y \left[1 - \cos(aq_y) \right] + \alpha m^4 \right] \quad (5.3.1.12)$$

5.3.2 - Ordem de Longo Alcance e Espectro de Mágons

Com considerações similares às do ítem 5.2.3, temos:

$$m \sim \gamma_{10} \left\{ \frac{\sinh \left[\frac{1}{8} \left(\frac{\hbar^2}{JI} \right)^{1/2} \frac{(\alpha m^4)^{1/2}}{t} \right]}{\sinh \left[\left(\pi^2 + \frac{2\alpha m^4}{K} \right)^{1/2} \frac{1}{8\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar^2 K}{JI} \right)^{1/2} \frac{1}{t} \right]} \right\}^{\frac{t}{\pi K}}$$

onde γ_{10} é um número puro da ordem da unidade.

Na região onde $0 < \alpha < t \ll 1$ temos:

$$m \propto \alpha \left(\frac{t}{2\pi K - t} \right)$$

Na região onde $0 \leq t < \alpha \ll 1$ temos:

$$m(t) \sim m(0) \exp - \frac{1}{4\pi\sqrt{2}} \frac{\gamma_1}{K^2(0)} t^3$$

onde aproximamos o coeficiente de renormalização deste caso pelo do caso isotrópico desde que $\alpha \ll 1$. As representações gráficas da magnetização em função da anisotropia e da temperatura são similares às expostas nas figuras 5.2.3.5, 5.2.3.6 e 5.2.3.7. O espectro de mágnons em analogia com o obtido anteriormente apresenta a existência de um "gap" para o vetor de onda nulo. O "gap" tende a desaparecer para anisotropias decrescentes ou temperaturas crescentes.

5.3.3 - Função de Correlações e Susceptibilidade

Analogamente ao efetuado no ítem 5.2.4, temos para a função de correlações:

$$S(R) \propto t^2 \frac{\xi}{R} \exp(-2R/\xi)$$

para

$$R \gg \xi \equiv a(K/2\alpha m^4)^{1/2} \gg a .$$

Para a susceptibilidade:

$$\chi_T \propto \frac{1}{t} \int_R S(R) \propto t\xi \int_{R_0}^{\infty} \exp(-2R/\xi) dR \propto t\xi^2 \propto \frac{t}{\alpha}$$

A susceptibilidade divergente do caso isotrópico é reobtida no limite $\alpha \rightarrow 0$.

5.4 - ANISOTROPIA DE ACOPLAMENTO NO ESPAÇO DOS SPINS

5.4.1 - Modelo

Considerando o hamiltoniano

$$H = \sum_{ij} \frac{L_{ij}^2}{2I} - \frac{J_x}{S^2} \sum_{ij} (S_{ij}^x S_{i+1,j}^x + S_{ij}^y S_{i+1,j}^y) - \\ - \frac{J_y}{S^2} \sum_{ij} (S_{ij}^x S_{i,j+1}^x + S_{ij}^y S_{i,j+1}^y)$$

onde $J_x \geq J_y > 0$. Esta também é uma forma de anisotropia associada ao campo cristalino ⁽⁵³⁾. Podemos reescrever o hamiltoniano como se segue:

$$H = \sum_{i,j} \frac{L_{ij}^2}{2I} - J \sum_{i,j} \left\{ \left[\cos(\theta_{i+1,j} - \theta_{ij}) + \cos(\theta_{i,j+1} - \theta_{ij}) \right] + \right. \\ \left. + \alpha \left[\cos(\theta_{i+1,j} + \theta_{ij}) + \cos(\theta_{i,j+1} + \theta_{ij}) \right] \right\}$$

onde

$$J \equiv \frac{1}{2} (J_x + J_y) \quad \text{e} \quad \alpha \equiv \frac{1}{2} \frac{(J_x - J_y)}{J}$$

Seguindo o mesmo procedimento de seções anteriores e após derivar a energia livre variacional obtemos:

$$c_{\vec{q}} = J \left[K_x \left(1 - \cos(aq_x) \right) + K_y \left(1 - \cos(aq_y) \right) + \alpha L_x \left(1 + \cos(aq_x) \right) + \alpha L_y \left(1 + \cos(aq_y) \right) \right] .$$

5.4.2 - Ordem de Longo Alcance, Espectro de Magnons, Funao de Correlaoes e Susceptibilidade

Os resultados sao analogos aos obtidos na seao 5.3 , com um comprimento de correlaao dado por:

$$\xi \equiv a \left(K/8\alpha L \right)^{1/2} .$$

CAPÍTULO VI

CONCLUSÃO

Discutimos neste trabalho o modelo XY uni e bidimensional para spins com momento de inércia com o estudo de grandezas como a magnetização \underline{m} , a função de correlações $\underline{S(R)}$, o comprimento de correlações $\underline{\xi}$ e a susceptibilidade $\underline{\chi_T}$.

Apresentaremos inicialmente duas tabelas contendo, de maneira sucinta, os resultados obtidos para os casos: clássico, $d = 1$, quântico, $d = 1$ e quântico $d = 2$. Para o caso clássico, $d = 2$, reproduzimos os resultados de Tsallis⁽¹⁶⁾. Posteriormente seguiremos com os principais comentários com relação aos efeitos da dimensionalidade ($d = 1,2$), da natureza (clássica, quântica) do caso (isotrópico, anisotrópico com/sem quebra de simetria) e o método de tratamento variacional que utilizamos para discutir o modelo.

Os principais comentários são:

- a) A ordem de longo alcance não surge, a temperatura finita, a uma ou duas dimensões em qualquer dos casos (clássico, quântico) se não houverem fontes de anisotropia no espaço dos spins (Teorema de Mermin-Wagner);
- b) A natureza do tratamento quântico não permite o surgimento de ordem de longo alcance para a cadeia linear, no modelo isotrópico, mesmo no estado fundamental ($T = 0$). As expres -

TABELA 6.1 - Resultados para o cálculo a uma dimensão (Cap. IV) onde foram consideradas as aproximações $t \approx 0$, $q \rightarrow 0$, $R/a \rightarrow \infty$. As equações com asterisco são aquelas que contêm uma restrição que impede a solução ($h, \alpha=0$; $m=0$).

