



UFAM

**UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

**EFEITOS DE SUPERFÍCIE E FRUSTRAÇÃO NAS
PROPRIEDADES CRÍTICAS DO MODELO DE ISING**

Vanusa Bezerra Pachêco

Dezembro - 2006



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

**EFEITOS DE SUPERFÍCIE E FRUSTRAÇÃO NAS
PROPRIEDADES CRÍTICAS DO MODELO DE ISING**

Vanusa Bezerra Pachêco

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Amazonas como parte do pré-requisito para obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. José Ricardo de Sousa

Có-orientador: Prof. Dr. João dos Santos Cabral Neto.

Dezembro - 2006

Dedico este trabalho ao Dr. José Ricardo de Sousa.

AGRADECIMENTOS

Ao Dr. José Ricardo de Sousa pelo incentivo, paciência e orientação.

A meus pais e irmãos, em especial a Janáina Bezerra Pacheco, pelo apoio, incentivo e compreensão.

Ao meu esposo Cleofano Cordeiro de Almeida pela dedicação, amor e carinho.

Ao órgão de fomento, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Amazonas-FAPEAM pelo apoio financeiro.

Ao colega Felipe Gomes e ao Dr. João Neto pela ajuda computacional.

Aos meus colegas que me acompanharam durante o curso de mestrado, em especial a Elizabeth Tavares Pimental e Clodoaldo.

Aos professores do programa de pós-graduação em física da UFAM que ministram as disciplinas do curso de mestrado.

Aos professores Antônio Bittencourt, Walter Esteves de Castro Junior, Haroldo de Almeida Guerreiro e a coordenadora do curso de pós-graduação Marta Gusmão que me incentivaram a concluir esta dissertação.

Resumo

Neste trabalho investigamos o diagrama de fase do modelo de Ising de spin $\frac{1}{2}$ aleatoriamente decorado nos planos de um filme fino de tamanho L . As interações nos planos simula a interação cobre-cobre (Cu-Cu) numa rede cúbica simples antiferromagnética, onde entre os vértices da rede coloca-se um spin decorador aleatoriamente distribuído, que simula o íon de oxigênio no plano de cobre-oxigênio (CuO_2) de valor $\frac{1}{2}$ e interagindo ferromagneticamente com os íons de cobre, provocando assim o fenômeno de frustração. Para este estudo, utilizamos a técnica do operador diferencial em aglomerado com um íon em conjunto com a aproximação do campo efetivo. Através dos diagramas de fase $T_c \times \Delta$ e $T_c \times L$, onde $\Delta = J_s^F / J_b^F$, que representa a relação das energias de interação ferromagnética da superfície com o *bulk* é possível notar um ponto multicrítico $\Delta = \Delta_c$ que corresponde ao caso em que tanto a superfície quanto o *bulk* estão ordenados a um dado valor de concentração e valores para os parâmetros de frustrações $\alpha_s = J_s^{AF} / J_s^F$ (parâmetro de frustração da superfície) e $\alpha_b = J_b^{AF} / J_b^F$ (parâmetro de frustração do *bulk*). Para valores $\Delta < \Delta_c$, o sistema apresenta-se com *bulk* ordenado e a superfície desordenada, isto significa que a temperatura crítica do *bulk* (T_c^b) é maior que a temperatura crítica da superfície (T_c^s), no entanto para $\Delta > \Delta_c$ a superfície está ordenada e o *bulk* desordenado, isto é, $T_c^b < T_c^s$. E para $T_c \times p$ verificamos que para determinados valores de concentração encontramos para qualquer valor de Δ os mesmos valores de temperaturas críticas.

Sumário

I	Introdução	5
1.1	Considerações Gerais	5
1.1.1	Modelagem de materiais magnéticos isolantes	7
1.1.2	Modelo de Heisenberg	17
1.2	Motivação do Trabalho	25
1.2.1	Supercondutividade	25
1.2.2	Filmes Finos	29
II	Métodos Aproximativos	38
2.1	Considerações Gerais	38
2.2	Técnica do Operador Diferencial	40
2.3	Filme fino: modelo de Ising	45
III	Filme Fino de Ising Aleatoriamente Decorado	57
3.1	Considerações Gerais	57
3.2	Modelo e Método	62
3.3	Resultados e Discussão	72
IV	Conclusão	89

Lista de Figuras

1.1	Comportamento típico da magnetização M em função do campo magnético H . .	12
1.2	Comportamento da magnetização em função da temperatura à campo nulo. . . .	15
1.3	Diagrama de fase do composto $(La_{1-x}Ba_x)_2CuO_4$. As fases antiferromagnética e supercondutora estão indicadas por A.F e S.C., respectivamente [29].	28
1.4	Evolução da temperatura crítica desde a descoberta da supercondutividade em 1911 até 1990. As linhas horizontais indicam as temperaturas dos líquidos refrigerantes necessários para alcançar baixas temperaturas [34].	30
1.5	Diagrama de fase do modelo de Ising aleatoriamente decorado com parâmetro de frustração $\alpha = 0,50$ [31] que é comparado com resultado experimental do composto $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ [33].	30
1.6	Temperatura crítica em função da espessura do filme fino supercondutor [46]. . .	32
1.7	Temperatura crítica T_c em função da concentração de buracos no plano CuO_2 com diferentes valores de voltagem [43].	33
1.8	Tensão ε (compressão e expansão) em função da espessura da cerâmica condutora $La_{1,85}Sr_{0,15}CuO$ quando acrescentado os substratos $SrLaAlO_4$ e $SrTiO_3$ [43]. . .	33

1.9	Temperatura crítica em função da espessura da cerâmica supercondutora (001) $La_{1,85}Sr_{0,15}CuO_4$ acrescentando os substratos $SrLaAlO_4$ (linha sólida) e $SrTiO_3$ (linha tracejada). Os triângulos abertos e cheios são dados experimentais para o crescimento da cerâmica condutora $La_{1,9}Sr_{0,1}CuO_4$ acrescentado os substratos $SrLaAlO_4$ e $SrTiO_3$, respectivamente. Os dados experimentais da $La_{1,85}Sr_{0,15}CuO_4$ acrescentando $SrTiO_3$ são marcados por sinais positivos. Os círculos abertos e fechados representam os pontos dos dados experimentais do crescimento da cerâmica $La_{1,85}Sr_{0,15}CuO_4$ quando acrescentado os substratos $SrTiO_3$ e $SrLaAlO_4$, respectivamente [43].	34
2.1	Rede Cúbica Simples na forma de filmes finos.	46
2.2	Temperatura crítica versus Δ para diversos tamanhos de filme L . O ponto de interseção corresponde o ponto multicrítico associado a transição de fase <i>bulk</i> -superfície.	53
2.3	Temperatura crítica T_c em função do tamanho do filme L para diversos valores de Δ	54
3.1	Rede cúbica simples decorada na forma de filmes finos.	63
3.2	Temperatura crítica versus Δ com frustração ($\alpha_s > \alpha_b$).	73
3.3	Temperatura crítica versus Δ , para $\alpha_s < \alpha_b$	74
3.4	Temperatura crítica T_c em função do número de camadas l com frustração ($\alpha_s > \alpha_b$).	75
3.5	Temperatura crítica T_c em função do número de camadas l com frustração ($\alpha_s < \alpha_b$).	75
3.6	Parâmetro Δ em função da frustração.	76
3.7	Parâmetro Δ em função da frustração na superfície.	77
3.8	Parâmetro Δ em função da frustração no <i>bulk</i>	77
3.9	Temperatura crítica em função da concentração para camada $l = 2$	78
3.10	Temperatura crítica em função da concentração para camada $l = 3$	79
3.11	Temperatura crítica em função da concentração para camada $l = 4$	80
3.12	Temperatura crítica em função da concentração para camada $l = 5$	81

3.13	Temperatura crítica em função da concentração para camada $l = 6$	82
3.14	Temperatura crítica em função da concentração para camada $l = 7$	83
3.15	Temperatura crítica em função da concentração para camada $l = 8$	84
3.16	Temperatura crítica em função da concentração para camada $l = 9$	85
3.17	Temperatura crítica em função da concentração para camada $l = 10$	86

Capítulo I

Introdução

1.1 Considerações Gerais

O ponto de partida para se estudar teoricamente as propriedades magnéticas nos compostos (e também de outras naturezas), é calcular a função de partição, definida por

$$\mathcal{Z} = \text{Tr} e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} \quad (1.1)$$

onde $\beta = \frac{1}{k_B T}$, k_B é a constante de Boltzmann, T é a temperatura absoluta, $\hat{\mathcal{H}}$ é o Hamiltoniano construído a partir da mecânica quântica usando os seus constituintes microscópicos e Tr é o traço. A Eq. (1.1) é a base da mecânica estatística de equilíbrio, no qual os vínculos T , H (campo magnético) e N (nº de partículas) estão fixos, estabelecendo assim o *ensemble* canônico. A conexão com a termodinâmica (experiência) é realizada calculando o potencial termodinâmico associado aos vínculos T , H e N fixos, ou seja,

$$G(T, H, N) = -k_B T \ln \mathcal{Z}(T, H, N) \quad (1.2)$$

onde $G(T, H, N)$ é a energia livre de Gibbs. Por se tratar de uma grandeza extensiva, e para nosso propósito estaremos trabalhando no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$), eliminando assim as

flutuações estatísticas das grandezas macroscópicas ¹, então definiremos a densidade de energia livre $g(T, H) = \frac{G(T, H, N)}{N}$. Partindo da equação fundamental, Eq. (1.2), ou a sua densidade, calculamos as grandezas (equações de estado); magnetização $M(T, H, N)$ e entropia $S(T, H, N)$ definidas (derivadas das leis termodinâmicas) por

$$M(T, H, N) = - \left(\frac{\partial G}{\partial H} \right)_{T, N} \quad (1.3)$$

e

$$S(T, H, N) = - \left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_{H, N} \quad (1.4)$$

onde mais uma vez as grandezas M e S são extensivas e, portanto, definimos as suas respectivas densidades no limite termodinâmico por $m(T, H) = \frac{M}{N}$ e $s(T, H) = \frac{S}{N}$.

Resumidamente, vimos que propondo um Hamiltoniano (modelagem de materiais magnéticos) e calculando a função de partição, Eq. (1.1), todas as propriedades macroscópicas do composto magnético em análise serão conhecidas, como, por exemplo, a magnetização definida pela Eq. (1.3), ou a susceptibilidade $\chi(T, H) = \frac{\partial m}{\partial H}$, calor específico $c(T, H) = T \frac{\partial s}{\partial T}$, etc. Infelizmente, os cálculos das grandezas magnéticas não são tão simples de se obter teoricamente como temos mencionado acima. Primeiro, devido as diversas interações de muitos corpos (spins) presentes no Hamiltoniano \mathcal{H} , o cálculo da função de partição \mathcal{Z} para $N \rightarrow \infty$ é impossível de se realizar para a grande maioria dos modelos que estudamos na mecânica estatística [?]. Segundo, mesmo calculando exatamente a função de partição, o Hamiltoniano real que descreve fisicamente os compostos magnéticos não é conhecido completamente, onde várias simplificações são feitas baseadas nas universalidades e predominâncias das interações, o que leva geralmente à impossibilidade de simular (mecânica estatística) exatamente as medidas experimentais (termodinâmica). Voltaremos a este impasse (cálculo de \mathcal{Z} exatamente ou modelagem real de um Hamiltoniano para descrever os compostos magnéticos) mais adiante, discutiremos a seguir algumas modelagens (Hamiltonianos) e as particularidades de propriedades magnéticas em compostos isolantes.

¹De uma maneira geral, a flutuação estatística de uma dada grandeza A é inversamente proporcional a raiz quadrada do número de partículas (isto é, $\frac{\Delta A}{\langle A \rangle} \simeq \frac{1}{\sqrt{N}}$), e, portanto, no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$) tende a zero. Porém, veremos que esta relação só é verdadeira fora da região crítica, pois para o ferromagneto em $H = 0$ e $T = T_c$, onde a magnetização vai a zero, temos fortes flutuações caracterizando assim os fenômenos críticos.

1.1.1 Modelagem de materiais magnéticos isolantes

Os compostos magnéticos são amplamente utilizados no desenvolvimento de novas tecnologias, como, por exemplo, em sistemas de geração e distribuição de energia, sistema de conversão eletromecânica, eletrônicos e de telecomunicações, transdutores, sensoriamento, prospecção geológica, informática, automação industrial, medicina, gravação magnética, etc. (Ver as Refs.[2, 3] para uma descrição detalhada sobre materiais magnéticos). A gravação magnética é, sem dúvida, a melhor tecnologia da eletrônica para armazenamento não-volátil de informação. Esta é essencial para o funcionamento de computadores, gravadores de som e de vídeo, além de inúmeros equipamentos acionados por cartões magnéticos. Esses avanços só foram possíveis graças à compreensão das propriedades atômicas da matéria, com base na mecânica quântica desenvolvida nas décadas de 1920 e 1930.

O uso de materiais magnéticos é datado desde 600 anos a. C.. Há evidências históricas do uso, por antigos chineses, de pedras chamadas de magnetita (Fe_3O_4) moldadas numa forma ornamental de colher. Quando colocadas sobre superfícies planas podiam ser usadas para indicar, ou seja, foram as primeiras bússolas ².

O estudo dos fenômenos magnéticos cria interface com outras áreas do conhecimento, como, por exemplo, a medicina. Medir os campos magnéticos produzidos por organismos vivos pode ser útil no entendimento de sistemas biofísicos, diagnóstico e terapia de humanos. Tais campos têm origem nas correntes que são produzidas pela atividade de despolarização das células (cérebro, coração, nervos), de substâncias paramagnéticas (fígado), ferromagnética (pulmão) e marcadores magnéticos presentes no corpo. Os tecidos biológicos, em sua maioria têm uma susceptibilidade magnética muito próxima à da água, ou seja, são construídos por moléculas diamagnéticas. Só alguns poucos órgãos como o fígado, o baço e o coração apresentam propriedades paramagnéticas por causa da presença de composto de ferritina em seus tecidos [5].

Divide-se as propriedades magnéticas nos sólidos em duas categorias [4]: magnetismo forte ou cooperativo (ferromagnetismo, antiferromagnetismo, ferrimagnetismo, vidro de spin, etc.) e magnetismo fraco (diamagnetismo e paramagnetismo). O magnetismo forte é caracterizado

²Para uma revisão histórica da revolução das idéias do magnetismo, recomendamos ao leitor a introdução do livro: The Theory of Magnetism, vol. I do Prof. Paul Mattis [4].

por apresentar uma dada interação (forte de origem eletrostática (interação de intercâmbio)) entre os íons magnéticos, dando assim uma ordem magnética ao sistema. O magnetismo fraco apresenta uma ausência de interação entre os íons magnéticos. Outra maneira de classificação está relacionada ao valor da susceptibilidade magnética. Para os compostos ferromagnéticos e ferrimagnéticos temos altos valores de $\chi (\gg 1)$, os diamagnéticos $\chi < 0$ e muito pequeno, paramagnético e antiferromagnético $\chi > 0$ e pequeno. O diamagnetismo é o tipo mais fraco de resposta magnética na matéria e apresenta uma susceptibilidade magnética negativa da ordem de grandeza de 10^{-5} . Este fenômeno ocorre em qualquer átomo, e só produz efeitos pronunciados quando no material não há dipolos magnéticos permanentes. A explicação clássica deste fenômeno deve-se a lei de Lenz, na qual uma variação de campo magnético resulta numa corrente elétrica induzida que tende a se opor a esta variação, criando assim um dipolo induzido oposto ao campo aplicado obtendo uma susceptibilidade negativa. Os materiais diamagnéticos são formados por átomos ou íons que têm em sua estrutura interna camadas eletrônicas completas. Este é o caso dos gases nobres (He, Ne, Ar, Kr, Xe) e os sólidos com ligação iônica, cujos átomos trocam elétrons para ficarem com suas últimas camadas completas, por exemplo, NaCl, KBr, LiF e CaF₂. Sendo a susceptibilidade muito pequena para o fenômeno do diamagnetismo, não consideremos aqui por tratarmos do forte magnetismo.

O **paramagnetismo** é o fenômeno que ocorre em materiais que têm momentos magnéticos permanentes não interagentes. Portanto, na ausência de campo externo os paramagnetos têm magnetização nula. Na presença de um campo externo (\vec{H}) uma magnetização induzida é criada na direção \vec{H} . Para pequenos valores de campo aplicado H , a magnetização m de um paramagneto é proporcional ao campo, isto é, $m = \chi_0 H$, onde $\chi_0 > 0$ é a susceptibilidade magnética à campo nulo. As primeiras medidas de χ_0 foram feitas por Pierre Curie [6], em 1895, mostrando o seguinte comportamento com a temperatura (lei de Curie)

$$\chi_0 = \frac{C}{T} \tag{1.5}$$

onde C é uma constante positiva. Exemplos de materiais paramagnéticos temos os sais dos elementos do grupo do ferro e das terras raras [M_nF₃, C_e(NO₃)₃5H₂O, E_uSO₄, Gd₂(SO₄)₃, etc.].

Uma tentativa, mal sucedida, de explicar teoricamente o resultado apresentado pela Eq. (1.5) foi formulada pela estudante de doutoramento de Lorentz, em 1911, a física holandesa Hendrika Johanna van Leeuwen. Usando o Hamiltoniano clássico para um sistema de N elétrons livres dado por

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N \left[\vec{p}_i - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}_i) \right]^2 + e \sum_{i=1}^N \phi_i(\vec{r}_i) \quad (1.6)$$

onde $\vec{A}(\vec{r}_i)$ é o potencial vetor, $\vec{B} = \nabla_{\mathbf{x}} \times \vec{A}$, $\phi(\vec{r}_i)$ é o potencial elétrico, \vec{p}_i é o vetor momento, \vec{r}_i é o vetor posição, c é a velocidade da luz. Desta maneira, van Leeuwen mostrou que a magnetização definida classicamente por $m = \frac{1}{N} \left\langle \sum_i \vec{p}_i \times \vec{r}_i \right\rangle$ é nula, não podendo assim explicar o magnetismo usando simplesmente a física clássica (lei de Curie).

As investigações dos espectros atômicos, desde o final do século XIX, constitui uma das ferramentas experimentais mais precisas para tirarmos informações microscópicas da sua estrutura interna. No ano de 1896 foi observado por Zeeman que, quando um dado átomo é submetido a um campo magnético externo e então excitado, as linhas espectrais emitidas no processo de desexcitação se separam em várias componentes. Para campos menores do que vários décimos de tesla, a separação é proporcional à intensidade do campo.

Apesar de não conhecer a origem dos momentos de dipolos magnéticos nos materiais paramagnéticos, Langevin, em 1905 [7], considerou “*ah doc*” que o Hamiltoniano representativo para este sistema constitui do acoplamento Zeeman entre os momentos de dipolos com o campo externo e é dado por

$$\mathcal{H} = - \sum_{i=1}^N \vec{\mu}_i \cdot \vec{H} = -\mu_o H \sum_i \cos \theta_i \quad (1.7)$$

onde μ_o é o valor do momento de dipolo magnético (desconhecido), H é o campo externo e θ_i é o ângulo entre $\vec{\mu}$ e \vec{H} . Substituindo Eq. (1.7) em Eq. (1.1), obtemos

$$\mathcal{Z}(T, H, N) = \left[\frac{4\pi \sinh(\beta\mu_o H)}{\beta\mu_o H} \right]^N \quad (1.8)$$

e usando a Eq. (1.3) obtemos a magnetização por spin $m = \frac{M}{N} = \langle \mu_o \cos \theta_i \rangle$, dada por

$$m(T, H) = \mu_o L(\beta\mu_o H) \quad (1.9)$$

onde $L(x) = \coth x - \frac{1}{x}$ é a função de Langevin. Derivando a Eq. (1.9) com relação ao campo, encontramos a susceptibilidade a campo nulo χ_0

$$\chi_0 = \frac{\mu_0^2}{3k_B T} = \frac{C}{T}$$

onde a constante de Curie é $C = \frac{\mu_0^2}{3k_B}$. Mesmo não conhecendo o valor de μ_0 , Langevin foi capaz de reproduzir exatamente o comportamento da lei de Curie, Eq. (1.5).

Para descrever integralmente a lei de Curie partindo dos princípios microscópicos, precisamos conhecer a origem do momento de dipolo μ_0 . Da mecânica quântica temos que um átomo com vários elétrons definimos dois momentos angulares: orbital - $\vec{L} = \sum_i \vec{L}_i$ e spin - $\vec{S} = \sum_i \vec{S}_i$. Os módulos $L = |\vec{L}|$ e $S = |\vec{S}|$ (n° quânticos) são determinados usando as regras de Hund [3, 8]. Assim sendo, o dipolo (operador) magnético é expresso em função do momento angular total $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, dado por

$$\vec{\mu} = -g\mu_B \frac{\vec{J}}{\hbar} \quad (1.10)$$

onde $\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$ é o magneton de Bohr (quantum do dipolo magnético) e g é o fator giromagnético dado pela fórmula

$$g = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad (1.11)$$

Aplicando um campo externo $\vec{H} = H\vec{k}$ em cada dipolo magnético, Eq. (1.10), o espectro de energia de um íon isolado é, segundo a mecânica quântica, discretizado e vale $E(m_j) = -g\mu_B H m_j$ ($-J \leq m_j \leq J$). Definindo $x = \beta g\mu_B J H$, a função de partição de uma partícula vale

$$\mathcal{Z}_1(T, H) = \sum_{m_j=-J}^J e^{m_j \frac{x}{J}}$$

calculando a série geométrica acima encontramos

$$\mathcal{Z}_1(T, H) = \frac{\sinh \left\{ \left(1 + \frac{1}{2J}\right) x \right\}}{\sinh \left\{ \frac{x}{2J} \right\}} \quad (1.12)$$

sendo $\mathcal{Z}(T, H) = [\mathcal{Z}_1(T, H)]^N$. Da Eq. (1.12) encontramos a magnetização média por spin

$$m(T, H) = \mu_0 B_J(x) \quad (1.13)$$

onde $\mu_0 = g\mu_B J$ e $B_J(x)$ é a função de Brillouin definida por

$$B_J(x) = \left(1 + \frac{1}{2J}\right) \coth \left\{ \left(1 + \frac{1}{2J}\right) x \right\} - \frac{1}{2J} \coth \left(\frac{x}{2J}\right) \quad (1.14)$$

Derivando a Eq. (1.13) com relação ao campo, reproduzimos a lei de Curie, Eq. (1.5), com as constantes $C = \frac{(p\mu_B)^2}{3k_B}$, e $p = g\sqrt{J(J+1)}$, relacionados com entidades microscópicas conhecidas. No limite $J \rightarrow \infty$ (clássico), a Eq. (1.13) reduz-se a Eq. (1.9).

O **ferromagnetismo** deve-se à existência de regiões em que os momentos magnéticos de spins estão alinhados (paralelos) entre si. O ferromagnetismo é uma propriedade que depende fortemente da temperatura. Para cada substância ferromagnética existe uma temperatura, designada temperatura de Curie, acima da qual a substância se torna paramagnética (o ordenamento de longo alcance dos spins desaparecem). Esta transição de fase ocorre quando a energia térmica é suficientemente elevada para contrabalançar as forças de alinhamento devido à interação spin-spin.

As substâncias que apresentam magnetização espontânea abaixo de certa temperatura são denominadas ferromagnéticas e, como exemplo, temos o Ferro (número atômico 26), Cobalto (27), Níquel (28), Gadolínio (64), Térbio (65), Dysprósio (66), Hólmio (67), Érbio (68), Túlio (69). A magnetização espontânea sugere que os spins dos átomos (ou moléculas) que constituem o material tenham uma forte tendência a se alinhar uns aos outros, dando origem aos momentos magnéticos espontâneos orientados ao longo da direção do eixo da magnetização. Esta orientação espontânea tende a desaparecer gradualmente a medida que o sistema é aquecido. Neste caso, os spins tendem a um estado de desordem. A temperatura crítica T_c para o qual a magnetização espontânea desaparece, isto é, ocorre a transição entre “ordem” e “desordem”, é chamada temperatura de Curie.

A curva da magnetização não depende somente do material, mas do tratamento (térmico, magnético) a que este foi submetido, ou seja, de sua história anterior. Por isso, costumam-se dizer que os materiais ferromagnéticos possuem memória ou uma função memória $M(H)$.

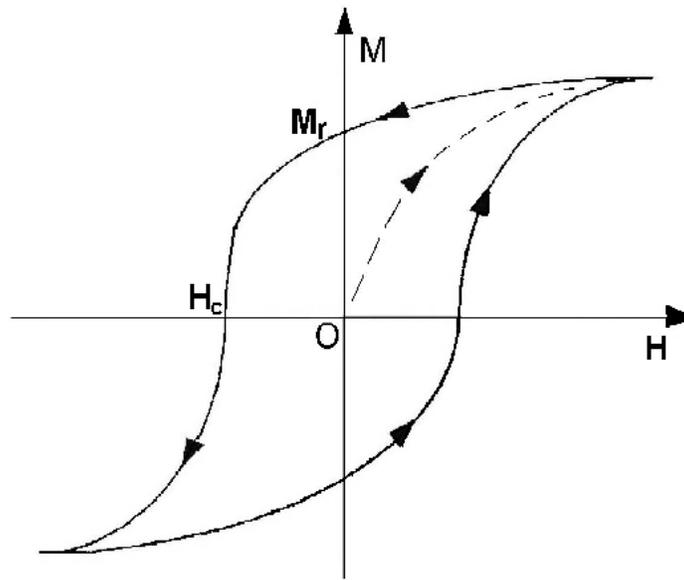


Figura 1.1: Comportamento típico da magnetização M em função do campo magnético H .

O comportamento da magnetização M em função do campo magnético H é mostrado na Figura 1.1, e é característico de um material magneticamente duro como o aço temperado (preparado por aquecimento seguindo de resfriamento brusco). Aplicando-se um campo magnético no material, inicialmente desmagnetizado, este seguirá a curva pontilhada até atingir um patamar constante chamado de magnetização de saturação (M_s). Diminuindo o campo a partir deste valor, M decresce mais lentamente seguindo o sentido dado pela seta até um valor residual da magnetização para um campo nulo chamado de magnetização remanente (M_r), onde o material permanece magnetizado sem aplicação de campo. Invertendo o sentido do campo, segue no mesmo sentido da curva para valores de M menores que M_r até que a magnetização se anule para um determinado valor de campo chamado de campo coercivo (H_C). E se continuarmos a variar o módulo do campo, chegaremos novamente a uma região de saturação, e repetindo o ciclo no sentido inverso obtemos uma curva fechada que é o chamado ciclo de histerese. Para um material como o ferro doce, em geral preparado por aquecimento até uma temperatura elevada, seguida de resfriamento lento (processo de recozimento) também possui um ciclo de histerese, mas a sua largura é muito pequena em relação a do ferro temperado aparentando ser uma curva unívoca.

Uma aplicação da memória característica destes materiais é a gravação de mídia magnética, memórias permanentes, dispositivos eletrônicos e outras. Os materiais ferromagnéticos são os materiais mais utilizados na indústria eletrônica, juntamente com os semicondutores.

Teoricamente, a primeira explicação do ferromagnetismo foi dada em 1907 por Pierre Weiss [9]. Weiss propôs que o campo efetivo (H_{ef}), também chamado de campo interno, ou campo molecular, que atua sobre cada átomo deveria considerar a interação entre os momentos de dipolo magnético dos outros átomos, sendo assim proporcional á densidade de magnetização (m), ou seja,

$$H_{ef} = H + \lambda m$$

onde λ é uma constante positiva.

Substituindo H_{ef} na Eq. (1.13), encontramos uma equação auto-consistente para a magnetização dada por

$$m = \mu_o B_J(x_{ef})$$

sendo $x_{ef} = \beta g \mu_\beta J(H + \lambda m)$. Diferenciando esta expressão para $m(T, H)$ com relação ao campo, encontramos a susceptibilidade para $T \geq T_c$ dada por

$$\chi_0 = \frac{C}{T - T_c}$$

Esta relação permite obter o valor de λ , pois $T_c = \lambda C$ pode ser obtido experimentalmente e C é uma constante fundamental conhecida. A divergência da susceptibilidade numa temperatura característica (T_c) para os ferromagnetos, indica que o sistema sofreu uma transição de fase, contínua (ou segunda ordem) ou descontínua (primeira ordem) dependendo do comportamento da magnetização quando esta atinge T_c , que pode ser contínua ou descontínua, respectivamente.

A partir da expressão de $m(T, H)$, fazendo $H = 0$, temos a presença de uma magnetização espontânea para $T < T_c = \lambda C$. Inicialmente, pensava-se que a origem microscópica atribuída ao parâmetro λ era do tipo energia dipolar (isto é, $\lambda \cong \mu_B^2/a^3$, onde a é o parâmetro de rede $\cong 1\text{Å}$) e com isto o valor obtido para $T_c \cong 10^{-1}K$ é muito menor do que o observado experimentalmente

$T_c \cong 10^3 K$ para os materiais ferromagnéticos. Portanto, apesar da teoria de Curie-Weiss ser capaz de explicar qualitativamente o ferromagnetismo, esta não descreve microscopicamente correto o magnetismo na matéria. Vimos que isto só foi resolvido com o advento da mecânica quântica, que junto com o princípio de exclusão de Pauli explicou satisfatoriamente a origem de λ como sendo eletrostática, assim os altos valores para T_c são previstos.

A natureza do campo interno só foi entendida com o advento da mecânica quântica, quando uma proposta proposta satisfatória foi apresentada por Heisenberg em 1928. Nos compostos ferromagnéticos, na ausência de campo externo, o ordenamento dos momentos magnéticos ocorre porque a energia de interação, aqui representado por ΔE , é suficiente maior do que a energia térmica $k_B T$, isto é, $\Delta E \gg k_B T$. À medida que a temperatura aumenta, a magnetização decresce conforme mostra a Figura 1.2, e quando atingimos T_c a ordem é destruída por causa fundamentalmente da energia térmica ser da mesma magnitude de ΔE , isto é, $\Delta E \simeq k_B T$. Na sua teoria fenomenológica de campo molecular, Weiss supunha que ΔE era de origem dipolar, assim sendo usando $\mu \simeq \mu_B$ (magneton de Bohr), $a \simeq 1 \text{ \AA}$ e o valor da constante k_B , $\Delta E \simeq \frac{\mu_B^2}{a^3}$ estimamos $T_c \simeq 10^{-1} K$ muito inferior aos resultados experimentais $T_c \simeq 10^3 K$. Assumindo (Heisenberg) que ΔE seja de origem elétrica ($\Delta E \simeq \frac{e^2}{a}$) conseguimos obter os altos valores de T_c , podem, assim, explicar a origem do forte magnetismo. Mais adiante a explicação mais rigorosa será exposta com a formulação da interação de troca (*exchange*). Se olharmos microscopicamente o ferromagnetismo, que em grande parte é devido ao spin dos elétrons, ou melhor, da interação de troca, para $T > T_c$, embora exista interação entre os spins, esta interação é suprimida pela agitação térmica e assim não comportam-se cooperativamente, aparentando que não existe interação entre os spins, dando origem ao paramagnetismo de Curie-Weiss. Se abaixarmos a temperatura, a interação entre os spins passa a ser cada vez mais relevante, e para $T < T_c$ os efeitos da agitação térmica são pequenos em relação as forças de interação entre os momentos magnéticos e os spins devem se alinhar (aumentando as forças de interação e assim o campo interno). Este alinhamento faz com que exista um campo interno sem a presença de um campo externo, que é proporcional a magnetização espontânea.

Na tentativa de reproduzir os resultados experimentais do comportamento da magnetização em função da temperatura, Lenz, em 1925, propôs para o seu aluno de doutoramento Ernest Ising um modelo microscópico simplificado de momentos magnéticos interagentes. Considerou

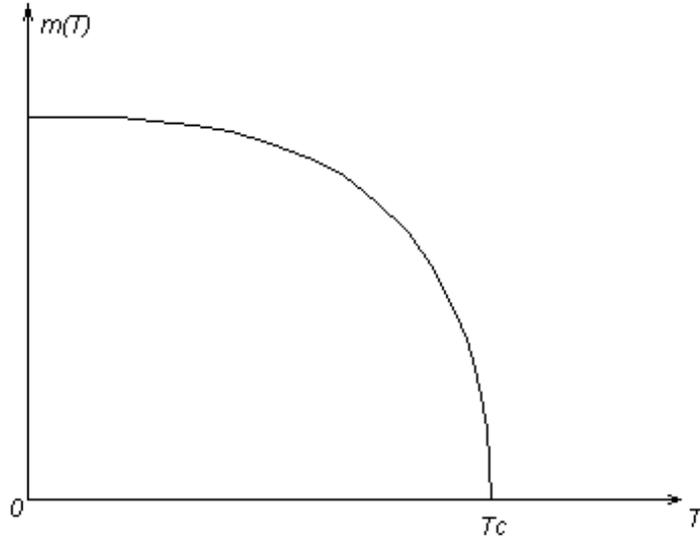


Figura 1.2: Comportamento da magnetização em função da temperatura à campo nulo.

uma rede com N ($N \rightarrow \infty$) momentos arranjados ao longo de uma cadeia (rede unidimensional), no qual interagem entre vizinhos mais próximos. Quando os momentos estão orientados na mesma direção ($\uparrow\uparrow$ ou $\downarrow\downarrow$) temos uma energia $-J$ e direções opostas ($\uparrow\downarrow$) energia J . Desta maneira, cada sítio da rede pode assumir dois estados $\sigma_i = \pm 1$ (onde σ_i é a variável que representa os momentos para cima $\sigma_i = 1$ ou para baixo $\sigma_i = -1$) e podemos escrever um Hamiltoniano efetivo na forma

$$\mathcal{H} = -J \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} - \mu_B H \sum_i \sigma_i, \quad (1.15)$$

onde o último termo da Eq. (1.15) representa o acoplamento do momento magnético com o campo externo (termo Zeeman). O modelo de Ising em uma dimensão, Eq. (1.15), foi resolvido exatamente e o fato mais surpreendente é que a solução mostrou que na ausência de campo ($H = 0$) a magnetização espontânea é nula para $T > 0$, alinhando os momentos magnéticos apenas em $T = 0$ (dizemos que $T_c = 0$). A falha da tentativa de explicar o magnetismo através do Hamiltoniano (1.15) levou o modelo de Ising a ficar desacreditado e a primeira citação posterior só apareceu no trabalho em que Heisenberg apresenta sua própria teoria do

magnetismo em 1928, a qual já leva em conta aspectos quânticos mais elaborados.

Peierls [10], em 1936, foi o primeiro a demonstrar que para temperatura suficientemente baixa ($T \neq 0$), o modelo de Ising em duas e três dimensões exibe uma magnetização espontânea, e que deve existir um valor finito $T_c > 0$ onde devemos observar uma transição de fase contínua³. Assim, o modelo de Ising ressuscitou. Em 1941, Kramers e Wannier [11] conseguiram determinar exatamente a temperatura crítica T_c do modelo de Ising numa rede quadrada, usando propriedades de simetria que permitiam relacionar a função de partição em baixas temperaturas com a função de partição em altas temperaturas, o que posteriormente ficou conhecido como relações de dualidade.

A solução exata do modelo de Ising 2d permanecia um desafio para os físicos da época. Algumas tentativas, hoje conhecidas como soluções aproximadas, foram obtidas por diversos autores Bragg e Williams [12], Bethe [13], Peierls [10], Rushbrooke [14], Guggenheim [15], Fowler e Guggenheim [16], Chang [17], e vários outros. Mas, somente em 1944, Lars Onsager [18], anunciava ter conseguido resolver exatamente o modelo de Ising numa rede quadrada na ausência de campo externo, obtendo uma expressão explícita para energia livre e, portanto, estabelecendo a singularidade logarítmica do calor específico próximo da temperatura crítica $\frac{k_B T_c}{J} = \frac{2}{\ln(1+\sqrt{2})} \simeq 2,269$. Usando a transformação triângulo-estrela, que foi primeiro enunciada no trabalho original de Onsager [18], Wannier [19] obteve de forma exata a temperatura crítica da rede triangular $\frac{k_B T_c}{J} = \frac{2}{\sinh^{-1}(1/\sqrt{3})} \simeq 4,049$ e *honeycomb* $\frac{k_B T_c}{J} = \frac{2}{\sinh^{-1}(\sqrt{3})} \simeq 1,519$. Observe que à medida que o número de primeiros vizinhos- z (ou coordenação) aumenta a temperatura crítica cresce, no limite $z \rightarrow \infty$ temos a solução de campo médio $\frac{k_B T_c}{zJ} = 1$.

Em 1949, Onsager [20] apresentou, sem detalhes de sua derivação, uma expressão exata para a magnetização espontânea: $m(T, 0) = \left[1 - \left(\sinh \frac{2J}{k_B T} \right)^{-4} \right]^{1/8}$, e que só foi derivada muito tempo após por Yang [21], em 1952. Posteriormente à solução exata apresentada por Onsager [20], vários outros autores encontraram soluções exatas mais simples, como, por exemplo, Kaufman (1949) [22], Vdovichenko (1965) [23], Glasser (1970) [24]. Para um estudo exaustivo do modelo de Ising 2d está discutido na Ref. [25].

³Ver Griffiths, em *Phase Transitions and Critical Phenomena*, C. Domb e M. S. Green (Academic Press, London), vol. 1, pag. 59-66 para detalhes deste argumento de Peierls para existência de ordem magnética em $T > 0$ para o modelo de Ising 2d e 3d.

1.1.2 Modelo de Heisenberg

O modelo de Heisenberg surgiu em 1928, com a necessidade de compreender e descrever uma substância ferromagnética, cujo modelo pode ser considerado como um sistema de spins localizados nos sítios de uma rede cristalina e acoplados por uma interação de intercâmbio entre os spins.

A energia de interação de intercâmbio entre spins foi proposta independentemente por Heisenberg [26], Frenkel [27] e Dorfman [28] e esta corresponde fisicamente à diferença de energia compreendida entre as configurações de spins com ordenamento paralelos e antiparalelos, ou seja, $J = E(\uparrow\uparrow) - E(\uparrow\downarrow)$. Para explicar a natureza da interação de intercâmbio entre spins, consideremos o exemplo simples de dois elétrons cujo Hamiltoniano independente do spin é dado por

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} (\mathbf{p}_1^2 + \mathbf{p}_2^2) + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (1.16)$$

onde \mathbf{p}_i ($i = 1, 2$) é o vetor momento linear do elétron i , m sua massa, $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V_L(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + V_{12}(r)$, sendo $V_L(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ o potencial de ligação do elétron $i = 1, 2$ ao núcleo e $V_{12}(r)$ o potencial de interação ($r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$) entre eles. O Hamiltoniano (1.16) não contém termos que envolvem explicitamente o operador de spin, então a função de onda espacial é obtida da equação de Schrödinger estacionária, ou seja,

$$\mathcal{H}\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E(1, 2)\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (1.17)$$

onde $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ é a auto-função de onda e $E(1, 2)$ a auto-energia dos elétrons (*férmions idênticos*). Pelo princípio de exclusão de Pauli (“dois elétrons não podem ocupar o mesmo estado quântico simultaneamente”), a função de onda total (Ψ_T) tem que ser anti-simétrica com respeito à troca de coordenadas espaciais e espinoriais dos elétrons. Portanto, escrevemos Ψ_T através do produto da parte espacial, $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, com a parte espinorial (spin), $\chi(1, 2)$, a saber $\Psi_T(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi(1, 2)$.

Para o termo de spin, que não está presente no Hamiltoniano (1.16), podemos ter duas

configurações de espinores representadas por

$$\chi_s(S=0, M=0) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\chi(\uparrow\downarrow) - \chi(\downarrow\uparrow)] \text{ estado singlete} \quad (1.18)$$

e

$$\chi_t(S=1, M) = \left\{ \begin{array}{l} \chi(\uparrow\uparrow), M=1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}[\chi(\uparrow\downarrow) + \chi(\downarrow\uparrow)], M=0 \\ \chi(\downarrow\downarrow), M=-1 \end{array} \right\} \text{ estados tripleto,} \quad (1.19)$$

onde $\chi(m_1, m_2)$ é o espinor dos dois elétrons (cada um de spin $\frac{1}{2}$) com componente z do spin representada por m_1 e m_2 [$m_i = +1, -1$ que se traduz em símbolos respectivamente, por \uparrow (*up*) e \downarrow (*down*)] e $\chi(S, M)$ o espinor soma, que pode representar o estado singlete - antisimétrico (Eq. 1.18) ou tripleto-simétrico (Eq. 1.19).

A parte da função de onda espacial é obtida através da solução da equação de Schrödinger (Eq. 1.17), mas por causa do termo do potencial de interação entre os elétrons, $V_{12}(r)$, não é possível obter a solução exata analiticamente. Para resolvermos o problema, trataremos de forma aproximada, através do auxílio da teoria de perturbação estacionária, utilizada em mecânica quântica para tratar potenciais não solúveis. No nosso caso, definimos a perturbação como o potencial $V_{12}(r)$, e o Hamiltoniano será escrito por

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V_{12}(r), \quad (1.20)$$

onde $\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2$, $\mathcal{H}_1 = \frac{1}{2m}\mathbf{p}_1^2 + V_1(\mathbf{r}_1)$ e $\mathcal{H}_2 = \frac{1}{2m}\mathbf{p}_2^2 + V_2(\mathbf{r}_2)$.

Resolvendo a primeira parte do problema relativo ao sistema não perturbado, temos

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0\Psi^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \mathcal{H}_1\Psi^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \mathcal{H}_2\Psi^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \\ &= E_{n_1}^0\Psi^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + E_{l_2}^0\Psi^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \end{aligned} \quad (1.21)$$

ou pela troca de partículas

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0\Psi^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \mathcal{H}_1\Psi^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \mathcal{H}_2\Psi^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \\ &= E_{n_2}^0\Psi^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + E_{l_1}^0\Psi^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \end{aligned} \quad (1.22)$$

onde $E_{nl}^0 = E_{n1}^0 + E_{l2}^0 = E_{n2}^0 + E_{l1}^0$ significa a mesma energia (auto-energia, E_{nl}^0) para os estados quânticos (auto-função de onda espacial), identificados pelo conjunto de números quânticos $\{n, l\}$. Então a auto-energia total será degenerada, porque as auto-funções $\Psi_1^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Phi_n(\mathbf{r}_1)\Phi_l(\mathbf{r}_2)$ e $\Psi_2^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Phi_n(\mathbf{r}_2)\Phi_l(\mathbf{r}_1)$ terão mesmos auto-valores $E_{nl}^0(1, 2) = E_n^0(1) + E_l^0(2) = E_n^0(2) + E_l^0(1)$. Vemos, portanto, que a permuta entre as partículas não modifica o espectro do sistema.

Para tentar resolver o problema da degenerescência, vamos considerar a presença do potencial $V_{12}(r)$ utilizando o tratamento da teoria de perturbação degenerada com a aproximação de primeira ordem, que tem como base determinar as auto-energias através da resolução do determinante secular

$$\begin{vmatrix} \langle \mathcal{H} \rangle_{11} - E(1, 2) & \langle \mathcal{H} \rangle_{12} \\ \langle \mathcal{H} \rangle_{21} & \langle \mathcal{H} \rangle_{22} - E(1, 2) \end{vmatrix} = 0, \quad (1.23)$$

cujo elemento de matriz $\langle \mathcal{H} \rangle_{ij}$ é definido por

$$\langle \mathcal{H} \rangle_{ij} = \int \Psi_i^{0*}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) V_{12}(r) \Psi_j^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \quad (1.24)$$

Utilizando as definições (1.21), (1.22) e (1.24), obtemos

$$\langle \mathcal{H} \rangle_{11} = \langle \mathcal{H} \rangle_{22} = E_{nl}^0(1, 2) + K$$

e

$$\langle \mathcal{H} \rangle_{12} = \langle \mathcal{H} \rangle_{21} = J,$$

com K e J são definidas por

$$K = \int \Phi_n^*(\mathbf{r}_1)\Phi_l^*(\mathbf{r}_2)V_{12}(r)\Phi_n(\mathbf{r}_1)\Phi_l(\mathbf{r}_2)d^3r_1d^3r_2$$

e

$$J = \int \Phi_n^*(\mathbf{r}_2)\Phi_l^*(\mathbf{r}_1)V_{12}(r)\Phi_n(\mathbf{r}_2)\Phi_l(\mathbf{r}_1)d^3r_1d^3r_2$$

A perturbação da energia consiste então de dois termos K e J , sendo que o termo K surge do princípio de exclusão de Pauli e cujo sinal depende do estado de spin associado 0 e 1, e

o outro J é responsável pelo sobreposição entre as funções de onda dos dois elétrons, este é chamado de integral de intercâmbio ou de troca. Fisicamente, ela mede a energia necessária para permutar a orientação dos elétrons. Resolvendo o determinante (1.23), obtemos

$$E_1(1, 2) = E_n^0(1) + E_l^0(2) + K + J$$

correspondente a auto-função

$$\Psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Phi_n(\mathbf{r}_1)\Phi_l(\mathbf{r}_2) + \Phi_n(\mathbf{r}_2)\Phi_l(\mathbf{r}_1)], \text{ função de onda simétrica}$$

e

$$E_2(1, 2) = E_n^0(1) + E_l^0(2) + K - J$$

com a auto-função associada

$$\Psi_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Phi_n(\mathbf{r}_1)\Phi_l(\mathbf{r}_2) - \Phi_n(\mathbf{r}_2)\Phi_l(\mathbf{r}_1)], \text{ função de onda anti-simétrica.}$$

Pelo princípio de exclusão de Pauli, as auto-funções de onda total dos férmions têm que ser anti-simétricas, ou seja,

$$\Psi_T(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \begin{cases} \Psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \cdot \chi_s(S = 0, M = 0), & \text{estado singleto} \\ \Psi_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \cdot \chi_t(S = 1, M), & \text{estado tripleto} \end{cases}$$

Decorre disso, que apesar do potencial $V_{12}(r)$ não depender do spin explicitamente, a simetrização das funções de onda conduz $V_{12}(r)$ a dependência implícita, isto é, o estado de spin singleto ($S = 0$) tem energia $E_1^S(1, 2) = E_n^0(1) + E_l^0(2) + K + J$, e o estado tripleto tem energia $E_2^T(1, 2) = E_n^0(1) + E_l^0(2) + K - J$. A energia de intercâmbio pode ser obtida através da diferença de energia desses dois estados, ou seja,

$$E(S) = \begin{cases} E_1(1, 2), & S = 0; \\ E_2(1, 2), & S = 1; \end{cases}$$

e

$$J = \frac{1}{2} [E(S = 0) - E(S = 1)].$$

O significado físico desses dois estados é dado observando $E(S = 0)$ que corresponde à energia do estado singleto, estado dos spins antiparalelos ($\uparrow\downarrow$), e $E(S = 1)$ ao estado tripleto, estado dos spins paralelos ($\uparrow\uparrow$). Para J positivo, o estado de menor energia é o tripleto, chamado de estado ferromagnético (spin paralelos), e no caso de J negativo os spins ficarão antiparalelos definindo o estado antiferromagnético. A energia de intercâmbio tem a propriedade de decrescer exponencialmente com a distância entre os íons, em contraste com a interação coulombiana que decresce mais lentamente ($\simeq 1/r$). A razão é que J contém o produto de funções de onda de elétrons ligados em diferentes núcleos, isso provoca uma sobreposição nas funções que tem por característica um rápido decrescimento. Portanto, J dependerá da sobreposição das funções de onda $\Phi_n(\mathbf{r}_i)$ e $\Phi_l(\mathbf{r}_j)$, e esta sobreposição decresce exponencialmente com a distância (r). Desta maneira, a interação de intercâmbio corresponde a uma interação de curto-alcance.

Considerando então um sistema formado por dois elétrons com auto-função dada por $\Psi_{S=0,1}(r_1, r_2)$, temos o spin total dado por $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$, o operador \mathbf{S}^2 satisfaz a seguinte relação:

$$\begin{cases} \mathbf{S}^2 \Psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = S(S+1) \Psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \\ \mathbf{S}_i^2 \Psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{3}{4} \Psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \end{cases}, \quad (1.25)$$

onde usamos $\hbar \equiv 1$.