FORMALISMO		d = 1	
CASO	CLÁSSICO	QUÂNTICO	
ISOTR. $h = 0$ $\alpha = 0$	$K \sim 1-t$ $m = \begin{cases} 1 & t = 0 \\ 0 & t \neq 0 \end{cases}$ $\Omega_q \sim q$ $S(R) \sim \exp(-R/\xi) ; \xi \propto 1/t$ $\chi_T \sim 1/t^2$	$K \sim \text{cte}(1-\text{cte}'t^2)$ $m = 0 \forall t$ $\Omega_q \sim q$ $S(R) [T = 0] \sim \left(\frac{a}{R}\right)^\Delta ; \Delta \approx \left(\frac{h^2}{JK(0)I}\right)^{\frac{1}{2}}$ $S(R) [T \neq 0] \sim t^{\Delta'} \exp(-R/\xi), \xi \propto 1/t$ $\chi_T \sim 1/t^{2-\Delta'} \quad \Delta' \approx \Delta$	
ANISOTR. $h \neq 0$ $\alpha = 0$	$m \approx \exp - \frac{t}{2} \frac{1}{(Khm)^{1/2}} (*)$ $\Omega_q \sim \left(q^2 + \frac{hm}{Ka^2}\right)^{1/2}$ $S(R) \sim (t\xi)^2 \exp(-2R/\xi)$ $\xi \propto 1/h^{1/2}$	$m(0,h) \sim h^{\left(\frac{\Delta''}{1-\Delta''}\right)} ; \Delta'' \approx \Delta$ $m(t,h) \sim t^{2\Delta''} \exp - \frac{t}{2} \frac{1}{(Khm)^{1/2}} (*)$ $\Omega_q \sim \left(q^2 + \frac{hm}{Ka^2}\right)^{1/2}$ $\chi_0 = \infty$ $S(R) [T=0] \sim \frac{\xi(0)}{R} \exp(-2R/\xi(0))$ $S(R) [T \neq 0] \sim (t\xi(t))^2 \exp(-2R/\xi(t))$ $\xi(t) \propto (K(t)/h)^{1/2}$	

(tabela 6.1 continua)

TABELA 6.1 (continuação)

ANISOTR.	$m \approx \exp - \frac{t}{2\sqrt{2}} \frac{1}{(K_{\text{com}}^4)^{1/2}} \quad (*)$	$m(0,h) \sim h^{\left(\frac{\Delta''''}{1-\Delta''''}\right)} \quad \Delta'''' \approx \Delta$
$h = 0$	$\Omega \sim (q^2 + \text{cteom}^4)^{1/2}$	$m(t,h) \sim t^{2\Delta''''} \exp - \frac{t}{2} \frac{1}{(K_{\text{com}}^4)^{1/2}} \quad (*)$
$\alpha \neq 0$	$S(R) \sim (t\xi)^2 \exp(-2R/\xi)$	$\Omega_q \sim (q^2 + \text{cteom}^4)^{1/2}$
	$\xi \propto 1/\alpha^{1/2}$	$S(R) [T=0] \sim \frac{\xi(0)}{R} \exp(-R/\xi(0))$
	$\chi_T \sim t/\alpha^{3/2}$	$S(R) [T \neq 0] \sim (t\xi(t))^2 \exp(-2R/\xi(t))$
		$\xi(t) \propto (K(t)/\alpha)^{1/2}$

sões obtidas neste caso particular ($n = 2, d = 1, T = 0$) as -
 semelham-se às obtidas por Tsallis para o caso clássico a du-
 as dimensões a temperaturas não nulas ($n = 2, d = 2, T \neq 0$).
 A susceptibilidade diverge ($\chi_{T=0} \rightarrow \infty$) sugerindo a existência
 de transição para alguma espécie de ordem a $T = 0$.

- c) Como era de se esperar tanto no caso clássico quanto no quântico - a uma e duas dimensões - surge um "gap" no espectro de mágns, para vetor de onda nulo se o sistema for anisotrô-
 pico no espaço dos spins.
- d) O tratamento quântico permite obter o comportamento considera-
 do correto para o calor específico e a magnetização no limite
 $T \rightarrow 0$, "consertando" a inclinação neste limite no sentido de
 não violar o Terceiro Princípio da Termodinâmica. As peculia-
 riedades da mudança de dimensionalidade podem ser visualiza -

TABELA 6.2 - Resultados para o cálculo a duas dimensões (Tsallis⁽¹⁶⁾ e Cap.V) onde foram consideradas as aproximações $t \approx 0$, $q \rightarrow 0$ e $R/a \rightarrow \infty$.

FORMA LISMO	d = 2	
CASO	CLÁSSICO (Tsallis ⁽¹⁶⁾)	QUÂNTICO
ISOTR. h = 0 α = 0	$K \sim 1-t$ $m = \begin{cases} 1 & t = 0 \\ 0 & t \neq 0 \end{cases}$ $\Omega_q \sim q$ $S(R) \propto \left(\frac{a}{R}\right)^\eta, \eta \equiv \frac{2t}{\pi K}$ $\chi_T \rightarrow \infty \quad \text{se } t < t_{cr.}$ $\chi_T \text{ finito se } t > t_{cr.}$	$K \sim \text{cte}(1-\text{cte}'t^3)$ $m = \begin{cases} \text{cte} < 1 & \text{se } t = 0 \\ 0 & \text{se } t \neq 0 \end{cases}$ $\Omega_q \sim q$ $S(R) \sim \left(\frac{a}{R}\right)^\eta, \eta \equiv \frac{2t}{\pi K}$ $\chi_T \rightarrow \infty \quad \text{se } t < t_{cr.}$ $\chi_T \text{ finito se } t > t_{cr.}$
ANISOTR. h ≠ 0 α = 0	$m \propto h \left(\frac{t}{2\pi K - t}\right)$ $\Omega_q \sim \left(q^2 + \frac{hm}{Ka^2}\right)^{1/2}$ $S(R) \sim t \frac{\xi}{R} \exp(-2R/\xi)$ $\xi \propto 1/h^{1/2}$ $\chi_T \rightarrow \infty \quad \text{se } t < t_{cr.}$	$0 < h < t \ll 1$ $m \propto h \left(\frac{t}{2\pi K - t}\right)$ $0 \leq t < h \ll 1$ $m \sim m(0) \exp-\text{cte } t^3$ $\Omega_q \sim \left(q^2 + \frac{hm}{Ka^2}\right)^{1/2}$ $S(R) \left[0 \leq t < h \ll 1 \right] \sim \left(\frac{a}{R}\right)^2 \exp(-2R/\xi(0))$ $S(R) \left[0 < h < t \ll 1 \right] \sim t^2 \frac{\xi(t)}{R} \exp(-2R/\xi(t))$ $\xi(t) \sim \left(\frac{K(t)}{h}\right)^{1/2}$ $\chi_T \rightarrow \infty \quad \text{se } t < t_{cr.}$

(tabela 6.2 continua)

TABELA 6.2 (continuação)

ANISOTR.	$m \propto \alpha^{\left(\frac{t}{2\pi K-t}\right)}$	$0 < \alpha < t \ll 1$
$h = 0$	$\Omega_q \sim (q^2 + cte \alpha m^4)^{1/2}$	$m \propto \alpha^{\left(\frac{t}{2\pi K-t}\right)}$
$\alpha \neq 0$	$S(R) \sim t \frac{\xi}{R} \exp(-2R/\xi)$	$0 \leq t < \alpha \ll 1$
	$\xi \propto 1/\alpha^{1/2}$	$m \sim m(0) \exp - cte t^3$
	$\chi_T \sim t/\alpha$	$S(R) \left[0 < \alpha < t \ll 1\right] \sim t^2 \frac{\xi(0)}{R} \exp(-2R/\xi(t))$
		$\xi \sim (K(t)/\alpha)^{1/2}$
		$\chi_T \sim t/\alpha$

das no calor específico onde

$$c \propto t \quad \text{para } d = 1$$

$$c \propto t^2 \quad \text{para } d = 2 .$$

- e) A função de correlações em todos os modelos discutidos apresenta comportamento do tipo lei de potência ($d=1$, quântico, isotrópico, $T = 0$; $d = 2$, clássico e quântico, isotrópico, $T \neq 0$) ou do tipo lei exponencial ($d = 1$, clássico e quântico, isotrópico e anisotrópico, $T \neq 0$; $d = 2$, clássico e quântico, anisotrópico, $\forall T$). O comportamento em lei de potência é pouco usual e leva à divergência da susceptibilidade ($\chi = \infty$).
- f) O Método Variacional comprova-se superior ao Campo Molecular como pode-se ver na constatação da não existência de ordem de longo alcance simultaneamente com uma susceptibilidade infinita em um intervalo finito de temperaturas. Este resultado não poderia jamais ser obtido no quadro da teoria de Campo Molecular.

Algumas extensões de interesse podem ser desenvolvidas a partir deste trabalho. Para isto bastaria:

- a) Admitir forças de longo alcance (já discutido no caso clássico, bidimensional por Tsallis⁽⁵⁷⁾). Neste caso deixa de ter validade o teorema de Mermin-Wagner.
- b) Usar o Método Variacional Generalizado (trabalho desenvolvido por da Silva e Tsallis⁽⁴¹⁾).
- c) Admitir Hamiltonianos de teste (variacionais) mais sofisticados, o que implicaria, por exemplo em um comportamento físico aceitável por maiores extensões do coeficiente de renormalização K .
- d) Fazer o cálculo admitindo magnetostrição, isto é, que J dependa da distância (o que poderá provocar transições estruturais).
- e) Tentar discutir com o presente formalismo o modelo de Heisenberg no caso clássico e quântico a uma e duas dimensões utilizando spins com momento de inércia.

APÊNDICE A

A função de partição canônica é dada por:

$$Z_0 = \prod_q Z_q$$

onde

$$Z_q = \int e^{-\beta H_q} d|\theta_q| d|L_q|$$
$$Z_q = \int e^{-\frac{\beta |L_q|^2}{2I}} d|L_q| \int e^{-\beta c_q |\theta_q|^2} d|\theta_q|$$

Fazendo $Y^2 = \beta |L_q|^2 / 2I$ e $x^2 = \beta c_q |\theta_q|^2$ obtemos

$$Z_q = \frac{(2I)^{1/2}}{\beta} \frac{\pi}{c_q^{1/2}}$$

E daí

$$Z_0 = \left[\frac{(2I)^{1/2} \pi}{\beta} \right]^N \frac{1}{\prod_q c_q^{1/2}}$$

A entropia é dada por

$$S_0 = K_B \ln Z_0$$

e portanto:

$$S_0 = K_B \ln \left\{ \left[\frac{(2I)^{1/2} \pi}{\beta} \right]^N \frac{1}{\prod_q c_q^{1/2}} \right\} = -\frac{K_B}{2} \sum_q \ln c_q^{1/2} + \text{cte}$$

APÊNDICE B*

Temos para a função de correlações do caso clássico a uma dimensão

$$S(R) = \frac{1}{2} \exp - \frac{t}{K} \frac{a}{2\pi} \int_B \frac{1 - \cos Rq}{1 - \cos aq} dq$$

Para $R \gg a$, dividimos a integral em dois intervalos

$$\begin{aligned} S(R) &\sim \gamma \exp - \frac{4t}{\pi K} \frac{1}{a} \int_0^{\pi/a} \frac{\text{sen}^2(Rq/2)}{q^2} dq \\ &\sim \gamma \exp - \frac{4t}{\pi K} \frac{1}{a} \left[\int_0^\delta \frac{\text{sen}^2(Rq/2)}{q^2} dq + \int_\delta^{\pi/a} \frac{\text{sen}^2(Rq/2)}{q^2} dq \right] \end{aligned}$$

onde entre 0 e δ - $\text{sen}^2(Rq/2) \sim (Rq/2)^2$ e entre δ e π/a - $\text{sen}^2(Rq/2) \approx \cos^2(Rq/2)$. Daí obtemos:

$$\begin{aligned} S(R) &\sim \gamma \exp \left[- \frac{3t}{\pi K} \frac{R}{a} \right] \exp \frac{t}{\pi^2 K} \quad \text{para } \delta = \frac{2}{R} \\ &\sim \gamma \exp - \frac{3t}{\pi K} \frac{R}{a} f(t) \\ &\sim \gamma f(t) \exp \left[-R/\xi \right] \end{aligned}$$

onde $\xi \equiv a \frac{\pi K}{3t}$ e $f(t) \equiv e^{t/\pi^2 K}$. Como trabalhamos com $t \ll 1$ $f(t)$ não tem grande peso na função de correlações.

* Não nos preocupamos, nos apêndices, em obter exatamente os coeficientes numéricos das expressões para as diversas grandezas físicas e sim o seu comportamento de forma geral.

APÊNDICE C

Temos para a função de correlações do caso quântico isotrópico a uma dimensão

$$S(R) = \frac{1}{2} \exp - \frac{1}{4} \left(\frac{\hbar^2}{JKI} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{a}{2\pi} \int \frac{1 - \cos Rq}{(1 - \cos aq)^{1/2}} \coth \left[\frac{1}{4} \left(\frac{\hbar^2 K}{JI} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{t} (1 - \cos aq)^{\frac{1}{2}} \right] dq$$

Para $R \gg a$

$$S(R) \sim \gamma \exp - \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar^2}{JKI} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \frac{\text{sen}^2(xR/2a)}{x} \coth \left[\frac{1}{4\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar^2 K}{JI} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{x}{t} \right] dx$$

$$\sim \gamma \exp - \alpha_1 \int_0^\pi \frac{\text{sen}^2(xR/2a)}{x} \coth \left(\frac{\alpha_2 x}{t} \right) dx$$

onde

$$\alpha_1 \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar^2}{JKI} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\pi}$$

e

$$\alpha_2 \equiv \frac{1}{4\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar^2 K}{JI} \right)^{\frac{1}{2}}$$

Dividindo a integral

$$S(R) \sim -\gamma \exp - \alpha_1 \left[\int_0^\delta + \int_\delta^{\delta'} + \int_{\delta'}^\pi \frac{\text{sen}^2(xR/2a)}{x} \coth \left(\frac{\alpha_2 x}{t} \right) dx \right]$$

entre 0 e δ

$$\text{sen}^2(Y) \sim Y^2$$

$$\coth(Z) \sim \frac{1}{Z} + \frac{Z}{3}$$

entre δ e δ'

$$\text{sen}^2(Y) \approx \cos^2(Y)$$

$$\text{coth}(Z) \sim \frac{1}{Z} + \frac{Z}{3}$$

entre δ' e π

$$\text{sen}^2(Y) \approx \cos^2(Y)$$

$$\text{coth}(Z) \sim 1 + 2e^{-2Z}$$

onde

$$\delta = \frac{2}{R} \quad \text{e} \quad \delta' = 2 \arctang\left(\frac{t}{\alpha_2}\right)$$