Utilizando a relação (1.25) temos

$$\frac{1}{2}(1 + \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2) \Psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = [S(S+1) - 1] \Psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (1.26)$$

Definimos um operador que possui autovalor $E(S = 0)$ no estado singleto e $E(S = 1)$ no estado tripleto, teremos

$$\mathcal{H} \Psi_{S=0}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E(S = 0) \Psi_{S=0}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = (E + K + J) \Psi_{S=0}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (1.27)$$

e

$$\mathcal{H}\Psi_{S=1}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E(S=1)\Psi_{S=1}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = (E + K - J)\Psi_{S=1}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (1.28)$$

Podemos reescrever o Hamiltoniano (1.20) da seguinte maneira

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^0 + \left(K - \frac{J}{2}\right) - J\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2, \quad (1.29)$$

tomando como constante os dois primeiros termos da Eq. (1.29), ficaremos

$$\mathcal{H} = cte - J\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$$

e redefinindo a constante para o ponto zero das energias, ficamos para o par dos dois elétrons interagentes o seguinte Hamiltoniano efetivo.

$$\mathcal{H} = -J\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \quad (1.30)$$

O Hamiltoniano dado pela Eq. (1.30) foi obtido de forma simples para o caso de uma molécula diatômica. Para o caso de um sistema com N partículas interagentes, consideramos apenas interações coulombianas. As funções de onda do sistema apresentam propriedades de simetria bem definidas e realizando uma combinação de pares de ligações distintas na rede podemos generalizar o Hamiltoniano na forma

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (1.31)$$

onde o somatório é feito sobre todos os pares $\langle ij \rangle$ da rede cristalina e $\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ é o operador de spin no sítio i . A Eq. (1.31) é conhecida como modelo de Heisenberg isotrópico, pois as três direções no espaço apresentam a mesma probabilidade de orientação. O Hamiltoniano acima, Eq. (1.31), foi derivado por meio da aproximação de Heitler-London, que é usada na teoria das moléculas com ligações covalentes.

Os materiais magnéticos encontrados na natureza são, com raras exceções, antiferromagnéticos. O estado fundamental ($T = 0$) do Hamiltoniano de Heisenberg ferromagnético ($J > 0$) corresponde a todos os spins alinhados paralelamente. Por outro lado, o estado fundamental deste

Hamiltoniano quântico antiferromagnético não corresponde aos spins orientados antiparalelamente (estado de Néel), pois este não é auto-estado do Hamiltoniano. Existem uma infinidade de estados de spins orientados de tal forma que $S^z = \sum_{i=1}^N S_i^z = 0$, que devem combinados para formar o estado fundamental do sistema. A dificuldade em estabelecer um estado fundamental é o maior problema teórico que surge no estudo do antiferromagneto Heisenberg.

A interação de troca (*exchange*) se caracteriza pelo fato de ser independente da orientação dos spins, ou seja, o Hamiltoniano de Heisenberg apresenta simetria de rotação dos spins. Os tipos de estrutura cristalmagnética são determinadas pela natureza e magnitude das interações entre os momentos magnéticos dos íons que formam o cristal. A interação de troca, de origem eletrostática responsável pelo ordenamento na matéria, é de natureza isotrópica, não sendo capaz de definir alguma orientação dos momentos magnéticos com respeito aos eixos cristalográficos mas ela produz um ordenamento mútuo dos spins em vários sítios da rede. O fato de que a distribuição de spins ordenados é sempre orientada numa dada direção (eixo de fácil magnetização), definida com respeito ao eixo cristalino, devemos assim ter algum tipo de interação que torne o Hamiltoniano de Heisenberg anisotrópico. Fisicamente, as interações magnéticas (dipolar, quadrupolar, etc) são responsáveis pela existência da anisotropia magnetocristalina, que se manifesta com a dependência da energia do cristal nas orientações dos momentos magnéticos dos íons com relação ao eixo cristalino. podemos dizer que num cristal existem campos magnéticos efetivos internos que tendem a orientar os momentos magnéticos numa dada direção privilegiada. Este campo pode alterar alguma vezes as orientações mútuas dos momentos magnéticos dos átomos, desta forma distorcendo a estrutura magnetocristalina.

O magnetismo dos elementos de transição do grupo ferro é sempre associado ao momento magnético dos spins. Isto ocorre porque nos cristais, formados por estes elementos, o campo cristalino geralmente remove a degenerescência orbital do estado eletrônico responsável pelo magnetismo. Como o valor esperado momento orbital de um estado não degenerado é zero, verifica-se o que convencionou chamar *quenching* do momento orbital, isto é, numa primeira aproximação a susceptibilidade estática não recebe contribuição do momento orbital. Esta contribuição apenas aparece se levarmos em consideração a interação spin-órbita, que é descrita pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_{SL} = \sum_i \xi(r_i) \vec{L}_i \vec{S}_i, \quad (1.32)$$

onde $\xi(r_i) = \frac{1}{2m^2 r_i} \frac{dV}{dr_i}$, $V(r_i)$ é a energia potencial elétrica (núcleo-elétron), \vec{L}_i e \vec{S}_i são os operadores momento angular orbital e spin, respectivamente.

Usando teoria de perturbação de 2ª ordem para o termo dado pela Eq. (1.31), podemos reescrever o Hamiltoniano efetivo devido a interação spin-órbita por

$$\mathcal{H}_{SL} = \sum_i \sum_{\alpha, \beta} \Lambda_i^{\alpha\beta} S_i^\alpha S_i^\beta, \quad (1.33)$$

sendo

$$\Lambda_i^{\alpha\beta} = 2\xi^2 \sum_{l \neq 0} \frac{\langle 0 | L_i^\alpha | l \rangle \langle l | L_i^\beta | 0 \rangle}{E_0^0 - E_l^0}, \quad (1.34)$$

o tensor de anisotropia, E_l^0 é a auto-energia do Hamiltoniano não perturbado.

Devido a interação spin-órbita ficamos com o seguinte Hamiltoniano anisotrópico

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i, j \rangle} \sum_{\alpha} J_{ij} S_i^\alpha S_j^\alpha + \sum_i \sum_{\alpha, \beta} \Lambda_i^{\alpha\beta} S_i^\alpha S_i^\beta,$$

onde o segundo termo contém a anisotropia de íon único, que é o campo cristalino gerado sobre o sítio i . Por exemplo, a anisotropia ortorrômbica considera apenas os termos diagonais de $\Lambda_i^{\alpha\beta}$, ou seja, $\Lambda_i^{\alpha\beta} = D\delta_{zz} - E(\delta_{xx} - \delta_{yy})$, e o Hamiltoniano ficará

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i, j \rangle} \sum_{\alpha} J_{ij} S_i^\alpha S_j^\alpha + D \sum_i (S_i^z)^2 + E \sum_i \left[(S_i^x)^2 - (S_i^y)^2 \right].$$

Em particular, considerando $E = 0$ (anisotropias uniaxiais), obtermos dois casos: para $D > 0$ os spins preferem, o mínimo de energia, o plano xy ; e no caso $D < 0$ a preferência dos spins é a direção z (axial).

A interação spin-órbita, também, pode induzir anisotropia na interação de troca, Eq. (1.31). Segundo van Vleck [47], anisotropia uniaxial deste tipo tem origem no acoplamento dos momentos orbitais dos átomos adjacentes, que não só dá orientação relativa dos dois momentos, como também dá orientação destes com relação ao eixo que une os dois átomos. Em termos de spins, esse acoplamento pode ser simulado por uma interação dipolar. Neste caso, a perturbação é

dada por $W_{ij} = \xi(r_i) \vec{L}_i \cdot \vec{S}_j + \lambda \vec{L}_i \cdot \vec{S}_i$, portanto, o Hamiltoniano efetivo ficará

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\alpha,\beta} J_{ij}^{\alpha\beta} S_i^\alpha S_j^\beta, \quad (1.35)$$

onde $J_{ij}^{\alpha\beta}$ é a interação entre os sítios i e j associados as direções α e β dos spins. O Hamiltoniano (1.35) generalizado contém alguns limites particulares dependendo das intensidades de $J_{ij}^{\alpha\alpha}$ (vamos considerar apenas o termo simétricos, vejamos: i) modelo Heisenberg isotrópico ($J^\mu = J_{ij}$, $\alpha = x, j, z$), ii) modelo xy ou planar ($J_{ij}^{xx} = J_{ij}^{yy} \gg J_{ij}^{zz}$) e iii) modelo de Ising ($J_{ij}^{zz} \gg J_{ij}^{xx}, J_{ij}^{yy}$).

1.2 Motivação do Trabalho

1.2.1 Supercondutividade

Em meados de 1908, Heinke Karmeling Onnes, observou que diminuindo a temperatura o mercúrio passa de um estado resistivo normal a um novo estado denominado de estado supercondutor, no qual a resistividade é nula abaixo de uma dada temperatura crítica de $T_c = 4,2K$. A supercondutividade é um dos descobrimentos mais fascinantes da ciência nas últimas décadas. Pertence a família dos descobrimentos da física capazes de modificar o modo de viver do ser humano, assim como foi o magnetismo no século 600 a. C.

No ano seguinte à descoberta da supercondutividade no mercúrio, Onnes e seus colaboradores verificaram que o estanho e o chumbo também apresentam esta propriedade, com temperatura crítica de 3,7 K e 7,2 K, respectivamente. Estes resultados demonstraram que a supercondutividade não era uma propriedade exclusiva do mercúrio. Até os meados do ano 1980, o valor máximo da temperatura crítica foi sendo lentamente elevado até atingir cerca de 23 K para a liga de nióbio Nb_3Ge . Desde então, o número de sistemas supercondutores, com as mais variadas características foram sintetizados. Por esta descoberta da supercondutividade, Onnes, em 1913, recebeu o Prêmio Nobel de Física. Em 1933, Meissner e Oschenfeld verificaram experimentalmente que um supercondutor se comporta de maneira que não permite que exista um campo de indução magnética em seu interior (efeito Meissner-Oschenfeld). Como consequência deste último efeito, um material supercondutor colocado sobre uma plataforma de um campo

magnético não muito intenso (ímã) tem a propriedade interessante de levitar. Dizemos numa linguagem técnica do magnetismo, que um supercondutor é um diamagneto perfeito ($\chi_o = -1$). Uma outra observação experimental feita também por Onnes, está relacionada a destruição das propriedades supercondutoras quando submetido a intensos campos magnéticos.

Até a década de cinquenta, diversas propriedades fascinantes foram descobertas experimentalmente nos materiais supercondutores, onde apenas teorias fenomenológicas eram propostas. Somente em 1957, que uma teoria microscópica foi formulada por Bardeen, Cooper e Schrieffer (conhecida hoje em dia como teoria BCS), e, portanto, explicou satisfatoriamente todas as propriedades dos supercondutores descobertos até então. Simplificadamente, a teoria BCS consiste qualitativamente na formação de pares de elétrons (pares de Cooper) correlacionados e movendo-se sobre o material sem dissipação de energia. A atração entre os elétrons dos pares de Cooper é devido sobretudo a distorção dos íons positivos da rede (vibração de rede-fônon), o que em baixas temperaturas ($T < T_c$) induz uma atração efetiva entre os elétrons. Teoricamente falando, podemos estimar a temperatura crítica T_c igualando a energia térmica $k_B T_c$ com a energia de rede (fônon) $\hbar\omega$, o que obtem com esta teoria um limite máximo para $T_c \simeq 25K$. Durante quase trinta anos nenhuma contribuição (teórica e/ou experimental) foi acrescida na área de estudo dos compostos supercondutores. Muitos laboratórios foram desativados, físicos migraram para estudar outros temas, e até previsões pessimistas do final feliz deste capítulo belíssimo no campo da supercondutividade foram dadas. Produzir as propriedades supercondutoras nos materiais tradicionais, que são explicados microscopicamente através da teoria BCS, tem um elevado custo financeiro para baixar temperatura da ordem de alguns Kelvin, o que torna impraticável o uso comercial em grande escala destes materiais. Pela formulação da teoria BCS, os físicos Bardeen, Cooper e Schrieffer receberam o prêmio Nobel de Física em 1972.

Em abril de 1986 foi anunciado o descobrimento de novos materiais supercondutores cerâmicos que possuíam temperaturas superiores a $T_c = 25K$, o que certamente a teoria BCS não seria capaz de descrever satisfatoriamente todas as suas propriedades. O descobrimento destes novos tipos de materiais supercondutores (conhecidos atualmente como supercondutores em altas temperaturas) foi realizado pelos físicos Bednorz e Müller no laboratório da companhia IBM em Zurique, na Suíça. A composição do material cerâmico estudado foi $BaLa_4Cu_5O_{13,4}$, onde

variando a concentração de Ba , Bednorz e Müller encontraram uma temperatura máxima de $T_c = 35K$, e esta nova descoberta valeu o prêmio Nobel de Física de 1987 a estes dois físicos. Vale a pena mencionar, que esta cerâmica composta de cobre e oxigênio haviam sido estudadas bastante nas décadas anteriores a descoberta, especialmente pelos físicos franceses Michel, Er-Rakho e Raveau. Certamente, estes estudos preliminares influenciaram nas pesquisas de Bednorz e Müller. Estes compostos têm uma característica estrutural marcante de seqüência de planos atômicos com composição CuO_2 , que são responsáveis pelas propriedades eletrônicas da fase normal e pela supercondutividade. Entre estes planos existem camadas atômicas contendo La , Ba (ou Sr) e o oxigênio que atuam como reservatório de cargas. Espalhamento de nêutrons indicam que o composto puro La_2CuO_4 é um antiferromagneto Heisenberg, onde os cobres (spin $\frac{1}{2}$) localizados nos vértices de uma rede quadrada interagem com um acoplamento forte (fraco) no plano (entre planos) de CuO_2 . Dopando este composto com elementos alcalinos (Ba , Sr) [por exemplo, $La_{2-x}Ba_xCuO_4$], os íons de oxigênio situados entre os átomos de Cu no plano apresentam um desbalanceamento de carga, induzindo assim um spin efetivo $\sigma = \frac{1}{2}$ que interage (aleatoriamente) ferromagneticamente com estes átomos Cu , provocando desta maneira conflito de orientação de spins entre os átomos Cu no plano (efeito de frustração). Este efeito competitivo (frustração) de interação nos planos de CuO_2 causa uma redução drástica na ordem antiferromagnética do sistema, que conseqüentemente a temperatura de Néel (T_N) diminui à medida que a concentração de buracos aumenta, se anulando no valor crítico x_c . Para $x > x_c$, a fase supercondutora aparece, onde as correntes oriundas dos pares de Cooper nos planos de CuO_2 interagem via energia de *exchange*. Na Figura 1.3 apresentamos o resultado experimental do diagrama de fase no plano $T - x$ para o composto $(La_{1-x}Ba_x)_2CuO_4$.

Quase que imediatamente após o anúncio do descobrimento dos supercondutores em altas temperaturas muitos grupos espalhados no mundo procuravam temperaturas mais elevadas. Um destes grupos mais atuante era do professor Pau Chu, da Universidade de Houston, que foi o primeiro a dar conta da importância do descobrimento de Bednorz e Müller. O professor Chu logo encontrou uma temperatura de $T_c = 57K$, quando este material era submetido a uma elevada pressão. Em fevereiro de 1987, Chu anunciou que havia encontrado um novo composto cerâmico ($YBa_2Cu_3O_{3+x}$) que tinha uma temperatura crítica maior do que $90K$. Vários outros grupos ao redor do mundo conseguiram reproduzir este alto valor para $T_c \gtrsim 90K$ nestes ma-

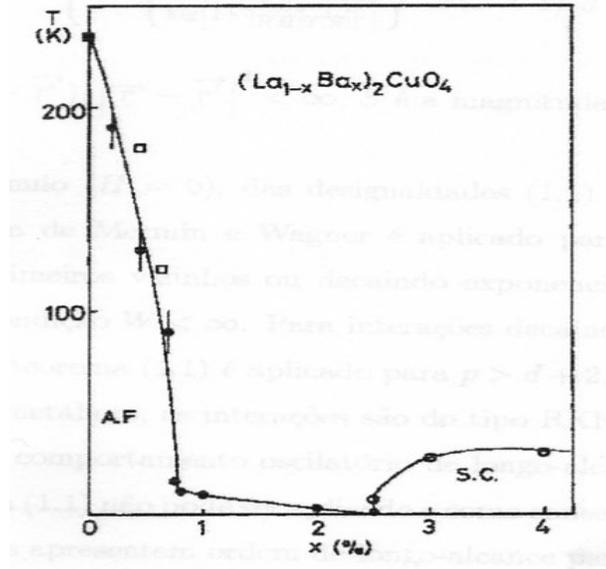


Figura 1.3: Diagrama de fase do composto $(La_{1-x}Ba_x)_2CuO_4$. As fases antiferromagnética e supercondutora estão indicadas por A.F e S.C., respectivamente [29].

teriais supercondutores cerâmicos. Na Figura 1.4 apresentamos, esquematicamente, a evolução dos valores de T_c nos materiais supercondutores desde 1908 até final da década de noventa. Por outro lado, mesmo com este grande avanço experimental na corrida da descoberta de compostos supercondutores com $T_c > 25K$ (alto T_c), uma teoria microscópica ainda não foi proposta para explicar todas as propriedades destes novos materiais. Um ingrediente fundamental presente nos compostos supercondutores formados por planos de CuO_2 é o antiferromagnetismo, e que aparentemente se manifesta na fase supercondutora ($x > x_c$) formando os pares de Cooper no plano de CuO_2 .

Do ponto de vista teórico, a fase isolante (AF) das cerâmicas supercondutoras é descrita numa primeira aproximação por um modelo de Heisenberg, onde os íons de cobre (spin \vec{S}) no plano (entre planos) interagem antiferromagneticamente com um *exchange* J_A (λJ_A , $\lambda \simeq 10^{-5}$) e os buracos de oxigênio (spin $\vec{\sigma}$) interagem aleatoriamente com os spins nodais de Cu no plano, e que matematicamente pode ser modelado pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij}^A \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \sum_{\langle i,j \rangle \in xy} J_{ij}^F \vec{\sigma}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (1.36)$$

onde $J_{ij}^A = J_A$ e λJ_A quando $\langle i, j \rangle \in xy$ e eixo z , respectivamente, J_{ij}^F é uma interação aleatória que pode ser mapeada pela seguinte distribuição (*quenched*) de probabilidade:

$$\mathcal{P}(J_{ij}^F) = p\delta(J_{ij}^F - J_F) + (1 - p)\delta(J_{ij}^F), \quad (1.37)$$

onde p é a concentração de buracos ($x = 2p$).

Devido as dificuldades teóricas para estudar o modelo quântico, Eq.(1.36), e desejando elucidar qualitativamente a influência da frustração no diagrama de fase no plano $T - p$ para os compostos cerâmicos formados por planos de CuO_2 na sua fase isolante (AF), de Sousa e colaboradores [30, 31, 32] têm substituído as variáveis de spins \vec{S}_i ($\vec{\sigma}_i$) por variáveis de spins de Ising S_i^z (σ_i^z), o que simplifica enormemente a análise teórica. Dependendo do valor do parâmetro de frustação $\alpha = \frac{J_A}{J_F}$ conseguimos reproduzir qualitativamente o comportamento da temperatura crítica $T_N(p)$ dos compostos cerâmicos. Assim sendo, justifica, a priori, o uso do modelo aleatório acima usando a simetria Ising para entender as propriedades magnéticas dos compostos cerâmicos formados por planos de CuO_2 na fase isolante (AF). A fim de ilustração, na Figura 1.5 apresentamos os resultados do diagrama de fase obtido teoricamente via teoria do campo efetivo e que é comparada com as medidas experimentais do composto $YBa_2Cu_3O_{6+x}$, onde certificamos a boa concordância qualitativa teoria-experimento. Assim sendo, o modelo de Ising aleatório é capaz de explicar, qualitativamente, as diversas propriedades magnéticas nas cerâmicas supercondutoras formadas por planos de CuO_2 na fase isolante.

1.2.2 Filmes Finos

Filmes finos são camadas delgadas de material condutor ou não, depositadas sobre substratos de qualquer natureza. Estas camadas possuem espessura que pode variar de alguns angstroms a dezenas de microns ($1\mu m = 10^{-6}m$). Os filmes finos são feitos de materiais do tipo isolantes, metais, semi-condutores ou supercondutores, dependendo da aplicação a qual será submetido o material. De acordo com a espessura e estrutura formada de um filme pode ser classificada por filme ultrafino ($< 5\mu m$), filme fino ($> 5\mu m$), filme ($10 - 100\mu m$), folha ($0,1 - 1mm$) e lâmina ($> 1mm$). Filmes finos podem ser utilizados na fabricação de mídia magnética (disquetes, discos rígidos, etc.), na fabricação de sensores de campo magnético (fo-

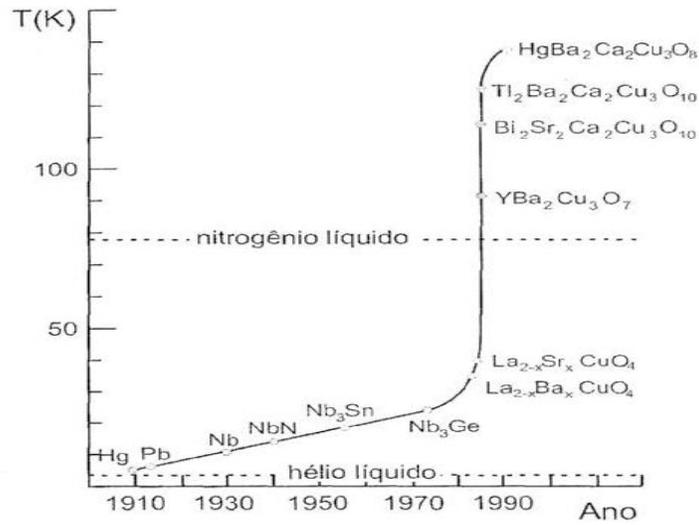


Figura 1.4: Evolução da temperatura crítica desde a descoberta da supercondutividade em 1911 até 1990. As linhas horizontais indicam as temperaturas dos líquidos refrigerantes necessários para alcançar baixas temperaturas [34].

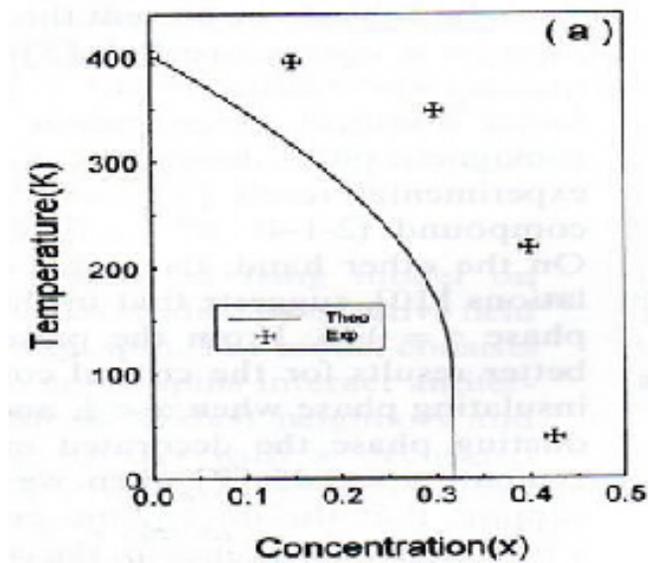


Figura 1.5: Diagrama de fase do modelo de Ising aleatoriamente decorado com parâmetro de frustração $\alpha = 0,50$ [31] que é comparado com resultado experimental do composto $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ [33].

todiodos, fototransistores, cabeças de leitura magnética e microtermopares), na ampliação e processamento de sinais (circuitos integrados, transistores, diodos, capacitores, resistores, etc.). A utilização de materiais na forma de filmes finos apresenta diversas vantagens como menor tamanho, menor peso e fácil integração a tecnologia do circuito integrado, além de vários benefícios, como baixa voltagem de operação, alta velocidade e a possibilidade de fabricação de estruturas em nível microscópico. Além dos filmes finos tradicionais formados por elementos magnéticos (Ni, Fe) temos os filmes finos que são constituídos de camadas de material cerâmico com espessura ainda abaixo de $1mm$, suportados por um substrato. Mudanças tanto no conteúdo do oxigênio como na composição de diversas cerâmicas têm um papel importante na definição de seu comportamento supercondutor, isolante ou magnético.

Ressaltamos, ainda, como filmes finos, as multicamadas que são formados pelo empilhamento alternado de diferentes tipos de materiais em substratos diversos. Materiais deste tipo não são encontrados na natureza e somente podem ser preparados artificialmente por técnicas de crescimento de filmes, são as chamadas super-redes magnéticas.

O presente trabalho está inserido no projeto sistema de baixa dimensionalidade, na área de pesquisa filmes finos e tem como objetivo principal investigar o diagrama de fase do composto supercondutor $La_{2-x}Ba_xCuO_4$, na fase isolante, na forma de filme de tamanho l . O modelo proposto é o de Ising de Spin $\frac{1}{2}$ (simula a interação cobre-cobre), numa rede cúbica, onde entre os vértices da rede coloca-se um spin decorador aleatoriamente distribuído (simula o íon de oxigênio no plano cobre-oxigênio) de valor $\frac{1}{2}$ e interage ferromagneticamente com os íons de cobre, provocando assim o fenômeno da frustração. Usaremos a técnica do operador diferencial em aglomerado com um íon. A motivação deste trabalho reside nos recentes resultados experimentais desta cerâmica supercondutora na ausência de buracos de oxigênio no plano cobre-oxigênio.