$$\begin{aligned} S(R) \sim \gamma \exp \left\{ -\frac{\alpha_1}{\alpha_2} \frac{t}{4} \left(\frac{R}{a}\right)^2 \int_0^\delta dx - \frac{\alpha_1 \alpha_2}{12t} \left(\frac{R}{a}\right)^2 \int_0^\delta x^2 dx \right. \\ \left. - \frac{\alpha_1}{\alpha_2} \frac{t}{4} \frac{R}{a} \int_{\delta R/2a}^{\delta' R/2a} \frac{dx}{x^2} - \frac{\alpha_1 \alpha_2}{3t} \frac{a}{R} \int_{\delta R/2a}^{\delta' R/2a} x^2 dx \right. \\ \left. - \frac{\alpha_1}{\alpha_2} \int_{\delta' R/2a}^{\pi R/2a} \frac{dx}{x} - 2\alpha_1 \int_{\delta' R/2a}^{\pi R/2a} \frac{e^{-2\alpha_2 ax/tR}}{x} dx \right\} \end{aligned}$$

$$S(R) \sim \gamma' \left[\arctang\left(\frac{t}{\alpha_2}\right) \right]^{\alpha_1/2} \exp\left(-\frac{3t}{\pi K} \frac{R}{a}\right) f(t)$$

onde

$$f(t) \equiv \exp \left\{ \frac{1}{2\pi K} \left(\frac{t}{\arctang\left(\frac{t}{\alpha_2}\right)} \right) - \frac{\alpha_1 \alpha_2}{3t} \arctang\left(\frac{t}{\alpha_2}\right) - 0 \right\}$$

$$\text{e} \quad 0 \equiv 2\alpha_1 \int_{\delta' R/2a}^{\pi R/2a} \frac{e^{-2\alpha_2 ax/tR}}{x} dx$$

considerando o limite $\frac{a}{R} \rightarrow 0$.

Podemos ver que para $\hbar \rightarrow 0 \implies \alpha_1, \alpha_2 \rightarrow 0$ e $f(t) \rightarrow \exp \frac{t}{\pi^2 K}$ re
obtendo-se o caso clássico. No limite de baixas temperaturas:

$$S(R) \propto t^\Delta \exp - \frac{3t}{\pi K} \frac{R}{a}$$

onde

$$\Delta \equiv \frac{1}{\sqrt{2}\pi} \left(\frac{\hbar^2}{JKI} \right)^{1/2} .$$

APÊNDICE D

A magnetização reduzida do caso quântico em presença de um campo magnético a uma dimensão é dada por:

$$m = \exp - \frac{1}{8} \left(\frac{\hbar^2}{J\Gamma} \right)^{1/2} \frac{a}{2\pi} \int_B \frac{1}{\left[K(1-\cos aq) + \frac{hm}{2} \right]^{1/2}} \times \\ \times \coth \left\{ \frac{\beta\hbar}{2} \left(\frac{J}{\Gamma} \right)^{1/2} \left[K(1-\cos aq) + \frac{hm}{2} \right]^{1/2} \right\} dq$$

Para $\hbar \ll t \ll 1$, e fazendo uma mudança de variáveis, podemos escrever:

$$m \sim \gamma \exp - \alpha_1 \int_0^{\pi/2} \frac{1}{\left(x^2 + \frac{hm}{4K} \right)^{1/2}} \coth \left[\frac{\alpha_2}{t} \left(x^2 + \frac{hm}{4K} \right)^{1/2} \right] dx$$

onde

$$\alpha_1 \equiv \frac{1}{4\pi\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar^2}{JK\Gamma} \right)^{1/2} \quad e \quad \alpha_2 \equiv \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar^2 K}{J\Gamma} \right)^{1/2}$$

Dividindo a integral de modo a que possamos expandir a $\coth[\dots]$, de 0 a $\delta \Rightarrow \alpha_2 \left(x^2 + \frac{hm}{4K} \right)^{1/2} < t$ e portanto $\coth[Z] \sim \frac{1}{Z} + \frac{Z}{3}$; de δ a $\pi/2 \Rightarrow \alpha_2 \left(x^2 + \frac{hm}{4K} \right)^{1/2} > t$ e daí $\coth[Z] \sim 1 + 2e^{-2Z}$, onde $\delta \equiv \arctang \left[\left(\frac{t}{\alpha_2} \right)^2 - \frac{hm}{4K} \right]^{1/2}$ de tal modo que para $\hbar = 0$ tenhamos $\delta = \pi/2$ reobtendo o caso clássico. Podemos escrever

$$m \sim \gamma \exp \left\{ - \frac{\alpha_1}{\alpha_2} t \int_0^{\delta} \frac{dx}{x^2 + \frac{hm}{4K}} - \frac{\alpha_1 \alpha_2}{3t} \int_0^{\delta} dx - \alpha_1 \int_{\delta}^{\pi/2} \frac{dx}{\left(x^2 + \frac{hm}{4K} \right)^{1/2}} \right\}$$

$$\begin{aligned}
 & - 2\alpha_1 \int_{\delta}^{\pi/2} \frac{e^{-\frac{2\alpha_2}{t} (x^2 + \frac{hm}{4K})^{1/2}}}{(x^2 + \frac{hm}{4K})^{1/2}} dx \left. \right\} \\
 m \sim \gamma & \left\{ \exp - \frac{t}{2\pi K} \frac{1}{(hm/4K)^{1/2}} \arctang \left[\frac{\arctang \left(\left(\frac{t}{\alpha_2} \right)^2 - \frac{hm}{4K} \right)^{1/2}}{(hm/4K)^{1/2}} \right] \right\} \times \\
 & \times \left\{ \exp - \frac{1}{48\pi} \times \frac{\hbar^2}{JIt} \arctang \left[\left(\frac{t}{\alpha_2} \right)^2 - \frac{hm}{4K} \right]^{1/2} \right\} \\
 & \times \left\{ \exp - \alpha_1 \left[\ln \left(\frac{\pi}{2} + \left[\left(\frac{\pi}{2} \right)^2 + \frac{hm}{4K} \right]^{1/2} \right) - \right. \right. \\
 & \quad \left. \left. - \ln \left(\arctang \left[\left(\frac{t}{\alpha_2} \right)^2 - \frac{hm}{4K} \right]^{1/2} + \left(\arctang \left[\left(\frac{t}{\alpha_2} \right)^2 - \frac{hm}{4K} \right]^{1/2} \right)^2 + \frac{hm}{4K} \right] \right] \right\} \\
 & \times \left\{ \exp - 2\alpha_1 \int_{\delta}^{\pi/2} \frac{e^{-\frac{2\alpha_2}{t} (x^2 + \frac{hm}{4K})^{1/2}}}{(x^2 + \frac{hm}{4K})^{1/2}} dx \right\}
 \end{aligned}$$

Lembrando que estamos considerando $h \ll t$ e fazendo as devidas aproximações:

$$\begin{aligned}
 m \sim \gamma' & \left\{ \exp - \frac{t}{\pi} \frac{1}{(Khm)^{1/2}} \arctang(\infty) \right\} \left\{ \exp - \frac{1}{48\pi} \left(\frac{\hbar^2}{JIt} \right)^{1/2} \frac{1}{t} \arctang \left(\frac{t}{\alpha_2} \right) \right\} \\
 & \left\{ \exp - \alpha_1 (\ln \pi) + \alpha_1 \ln \left[2 \arctang \left(\frac{t}{\alpha_2} \right) \right] \right\}
 \end{aligned}$$

Para $t \ll 1$

$$m \sim \gamma'' t^{\alpha} \left\{ \exp - \frac{t}{2(Khm)^{1/2}} \right\} f(t)$$

onde $f(t) \equiv \exp - \frac{\sqrt{2}}{24} \left(\frac{\hbar^2}{JKI} \right)^{1/2}$. Se $\hbar \rightarrow 0 \implies \alpha_1 \rightarrow 0, \alpha_2 \rightarrow 0$ e

reobtemos o caso clássico

$$m \sim \gamma''' \exp - \frac{t}{2(Khm)^{1/2}} \cdot$$

APÊNDICE E

A função de correlações do caso quântico anisotrópico (presença de campo magnético a uma dimensão) é dada por:

$$S(R) \sim \frac{m^2}{2} \langle \theta_i \theta_{i'} \rangle_0^2$$

$$\langle \theta_i \theta_{i'} \rangle_0 = \frac{1}{4} \left(\frac{\hbar^2}{J\Gamma} \right)^{1/2} \frac{a}{\pi} \int_0^{\pi/a} \frac{\cos(Rq)}{\left[K(1-\cos aq) + \frac{hm}{2} \right]^{1/2}}$$

$$\times \coth \left[\frac{\beta h}{2} \left(\frac{J}{\Gamma} \right)^{1/2} \left\{ K(1-\cos aq)^{1/2} + \frac{hm}{2} \right\}^{1/2} \right] dq$$

Para $T = 0$

$$\langle \theta_i \theta_{i'} \rangle_0 = \frac{1}{4} \left(\frac{\hbar^2}{JK\Gamma} \right)^{1/2} \frac{a}{\pi} \int_0^{\pi/a} \frac{\cos(Rq)}{\left[K(1-\cos aq) + \frac{hm}{2} \right]} dq$$

Para $q \approx 0$ e fazendo uma mudança de variáveis temos

$$\langle \theta_i \theta_{i'} \rangle_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar^2}{JK\Gamma} \right)^{1/2} \frac{1}{\pi} \int_0^{\frac{\pi}{a}\xi} \frac{\cos(Rx/\xi)}{(x^2+1)^{1/2}} dx$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar^2}{JK\Gamma} \right)^{1/2} \frac{1}{\pi} K_0(R/\xi)$$

onde $\xi \equiv a \sqrt{K/hm}$, K_0 é a função modificada de Bessel cujo comportamento assintótico para $R/\xi \rightarrow \infty$ nos permite escrever

$$\langle \theta_i \theta_{i'} \rangle_0 \sim \left(\frac{\xi}{R} \right)^{1/2} e^{-R/\xi}$$

E portanto

$$S(R) \sim \frac{\xi}{R} e^{-2R/\xi}$$

Para $T \neq 0$

Procedendo como nos cálculos anteriores, isto é, dividindo a integral de forma a que possamos expandir a $\coth[\dots]$, expandindo para $q \approx 0$ e fazendo uma mudança de variáveis tem-se:

$$\begin{aligned} \langle \theta_i \theta_{i'} \rangle_0 &\sim \frac{2t}{\pi K} \frac{\xi}{a} \int_0^{\delta \xi} \frac{\cos(Rx/\xi)}{x^2 + 1} dx + \frac{1}{16\pi} \left(\frac{\hbar^2}{JKI}\right) \frac{1}{t} \frac{a}{\xi} \int_0^{\delta \xi} \cos(Rx/\xi) dx \\ &+ \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar^2}{JKI}\right)^{1/2} \int_{\delta \xi}^{\frac{\pi \xi}{a}} \frac{\cos(Rx/\xi)}{(x^2+1)^{1/2}} dx + \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar^2}{JKI}\right)^{1/2} \int_{\delta \xi}^{\frac{\pi \xi}{a}} \frac{e^{-\frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar^2 K}{JKI}\right)^{1/2} \frac{a}{t\xi} (x^2+1)^{1/2}}}{(x^2+1)^{1/2}} dx \end{aligned}$$

onde $\delta = 2 \arctang\left[\left(\frac{t}{\alpha}\right)^2 - \frac{\hbar m}{4K}\right]^{1/2}$. Para $\hbar \rightarrow 0$ temos $\xi \gg a$ e a contribuição das duas últimas integrais é praticamente nula e temos

$$\langle \theta_i \theta_{i'} \rangle_0 \sim \frac{2t}{\pi K} \left(\frac{\xi}{a}\right) e^{-R/\xi} + \frac{1}{32\pi} \left(\frac{\hbar^2}{JKI}\right)^{1/2} \frac{1}{t} \frac{a}{\xi} \int_{-\infty}^{+\infty} \cos(Rx/\xi) dx$$

E como trabalhamos com $R \gg \xi \gg a \implies \int_{-\infty}^{+\infty} \cos(Rx/\xi) dx = \delta(R/\xi)$ o que representa uma pequena contribuição do segundo termo. Considerando-se ainda que temos um fator $1/\xi$ multiplicativo anteriormente à integral temos:

$$S(R) \sim \frac{m^2}{2} \langle \theta_i \theta_{i'} \rangle_0^2 \sim t^2 \left(\frac{\xi}{a}\right)^2 e^{-2R/\xi}$$

APÊNDICE F

A função de correlações para o caso quântico isotrópico a duas dimensões é dado por

$$S(R) = \frac{1}{2} \exp - \frac{1}{8} \left(\frac{\hbar^2}{JKI} \right)^{1/2} \frac{a^2}{2\pi^2} \iint \frac{1 - \cos(\vec{R} \cdot \vec{q})}{[2 - \cos aqx - \cos aqy]^{1/2}} \times$$

$$\times \coth \left[\frac{1}{8} \left(\frac{\hbar^2 K}{JI} \right)^{1/2} \frac{1}{t} (2 - \cos aqx - \cos aqy)^{1/2} \right] d\vec{q}$$

Para o caso clássico, $\hbar = 0$ e

$$S(R) = \frac{1}{2} \exp - \frac{t}{K} \frac{a^2}{2\pi^2} \iint_B \frac{1 - \cos(\vec{R} \cdot \vec{q})}{(2 - \cos aqx - \cos aqy)} d\vec{q}$$

Em seu trabalho Tsallis⁽¹⁷⁾ obteve para esta integral o resultado

$$S(R) \sim \gamma \left(\frac{a}{R} \right)^\eta$$

onde $\eta \equiv 2t/\pi K$, utilizando uma aproximação em que $R_x = R_y$. De modo mais simples obtemos para o caso clássico o mesmo resultado fazendo $\vec{R} \cdot \vec{q} \approx Rq$, a menos de uma constante multiplicativa $(\frac{\pi}{2}e)^{-\eta}$ que na faixa de temperaturas com que trabalhamos é irrelevante (da ordem de 1).