Vários trabalhos experimentais e teóricos já foram desenvolvidos para o estudo das cerâmicas supercondutoras ([35] a [46]). Entre eles destacamos o de Fuchs et al. [46] e Chen et al.[43].

Recentemente, Fuchs e colaboradores [46] estudaram o diagrama de fase do filme fino cerâmico $La_{0,7}A_{0,3}CoO_3$ ($A = Ca, Sr, Ba$). A temperatura de Curie T_c foi estudada em função da espessura do filme (d) para $400\text{ nm} > d \geq 2,6\text{ nm}$ (Figura 1.6). Analisaram a temperatura do *bulk*, obtendo um valor de $T_c = 240\text{ K}$. Verificar-se que para valores de $d < 100\text{ nm}$ a tem-

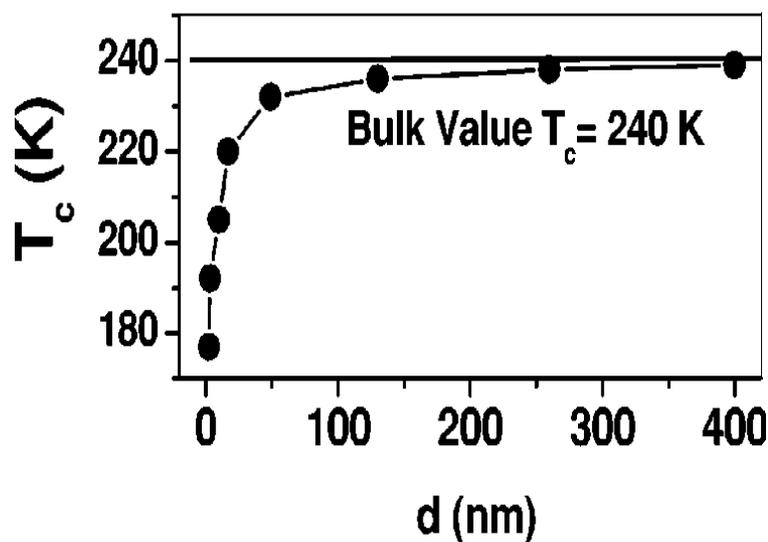


Figura 1.6: Temperatura crítica em função da espessura do filme fino supercondutor [46].

peratura de Curie aumenta de 180 K a 220 K, tendendo a temperatura do bulk para $d > 100$ nm.

Chen et al. [43], analisaram o comportamento da temperatura crítica em função da espessura (tamanho do filme) em um filme fino cerâmico (001) $La_{1,85}Sr_{0,15}CuO_4$, considerando o crescimento do filme cerâmico devido a dois tipos de substratos ($SrLaAlO_4$ e $SrTiO_3$), com base no modelo t-J e compararam o modelo qualitativamente com dados experimentais e para determinar esse modelo teórico usaram a teoria BCS. Estudaram, assim, o comportamento de T_c em função da concentração de buracos no plano CuO_2 (Figura 1.7), à tensão ε (compressão e expansão) em função da espessura do filme (Figura 1.8) e a temperatura crítica em função da espessura do filme (Figura 1.9). Encontraram a temperatura crítica T_c de 41,3 K para o filme cerâmico com espessura de 50 nm quando acrescentado ao substrato $SrLaAlO_4$, enquanto que, para o substrato $SrTiO_3$ foi estimado 34,7 K (Figura 1.6) e comparando os resultados estimados verificam que se ajustam com os experimentais.

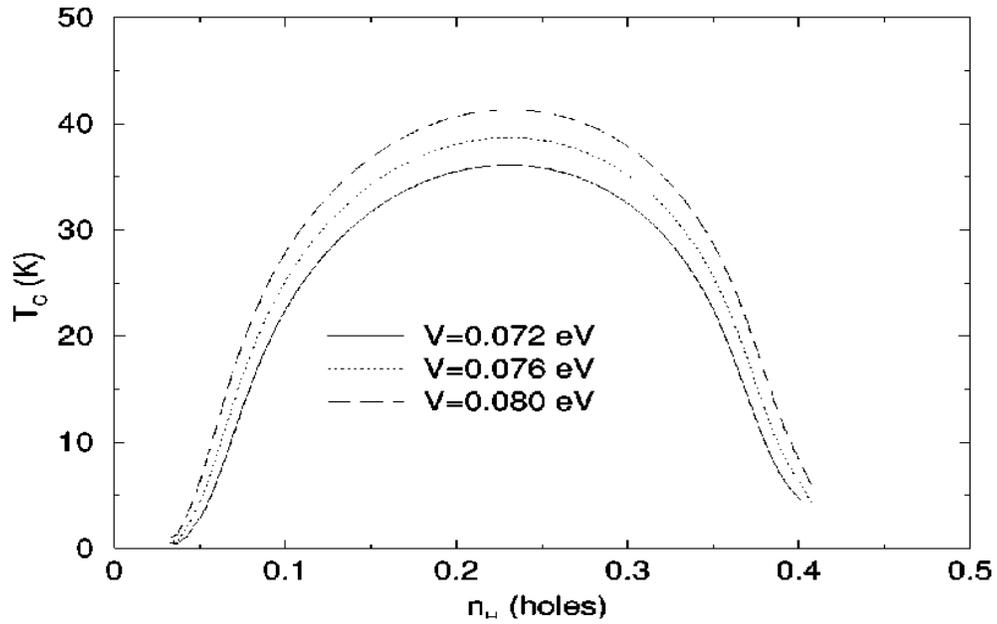


Figura 1.7: Temperatura crítica T_c em função da concentração de buracos no plano CuO_2 com diferentes valores de voltagem [43].

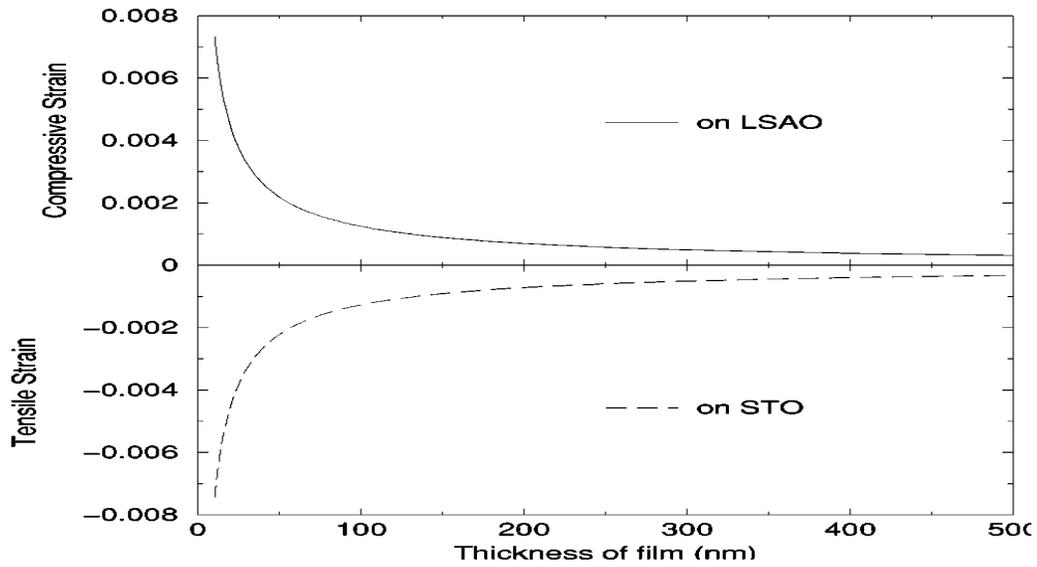


Figura 1.8: Tensão ε (compressão e expansão) em função da espessura da cerâmica condutora $La_{1,85}Sr_{0,15}CuO$ quando acrescentado os substratos $SrLaAlO_4$ e $SrTiO_3$ [43].

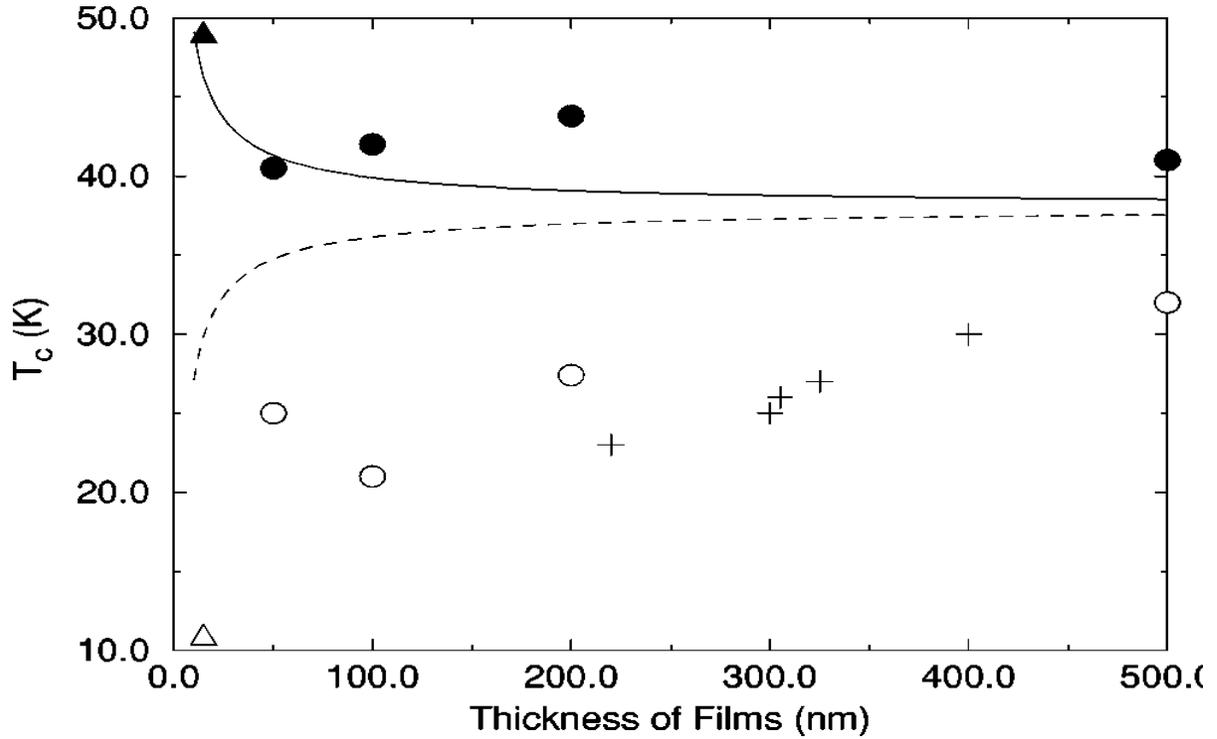


Figura 1.9: Temperatura crítica em função da espessura da cerâmica supercondutora (001) $La_{1,85}Sr_{0,15}CuO_4$ acrescentando os substratos $SrLaAlO_4$ (linha sólida) e $SrTiO_3$ (linha tracejada). Os triângulos abertos e cheios são dados experimentais para o crescimento da cerâmica condutora $La_{1,9}Sr_{0,1}CuO_4$ acrescentado os substratos $SrLaAlO_4$ e $SrTiO_3$, respectivamente. Os dados experimentais da $La_{1,85}Sr_{0,15}CuO_4$ acrescentado $SrTiO_3$ são marcados por sinais positivos. Os círculos abertos e fechados representam os pontos dos dados experimentais do crescimento da cerâmica $La_{1,85}Sr_{0,15}CuO_4$ quando acrescentado os substratos $SrTiO_3$ e $SrLaAlO_4$, respectivamente [43].

Referências

- [1] Baxter, R. J. , *Exactly solved models in statistical mechanics* (Academic Press, London, 1982).
- [2] Faria, R. N., e L. F. C. P. Lima, *Introdução ao Magnetismo dos Materiais* (Livraria da Física, São Paulo, 2005).
- [3] Rezende, S. M. , *A Física de Materiais e Dispositivos Eletrônicos* (Editora UFPE, Recife, 1996)
- [4] Mattis, D. C. , *The Theory of Magnetism*, vol I (Springer-Verlag, 1985).
- [5] Carneiro, A. A. O. , Ferreira, A. , Morais, E. R. , Araújo, R. D. , Rosa, M. e Baffa, O. , *Rev. Bras. Ens. Física* **22**, 324 (2000).
- [6] Curie, P. , *Ann. Chim. Phys.* **5**, 289 (1895).
- [7] Langevin, P. , *J. Phys.* **4**, 678 (1905); *Ann. Chim. Phys.* **5**, 70 (1905).
- [8] Chakravarty, A. S. , *Introduction to the Magnetic Properties of Solids* (John Wiley, New York, 1980).
- [9] Weiss, P. , *J. de Phys.* **6**, 661, (1907).
- [10] Peierls, R. E. , *Proc. Camb. Phil. Soc.* **32**, 471, 477 (1936).
- [11] Kramers, H. A., Wannier, G. H. , *Phys. Rev.* **60**, 252, 263 (1941).
- [12] Bragg, W. L., Williams, E. J. , *Proc. Roy. Soc. London A* **145**, 699 (1934).
- [13] Bethe, H. A. , *Proc. Roy. Soc. London A* **150**, 552 (1935).

- [14] Rushbrooke, G. S. , *Proc. Roy. Soc. Londom A* **166**, 296 (1938).
- [15] Guggenheim, E. A. , *Proc. Roy. Soc. Londom A* **148**, 304 (1935), *ibid* **169**, 134 (1938).
- [16] Fowler, R. H., Guggenheim, E. A. , *Proc. Roy. Soc. Londom A* **174**, 189 (1940).
- [17] Chang, T. S. , *Proc. Camb. Phil Soc.* **35**, 265 (1939).
- [18] Onsager, L. , *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944).
- [19] Wannier, G. H. , *Rev. Mod. Phys.* **17**, 181 (1945).
- [20] Onsager, L. , *Nuovo Cim.* **6** (Suppl. 2), 249,261 (1949).
- [21] Yang, C. N. , *Phys. Rev.* **85**, 808 (1952).
- [22] Kaufman, B. , *Phys. Rev.* **76**, 1232 (1949).
- [23] Vdovichenko, N. V. , *Soviet Phys. JETP* **20**, 477 (1965); *ibid* **21**, 350 (1965).
- [24] Glasser, M. L. , *Am. J. Phys.* **38**, 1033 (1970).
- [25] Mc Coy, B. M., Wu, T. T. , *The Two-dimensional Ising model* (Harvard University Press, 1973).
- [26] Heisenberg, W. , *Z. Phys.* **49**, 619 (1928).
- [27] Frenkel, Y. I. , *Z. Phys.* **49**, 31 (1928).
- [28] Dorfman, Y. , *Nature (Londres)* **119**, 353 (1928).
- [29] Kitaoka, Y. , et al., *J. Phys. Soc. Jpn.* **57**, 734 (1988).
- [30] Fittipaldi, I. P. , Ricardo de Sousa, J., dos Santos, R. J. V. , *J. Magn. Magn.Mater.* **104-107**, 279 (1992).
- [31] Ricardo de Sousa, J., Araújo, I. G. , *J. Magn. Magn. Matyer.* **219**, 355 (2000)
- [32] Igor Tavares, Pacobahyba, J. T. M., e Ricardo de Sousa, J. , *Physica A* (2006) **submetido**.
- [33] Guo, Y. e autores, *Science* **239**, 896 (1988).

- [34] Ostermann, F., Pureur, P. , *Supercondutividade* (Livraria da Fisica, São Paulo, 2005).
- [35] Tranquada, J. M., Heald, S. M., Moodenbaugh, A. R., Suenega, M., *Phys. Rev. B* **35**, 7187 (1987).
- [36] Aharony, A., Birgeneau, R. J., Coniglio A., Kastner, M. A., Stanley, H. E., *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1330 (1988).
- [37] Nishikawa, O., Nagai, M., *Phys. Rev. B* **37** 3685 (1988).
- [38] Tan, Z. , Filipkowski, M. E. , Budinick, J. I. , Heller, E. K. , Brewes, D. L. , Chamberland B.L. , Bouldin, C. E. , Woick, J. C. , Shi, D. , *Phys. Rev. Lett.* **64**, 2715 (1990).
- [39] Phillips, J. C., Rabe, K. M., *Phys. Rev. B* **44**, 2863 (1991).
- [40] Billinge, S. J. L., Kwei, G. H., Lawson, A. C., Thompson, J. D., Takagi, H., *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1903 (1993).
- [41] Katano, S., Fnahashi, S., Mori N., Ueda, Y., Fernandez-Baca, J. A., *Phys. Rev. B* **48**, 6569 (1993).
- [42] Boebinger, G. S., Ando, Y., Passner, A., Kimura, T., OKaya, M., Shimoyama, J., Kishio, K., Tamasaku, K., Ichikawa, N., Uchida, S., *Phys. Rev. Lett.* **77**, 5417 (1996).
- [43] Chen, X. J., Lin, H. Q., Gong, C. D., *Phys. Rev. B* **61**, 9782 (2000).
- [44] Miura, N. , Nakagawa, H. , Sekitani, T. , Naito, M. , Sato, H. , Enomoto, Y. , *Physica B* **319**, 320 (2002).
- [45] Fuchs, D., Morán, O., Adelman, P., Schneider, R., *Phys. Rev. B* **349**, 337 (2004).
- [46] Fuchs, D., Schwarz, T., Morán, O., Schweiss, P., Schneider, R., *Phys. Rev. B* **71**, 92406 (2005).
- [47] van Vleck, J. H., *J. Phys. Rad.* **12**, 269 (1931); *Phys. Rev.* **52**, 1178 (1937).

Capítulo II

Métodos Aproximativos

2.1 Considerações Gerais

Devido a existência de muitas partículas (spins) interagentes na matéria, o cálculo exato da função de partição para modelos de spins [1] fica impossibilitado na sua grande maioria. O primeiro passo para estudar as propriedades magnéticas dos mais variados modelos (Hamiltonianos) é usualmente a aplicação de uma teoria de campo efetivo [2]. A aproximação de campo médio (MFA), escrita nas suas diversas formas (campo molecular, desigualdade de Bogoliubov, interação de longo-alcance, Bragg-Williams), consiste na mais simples metodologia usada para estudar fenômenos críticos, onde o conceito de campo molecular introduzido inicialmente por Weiss [3] para descrever o ferromagnetismo e posteriormente por Néel [4] para o antiferromagnetismo, constitui ainda técnica muito utilizada na literatura [5].

Desejando melhor elucidar a potencialidade de algumas teorias de campo efetivo, vamos calcular T_c do modelo de Ising com dois estados descrito pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad (\sigma_i = \pm 1), \quad (2.1)$$

onde a soma é feita sobre os primeiros, vizinhos (z) e consideramos o caso ferromagnético $J > 0$. Podemos reescrever o Hamiltoniano (2.1) na forma

$$\mathcal{H} = - \sum H_i (\sigma_i) \sigma_i, \quad (2.2)$$

sendo $H_i(\sigma_i) = +J \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{i+\vec{\delta}}$ o “campo” interno aplicado no spin σ_i e $\vec{\delta}$ é o vetor primeiro vizinho.

Dada a dimensão d e a topologia da rede, usando o Hamiltoniano (2.2) teremos como ponto de partida o cálculo da função de partição

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta\mathcal{H}(\{\sigma_i\})}, \quad (2.3)$$

onde $\{\sigma_i\}$ representa as 2^N configurações possíveis de spins numa rede cristalina.

Para as redes $1d$ ($z = 2$) e $2d$ [quadrada, $z = 4$] a função de partição (2.3) foi obtida de forma exata, sendo que o caso $1d$ não exhibe ordem de longo-alcance (magnetização espontânea nula) em temperatura $T > 0$. Posteriormente a solução exata do modelo de Ising numa rede quadrada na ausência de campo magnético por Onsager [6], outras redes bidimensionais (triangular, *honeycomb*, *kagomé*) também foram estudadas de forma exata [1]. No caso de redes tridimensionais ($3d$), o modelo de Ising não é solúvel exatamente, mas resultados de simulação de Monte Carlo [7] são considerados como solução exata (rigorosa).

A primeira tentativa de estudar transição de fase modelo de Ising foi dada por Weiss formulando a teoria fenomenológica do campo molecular. Numa visão moderna, a teoria de campo molecular (ou médio) pode ser interpretada como aproximando o campo local $H_i(\sigma_i)$ por uma média, ou seja,

$$H_i^{MFA} = \langle H_i(\sigma_i) \rangle = zJm, \quad (2.4)$$

onde $m = \langle \sigma_i \rangle \forall i$ é a magnetização por spin e z é o número de coordenação. Substituindo Eq. (2.4) na função de partição Eq. (2.3) podemos obter através de derivação a magnetização $m(T)$ que é dada por

$$m = \tanh(zkm), \quad (2.5)$$

onde $k = \beta J$. No limite $m \rightarrow 0$, obtemos da Eq. (2.5) a temperatura crítica T_c por

$$\frac{k_B T_c}{J} = z, \quad (2.6)$$

onde para a rede $1d$ ($z = 2$) encontramos erroneamente um valor finito para $\frac{k_B T_c}{J} = 2$ ($T_c = 0$ é a solução exata) e para a rede quadrada ($z = 4$) $\frac{k_B T_c}{J} = 4$ que é comparada com a solução exata $\frac{k_B T_c}{J} = 2,264\dots$ obtida por Onsager[6]. Fisicamente a explicação da existência de ordem de longo-alcance ($T_c \neq 0$) para o modelo de Ising $1d$ obtida via aproximação de campo médio (MFA), pode ser dada quando analisamos a criticalidade do modelo de interação de longo-alcance descrito pelo Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{N} \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j = -\frac{J}{2N} \left(\sum_i \sigma_i \right)^2, \quad (2.7)$$

onde a normalização $\frac{J}{N}$ na Eq. (2.7) é devido a preservar a extensividade da energia interna (isto é, $\frac{\langle \mathcal{H} \rangle}{N} = \mu$ é finito para $N \rightarrow \infty$). O modelo (2.7) é resolvido exatamente e obtém-se uma expressão auto consistente para a magnetização do tipo o MFA, Eq. (2.5), ficando a dimensionalidade da rede mascarada por causa do alcance infinito das interações. Portanto, mesmo uma rede $1d$, MFA significa que em média um dado íon interage com todos os sítios da rede e conseqüentemente a ordem de longo-alcance será estabelecida para $T < T_c$ em qualquer dimensão. Dizemos, então, que a solução MFA é exata no limite $z \rightarrow \infty$ ($\frac{k_B T_c}{zJ} = 1$) e se definirmos uma rede hipercrítica como $z = 2d$, MFA é considerada a solução exata em dimensão infinita ($d \rightarrow \infty$). A MFA apresenta melhores resultados quando tratamos redes $3d$, pois temos menores flutuações de spins. Segundo o critério de Ginzberg [8], as flutuações serão irrelevantes para dimensões superior a $d_c = 4$ ($d > 4$) onde os expoentes críticos de campo médio ($\beta = \frac{1}{2}$, $\gamma = 1$, $\alpha = 0$, $\delta = 3$, $\eta = 0$, $\nu = \frac{1}{2}$) são considerados exatos.

Vários métodos aproximativos têm sido propostos na literatura [2], neste trabalho desenvolveremos a técnica do operador diferencial, proposta anos atrás por Honmura e Kaneyoshi [9] e aplicada em diversos sistemas de spins.

2.2 Técnica do Operador Diferencial

A técnica do operador diferencial foi proposta por Honmura e Kaneyoshi [9], e é baseada no uso da identidade matemática $e^{\alpha D_x} F(x) = F(x + \alpha)$ (onde $D_x = \frac{d}{dx}$ é o operador diferencial), dando uma nova abordagem às identidades de Callen [10], facilitando assim o manuseio das variáveis de spin $1/2$.

Esta técnica era aplicada somente em modelos de Ising, até os meados do ano de noventa, mas depois com a generalização em aglomerados maiores (com dois spins) a técnica foi aplicada, também, para o modelo de Heisenberg de spin $\frac{1}{2}$ ferromagnético [11, 12, 13] e antiferromagnético [14]. O desacoplamento usado apresenta resultados satisfatórios em redes tridimensionais, e no caso para redes bidimensionais encontra valores espúrios no limite do modelo de Heisenberg isotrópico, $T_c \neq 0$ em contradição com o teorema de Mermin-Wagner ($T_c = 0$) [15]. Os resultados usando a técnica do operador diferencial são superiores ao de campo médio, que conduz a resultados indesejáveis para temperatura crítica, em rede $1d$ devido ao fato da teoria tratar as autocorrelações de spin de forma aproximada, ou seja, $\langle \sigma_i^{2n} \rangle = \langle \sigma_i \rangle^{2n}$ e $\langle \sigma_i^{2n+1} \rangle = \langle \sigma_i \rangle^{2n+1}$. Para obtermos as expressões de campo médio calculamos as médias térmicas direto nos argumentos das funções hiperbólicas. Outra maneira é fazer direto no Hamiltoniano a média na soma de primeiros vizinhos. Portanto, a teoria do campo médio despreza as flutuações de spins e também efeitos de auto-correlações, em que encontra-se resultados que não são boas estimativas para temperatura crítica. A técnica do operador diferencial tem sido proposta para melhoria dos valores da temperatura crítica.

Vamos desenvolver a seguir a teoria de campo efetivo em aglomerado finito usando a técnica do operador diferencial. Da mecânica estatística de equilíbrio, o valor médio de uma grandeza A é definido por

$$\langle A \rangle = \frac{Tr (Ae^{-\beta\mathcal{H}})}{Z} \quad (2.8)$$

com a função de partição dada por

$$Z = Tr \left(e^{-\beta\mathcal{H}} \right), \quad (2.9)$$

onde Tr é o funcional traço no espaço de todos os spins. Sendo \mathcal{H} um Hamiltoniano que descreve um sistema qualquer com N partículas interagentes, podemos separá-lo em dois Hamiltoniano, ou seja

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_\Omega + \mathcal{H}'_{\Omega'}, \quad (2.10)$$

onde \mathcal{H}_Ω representa o Hamiltoniano de um aglomerado (Ω) finito com $n < N$ spins levando

em conta as interações dentro do aglomerado e com a sua vizinhança e $\mathcal{H}'_{\Omega'}$ representa a parte restante (Ω') que não possui spins do aglomerado Ω .

Seja $O(\Omega)$ uma função de variáveis dentro do aglomerado Ω . Caso \mathcal{H}_{Ω} e $\mathcal{H}'_{\Omega'}$ comutem, $[\mathcal{H}_{\Omega}, \mathcal{H}'_{\Omega'}] = 0$, isto é, traço na Eq.(2.9) pode ser efetuado em dois passos: primeiramente o traço sobre o aglomerado finito Tr_{Ω} e em seguida sobre os spins da vizinhança não pertencentes ao aglomerado Ω , que é denotado por $Tr_{\Omega'}$. O valor médio da grandeza $O(\Omega)$, segundo a definição da Eq.(2.8), é dado por

$$\langle O(\Omega) \rangle = \frac{Tr_{\Omega'} Tr_{\Omega} \left\{ O(\Omega) e^{-\beta[\mathcal{H}_{\Omega} + \mathcal{H}'_{\Omega'}]} \right\}}{Tr_{\Omega'} Tr_{\Omega} \left\{ e^{-\beta[\mathcal{H}_{\Omega} + \mathcal{H}'_{\Omega'}]} \right\}}. \quad (2.11)$$

Ao assumir que \mathcal{H}_{Ω} e $\mathcal{H}'_{\Omega'}$ comutam entre si, a Eq. (2.11) ficará reescrita na forma

$$\langle O(\Omega) \rangle = \frac{Tr_{\Omega'} \left(e^{-\beta\mathcal{H}'_{\Omega'}} \right) Tr_{\Omega} \left\{ O(\Omega) e^{-\beta\mathcal{H}_{\Omega}} \right\}}{Tr_{\Omega'} \left(e^{-\beta\mathcal{H}'_{\Omega'}} \right) Tr_{\Omega} \left\{ e^{-\beta\mathcal{H}_{\Omega}} \right\}} \quad (2.12)$$

Agora, multiplicando a Eq. (2.12) por um fator unidade $\frac{Tr_{\Omega} \{ e^{-\beta\mathcal{H}_{\Omega}} \}}{Tr_{\Omega} \{ e^{-\beta\mathcal{H}_{\Omega}} \}}$ e combinando adequadamente mediante as propriedades da separação do traço e do Hamiltoniano, obtemos

$$\langle O(\Omega) \rangle = \frac{1}{Z} Tr \left\{ \frac{Tr_{\Omega} \left\{ O(\Omega) e^{-\beta\mathcal{H}_{\Omega}} \right\}}{Tr_{\Omega} \left\{ e^{-\beta\mathcal{H}_{\Omega}} \right\}} \right\} \quad (2.13)$$

Comparando a Eq. (2.13) com a definição Eq. (2.8), temos que o valor médio de $O(\Omega)$ fica reduzido ao cálculo parcial no aglomerado finito, ou seja

$$\langle O(\Omega) \rangle = \left\langle \frac{Tr_{\Omega} \left\{ O(\Omega) e^{-\beta\mathcal{H}_{\Omega}} \right\}}{Tr_{\Omega} \left\{ e^{-\beta\mathcal{H}_{\Omega}} \right\}} \right\rangle \quad (2.14)$$

A Eq. (2.14) é exata para sistemas clássicos, pois neste limite as variáveis de spin presentes no Hamiltoniano comutam. Por outro lado, para modelos descritos por Hamiltoniano quânticos esta equação não é exata [16] uma vez que $[\mathcal{H}_{\Omega}, \mathcal{H}'_{\Omega'}] \neq 0$.

Para ilustrar o uso da relação (2.14) e a técnica do operador diferencial, consideramos o modelo de Ising de spin $\frac{1}{2}$ na ausência de campo externo descrito pelo Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j; \quad (2.15)$$

onde J ($J > 0$ e $J < 0$ corresponde o sistema ferromagnético e antiferromagnético, respectivamente) é a interação de troca e $\sigma_i = \pm 1$.

Por simplicidades, consideramos um aglomerado com um spin. Portanto, neste aglomerado, o Hamiltoniano (2.15) ficará

$$-\beta\mathcal{H}_1 = K \left(\sum_{\vec{\delta}_1} \sigma_{1+\vec{\delta}_1} \right) \sigma_1 = a_1 \sigma_1 \quad (2.16)$$

onde $\beta = 1/k_B T$, $K = \beta J$ e $\vec{\delta}$ é o vetor primeiro vizinho e

$$a_1 = K \sum_{\vec{\delta}_1} \sigma_{1+\vec{\delta}_1}. \quad (2.17)$$

Da Eq.(2.14), podemos calcular a magnetização por spins, ou seja

$$m = \left\langle \frac{Tr_1(\sigma_1 e^{a_1 \sigma_1})}{Tr_1(e^{a_1 \sigma_1})} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial \ln Z_1}{\partial a_1} \right\rangle \quad (2.18)$$

onde a função de partição Z_1 é dada por

$$Z_1 = Tr_1 e^{a_1 \sigma_1} = 2 \cosh(a_1) \quad (2.19)$$

Substituindo o resultado Eq. (2.17) na Eq. (2.18), obtemos

$$m = \langle \tanh(a_1) \rangle \quad (2.20)$$

A Eq.(2.20) foi primeiramente deduzida, através da técnica da função de Green dependente de dois tempos, por Callen (1963) [10] para o modelo de Ising de spin $\frac{1}{2}$, e generalizada, em 1965, para o spin qualquer ($S \geq \frac{1}{2}$) por Suzuki [17] e com isso ficou conhecida na literatura por identidade de Callen-Suzuki. A identidade de Callen-Suzuki foi primeiramente usada para se obter funções de correlações e temperatura crítica do modelo de Ising $2d$ pelo método da expansão em séries de altas temperaturas [18]. Na mesma época, vários outros autores usaram

esta identidade [19, 20, 21]. A Eq.(2.20) é exata, mas envolve uma média da tangente hiperbólica com argumento contendo variáveis de spin. A aproximação usual de campo médio (MFA), consiste em tomar a média no argumento reduzindo assim a expressão aproximada

$$m \simeq \tanh \left\langle K \sum_{\vec{\delta}_1} \sigma_{1+\vec{\delta}_1} \right\rangle = \tanh(zKm) \quad (2.21)$$

onde no limite $m \rightarrow 0$ (transição de fase de segunda ordem) encontramos $\frac{k_B T_c}{J} \equiv K_c^{-1} = z$. Observe que para uma rede linear ($z = 2$), MFA obtém espuriamente um valor para $T_c \neq 0$.

Usando a identidade $e^{\alpha D_x} F(x) = F(x + \alpha)$, a Eq. (2.20) ficará

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}_1}^z e^{K\sigma_{1+\vec{\delta}_1} D_x} \right\rangle \tanh(x)|_{x=0} \quad (2.22)$$

Agora, usando a identidade de Van der Waerden para spin $\frac{1}{2}$, isto é,

$$e^{KD_x \sigma_{1+\vec{\delta}}} = \cosh(KD_x) + \sigma_{1+\vec{\delta}} \sinh(KD_x) \quad (2.23)$$

a Eq. (2.22) ficará

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}_1}^z \left[\cosh(KD_x) + \sigma_{1+\vec{\delta}_1} \sinh(KD_x) \right] \right\rangle \tanh(x)|_{x=0} \quad (2.24)$$

Definindo os operadores $C_k \equiv \cosh(KD_x)$ e $S_k \equiv \sinh(KD_x)$, a Eq.(2.24) ficará reescrita na forma

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}_1}^{z_1} \left(C_k + \sigma_{1+\vec{\delta}_1} S_k \right) \right\rangle \tanh(x)|_{x=0} \quad (2.25)$$

A Eq.(2.25) é de difícil manipulação matemática, pois envolve funções de correlações de multi-spins, e para tratar as correlações de forma exata é muito difícil (exceto para a cadeia linear), pois precisamos resolver um conjunto infinito de equações acopladas. Nesta linha de trabalho, o formalismo se depara com um problema de muitos corpos, que depende de uma aproximação para o desacoplamento.

Considerando a aproximação onde todas as correlações de muitos spins são desacopladas, denominada de aproximação de Zermite [23], ou seja

$$\langle \sigma_i \sigma_j \dots \sigma_n \rangle \simeq \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \dots \langle \sigma_n \rangle \quad (i \neq j \neq \dots \neq n) \quad (2.26)$$

a Eq. (2.26) poderá ser reescrita na forma aproximada

$$m \cong (C_k + mS_k)^z \tanh(x)|_{x=0} \quad (2.27)$$

onde foi usado o fato de que $\langle \sigma_i \rangle = m \forall i$.

A fim de comparação, calcularemos apenas a temperatura crítica, então no limite $m \rightarrow 0$ da Eq. (2.27) obtemos

$$A_1(K_c) = zC_k^{z-1}S_k \tanh(x)|_{x=0} \quad (2.28)$$

Resolvendo numericamente a Eq. (2.28), encontramos $\frac{k_B T_c}{J} = 3,09$ e $5,07$ para as redes quadrada ($z = 4$) e cúbica simples ($z = 6$), respectivamente. No caso da rede quadrada podemos comparar com a solução exata de Onsager [6] $\frac{k_B T_c}{J} = 2,27$ e a rede cúbica simples com simulação de Monte Carlo[7] $\frac{k_B T_c}{J} = 4,51$. Outros tipos de desacoplamentos têm sido aplicados [24, 25, 26], onde resultados superiores de T_c foram obtidos. Para uma rede linear ($z = 2$), da Eq. (2.28) obtemos resultado exato $T_c = 0$.

2.3 Filme fino: modelo de Ising

Na aplicação técnica do operador diferencial em redes cúbicas simples na forma de filme fino de L camada, iremos estudar dois tipos de interação dos spins dos vértices, a interação com a superfície (J_s) e a interação com as camadas internas (J) veja a Figura 2.1.

Usando o modelo de Ising como prototipo para descrever o filme fino, teremos então o seguinte Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J_s \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \quad (2.29)$$

onde $\sigma_i = \pm 1$. Para aglomerado com um spin, a Eq.(2.29) para a primeira camada (superfície) $n = 1$ será escrita por

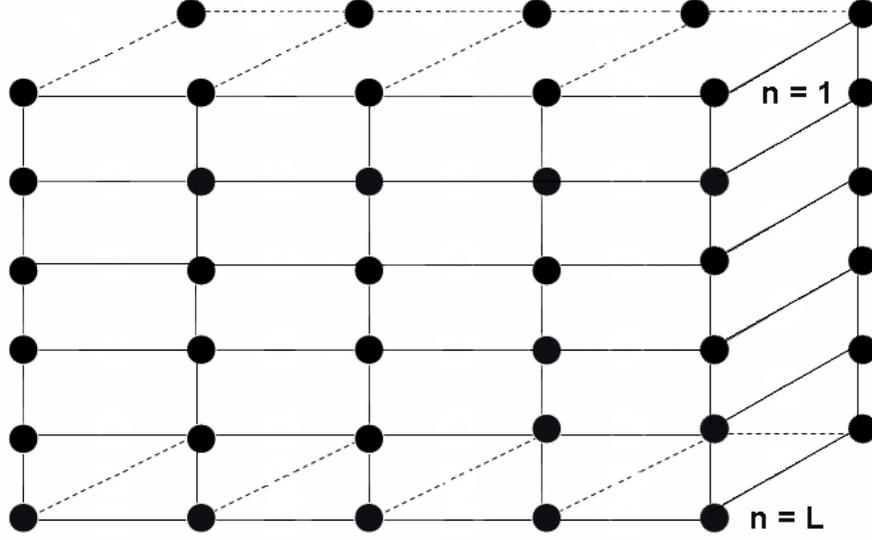


Figura 2.1: Rede Cúbica Simples na forma de filmes finos.

$$\mathcal{H}^{(1)} = -J_s \sigma_1^{(1)} \sum_{\vec{\delta}}^4 \sigma_{1+\vec{\delta}}^{(1)} - J \sigma_1^{(1)} \sum_{\vec{\delta}}^1 \sigma_{1+\vec{\delta}}^{(2)} \quad (2.30)$$

Para a l -ésima camadas (segunda superfície), teremos

$$\mathcal{H}^{(l)} = -J_s \sigma_1^{(l)} \sum_{\vec{\delta}}^4 \sigma_{1+\vec{\delta}}^{(l)} - J \sigma_1^{(l)} \sum_{\vec{\delta}}^1 \sigma_{1+\vec{\delta}}^{(l-1)} \quad (2.31)$$

Para a n -ésima camada, teremos

$$\mathcal{H}^{(n)} = -J \sigma_1^{(n)} \left[\sum_{\vec{\delta}}^4 \sigma_{1+\vec{\delta}}^{(n)} + \sum_{\vec{\delta}}^1 \sigma_{1+\vec{\delta}}^{(n-1)} + \sum_{\vec{\delta}}^1 \sigma_{1+\vec{\delta}}^{(n+1)} \right] \quad (2.32)$$

Usando as Eqs. (2.8), (2.9), e (2.20) podemos escrever a magnetização por spin das seguintes maneiras

$$m^{(1)} = \langle \sigma_1^{(1)} \rangle = \left\langle \tanh \left[K_s \sum_{\vec{\delta}}^4 \sigma_{1+\vec{\delta}}^{(1)} + K \sum_{\vec{\delta}}^1 \sigma_{1+\vec{\delta}}^{(2)} \right] \right\rangle$$

$$m^{(n)} = \left\langle \sigma_1^{(n)} \right\rangle = \left\langle \tanh K \left[\sum_{\vec{\delta}}^4 \sigma_{1+\vec{\delta}}^{(n)} + K \sum_{\vec{\delta}}^1 \sigma_{1+\vec{\delta}}^{(n-1)} + K \sum_{\vec{\delta}}^1 \sigma_{1+\vec{\delta}}^{(n+1)} \right] \right\rangle \quad (2.33)$$

$$m^{(l)} = \left\langle \sigma_1^{(l)} \right\rangle = \left\langle \tanh \left[K_s \sum_{\vec{\delta}}^4 \sigma_{1+\vec{\delta}}^{(l)} + K \sum_{\vec{\delta}}^1 \sigma_{1+\vec{\delta}}^{(l-1)} \right] \right\rangle \quad (2.34)$$

onde $K = \beta J$, $K_s = \beta J_s$ e $\beta = 1/k_B T$, k_B é a constante de Boltzmann e T a temperatura absoluta.

Aplicando a técnica do operador diferencial, ficaremos

$$m^{(1)} = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^4 e^{K_s \sigma_{1+\vec{\delta}}^{(1)} D_x} \prod_{\vec{\delta}}^1 e^{K \sigma_{1+\vec{\delta}}^{(2)} D_x} \right\rangle \tanh(x)|_{x=0}$$

$$m^{(n)} = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^4 e^{K \sigma_{1+\vec{\delta}}^{(n)} D_x} \prod_{\vec{\delta}}^1 e^{K \sigma_{1+\vec{\delta}}^{(n-1)} D_x} \prod_{\vec{\delta}}^1 e^{K \sigma_{1+\vec{\delta}}^{(n+1)} D_x} \right\rangle \tanh(x)|_{x=0} \quad (2.35)$$

$$m^{(l)} = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^4 e^{K_s \sigma_{1+\vec{\delta}}^{(l)} D_x} \prod_{\vec{\delta}}^1 e^{K \sigma_{1+\vec{\delta}}^{(l-1)} D_x} \right\rangle \tanh(x)|_{x=0} \quad (2.36)$$

Definindo $\alpha_s \equiv \cosh(K_s D_x)$, $\beta_s \equiv \sinh(K_s D_x)$, $\alpha_k \equiv \cosh(K D_x)$, $\beta_k \equiv \sinh(K D_x)$ e usando a identidade de van der Waerden, as expressões acima ficarão reescrita, por

$$m^{(1)} = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^4 \left(\alpha_s + \sigma_{1+\vec{\delta}}^{(1)} \beta_s \right) \left(\alpha_k + \sigma_a^{(2)} \beta_k \right) \right\rangle \tanh(x)|_{x=0}$$

$$m^{(l)} = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^4 \left(\alpha_s + \sigma_{1+\vec{\delta}}^{(l)} \beta_s \right) \left(\alpha_k + \sigma_a^{(l-1)} \beta_k \right) \right\rangle \tanh(x)|_{x=0} \quad (2.37)$$

$$m^{(n)} = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^4 \left(\alpha_k + \sigma_{1+\vec{\delta}}^{(n)} \beta_k \right) \left(\alpha_k + \sigma_a^{(n-1)} \beta_k \right) \left(\alpha_k + \sigma_a^{(n+1)} \beta_k \right) \right\rangle \tanh(x)|_{x=0} \quad (2.38)$$

Aplicando a aproximação de Zernike, Eq. (2.26), ficaremos

$$m^{(1)} \cong \left(\alpha_s + m_s^{(1)} \beta_s \right)^4 \left(\alpha_k + m^{(2)} \beta_k \right) \tanh(x)|_{x=0} \quad (2.39)$$

$$m^{(n)} \cong \left(\alpha_k + m^{(n)} \beta_k \right) \left(\alpha_k + m^{(n-1)} \beta_k \right) \left(\alpha_k + m^{(n+1)} \beta_k \right) \tanh(x)|_{x=0} \quad (2.40)$$

$$m^{(l)} \cong \left(\alpha_s + m_s^{(l)} \beta_s \right)^4 \left(\alpha_k + m^{(l-1)} \beta_k \right) \tanh(x)|_{x=0} \quad (2.41)$$

Expandindo em primeira ordem a magnetização ($m \cong 0$) e lembrando que um operador funcional par vezes uma função ímpar, irá dar um termo igual a zero, então as Eqs.(2.39, 2.40 e 2.41) tornam-se

$$m^{(1)} = A_{11}m^{(1)} + A_{12}m^{(2)}$$

$$m^{(n)} = Am^{(n)} + Bm^{(n+1)} + Bm^{(n-1)} \quad (2.42)$$

$$m^{(l)} = A_{11}m^{(l)} + A_{12}m^{(l-1)} \quad (2.43)$$

sendo

$$A_{11} = 4\alpha_s^3\beta_s\alpha_k \tanh(x)|_{x=0}$$

$$A_{12} = \alpha_s^4\beta_k \tanh(x)|_{x=0}$$

$$A = 4\alpha_k^5\beta_k \tanh(x)|_{x=0}$$

$$B = \alpha_k^5\beta_k \tanh(x)|_{x=0}$$

Podemos rearrumar as expressões acima na forma de um sistema de equações lineares homogêneas, ou seja,

$$\left\{ \begin{array}{l} (A_{11} - 1)m^{(1)} + A_{12}m^{(2)} = 0 \\ Bm^{(1)} + (A - 1)m^{(2)} + Bm^{(3)} = 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ Bm^{(n-1)} + (A - 1)m^{(n)} + Bm^{(n+1)} = 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ (A_{11} - 1)m^{(l)} + A_{12}m^{(l-1)} = 0 \end{array} \right.$$

ou na forma simplificada

$$\left\{ \begin{array}{l} (A_{11} - 1)m^{(1)} + A_{12}m^{(2)} + 0m^{(3)} + 0m^{(4)} + 0m^{(5)} + \dots + 0m^{(l)} = 0 \\ Bm^{(1)} + (A - 1)m^{(2)} + Bm^{(3)} + 0m^{(4)} + 0m^{(5)} + \dots + 0m^{(l)} = 0 \\ 0m^{(1)} + Bm^{(2)} + (A - 1)m^{(3)} + Bm^{(4)} + 0m^{(5)} + \dots + 0m^{(l)} = 0 \\ \dots \\ 0m^{(1)} + 0m^{(2)} + 0m^{(3)} + 0m^{(4)} + \dots + m^{(l-1)} + (A_{11} - 1)m^{(l)} = 0 \end{array} \right.$$

Definindo

$$\begin{aligned} a &= \frac{A_{11} - 1}{A_{12}} \\ b &= \frac{A - 1}{B} \end{aligned} \tag{2.44}$$

teremos

$$\left\{ \begin{array}{l} am^{(1)} + m^{(2)} + 0m^{(3)} + 0m^{(4)} + \dots + 0m^{(l)} = 0 \\ m^{(1)} + bm^{(2)} + m^{(3)} + 0m^{(4)} + \dots + 0m^{(l)} = 0 \\ 0m^{(1)} + m^{(2)} + bm^{(3)} + m^{(4)} + \dots + 0m^{(l)} = 0 \\ \dots \\ 0m^{(1)} + 0m^{(2)} + \dots + m^{(l-1)} + am^{(l)} = 0 \end{array} \right. \quad (2.45)$$

O sistema acima pode ser escrito na forma matricial, ou seja,

$$\begin{pmatrix} a & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 1 & b & 1 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 1 & b & 1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & b & 1 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 1 & a \end{pmatrix}_l \begin{pmatrix} m^{(1)} \\ m^{(2)} \\ m^{(3)} \\ m^{(4)} \\ \dots \\ m^{(l)} \end{pmatrix}_l = 0$$

ou

$$A_l M_l = 0 \quad (2.46)$$

onde A_l é a matriz formada pelos coeficientes a e b e M_l é a matriz das magnetizações de cada camada.

Os valores críticos são encontrados a partir da solução não trivial da equação

$$\det A_l = 0 \quad (2.47)$$

As raízes da Eq. (2.47) serão encontradas através de métodos numéricos. Para isso temos que encontrar uma relação generalizada, e encontrar uma relação entre a temperatura crítica do filme e o número de camadas que ele possui.