Para o caso quântico, considerando $\vec{R} \cdot \vec{q} \approx Rq$, $q \approx 0$ e fazendo uma mudança de variáveis, temos:

$$S(R) \sim \gamma \exp - \alpha_1 \int_0^\pi \text{sen}^2(xR/2a) \coth(\alpha_2 \frac{x}{t}) dx$$

onde

$$\alpha_1 \equiv \frac{\sqrt{2}}{4\pi} \left(\frac{\hbar^2}{JKI} \right)^{1/2}$$

e

$$\alpha_2 \equiv \frac{1}{8\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar^2 K}{JI} \right)^{1/2}$$

Dividindo a integral

$$S(R) \sim \gamma \exp - \alpha_1 \left[\int_0^\delta + \int_\delta^{\delta'} + \int_{\delta'}^\pi \text{sen}^2(xR/2a) \coth\left(\frac{\alpha_2 x}{t}\right) dx \right]$$

onde entre 0 e $\delta \Rightarrow \text{sen}^2(Z) \sim Z^2$ e $\coth[Y] \sim \frac{1}{Y} + \frac{Y}{3}$, entre δ e $\delta' \Rightarrow \text{sen}^2(Z) \approx \cos^2 Z$ e $\coth[Y] \sim \frac{1}{Y} + \frac{Y}{3}$ e entre δ' e $\pi \Rightarrow \text{sen}^2 Z \approx \cos^2 Z$ e $\coth[Y] \sim 1 + 2e^{-2Y}$, $\delta \equiv \frac{2a}{R}$ e $\delta' = 2 \arctang\left(\frac{t}{\alpha_2}\right)$. Fazendo as substituições e resolvendo as integrais resultantes (todas de fácil resolução) obtemos

$$S(R) \sim \gamma' \left(\frac{a}{R}\right)^\eta \left[\arctang\left(\frac{t}{\alpha_2}\right) \right]^{-\eta} e^{-\eta} f(t)$$

onde

$$f(t) \equiv \exp\left\{ -\frac{1}{192\pi} \left(\frac{\hbar^2}{JI}\right) \arctang\left(\frac{t}{\alpha_2}\right) - \frac{\sqrt{2}}{8} \left(\frac{\hbar^2}{JKI}\right)^{1/2} + \frac{\sqrt{2}}{4\pi} \left(\frac{\hbar^2}{JKI}\right)^{1/2} \arctang\left(\frac{t}{\alpha_2}\right) \right\}$$

Para $\hbar \rightarrow 0$, $\alpha_1, \alpha_2 \rightarrow 0$, $f(t) \rightarrow 1$, $\arctang\left(\frac{t}{\alpha_2}\right) \rightarrow \frac{\pi}{2}$, e tem-se

$$S(R) \sim \gamma \left(\frac{a}{R}\right)^\eta \left(\frac{\pi}{2} e\right)^{-\eta}$$

que é a resposta para o caso clássico. Como trabalhamos no limite $\frac{R}{a} \rightarrow \infty$ desprezamos os termos com o comportamento $\left(\frac{1}{R}\right)$ dentro da exponencial.

APÊNDICE G

Função de correlações para o caso anisotrópico quântico a duas dimensões

$$\langle \theta_{ij} \theta_{i'j'} \rangle_0 = \frac{1}{4} \left(\frac{\hbar^2}{JI} \right)^{1/2} \iint \frac{\cos(\vec{q} \cdot \vec{R})}{\left[Kx(1-\cos aqx) + Ky(1-\cos aqy) + \frac{hm}{2} \right]^{1/2}} \times \\ \times \coth \left\{ \frac{\beta \hbar}{2} \left(\frac{J}{I} \right)^{1/2} \left[Kx(1-\cos aqx) + Ky(1-\cos aqy) + \frac{hm}{2} \right]^{1/2} \right\} d\vec{q}$$

Para $t \ll 1$, $h \ll 1$, desenvolvendo para $qx, qy \approx 0$ e com uma mudança de variáveis: $aqx = x$, $aqy = y$ e $x^2 + y^2 = r^2$

$$\langle \theta_{ij} \theta_{i'j'} \rangle_0 = \frac{\sqrt{2}}{4} \left(\frac{\hbar^2}{JKI} \right)^{1/2} \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\pi \int_{-\pi}^\pi \frac{\cos(r \frac{R}{a} \cos \theta)}{\left(r^2 + \frac{hm}{4K} \right)^{1/2}} \times \\ \times \coth \left[\frac{1}{8\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar^2 K}{JI} \right)^{1/2} \left(r^2 + \frac{hm}{4K} \right)^{1/2} \right] r dr d\theta$$

onde $\vec{r} \cdot \vec{R} = rR \cos \theta$. E como

$$\frac{1}{2} \int_{-\pi}^\pi \cos\left(\frac{rR}{a} \cos \theta\right) d\theta = \pi J_0\left(\frac{rR}{a}\right)$$

Podemos escrever

$$\langle \theta_{ij} \theta_{i'j'} \rangle_0 \approx \alpha_1 \int_0^\pi \frac{J_0(rR/a)}{\left(r^2 + \frac{hm}{4K} \right)^{1/2}} \coth \left[\frac{\alpha_2}{t} \left(r^2 + \frac{hm}{4K} \right)^{1/2} \right] r dr$$

onde

$$\alpha_1 \equiv \frac{\sqrt{2}}{8\pi} \left(\frac{h^2}{JKI}\right)^{1/2}, \quad \alpha_2 \equiv \frac{1}{8\sqrt{2}} \left(\frac{h^2 K}{JI}\right)^{1/2}.$$

Na região $0 \leq t < h \ll 1$, $\coth\left(\frac{Y}{t}\right) \sim 1$

$$\langle \theta_{ij} \theta_{i',j'} \rangle_0 \sim \alpha_1(0) \int_0^\pi \frac{J_0(rR/a)}{\left(r^2 + \frac{hm}{4K}\right)^{1/2}} r dr$$

Definindo $\xi \equiv a\sqrt{K/hm}$, colocando a/ξ em evidência e fazendo uma mudança de variáveis $r\xi/a = x$ tem-se

$$\langle \theta_{ij} \theta_{i',j'} \rangle_0 \sim \alpha_1(0) \frac{a}{\xi} \int_0^{\pi\xi/a} \frac{J_0(Rx/\xi)}{(x^2+1)^{1/2}} x dx$$

No limite $h \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} \langle \theta_{ij} \theta_{i',j'} \rangle_0 &\sim \alpha_1(0) \frac{a}{\xi} \int_0^\infty \frac{J_0(Rx/\xi)}{(x^2+1)^{1/2}} x dx \\ &\sim \alpha_1(0) \frac{a}{R} e^{-R/\xi} \end{aligned}$$

e

$$S(R) \propto \left(\frac{a}{R}\right)^2 e^{-2R/\xi}$$

Na região $0 < h < t \ll 1$ partindo de

$$\langle \theta_{ij} \theta_{i',j'} \rangle_0 \sim \alpha_1 \int_0^\pi \frac{J_0(rR/a)}{\left(r^2 + \frac{hm}{4K}\right)^{1/2}} \coth\left[\frac{\alpha_2}{t} \left(r^2 + \frac{hm}{4K}\right)^{1/2}\right] r dr$$