Usando o método de Laplace com o cálculo de cofatores, encontramos a seguinte relação para matriz A_l

$$\left\{ \begin{array}{l} \det A_5 = (ab - 1)^2 B_1 - 2a(ab - 1) B_0 = 0 \\ \det A_6 = (ab - 1)^2 B_2 - 2a(ab - 1) B_1 + a^2 B_0 = 0 \\ \quad \quad \quad \cdot \\ \quad \quad \quad \cdot \\ \quad \quad \quad \cdot \\ \det A_l = (ab - 1)^2 B_{l-4} - 2a(ab - 1) B_{l-5} + a^2 B_{l-6} = 0 \end{array} \right. \quad (2.48)$$

para $n \geq 5$. Na qual, B_l é o determinante da matriz interna que apresenta somente coeficientes b , definida por

$$B_l = \begin{vmatrix} b & 1 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 1 & b & 1 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & 1 & b & 1 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & b \end{vmatrix} \quad (2.49)$$

Deparamos novamente com um determinante e devemos encontrar uma outra relação generalizada. Usando mesmo procedimento utilizando para a matriz A_l , podemos encontrar a seguinte relação de recorrência para B_l

$$B_l = bB_{l-1} - B_{l-2} \quad (2.50)$$

onde $l \geq 1$. Para encontrar B_l , utilizamos a software MAPLE 9, ou seja aplicando o comando `rsolve` na relação (2.50)

$$r \text{ solve}(\{b^*B(l-1) - B(l-2) - B(l) = 0, B(0) = 1, B(1) = b\}, B) \quad (2.51)$$

sendo $B_0 = 1$ e $B_1 = b$ as condições iniciais. Resulta

$$B_l = \frac{2^l}{2\sqrt{b^2-4}} \left\{ b \left[- \left(\frac{1}{b+\sqrt{b^2-4}} \right)^l + \left(\frac{1}{b-\sqrt{b^2-4}} \right)^l \right] + \sqrt{b^2-4} \left[\left(\frac{1}{b+\sqrt{b^2-4}} \right)^l + \left(\frac{1}{b-\sqrt{b^2-4}} \right)^l \right] \right\}$$

Fazendo algumas manipulações algébricas chegamos a seguinte relação de recorrência

$$B_l = \frac{1}{\sqrt{b^2-4}} \left\{ \left[\frac{b+\sqrt{b^2-4}}{2} \right]^{l+1} - \left[\frac{b-\sqrt{b^2-4}}{2} \right]^{l+1} \right\} \quad (2.52)$$

A Eq. (2.52) é válida apenas para o caso em que $b^2 > 4$. Para $b^2 < 4$ realizamos a seguinte substituição

$$\omega = \sqrt{b^2-4} = i\sqrt{4-b^2}$$

e

$$b = 2 \cos \theta,$$

resultando

$$\omega = 2i \sin \theta, \quad (2.53)$$

substituindo na Eq. (2.52), obtemos

$$B_l = \frac{1}{2i \sin \theta} \left\{ \left[\frac{b+2i \sin \theta}{2} \right]^{l+1} - \left[\frac{b-2i \sin \theta}{2} \right]^{l+1} \right\}$$

fazendo algumas manipulações algébricas encontramos

$$B_l = \frac{1}{\sin \theta} \{ \sin [\theta(l+1)] \} \quad (2.54)$$

sendo

$$\theta = \cos^{-1}\left(\frac{b}{2}\right)$$

Portanto, através das Eqs. (2.44), (2.48), (2.52) e (2.54), resolvemos numericamente usando o método da abseção, obtemos os valores de temperatura crítica do sistema composto

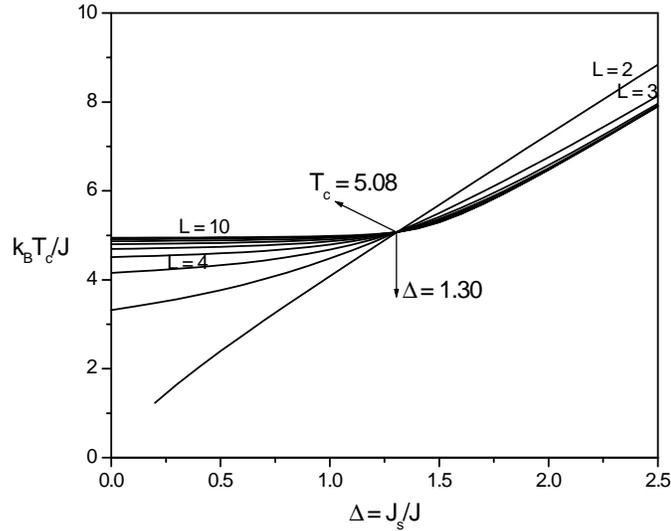


Figura 2.2: Temperatura crítica versus Δ para diversos tamanhos de filme L . O ponto de interseção corresponde ao ponto multicrítico associado a transição de fase *bulk*-superfície.

de equações acopladas.

Os resultados a seguir podem ser analisados tanto em função da espessura do filme como também em função de um parâmetro que representa a relação de mudança da superfície com o *bulk*, que será simbolizado por $\Delta = J_s/J$.

Como já mencionamos, o sistema é formado por rede cúbica simples na forma de filme fino que contém dois tipos de interações, a interação de superfície (J_s) e a interação de *bulk* (J), ou seja, temos dois tipos de transição, a transição de ordenação da superfície e ordenação do *bulk*.

Na Figura 2.2, temos o diagrama de fase no plano $T - \Delta$ para diversos valores de L . Observamos que existe um ponto multicrítico $\Delta_c = 1.30$ onde todas as curvas cruzam, e que para $\Delta < \Delta_c$ o sistema apresenta-se com o *bulk* ordenado e para $\Delta > \Delta_c$ a superfície é que está ordenada. Nota-se também que para este ponto multicrítico equivale a uma temperatura crítica onde $k_B T_c/J = 5.08$.

Na Figura 2.3, observamos vários tipos de temperaturas, a qual simbolizaremos por T_c^s por temperaturacrítica da superfície e T_c^b temperatura crítica do *bulk*. Quando $\Delta < \Delta_c$, verifica-se que a superfície está desordenada, ou seja, $T_c^b > T_c^s$. Quando $\Delta > \Delta_c$ o *bulk* desordenado, ou

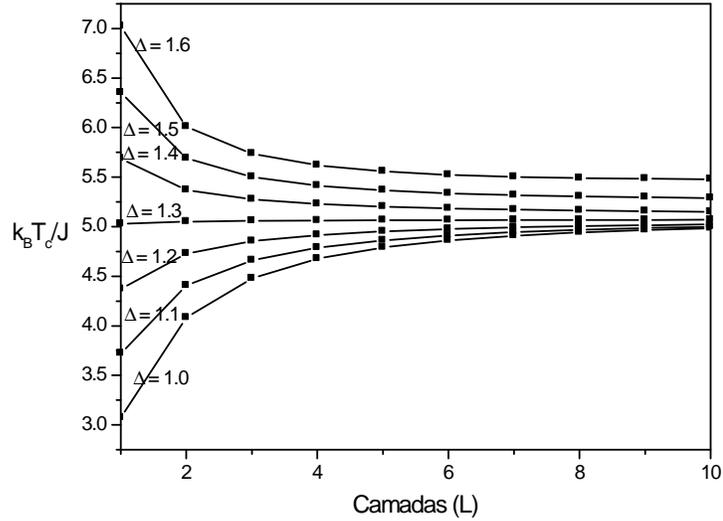


Figura 2.3: Temperatura crítica T_c em função do tamanho do filme L para diversos valores de Δ .

seja, $T_c^b < T_c^s$.

Os valores críticos obtidos nas Figuras 2.3 e 2.4 podem ser comparados com valores obtidos por Amazonas e colaboradores[27]. Eles analisaram o comportamento crítico para vários modelos entre eles o modelo de Ising, que foi analisado nesta seção, usando a teoria do campo médio. Nas suas análises obtiveram para a rede cúbica simples na forma de filmes finos os valores $\Delta_c = 0.27$ e temperatura crítica $T_c = 5.84$. Vale salientar para fins de comparações, que o parâmetro Δ usado por Amazonas e colaboradores foi $\Delta = J_s/J_b - 1$. Verificamos que a diferença nos valores deve-se a diferença nas técnicas utilizadas, onde nossos resultados, que estão apresentados nas Figuras 2.2 e 2.3, foram obtidos usando a técnica do operador diferencial.

No capítulo 3, iremos usar a técnica do operador diferencial em uma rede cúbica simples na forma de filme finos, considerando um novo parâmetro, o qual iremos denominá-lo de parâmetro de frustração que aparecerá devido a dopagem do sistema por um spin decorador, em uma certa concentração, que criará buracos de elétrons. Iremos analisar como as interações J_s e J_b descritas pelo modelo de Ising de spin 1/2, as temperaturas T_c^s e T_c^b e o valor do ponto multicrítico são modificados devido a este spin decorador.

Referências

- [1] Baxter, R. J., *Exactly solved models in statistical mechanics* (Academic Press, London, 1982).
- [2] Smart, J., *Effective-Field Theories of Magnetism* Sounders, Philadelphia, (1966).
- [3] P. Weiss, *J. de Phys.* **4**, 661, (1907).
- [4] Néll, L., *Ann. Physique* **18**, 5 (1932)
- [5] Zhuravlev, K. K., *Phys. Rev. E* **72**, 056104 (2005).
- [6] Onsager, L., *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944).
- [7] Landau, D. P., Binder, K., *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics* (Cambridge University Press, 2000)
- [8] Ginzberg, V. L., *Sov. Phys. Solid State* **2**, 1824 (1960).
- [9] Honmura, R., Kaneyoshi, T. , *Prog. Teor.Phys. (Kyoto)* **60**, 635 (1978).
- [10] Callen, H. B. , *Phys. Lett.* **4**, 161 (1963).
- [11] Butera, P., Comi , M. ., *Phys. Rev. B* **52**, 6185 (1995).
- [12] Idogaki, T. , Miyoshi, Y., Tucker , J. W. , *J. Mag. Mag. Mat.* **154**, 221 (1996).
- [13] Ricardo de Sousa, J., de Albuquerque, D. F. e, *Physica A* **236**, 419 (1997).
- [14] Liu, B. G. , *J. Phys. Cond. Matter* **4**, 8339 (1992).
- [15] Mermin, N. D., Wagner, H., *Phys. Rev. Lett.* **22**, 1133 (1966).

- [16] Sá Barreto, F. C., Fittipaldi, I. P., *Physica A* **129**, 360 (1985).
- [17] Suzuki, N., *Phys. Lett.* *19*, **267** (1965).
- [18] Tahir-Kheli, R. A., *Phys. Rev.* **188**, 1142 (1969); Taggart, G. B., Tahir-Kheli, R. A., *Physica* **68**, 93 (1973).
- [19] Matsudaira, N., *J. Phys. Soc. Jpn.* **35**, 1493 (1973).
- [20] Frank, B., Mitran, O., *J. Phys. C* **10**, 2641 (1977); *ibid* **11** 2087 (1978).
- [21] Tanaka, Y., Uryû, *Phys. Rev.* **21**, 1994 (1980).
- [22] Zhang, H. I., Min, B. I., *J. Phys. C* **14**, 1769 (1981).
- [23] F. Zernike, *Physica (Utrecht)* *1*, **565**, (1940).
- [24] Kaneyoshi, T. Fittipaldi, I. P., Honmura, R., Manabe, T., *Phys. Rev. B* **24**, 481 (1981).
- [25] Taggart, G. B., Fittipaldi, I. P., *Phys. Rev. B* **25**, 7026 (1982).
- [26] Taggart, G. B., *Physica A* **113**, 535 (1982).
- [27] M. A. S. Amazonas, *Dissertação de Mestrado* (2003), ICE-DF-UFAM.

Capítulo III

Filme Fino de Ising Aleatoriamente Decorado

3.1 Considerações Gerais

Os sólidos encontrados na natureza, ou mesmo aqueles sintetizados, em laboratórios, apresentam de uma maneira geral algum grau de impurezas ou imperfeições quando comparados com uma estrutura cristalina perfeita, caracterizando assim a desordem [1]. Quando um cristal perfeito formado, por exemplo, por átomos do tipo A é substituído aleatoriamente por outro do tipo B , na hipótese de não haver nenhum distúrbio na rede cristalina formando uma liga do tipo A_pB_{1-p} (onde p é a concentração de átomo A), dizendo ter uma **desordem substitucional**. Este tipo de desordem, e que ocorre em muitos diferentes elementos em metais, semicondutores e cristais iônicos é de grande importância na metalurgia e em outros campos da ciência dos materiais. Em particular, e de interesse desta dissertação, vamos admitir que o átomo B seja não magnético e denotamos assim a liga A_pB_{1-p} de um magneto diluído. Dependendo da concentração de átomos não-magnéticos ($1 - p$), a mistura pode atingir um limite em que a impureza pode predominar e a ordem magnética do sistema diluído é destruída. Quando a distribuição de sistema diluído é destruída. Quanto a distribuição de átomos na rede cristalina podemos distinguir dois tipos:

i) diluição temperada: os átomos magnéticos e não magnéticos situam-se ao acaso nos sítios (ou ligação) de uma rede cristalina, de modo que a probabilidade de um dado sítio (ou ligação)

esteja ocupado por um átomo magnético é independente de outras ocupações e permanece constante;

ii) diluição recozida: a probabilidade de distribuição dos átomos magnéticos é governada pela mecânica estatística e varia com a temperatura e outros parâmetros macroscópicos (campos), e geralmente os sítios são ocupados de tal forma que a energia livre seja mínima.

A grande motivação de se estudar sistemas desordenados, reside ao fato de ter se tornado possível controlar, de maneira adequada, as propriedades físicas dos materiais através de várias técnicas de dopagem. Do ponto de vista teórico, o maior interesse tem sido dado ao estudo da criticalidade (temperatura crítica e expoentes críticos) como uma função da concentração. Fisicamente, esperamos que a medida que diminuimos a concentração de íons magnéticos (p), a ordem magnética é gradativamente enfraquecida com a introdução de cada vez mais íons não magnéticos sobre a rede cristalina.

Historicamente falando, os primeiros estudos teóricos em sistemas desordenados foram na década de sessenta com os trabalhos pioneiros de Sato, Arrott e Kikuchi [2], Elliott[3] e Smart [4]. Nesta época usava-se a aproximação de campo médio (*MFA*), onde um comportamento linear com a concentração p foi obtida para a temperatura crítica, isto é,

$$\frac{k_B T_c}{J} = zp, \quad (3.1)$$

onde z é o número de coordenação. O resultado acima prediz, erroneamente, um valor para a temperatura crítica mesmo para pequenas concentrações de átomos magnéticos ($p \ll 1$), o que certamente contradiz à intuição e aos resultados experimentais. Espera-se que T_c diminua com o decréscimo da concentração, e que abaixo de uma dada concentração crítica p_c a ordem magnética é destruída (isto é, $T_c = 0$ para $p \leq p_c$).

Resultados rigorosos de expansão em séries [5] têm mostrado que a concentração crítica p_c independe da simetria do Hamiltoniano, ou seja, $p_c(\text{Ising}) = p_c(\text{Heisenberg}) = p_c(xy)$, sendo, portanto, uma propriedade da topologia da rede. No composto diluído, a ocorrência de ordem magnética depende da existencia de um aglomerado de tamanho infinito correlacionado, e que em $T = 0$ a existência deste aglomerado em função da concentração é um problema puramente geométrico. Este aspecto geométrico na destruição do aglomerado infinito em função da con-

centração é conhecido como percolação, e foi mostrado[6] que a concentração de percolação p_c corresponde exatamente ao mesmo valor da concentração crítica obtida em $T_c = 0$ para o sistema diluído com uma dada topologia de rede.

A natureza da desordem pode também ser classificada em dois tipos: a desordem por ligações, onde ligações magnéticas conectando sítios vizinhos são “quebradas” por introdução de algum tipo de íon diamagnético neutralizado o *overlap* das funções de onda entre os sítios. Exemplo de desordem por ligação temos o composto $Co(S_pSe_{1-p})_2$, no qual os átomos de cobalto (Co) interagem entre si via átomos de enxofre (S) e silênio (Se). Outro tipo que temos é a desordem por sítios, os átomos magnéticos distribuídos numa rede cristalina são substituído por átomos magnéticos. Exemplo deste último de desordem podemos citar os compostos $Mn_pZn_{1-p}F_2$, $Rb_2Mn_2Fe_{1-p}F_4$, $Fe_pMg_{1-p}Cl_2$, $Rb_2Co_pMg_{1-p}Cl_2$, etc. Um resultado importante demonstrado na teoria de percolação [7] é que a concentração de ligações (p_c^b) não pode exceder a concentração de sítios (p_c^s), isto é, $p_c^b \leq p_c^s$. Por exemplo, para uma rede quadrada ($z = 4$) temos $p_c^b = 0,50$ e $p_c^s = 0,59$, rede triangular ($z = 6$) $p_c^b = 0,347$ e $p_c^s = 0,50$ e rede cúbica simples ($z = 6$) $p_c^b = 0,25$ e $p_c^s = 0,31$.

Apesar da concentração crítica p_c independe do modelo, a curva crítica $T_c(p)$ vai ser sensivelmente afetada pelo tipo de simetria do Hamiltoniano. Para concentração $p_c < p < 1$, devido a forte anisotropia do spin numa única direção, o comportamento de $T_c(p)$ para o modelo de Ising 3d é maior do que o caso do modelo xy , e este por sua vez superior ao modelo de Heisenberg, isto é, $T_c^I(p) > T_c^{xy}(p) > T_c^H(p)$. Na região de baixas temperaturas (ao redor da concentração crítica ou percolação), Stauffer [8] e Lubenski [9] mostraram que $T_c(p)$ para os modelos xy e Heisenberg 3d decaem a zero segundo uma lei de potência na variável $p - p_c$, enquanto para o modelo de Ising 3d (ou 2d) temos uma lei logarítmica, ou seja,

$$\begin{cases} T_c^{xy,H}(p) \simeq (p - p_c)^{1/\Phi_{xy,H}} \\ T_c^I(p) \simeq [-\ln(p - p_c)]^{-1} \end{cases} \quad (3.2)$$

onde $\Phi_{xy,H} = \frac{\nu^{xy,H}}{\nu_p} < 1$ é o expoente de *crossover*, $\nu^{xy,H}$ é o expoente crítico térmico do comprimento de correlação (isto é, $\xi^{-1}(T) \simeq (T - T_c)^{\nu^{xy,H}}$) e ν_p o expoente crítico geométrico (independe do modelo) associada à divergência do comprimento de correlação quando $p \rightarrow p_c$ (isto é, $\xi^{-1}(p) \simeq (p - p_c)^{1/p}$).

O expoente crítico $\nu(p)$ associado à divergência do comprimento de correlação ao longo da linha crítica $T_c(p)$ para um dado modelo magnético não é em geral igual ao seu limite puro $\nu(1)$. O efeito da diluição pode afetar a classe de universalidade do sistema. Resultado exato no modelo de Ising numa rede quadrada [10] tem indicado que $\nu(p) = \nu(1)$ (e também outros expoentes críticos), mostrando que a aleatoriedade nas ligações não afeta a classe de universalidade. Por outro lado, para o caso deste modelo tridimensional não disponibilizamos de resultados exatos, mas argumentos (fenomenológicos, conhecido como critério de Harris [11], têm indicado que, se o expoente crítico do calor específico no limite puro for negativo ($\alpha(1) < 0$) temos, para pequenas concentrações de defeitos ($p \simeq 1$), a igualdade entre os expoentes críticos $\nu(p) = \nu(1)$ (mesma classe de universalidade), que correspondem aos casos dos modelos xy e Heisenberg $3d$. No caso do modelo de Ising $3d$, $\alpha(1) > 0$ e segundo o critério de Harris $\nu(p) \neq \nu(1)$.

Um outro tipo de sistema magnético é o que apresenta interações competitivas, que teoricamente será objetivo deste trabalho. O estudo de sistemas com interações competitivas surgiu inicialmente com a descoberta experimental, usando espalhamento de nêutrons, de estruturas magnéticas espacialmente moduladas, com configurações mais complexas que os casos anti-ferromagnéticos e ferrimagnéticos [12]. Teoricamente, a origem destas estruturas magnéticas moduladas está na combinação de dois efeitos: cooperação e competição. A cooperação tende a levar o sistema magnético, no regime de baixas temperaturas ($T < T_c$), a assumir uma configuração (ordem) de spins, como, por exemplo, a ferromagnética e antiferromagnética. Por sua vez, a competição, que pode surgir de diversas formas, tais como: presença simultânea de interações ferromagnéticas e antiferromagnéticas, aleatoriedade na distribuição espacial dos momentos magnéticos e/ou distribuição aleatória de interações de intercâmbio (em intensidade e em sinal), diluição, T_c , pode, em determinadas circunstâncias, fazer com que as configurações magnéticas simples não minimizem a energia do sistema, havendo a necessidade do aparecimento de estruturas moduladas, as quais podem apresentar aspectos bastante complexos. Sobre estes aspectos complexos, temos, por exemplo, o aparecimento de fases moduladas incomensuráveis com o parâmetro de rede, surgimento de pontos multicríticos, um número muito grande de estados metaestáveis (vidro de spin), fases reentrantes, etc.

Por trás de todas essas manifestações está um efeito, primeiramente identificado por Toulouse

[13] denominado de frustração. A frustração pode ser entendida como o conflito entre dois ou mais tipos de interações experimentadas simultaneamente por alguns spins do sistema. Tal conflito torna impossível a satisfação simultânea da configuração de menor energia de todas as interações. Na proposta inicial de Toulouse, a frustração é uma propriedade espacial de uma distribuição aleatória de interações ferromagnéticas e antiferromagnéticas. Esse conceito foi posteriormente estendendo por Anderson [14] para levar em consideração a possibilidade de variação aleatória de intensidade, alcance e sinal das interações e natureza dos spins. Como um sistema frustrado não é capaz de atingir uma configuração que satisfaça inteiramente os seus vínculos desenvolve uma multiplicidade de estados igualmente insatisfatórios. Por isso um sistema frustrado apresenta metaestabilidade com efeitos de *histerese* e relaxação com dependência nas histórias térmicas e magnéticas da amostra.

Do ponto de vista teórico, outro tema abordado de sistema competitivos é o estudo da termodinâmica e criticalidade de modelos decorados. Um modelo decorado pode ser construído a partir de uma rede original (bravais), sobre o qual cada ligação é ocupada por um spin decorador. Estes modelos decorados foram primeiramente estudado por Syozi [15] na década de cinquenta para determinar a temperatura crítica da rede *kagomé* a partir do valor de T_c de rede *honeycomb*. Em 1954, Naya [16] estendeu o método para incluir os efeitos de um campo magnético externo, conseguindo obter uma expressão para a magnetização espontânea da rede *kagomé* a partir da expressão equivalente da rede *honeycomb*. Diversos a outros trabalhos em modelos solúveis numa rede decorada têm sido feitos [17].

A partir da década de noventa, de Sousa e colaboradores [18, 19] têm estudado o modelo de Ising decorado ($2d$ e $3d$) com interação *quenched* aleatória, onde o compostos supercondutores formados por planos de C_uO_2 . O diagrama de fase no plano T-p (p é a concentração) de ligação decorada) obtido teoricamente está, qualitativamente, em concordância com os resultados experimentais. Recentemente, Tavares [20] tem estendido os cálculos [18, 19] para estudar as diversas propriedades termodinâmicas. Outros aspectos deste modelo decorado também foram explorados, tais como, spin misto [21], campo transversal [22], campo aleatório [23] e efeito de superfície [24]. Neste trabalho aplicaremos a técnica do operador diferencial, desenvolvida por de Sousa e colaboradores [18, 19] para rede de Ising aleatoriamente decorada para estudar o filme de Ising decorado, onde os efeitos de superfície e frustração serão investigados nos

diagramas de fases.

3.2 Modelo e Método

O modelo de Ising aleatoriamente decorado numa rede cúbica simples na forma de filme fino será aqui estudado através da técnica do operador diferencial em aglomerado com um spin em conjunto com a aproximação de campo efetivo, e é descrito pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij}^{AF} S_i^\nu S_j^{-\nu} - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij}^F \sigma_i S_j^\nu \quad (3.3)$$

onde $J_{ij}^{AF} > 0$ é a interação antiferromagnética no plano formado entre os spins dos vértices de duas sub-redes interpenetrantes, onde $\nu \equiv A$ (spin para cima) e $-\nu \equiv B$ (spin para baixo), isto simula as interações Cu-Cu no plano e entre planos. Numa estrutura de filme fino de tamanho L os spins decoradores σ_i estão situados no meio da ligação dos spins dos vértices com probabilidade p , interagindo com os spins vizinhos da rede através da variável aleatória independente $J_{i,j}^F$ cuja distribuição é dada pela relação:

$$\mathcal{P}(J_{i,j}^F) = p\delta(J_{i,j}^F - J^F) + (1-p)\delta(J_{i,j}^F) \quad (3.4)$$

sendo $J^F > 0$ a interação aleatória entre o átomo de oxigênio e os pares de cobre adjacentes no plano C_u .

A concentração p de ligações decoradas é um número que varia entre 0 e 1, enquanto a concentração real x de dopagem de Ba , no composto puro $La_{2-x}Ba_xCuO_4$ é um número entre 0 e 2. Entre as concentrações existe uma correspondência um a um definida pela densidade de buracos e p é $x = 2p$. Portanto, o modelo de Ising decorado aleatoriamente simula qualitativamente os compostos cupratos supercondutores na fase isolante (antiferromagnética). No caso puro ($p = 0$), o modelo (3.3) foi estudado preliminarmente por vários autores [25].

Para descrever a criticalidade numa estrutura de um filme fino tendo como característica a presença de interações ferromagnéticas aleatoria ($J^F > 0$) e antiferromagnético em cada camada de um filme de tamanho l , $J_{ij}^{AF} = J^{AF}$ e J_s^{AF} para interações no *bulk* e superfície ($n = 1, l$), respectivamente. A interação entre planos é antiferromagnética, enquanto nos planos temos

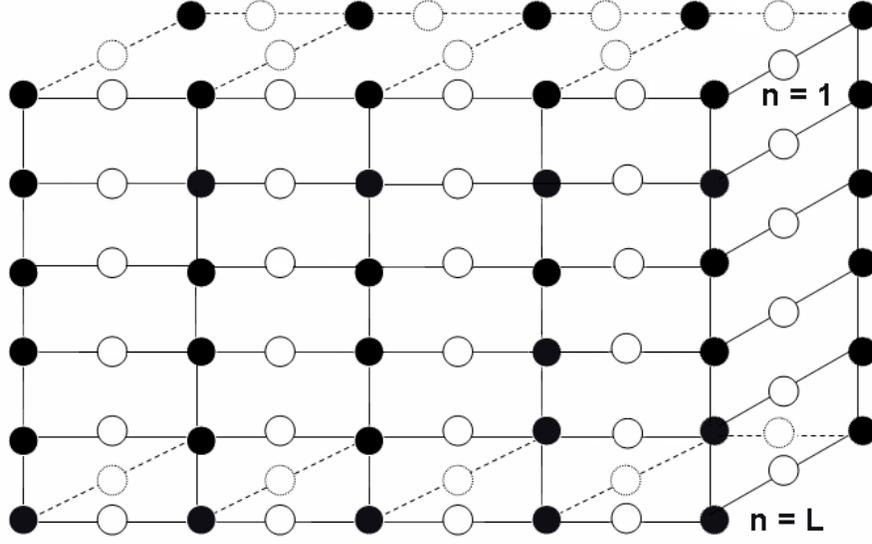


Figura 3.1: Rede cúbica simples decorada na forma de filmes finos.

efeitos competitivos entre interações F e AF conforme está esquematizado na Figura 3.1.

Para estudar teoricamente o diagrama de fase usaremos a técnica do operador diferencial [26], desenvolvida anteriormente no capítulo 2 para o caso do filme fino Ising puro [25].

Consideramos aglomerados de um spin em subrede A , para um filme fino de tamanho l , e o Hamiltoniano (3.3) ficará escrito para a primeira camada $n = 1$ (primeira superfície) por

$$\mathcal{H}_1^{A(1)} = S_1^{A(1)} \left\{ J_s^{AF} \sum_{\vec{\delta}} S_{1+\vec{\delta}}^{B(1)} + J^{AF} \sum_{\vec{\delta}} S_{1+\vec{\delta}}^{B(2)} - \sum_{\vec{\delta}} J_{s\vec{\delta}}^F \sigma_{1+\vec{\delta}}^1 \right\} \quad (3.5)$$

para camada n -ésima

$$\mathcal{H}_1^{A(n)} = S_1^{A(n)} \left\{ J^{AF} \left[\sum_{\vec{\delta}} S_{1+\vec{\delta}}^{B(n)} + \sum_{\vec{\delta}} S_{1+\vec{\delta}}^{B(n+1)} + \sum_{\vec{\delta}} S_{1+\vec{\delta}}^{B(n-1)} \right] - \sum_{\vec{\delta}} J_{\vec{\delta}}^F \sigma_{1+\vec{\delta}}^n \right\} \quad (3.6)$$

e para finalmente para a camada $n = l$ (segunda superfície) teremos

$$\mathcal{H}_1^{A(l)} = S_1^{A(l)} \left\{ J_s^{AF} \sum_{\vec{\delta}} S_{1+\vec{\delta}}^{B(l)} + J^{AF} \sum_{\vec{\delta}} S_{1+\vec{\delta}}^{B(l-1)} - \sum_{\vec{\delta}} J_{s\vec{\delta}}^F \sigma_{1+\vec{\delta}}^l \right\} \quad (3.7)$$

Para calcular o valor médio para um spin na subrede A usamos a mecânica estatística de equilíbrio, onde o valor médio desta grandeza é definida por

$$m_A^{(n)} = \langle S_1^{A(n)} \rangle = \left\langle \frac{Tr_1 \left\{ S_1^{A(n)} e^{-\beta \mathcal{H}_1^{A(n)}} \right\}}{Tr_1 \left\{ e^{-\beta \mathcal{H}_1^{A(n)}} \right\}} \right\rangle \quad (3.8)$$

onde $m_A^{(n)}$ é a magnetização do n -ésimo plano na subrede A e Tr_1 é o traço parcial no espaço de apenas um spin.

A partir dos respectivos Hamiltonianos e a definição do valor médio acima, podemos expressar as magnetizações por spins por

$$m_A^{(1)} = \frac{\partial \ln Z_1^{A(1)}}{\partial a_1^{A(1)}} \quad (3.9)$$

$$m_A^{(n)} = \frac{\partial \ln Z_1^{A(n)}}{\partial a_1^{A(n)}} \quad (3.10)$$

e

$$m_A^{(l)} = \frac{\partial \ln Z_1^{A(l)}}{\partial a_1^{A(l)}} \quad (3.11)$$

onde as funções de partição para cada plano $Z_1^{A(1)}$, $Z_1^{A(l)}$ e $Z_1^{A(n)}$ são dadas por

$$Z_1^{A(1)} = Tr_1 e^{a_1^{A(1)} S_1^{A(1)}} = 2 \cosh(a_1^{A(1)}) \quad (3.12)$$

$$Z_1^{A(n)} = Tr_1 e^{a_1^{A(n)} S_1^{A(n)}} = 2 \cosh(a_1^{A(n)}) \quad (3.13)$$

e

$$Z_1^{A(l)} = Tr_1 e^{a_1^{A(l)} S_1^{A(l)}} = 2 \cosh(a_1^{A(l)}) \quad (3.14)$$

sendo

$$a_1^{A(1)} = -\beta J_s^{AF} \sum_{\vec{\delta}} S_{1+\vec{\delta}}^{B(1)} - \beta J^{AF} \sum_{\vec{\delta}} S_{1+\vec{\delta}}^{B(2)} + \beta \sum_{\vec{\delta}} J_{s\vec{\delta}}^F \sigma_{1+\vec{\delta}}^1 \quad (3.15)$$

$$a_1^{A(n)} = -\beta J^{AF} \left[\sum_{\vec{\delta}}^4 S_{1+\vec{\delta}}^{B(n)} + \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{1+\vec{\delta}}^{B(n+1)} + \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{1+\vec{\delta}}^{B(n-1)} \right] + \beta \sum_{\vec{\delta}}^4 J_{\vec{\delta}}^F \sigma_{1+\vec{\delta}}^n \quad (3.16)$$

e

$$a_1^{A(l)} = -\beta J_s^{AF} \sum_{\vec{\delta}}^4 S_{1+\vec{\delta}}^{B(l)} - \beta J^{AF} \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{1+\vec{\delta}}^{B(l-1)} + \beta \sum_{\vec{\delta}}^4 J_{s\vec{\delta}}^F \sigma_{1+\vec{\delta}}^l \quad (3.17)$$

Portanto, substituindo o resultado Eqs. (3.15), (3.16) e (3.17) nas Eqs. (3.12), (3.13) e (3.14), obtemos

$$m_A^{(1)} = \left\langle \tanh(a_1^{A(1)}) \right\rangle \quad (3.18)$$

$$m_A^{(n)} = \left\langle \tanh(a_1^{A(n)}) \right\rangle \quad (3.19)$$

e

$$m_A^{(l)} = \left\langle \tanh(a_1^{A(l)}) \right\rangle \quad (3.20)$$

ou substituindo os coeficientes no argumento da função tangente hiperbólica ficamos

$$m_A^{(1)} = \left\langle \tanh \left[-\beta J_s^{AF} \sum_{\vec{\delta}}^4 S_{1+\vec{\delta}}^{B(1)} - \beta J^{AF} \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{1+\vec{\delta}}^{B(2)} + \beta \sum_{\vec{\delta}}^4 J_{s\vec{\delta}}^F \sigma_{1+\vec{\delta}}^1 \right] \right\rangle \quad (3.21)$$

$$m_A^{(n)} = \left\langle \tanh \left[-\beta J^{AF} \left(\sum_{\vec{\delta}}^4 S_{1+\vec{\delta}}^{B(n)} + \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{1+\vec{\delta}}^{B(n+1)} + \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{1+\vec{\delta}}^{B(n-1)} \right) + \beta \sum_{\vec{\delta}}^4 J_{\vec{\delta}}^F \sigma_{1+\vec{\delta}}^n \right] \right\rangle \quad (3.22)$$

e

$$m_A^{(l)} = \left\langle \tanh \left[-\beta J_s^{AF} \sum_{\vec{\delta}}^4 S_{1+\vec{\delta}}^{B(l)} - \beta J^{AF} \sum_{\vec{\delta}}^1 S_{1+\vec{\delta}}^{B(l-1)} + \beta \sum_{\vec{\delta}}^4 J_{s\vec{\delta}}^F \sigma_{1+\vec{\delta}}^l \right] \right\rangle \quad (3.23)$$

A equação da magnetização, dos tipos apresentadas acima, foi primeiramente deduzida por Callen (1963) [27] para o modelo de Ising de spin $\frac{1}{2}$ através da técnica da função de Green dependente de dois tempos e temperatura, e generalizada, em 1965, para o spin qualquer ($S \geq \frac{1}{2}$) por Suzuki [28] e com isso ficou conhecida na literatura por identidade de Callen-Suzuki.

Aplicando a técnica do operador diferencial (ver mais detalhes no capítulo 2) nas Eqs. (3.21), (3.22) e (3.23), ficaremos

$$m_A^{(1)} = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^4 e^{-\beta J_s^{AF} S_{1+\vec{\delta}}^{B(1)} D_x} \prod_{\vec{\delta}}^1 e^{-\beta J^{AF} S_{1+\vec{\delta}}^{B(2)} D_x} \prod_{\vec{\delta}}^4 e^{+\beta J_{s\vec{\delta}}^F \sigma_{1+\vec{\delta}}^1 D_x} \right\rangle \tanh(x)|_{x=0} \quad (3.24)$$

$$m_A^{(n)} = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^4 e^{-\beta J^{AF} S_{1+\vec{\delta}}^{B(n)} D_x} \prod_{\vec{\delta}}^1 e^{-\beta J^{AF} S_{1+\vec{\delta}}^{B(n+1)} D_x} \prod_{\vec{\delta}}^1 e^{-\beta J^{AF} S_{1+\vec{\delta}}^{B(n-1)} D_x} \prod_{\vec{\delta}}^4 e^{+\beta J_{s\vec{\delta}}^F \sigma_{1+\vec{\delta}}^n D_x} \right\rangle \tanh(x)|_{x=0} \quad (3.25)$$

e

$$m_A^{(l)} = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^4 e^{-\beta J_s^{AF} S_{1+\vec{\delta}}^{B(l)} D_x} \prod_{\vec{\delta}}^1 e^{-\beta J^{AF} S_{1+\vec{\delta}}^{B(l-1)} D_x} \prod_{\vec{\delta}}^4 e^{+\beta J_{s\vec{\delta}}^F \sigma_{1+\vec{\delta}}^l D_x} \right\rangle \tanh(x)|_{x=0} \quad (3.26)$$

Agora, usando a identidade de van der Waerden para spin $\frac{1}{2}$, isto é, $e^{\gamma S^{(n)}} = \cosh \gamma + S^{(n)} \sinh \gamma$, as Eqs. (3.24), (3.25) e (3.26) ficarão reescritas por

$$m_A^{(1)} = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^4 \left[\cosh(\beta J_s^{AF} D_x) - S_{1+\vec{\delta}}^{B(1)} \sinh(\beta J_s^{AF} D_x) \right] \prod_{\vec{\delta}}^1 \cosh(\beta J^{AF} D_x) - S_{1+\vec{\delta}}^{B(2)} \sinh(\beta J^{AF} D_x) \prod_{\vec{\delta}}^4 \left[\cosh(\beta J_{s\vec{\delta}}^F D_x) + \sigma_{1+\vec{\delta}}^1 \sinh(\beta J_{s\vec{\delta}}^F D_x) \right] \right\rangle \tanh(x)|_{x=0} \quad (3.27)$$

$$m_A^{(n)} = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^4 \left[\cosh(\beta J^{AF} D_x) - S_{1+\vec{\delta}}^{B(n)} \sinh(\beta J^{AF} D_x) \right] \prod_{\vec{\delta}}^1 \left[\cosh(\beta J^{AF} D_x) - S_{1+\vec{\delta}}^{B(n+1)} \sinh(\beta J^{AF} D_x) \right] \prod_{\vec{\delta}}^1 \left[\cosh(\beta J^{AF} D_x) - S_{1+\vec{\delta}}^{B(n-1)} \sinh(\beta J^{AF} D_x) \right] \prod_{\vec{\delta}}^4 \left[\cosh(\beta J_{s\vec{\delta}}^F D_x) + \sigma_{1+\vec{\delta}}^n \sinh(\beta J_{s\vec{\delta}}^F D_x) \right] \right\rangle \tanh(x)|_{x=0} \quad (3.28)$$

e

$$m_A^{(l)} = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^4 \left[\cosh(\beta J_s^{AF} D_x) - S_{1+\vec{\delta}}^{B(l)} \sinh(\beta J_s^{AF} D_x) \right] \prod_{\vec{\delta}}^1 \cosh(\beta J^{AF} D_x) - S_{1+\vec{\delta}}^{B(l-1)} \sinh(\beta J^{AF} D_x) \prod_{\vec{\delta}}^4 \left[\cosh(\beta J_{s\vec{\delta}}^F D_x) + \sigma_{1+\vec{\delta}}^l \sinh(\beta J_{s\vec{\delta}}^F D_x) \right] \right\rangle \tanh(x)|_{x=0} \quad (3.29)$$

Fazendo $\alpha_{SAF} = \cosh(\beta J_s^{AF} D_x)$, $\beta_{SAF} = \sinh(\beta J_s^{AF} D_x)$, $\alpha_{AF} = \cosh(\beta J^{AF} D_x)$, $\beta_{AF} = \sinh(\beta J^{AF} D_x)$, $\alpha_{SF} = \cosh(\beta J_{s\vec{\delta}}^F D_x)$, $\beta_{SF} = \sinh(\beta J_{s\vec{\delta}}^F D_x)$, $\alpha_F = \cosh(\beta J_{s\vec{\delta}}^F D_x)$, $\beta_F = \sinh(\beta J_{s\vec{\delta}}^F D_x)$, as Eqs. (3.27), (3.28) e (3.29) ficarão na forma

$$m_A^{(1)} = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^4 \left[\alpha_{SAF} - S_{1+\vec{\delta}}^{B(1)} \beta_{SAF} \right] \prod_{\vec{\delta}}^1 \left[\alpha_{AF} - S_{1+\vec{\delta}}^{B(2)} \beta_{AF} \right] \prod_{\vec{\delta}}^4 \left[\alpha_{SF} + \sigma_{1+\vec{\delta}}^1 \beta_{SF} \right] \right\rangle \tanh(x)|_{x=0} \quad (3.30)$$

$$m_A^{(n)} = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^4 \left[\alpha_{AF} - S_{1+\vec{\delta}}^{B(n)} \beta_{AF} \right] \prod_{\vec{\delta}}^1 \left[\alpha_{AF} - S_{1+\vec{\delta}}^{B(n+1)} \beta_{AF} \right] \prod_{\vec{\delta}}^4 \left[\alpha_{AF} - S_{1+\vec{\delta}}^{B(n-1)} \beta_{AF} \right] \prod_{\vec{\delta}}^4 \left[\alpha_F + \sigma_{1+\vec{\delta}}^n \beta_F \right] \right\rangle \tanh(x)|_{x=0} \quad (3.31)$$

e

$$m_A^{(l)} = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^4 \left[\alpha_{SAF} - S_{1+\vec{\delta}}^{B(l)} \beta_{SAF} \right] \prod_{\vec{\delta}}^1 \left[\alpha_{AF} - S_{1+\vec{\delta}}^{B(l-1)} \beta_{AF} \right] \prod_{\vec{\delta}}^4 \left[\alpha_{SF} + \sigma_{1+\vec{\delta}}^l \beta_{SF} \right] \right\rangle \tanh(x)|_{x=0} \quad (3.32)$$

As Eqs. (3.30), (3.31) e (3.32) são de difíceis manipulações matemática, que envolvem funções de correlações de multi-spins, e para tratar as correlações de forma exata é muito difícil (exceto para a cadeia linear), pois precisamos resolver um conjunto infinito de equações acopladas. Nesta linha de trabalho, o formalismo se depara com um problema de muitos corpos, que depende de uma aproximação para o desacoplamento.

Considerando a aproximação, onde todas as correlações de muitos spins são desacopladas, correspondendo a aproximação de Zermite [29], ou seja,

$$\langle S_i \sigma_j \dots S_n \rangle \simeq \langle S_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \dots \langle S_n \rangle \quad (i \neq j \neq \dots \neq n) \quad (3.33)$$

As equações das magnetizações poderão ser reescrita por:

$$m_A^{(1)} = \left(\alpha_{SAF} - m_B^{(1)} \beta_{SAF} \right)^4 \left(\alpha_{AF} - m_B^{(2)} \beta_{AF} \right) \left(\alpha_{SF} + m_0^{(1)} \beta_{SF} \right)^4 \tanh(x)|_{x=0} \quad (3.34)$$

$$m_A^{(n)} = \left(\alpha_{AF} - m_B^{(n)} \beta_{AF} \right)^4 \left(\alpha_{AF} - m_B^{(n+1)} \beta_{AF} \right) \left(\alpha_{AF} - m_B^{(n-1)} \beta_{AF} \right) \left(\alpha_F + m_0^{(n)} \beta_F \right)^4 \tanh(x)|_{x=0} \quad (3.35)$$

e

$$m_A^{(l)} = \left(\alpha_{SAF} - m_B^{(l)} \beta_{SAF} \right)^4 \left(\alpha_{AF} - m_B^{(l-1)} \beta_{AF} \right) \left(\alpha_{SF} + m_0^{(l)} \beta_{SF} \right)^4 \tanh(x)|_{x=0} \quad (3.36)$$

onde foi usado o fato que $\langle S_i^{B(l)} \rangle = m_B^{(l)}$, $\langle S_i^{B(l+1)} \rangle = m_B^{(l+1)}$, $\langle \sigma_i^l \rangle = m_0^{(l)}$, $\langle S_i^{A(n)} \rangle = m_A^{(n)}$, $\langle S_i^{A(n+1)} \rangle = m_A^{(n+1)}$, $\langle S_i^{A(n-1)} \rangle = m_A^{(n-1)}$ e $\langle \sigma_i^n \rangle = m_0^{(n)}$, na qual a magnetização do spin decorador é dada por

$$m_0^{(1,l)} = \left(\alpha_{SF} + m_A^{(1,l)} \beta_{SF} \right) \left(\alpha_{SF} + m_B^{(1,l)} \beta_{SF} \right) \quad (3.37)$$

e

$$m_0^{(n)} = \left(\alpha_F + m_A^{(n)} \beta_F \right) \left(\alpha_F + m_B^{(n)} \beta_F \right)$$

Fazendo a média configuracional das Eqs. (3.34), (3.35) e (3.36), ficaremos

$$m_A^{(1)} = \left(\alpha_{SAF} - m_B^{(1)} \beta_{SAF} \right)^4 \left(\alpha_{AF} - m_B^{(2)} \beta_{AF} \right) \left(\bar{\alpha}_{SF} + m_0^{(1)} \bar{\beta}_{SF} \right)^4 \tanh(x)|_{x=0} \quad (3.38)$$

$$m_A^{(n)} = \left(\alpha_{AF} - m_B^{(n)} \beta_{AF} \right)^4 \left(\alpha_{AF} - m_B^{(n+1)} \beta_{AF} \right) \left(\alpha_{AF} - m_B^{(n-1)} \beta_{AF} \right) \left(\bar{\alpha}_F + m_0^{(n)} \bar{\beta}_F \right)^4 \tanh(x)|_{x=0} \quad (3.39)$$

e

$$m_A^{(l)} = \left(\alpha_{SAF} - m_B^{(l)} \beta_{SAF} \right)^4 \left(\alpha_{AF} - m_B^{(l-1)} \beta_{AF} \right) \left(\bar{\alpha}_{SF} + m_0^{(l)} \bar{\beta}_{SF} \right)^4 \tanh(x)|_{x=0} \quad (3.40)$$

sendo

$$m_0^{(1)} = \left[\bar{\alpha}_{SF}^2 + \bar{\alpha}_{SF} \bar{\beta}_{SF} \left(m_A^{(1)} + m_B^{(1)} \right) + m_A^{(1)} m_B^{(1)} \bar{\beta}_{SF}^2 \right] \tanh(x)|_{x=0} \quad (3.41)$$

$$m_0^{(n)} = \left[\bar{\alpha}_F^2 + \bar{\alpha}_F \bar{\beta}_F \left(m_A^{(n)} + m_B^{(n)} \right) + m_A^{(n)} m_B^{(n)} \bar{\beta}_F^2 \right] \tanh(x)|_{x=0} \quad (3.42)$$

$$m_0^{(l)} = \left[\bar{\alpha}_{SF}^2 + \bar{\alpha}_{SF} \bar{\beta}_{SF} \left(m_A^{(l)} + m_B^{(l)} \right) + m_A^{(l)} m_B^{(l)} \bar{\beta}_{SF}^2 \right] \tanh(x)|_{x=0} \quad (3.43)$$

Na ausência de campo externo atuando sobre o filme, podemos assumir as seguintes condições de contorno:

$$\begin{cases} m_0^{(n)} = 0 \\ m_B^{(n)} = -m_A^{(n)} \end{cases}, n = 1, 2, \dots, L \quad (3.44)$$

Assim, as Eqs. (3.38), (3.39) e (3.40) ficarão

$$m_A^{(1)} = \left(\alpha_{SAF} + m_A^{(1)} \beta_{SAF} \right)^4 \left(\alpha_{AF} + m_A^{(2)} \beta_{AF} \right) \bar{\alpha}_{SF}^4 \tanh(x)|_{x=0} \quad (3.45)$$

$$m_A^{(n)} = \left(\alpha_{AF} + m_A^{(n)} \beta_{AF} \right)^4 \left(\alpha_{AF} + m_A^{(n+1)} \beta_{AF} \right) \left(\alpha_{AF} + m_A^{(n-1)} \beta_{AF} \right) \bar{\alpha}_F^4 \tanh(x)|_{x=0} \quad (3.46)$$

e

$$m_A^{(l)} = \left(\alpha_{SAF} + m_A^{(l)} \beta_{SAF} \right)^4 \left(\alpha_{AF} + m_A^{(l-1)} \beta_{AF} \right) \bar{\alpha}_{SF}^4 \tanh(x)|_{x=0} \quad (3.47)$$

Desenvolvendo as multiplicações das Eqs. (3.45), (3.46) e (3.47), e usando o fato de que um operador funcional par vezes a função ímpar $\tanh(x)$ irá dar um termo igual a zero. Portanto, as expressões acima ficarão reduzidas nas formas

$$m_A^{(1)} = \left(4\alpha_{SAF}^3 \beta_{SAF} \alpha_{AF} \bar{\alpha}_{SF}^4 m_A^{(1)} + \alpha_{SAF}^4 \beta_{AF} \bar{\alpha}_{SF}^4 m_A^{(2)} \right) \tanh(x)|_{x=0} \quad (3.48)$$

$$m_A^{(n)} = \left(4\alpha_{AF}^5 \beta_{AF} \bar{\alpha}_F^4 m_A^{(n)} + \alpha_{AF}^5 \beta_{AF} \bar{\alpha}_F^4 m_A^{(n+1)} + \alpha_{AF}^5 \beta_{AF} \bar{\alpha}_F^4 m_A^{(n-1)} \right) \tanh(x)|_{x=0} \quad (3.49)$$

e

$$m_A^{(l)} = \left(4\alpha_{SAF}^3 \beta_{SAF} \alpha_{AF} \bar{\alpha}_{SF}^4 m_A^{(l)} + \alpha_{SAF}^4 \beta_{AF} \bar{\alpha}_{SF}^4 m_A^{(l-1)} \right) \tanh(x)|_{x=0} \quad (3.50)$$

Definimos os coeficientes

$$\begin{aligned} A_{11} &= 4\alpha_{SAF}^3 \beta_{SAF} \alpha_{AF} \bar{\alpha}_{SF}^4 \tanh(x)|_{x=0} \\ A_{12} &= \alpha_{SAF}^4 \beta_{AF} \bar{\alpha}_{SF}^4 \tanh(x)|_{x=0} \\ A &= 4\alpha_{AF}^5 \beta_{AF} \bar{\alpha}_F^4 \tanh(x)|_{x=0} \\ B &= \alpha_{AF}^5 \beta_{AF} \bar{\alpha}_F^4 \tanh(x)|_{x=0} \end{aligned} \quad (3.51)$$

ficaremos

$$\left\{ \begin{array}{l} m_A^{(1)} = A_{11}m_A^{(1)} + A_{12}m_A^{(2)} \\ m_A^{(2)} = Am_A^{(2)} + Bm_A^{(3)} + Bm_A^{(1)} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ m_A^{(n)} = Am_A^{(n)} + Bm_A^{(n+1)} + Bm_A^{(n-1)} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ m_A^{(l)} = A_{11}m_A^{(l)} + A_{12}m_A^{(l+1)} \end{array} \right. \quad (3.52)$$

ou ainda

$$\left\{ \begin{array}{l} (A_{11} - 1)m_A^{(1)} + A_{12}m_A^{(2)} = 0 \\ Bm_A^{(1)} + (A - 1)m_A^{(2)} + Bm_A^{(3)} = 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ Bm_A^{(n-1)} + (A - 1)m_A^{(n)} + Bm_A^{(n+1)} = 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ (A_{11} - 1)m_A^{(l)} + A_{12}m_A^{(l+1)} = 0 \end{array} \right. \quad (3.53)$$

Definindo os coeficientes normalizados

$$\begin{aligned} a &= \frac{A_{11} - 1}{A_{12}} \\ b &= \frac{A - 1}{B}, \end{aligned} \quad (3.54)$$

ficaremos

$$\left\{ \begin{array}{l} am_A^{(1)} + m_A^{(2)} + 0m_A^{(3)} + 0m_A^{(4)} + \dots + 0m_A^{(l)} = 0 \\ m_A^{(1)} + bm_A^{(2)} + m_A^{(3)} + 0m_A^{(4)} + \dots + 0m_A^{(l)} = 0 \\ 0m_A^{(1)} + m_A^{(2)} + bm_A^{(3)} + m_A^{(4)} + \dots + 0m_A^{(l)} = 0 \\ \dots \\ 0m_A^{(1)} + 0m_A^{(2)} + \dots + m_A^{(l-1)} + am_A^{(l)} = 0 \end{array} \right. \quad (3.55)$$

Podemos reescrever ainda na forma matricial

$$\begin{pmatrix} a & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 1 & b & 1 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 1 & b & 1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & b & 1 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 1 & a \end{pmatrix}_l \begin{pmatrix} m_A^{(1)} \\ m_A^{(2)} \\ m_A^{(3)} \\ m_A^{(4)} \\ \dots \\ m_A^{(l)} \end{pmatrix}_l = 0$$

ou

$$A_l M_l = 0 \quad (3.56)$$

onde A_l é uma matriz formada pelos coeficientes a e b , e M_l é uma matriz coluna das magnetizações de cada camada.