Dividindo a integral em duas partes de 0 a $\delta \Rightarrow \alpha_2 \left(r^2 + \frac{hm}{4K}\right)^{1/2} < t$ e de δ a $\pi \Rightarrow \alpha_2 \left(r^2 + \frac{hm}{4K}\right)^{1/2} > t$ de modo a permitir a ex -

pansão da $\coth[\square \square]$ temos, colocando $\frac{hm}{4K}$ em evidência e com uma mudança de variáveis simples:

$$\begin{aligned} \langle \theta_{ij} \theta_{i',j'} \rangle_0 &\sim \frac{t\alpha_1}{\alpha_2} \int_0^{\delta\xi/a} \frac{J_0(R/\xi x)}{(x^2+1)^{1/2}} x dx + \\ &+ \frac{1}{3} \frac{\alpha_1\alpha_2}{t} \left(\frac{a}{\xi}\right)^2 \int_0^{\delta\xi/a} J_0(R/\xi x) x dx \\ &+ \alpha_1 \frac{a}{\xi} \int_{\delta\xi/a}^{\pi\xi/a} \frac{J_0(R/\xi x)x}{(x^2+1)^{1/2}} dx + \\ &+ 2\alpha_1 \frac{a}{\xi} \int_{\delta\xi/a}^{\pi\xi/a} \frac{J_0(R/\xi x)}{(x^2+1)^{1/2}} e^{-\frac{2\alpha_2}{t} \frac{a}{\xi} (x^2+1)^{1/2}} x dx \end{aligned}$$

Considerando $h \rightarrow 0 \implies \xi \rightarrow \infty$ e podemos considerar

$$\begin{aligned} \langle \theta_{ij} \theta_{i',j'} \rangle_0 &\sim \frac{t\alpha_1}{\alpha_2} \int_0^\infty \frac{J_0(R/\xi x)}{(x^2+1)^{1/2}} x dx + o\left(\frac{1}{\xi}\right) + o\left(\frac{1}{\xi}\right)^2 \\ &\sim \frac{2t}{\pi K} \left(\frac{\xi}{R}\right)^{1/2} e^{-R/\xi} \end{aligned}$$

E daí

$$S(R) \propto t^2 \frac{\xi}{R} e^{-2R/\xi} .$$

BIBLIOGRAFIA

- (1) - Landau, L.D. - Zh. Eksp. Teor. Fiz. 7, (1937), 19 e 7, (1937), 627.
- (2) - Nino Boccara - "Symmetries Brisées" - 1^a edição, Hermann, (1976), Introdução.
- (3) - Onsager, L. - "Crystal Statistics I: A Two-Dimensional Model with an Order- Disorder Transition" - Phys. Rev. 65, (1944), 117.
- (4) - Yang, C.N. - "The Spontaneous Magnetization of a Two-Dimensional Ising Model" - Phys. Rev. 85, (1952), 808.
- (5) - Fisher, M.E. - "The Susceptibility of the Plane Ising Model" - Physica 25, (1959), 521.
- (6) - Domb, C.; Green, M.S. - "Phase Transitions and Critical Phenomena" - vol. 3, 1^a edição, Academic Press Inc. (1974).
- (7) - Rogério César de Cerqueira Leite, Antonio Rubens Britto de Castro - "Física do Estado Sólido" - 1^a edição, Edgard Blücher, (1978), Cap. 16.
- (8) - Hone, D.W.; Richards, P.M. - "One and Two-Dimensional Magnetic Systems" - A. Rev. Mater. Sci. 4, (1974), 337.
- (9) - De Jongh, L.J.; Miedema, A.R. - "Experiments on Simple Magnetic Model Systems" - Adv. Phys. 23, (1974), 1.
- (10) - Ising, E. - "Beitrag Zur Theorie des Ferromagnetismus" - Z. Phys. 31, (1925), 253.
- (11) - Blöte, H.W.J.; Huiskamp, W.J. - "Heat Capacity Measurement on Rb_3CoCl_5 Compared with the Ising Model" - Phys. Lett. A 29, (1969), 304.
- (12) - Blöte, H.W.J. - Thesis, University of Leiden - (1972).

- (13) - Thouless, D.J. - "Phase Transitions" - Rudolf Peierls and Theoretical Physics, Pergamon Press, (1977), 70.
- (14) - Bloemberger, P.; Tan, K.G.; Lefèvre, F.H.J.; Bleyendal, A.H.M. - Proceed. Int. Conf. Magn., Grenoble, J. Phys. 32 suppl. C-1, (1970), 879.
- (15) - De Jongh, L.J.; Van Amstel, W.D. - Proceed. Int. Conf. Magn., Grenoble - J. Phys. 32 suppl. C-1, (1970), 880.
- (16) - Tsallis, C. - "Classical Statistical Approach to Anisotropic Two-Dimensional X-Y Model" - Il Nuovo Cimento 34 B, No. 2, (1976), 411.
- (17) - Obokata, T.; Oguchi, T. - "One Dimensional Ising Model with General Spin" - J. Phys. Soc. Jap. 25, (1968), 322.
- (18) - Suzuki, M.; Tsujiyama, B.; Katsura, K. - "One Dimensional Ising Model with General Spin" - J. Math. Phys. 8, (1967), 124.
- (19) - Lieb, E.; Schultz, T.; Mattis, D. - "Two Soluble Models of an Antiferromagnetic" - Ann. Phys. 16, (1961), 407.
- (20) - Katsura, S. - "Statistical Mechanics of the Anisotropic Linear Heisenberg Model" - Phys. Rev. 127, (1962), 1508.
- (21) - Wegner, F. - "Spin Ordering in a Planar Classical Heisenberg Model" - Z. Phys. 206, (1967), 465.
- (22) - Fisher, M.E. - "Magnetism in One-Dimensional Systems - The Heisenberg Model for Infinite Spin" - Am. J. Phys. 32, (1964), 343.
- (23) - Griffiths, R.B. - "Magnetization Curve at Zero Temperature for the Antiferromagnetic Heisenberg Linear Chain" - Phys. Rev. 133, (1964), 768.
- (24) - Bonner, J.C.; Fisher, M.E. - "Linear Magnetic Chains with Anisotropic Coupling" - Phys. Rev. A 135, (1964), 640.

- (25) - Griffiths, R.B. - Thesis; Stanford University - (1962).
- (26) - Bethe, H.A. - "Zur Theorie der Metalle I: Eigenwerte und Eigenfunktionen der Linearen Atomkette" - Z. Phys. 71, (1931), 205.
- (27) - Mermin, N.D. - "Crystalline Order in Two Dimensions" - Phys. Rev. 176, (1968), 250.
- (28) - Mermin, N.D.; Wagner, H. - "Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models" - Phys. Rev. Lett. 17, 22, (1966), 1133.
- (29) - Fisher, M.E.; Jasnow, D. - "Decay of Order in Isotropic Systems of Restricted Dimensionality II: Spin Systems" - Phys. Rev. B 3, (1971), 907.
- (30) - Stanley, H.E.; Kaplan, T.A. - "Possibility of a Phase for the Two-Dimensional Heisenberg Model" - Phys. Rev. Lett. 17, 17 (1966), 913.
- (31) - Stanley, H.E. - "Critical Properties of Isotropically Interacting Classical Spins Constrained to a Plane" and "Dependence of Critical Properties on Dimensionality of Spins" - Phys. Rev. Lett. 20, (1968), 150, 589.
- (32) - Moore, M.A. - "Additional Evidence for a Phase Transitions in the Plane-Rotator and Classical Heisenberg Models for Two-Dimensional Lattices" - Phys. Rev. Lett. 23, (1969), 861.
- (33) - Kosterlitz, J.M.; Thouless, D.J. - "Ordering, Metastability and Phase Transition in Two-Dimensional Systems" - J. Phys. C: Solid State Physics 6, (1973), 1181.
- (34) - R.P. Feynman - "Statistical Mechanics: A Set of Lectures" - 3a. Edição, W.A. Benjamin, Inc., (1972), cap. 2, pág. 67.
- (35) - Barden, J.; Cooper, L.N.; Schrieffer, J.R. - "Microscop-

- pic Theory of Superconductivity" - Phys. Rev. 106, (1957), 162 - "Theory of Superconductivity" - Phys. Rev. 108 , (1957), 1175.
- (36) - Tsallis, C.; Furtado Valle, J.W. - "Remarks on the Choice of Trial Hamiltonians for the Quantum Statistical Treatment of Anharmonic Systems" - Revista Brasileira de Física, 9, nº 3, (1979).
- (37) - Boccara, N.; Sarma, G. - "Theorie Microscopique des Transitions s'Accompagnat d'une Modification de la Structure Cristalline" - Physics 1, (1965), 219.
- (38) - Pytte, E. - "Spurious First-Order Transitions in the Self-Consistent Phonon Approximation" - Phys. Rev. Lett. 28, (1972), 895.
- (39) - Conte, R. - "Determination Théorique de l'Ordre d'Un Changement de Phase Displacif A d Dimensions" - Journal de Physique 35, (1974), 67.
- (40) - de Lima, R.A.T.; Tsallis, C. - "Debye-Waller Factor , Thermal Expansion and Specific Heat of Anharmonic Crystals" -
- (41) - da Silva, L.R.; Tsallis, C. - "Calor Específico, Susceptibilidade e Frequência de um Oscilador Anarmônico . Teste do Método Variacional" - Revista Brasileira de Física 9, N. 3, (1979), 619.
- (42) - Berezinskii, V.L. - "Destruction of Long-Range Order in One-Dimensional and Two-Dimensional Systems Having a Continuous Symmetry Group: Classical Systems" - Zurn Eksp. Fiz. 59, (1970), 907 (English Translation: Sov. Phys. JETP 32, (1971), 610).
- (43) - Berezinskii, V.L. - "Destruction of Long-Range Order in One-Dimensional and Two-Dimensional Systems Having a Continuous Symmetry Group: Quantum Systems" - Zurn. Eksp. Teor. Fiz. 61, (1971), 1144 (English Translation: Sov. Phys. JETP 34, (1972), 310).

- (44) - Sarma, G. - "Non Linear Response of Two Dimensional Nematics to an Applied Field" - Solid State Comm. 10, (1972), 1049.
- (45) - Edwards, S.F. - "The Ground State of a Spin Glass" - J. Phys. F: Metal Physics 6, N. 10, (1976), 1923.
- (46) - Edwards, S.F.; Anderson, P.W. - "Theory of Spin Glasses: II" - J. Phys. F 6, N. 10, (1976), 1927.
- (47) - Villain, J. - "Spin Waves in the One-or-Two- Dimensional Classical Heisenberg Ferromagnet with a Hard Magnetization Axis" - J. Phys. C 6, (1973).
- (48) - Kittel, C. - "Introduction to Solid State Physics" - 4^a edição, John Wiley & Sons, (1971), Cap. 16.
- (49) - Des Cloizeaux, J.; Pearson, J.J. - "Spin Wave Spectrum of the Antiferromagnetic Linear Chain" - Phys. Rev. 128, N. 5, (1962), 2131.
- (50) - Villain, J. - J. Phys. C 6 (1974), L97.
- (51) - Loveluck, J.; Lovesey, S.W.; Aubry, S. - "Spin Correlations for a Classical Linear Magnet with Exchange and Single-Site Anisotropy Energies" - J. Phys. C 8, (1975), 3841.
- (52) - Steiner, M.; Villain, J.; Windsor, C. - "Theoretical and Experimental Studies on one Dimensional Magnetic Systems" - Adv. in Phys. 25, N.2, (1976), 87.
- (53) - Herpin A. - "Théorie du Magnetism" - 1^a edição, Presses Universitaires de France, Paris, (1968), Cap. V.
- (54) - Kubo, R. - "Statistical Mechanics" - 1^a edição, North Holland Publishing Company, (1965), Cap. 1, pág. 79.
- (55) - Landau, L., Lifchitz, E. - "Physique Statistique" - 1^a edição, Editora MIR, (1967), Cap. III.
- (56) - McCoy, B.M. - "Spin Correlation Functions of the XY Mo

dels" - Phys. Rev. 173, N. 2, (1968), 531.

- (57) - Tsallis, C. - "Influence of Long-Range Forces in Isotropic Two-Dimensional Magnetism" - Phys. Stat. Sol. (b) 86, (1978), K101.

APÊNDICE B*

Temos para a função de correlações do caso clássico a uma dimensão

$$S(R) = \frac{1}{2} \exp - \frac{t}{K} \frac{a}{2\pi} \int_B \frac{1 - \cos Rq}{1 - \cos aq} dq$$

Para $R \gg a$, dividimos a integral em dois intervalos

$$S(R) \sim \gamma \exp - \frac{4t}{\pi K} \frac{1}{a} \int_0^{\pi/a} \frac{\text{sen}^2(Rq/2)}{q^2} dq$$

$$\sim \gamma \exp - \frac{4t}{\pi K} \frac{1}{a} \left[\int_0^{\delta} \frac{\text{sen}^2(Rq/2)}{q^2} dq + \int_{\delta}^{\pi/a} \frac{\text{sen}^2(Rq/2)}{q^2} dq \right]$$

onde entre 0 e $\delta - \text{sen}^2(Rq/2) \sim (Rq/2)^2$ e entre δ e $\pi/a - \text{sen}^2(Rq/2) \approx \cos^2(Rq/2)$. Daí obtemos:

$$S(R) \sim \gamma \exp \left[- \frac{3t}{\pi K} \frac{R}{a} \right] \exp \frac{t}{\pi^2 K} \quad \text{para } \delta = \frac{2}{R}$$

$$\sim \gamma \exp - \frac{3t}{\pi K} \frac{R}{a} f(t)$$

$$\sim \gamma f(t) \exp \left[-R/\xi \right]$$

onde $\xi \equiv a \frac{\pi K}{3t}$ e $f(t) \equiv e^{t/\pi^2 K}$. Como trabalhamos com $t \ll 1$ $f(t)$ não tem grande peso na função de correlações.

* Não nos preocupamos, nos apêndices, em obter exatamente as expressões para as diversas grandezas físicas e sim em seu comportamento de forma geral.