Os valores críticos são encontrados assim como procedemos no capítulo 2, usando as Eqs. (2.48), (2.52), (2.54), e os coeficientes dado por Eq. (3.54).

A seguir iremos discutir os diagramas de fase considerando a rede cúbica simples na forma de filme fino.

3.3 Resultados e Discussão

Neste subitem, investigamos os diagramas de fase do composto supercondutor em altas temperaturas (fase isolante) $La_{2-x}Ba_xCuO_4$ na forma de filme de tamanho $l = 2$ a $l = 10$. Para isto, utilizamos o modelo e método descrito no subitem 3.2, na qual apresenta o modelo de Ising aleatoriamente decorado. Simulamos a interação cobre-cobre numa rede cúbica simples antiferromagnética onde entre os vértices da rede colocou-se um spin decorador aleatoriamente

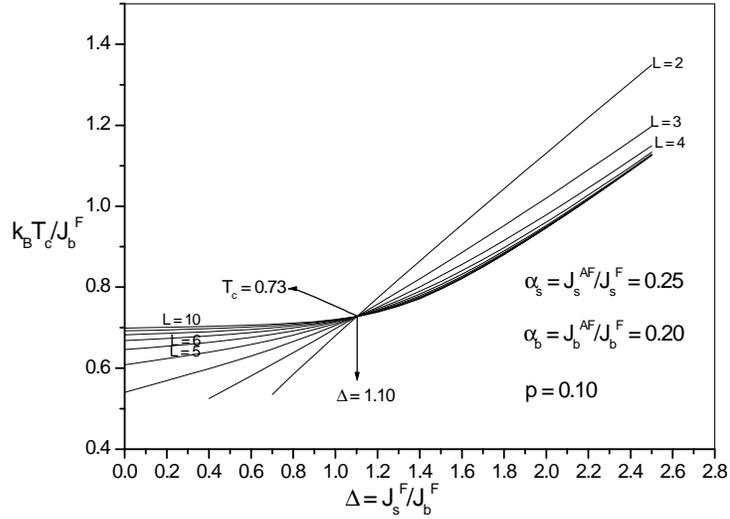


Figura 3.2: Temperatura crítica versus Δ com frustração ($\alpha_s > \alpha_b$).

distribuído, simulou-se, também, o íon de oxigênio no plano de cobre-oxigênio interagindo ferromagneticamente com os íons de cobre que provoca o fenômeno de frustração. Para isto, utilizamos a técnica do operador diferencial (capítulo 2 e subitem 2.2).

Através dos diagramas de fase $T_c \times \Delta$ (Figuras 3.2 e 3.3), onde $\Delta = J_s^F / J_b^F$ que representa a relação de interação da energia ferromagnética da superfície com o *bulk* e T_c é a temperatura crítica. É possível notar um ponto multicrítico $\Delta = \Delta_c$ que corresponde ao caso em que tanto a superfície quanto o *bulk* estão ordenados a um dado valor de concentração e valores para os parâmetros de frustrações $\alpha_s = J_s^{AF} / J_s^F$ (parâmetro de frustração da superfície) e $\alpha_b = J_b^{AF} / J_b^F$ (parâmetro de frustração do *bulk*).

Na Figura 3.2, para $p = 0,10$, $\alpha_s = 0,25$ e $\alpha_b = 0,20$, encontramos $\Delta = \Delta_c = 1,10$ e $T_c = 0,73$. Para valores $\Delta < \Delta_c$ o sistema apresenta-se com *bulk* ordenado e a superfície desordenada, isto significa que a temperatura do *bulk* (T_c^b) é maior que a temperatura de superfície (T_c^s), no entanto, para $\Delta > \Delta_c$ a superfície está ordenada e o *bulk* desordenado, isto é, $T_c^b < T_c^s$.

Para $\alpha_s < \alpha_b$ (Figura 3.3), verificamos que Δ_c e T_c aumentam para encontramos uma

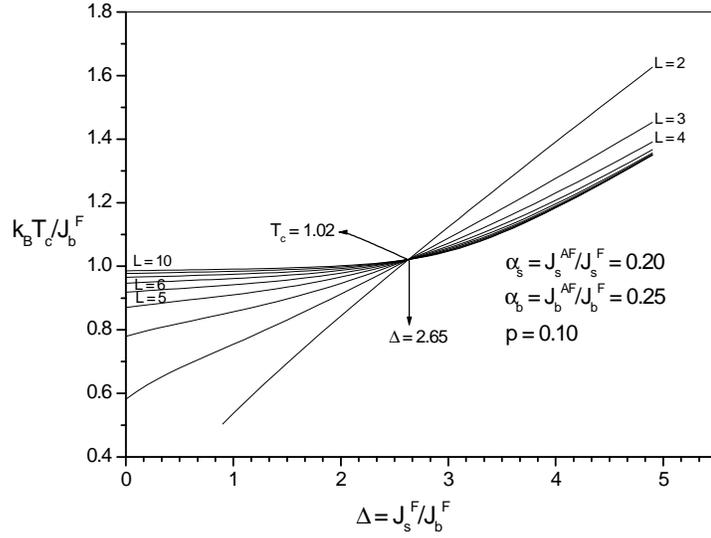


Figura 3.3: Temperatura crítica versus Δ , para $\alpha_s < \alpha_b$.

ordenação tanto no *bulk* como na superfície. Quanto mais frustrado o *bulk* maior será o valor do ponto multicrítico para uma concentração fixa.

Nas Figuras 3.4 e 3.5, apresentamos o comportamento da temperatura crítica T_c em função do número l de camadas, verificamos que para $l > 10$ o sistema tende a ordena-se, quando $l \rightarrow \infty$, $\Delta > \Delta_c$ e a temperatura tende a temperatura do *bulk*, caracterizando o ordenamento da superfície e desordem do *bulk*. Para $l \leq 10$ e $\Delta < \Delta_c$, a temperatura crítica T_c , tende a temperatura do *bulk*, quando aumentamos o número de camadas, significando um ordenamento do *bulk* e desordem da superfície. A temperatura do *bulk* vai depender de quanto o *bulk* esta mais frustrado.

Na Figura 3.6, analisamos o parâmetro Δ em função da frustração (α), verificamos um valor máximo do parâmetro de frustração $\alpha \cong 0,20$, abaixo deste valor observamos que o parâmetro Δ aumenta devido a frustração e acima deste ponto ($\alpha \cong 0,20$) o parâmetro Δ diminui. No entanto, na Figura 3.7, observamos o comportamento do parâmetro Δ com relação o parâmetro de frustração da superfície (α_s) a uma concentração de $p = 0,10$. O resultado mostra que o parâmetro delta diminui exponencialmente com o aumento da frustração na

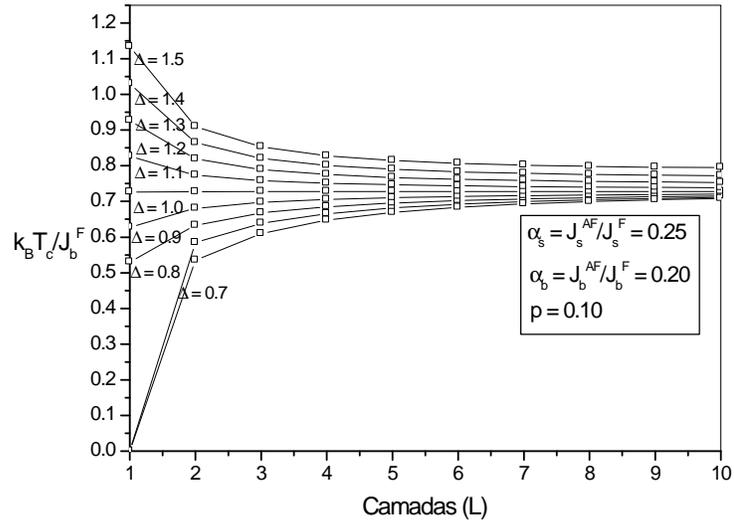


Figura 3.4: Temperatura crítica T_c em função do número de camadas l com frustração ($\alpha_s > \alpha_b$).

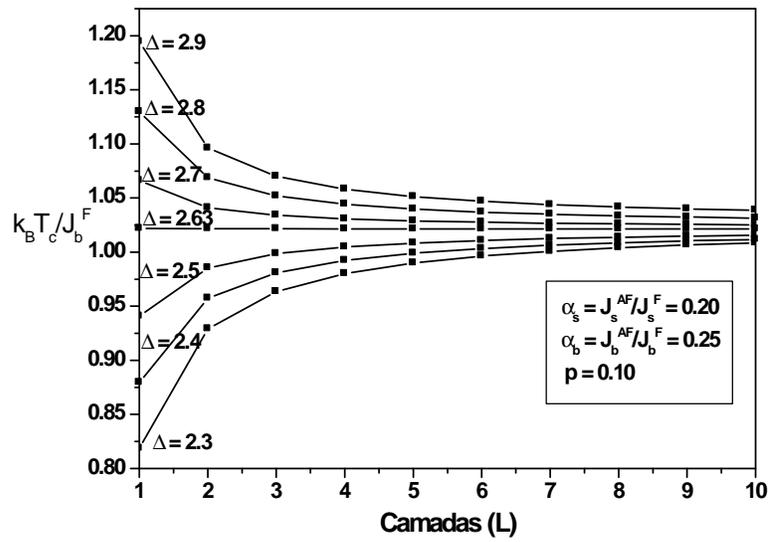


Figura 3.5: Temperatura crítica T_c em função do número de camadas l com frustração ($\alpha_s < \alpha_b$).

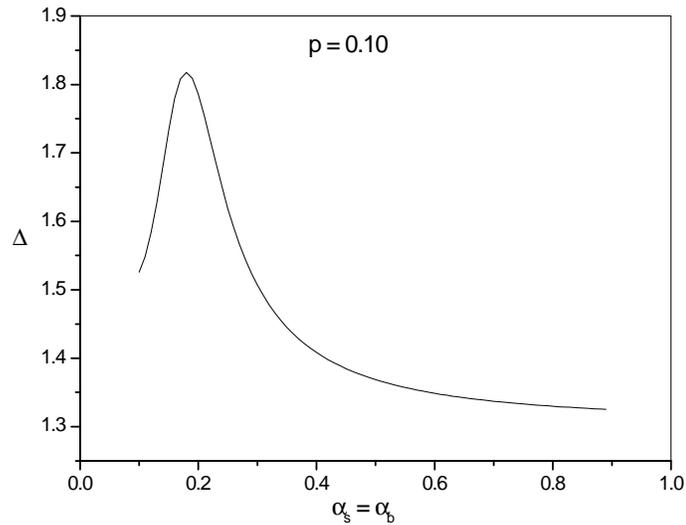


Figura 3.6: Parâmetro Δ em função da frustração.

superfície. Porém, na Figura 3.8, notamos que o parâmetro delta aumenta linearmente com o parâmetro de frustração do *bulk* (α_b). Os resultados das Figuras 3.7 e 3.8 ocorrem quando $\alpha_s > \alpha_b$ e o da Figura 3.6 quando $\alpha_s = \alpha_b$.

Analisamos nas Figuras 3.9 a 3.17 a temperatura crítica (T_c) em função da concentração (p) para cada camada do filme fino. Notamos que temos uma concentração crítica $p_c = 0,18$. Para $p < p_c$ e para vários valores de Δ existe uma variação proporcional a temperatura crítica T_c . Para $p > p_c$, verificamos que para qualquer valor de Δ , $T \rightarrow 0$.

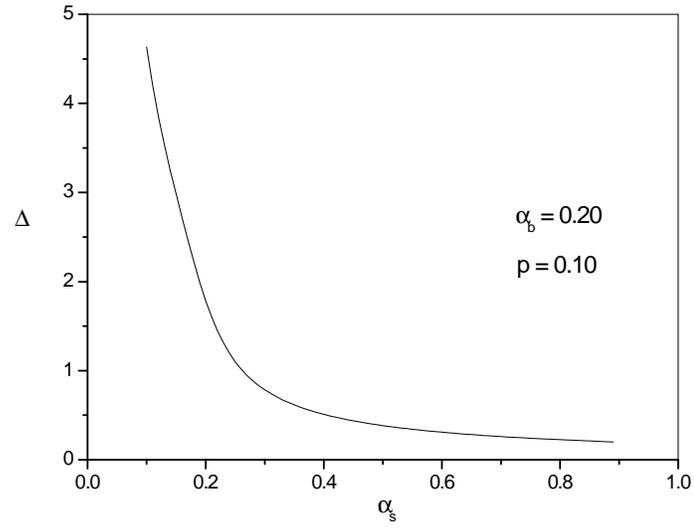


Figura 3.7: Parâmetro Δ em função da frustração na superfície.

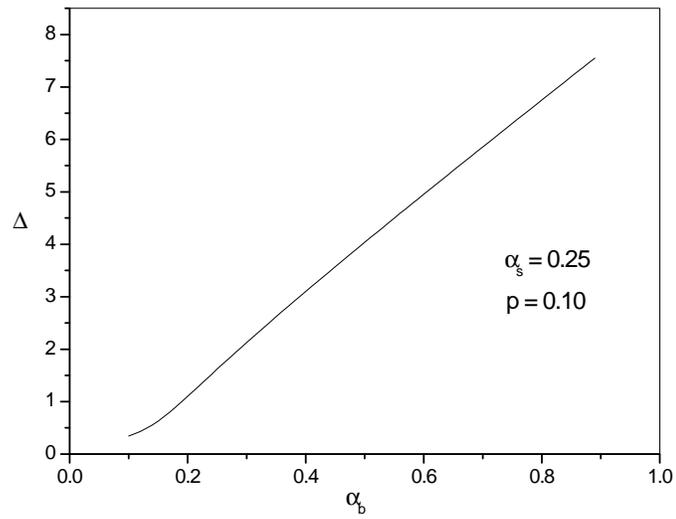


Figura 3.8: Parâmetro Δ em função da frustração no *bulk*.

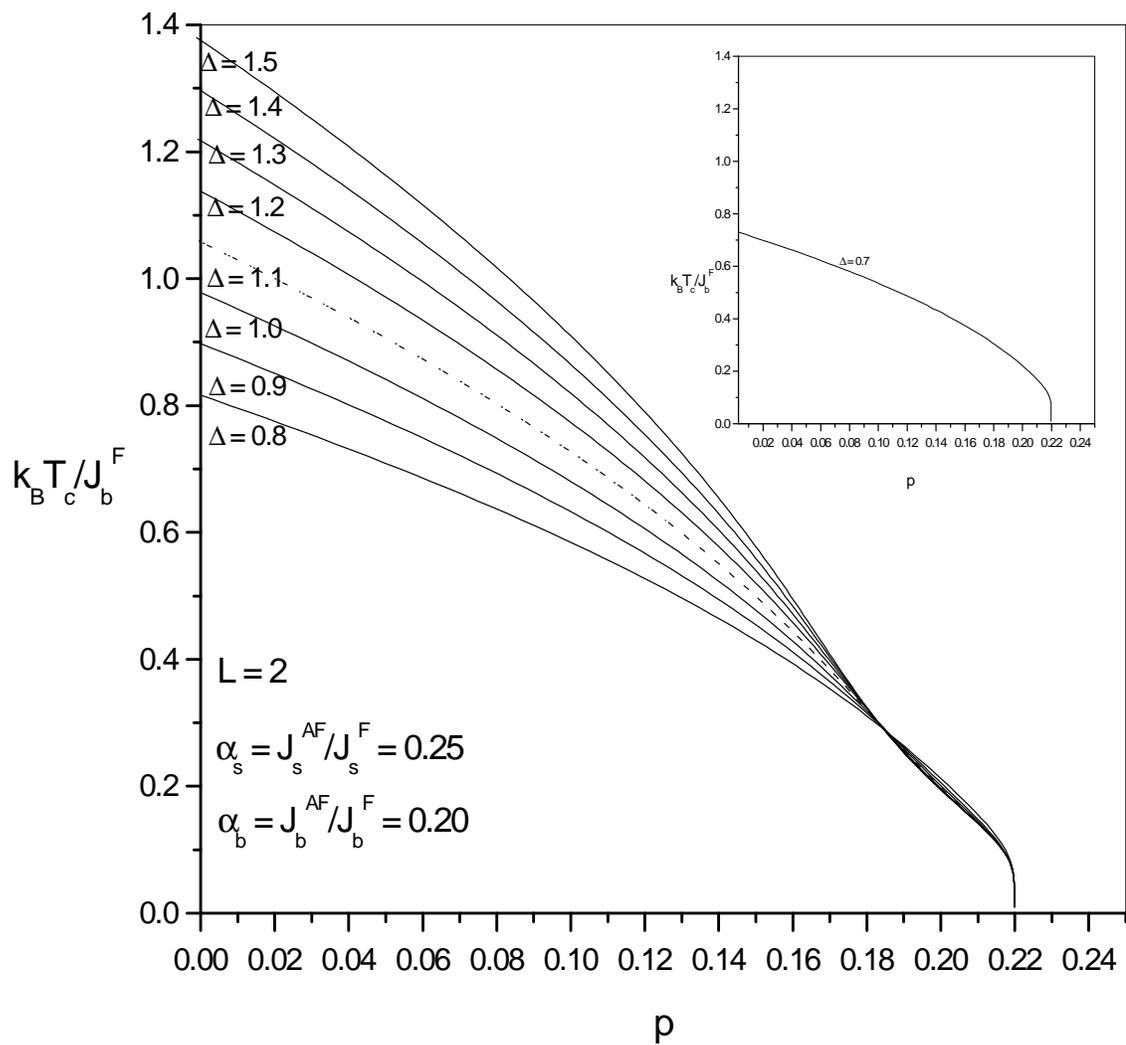


Figura 3.9: Temperatura crítica em função da concentração para camada $l = 2$.

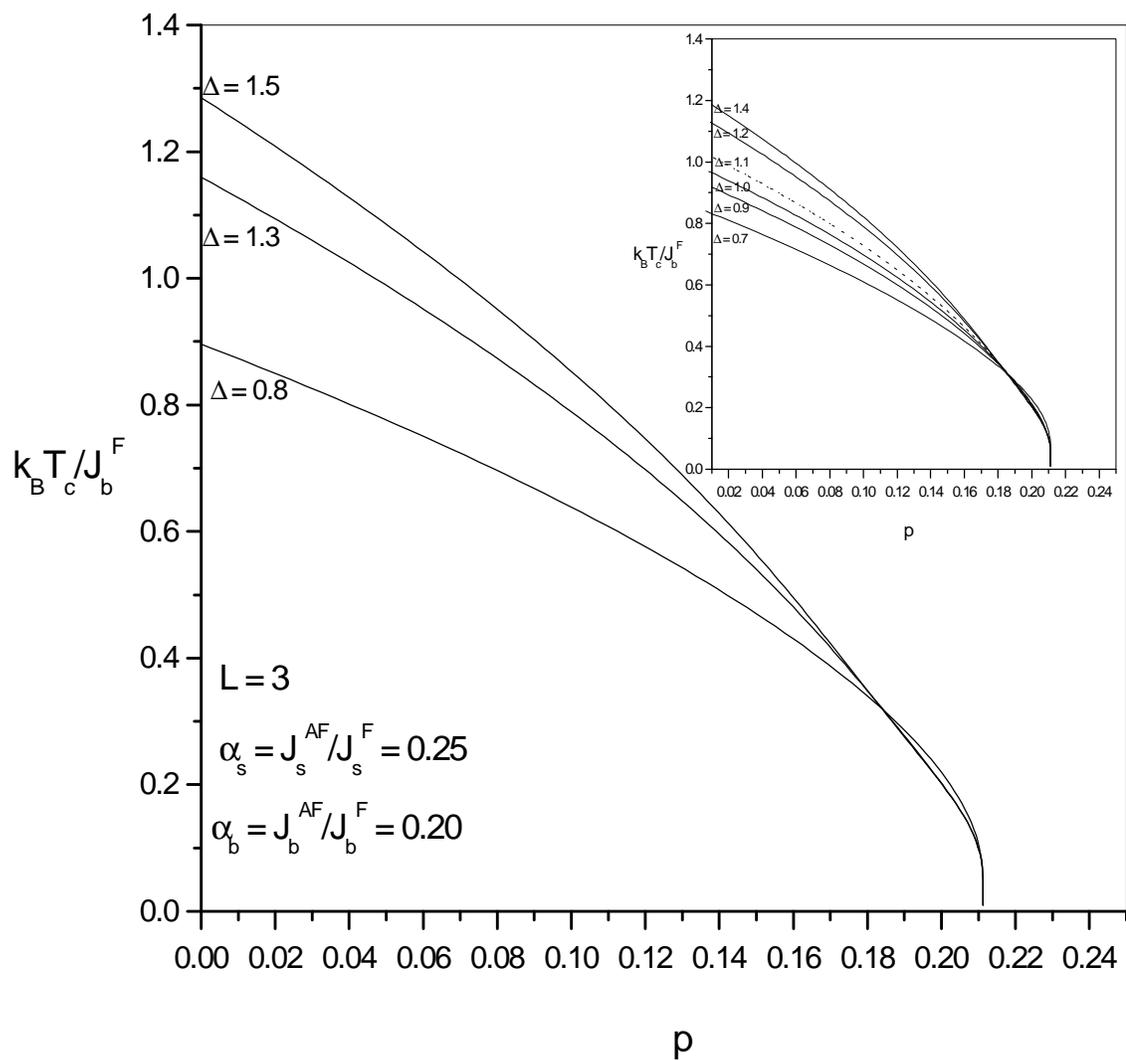


Figura 3.10: Temperatura crítica em função da concentração para camada $l = 3$.

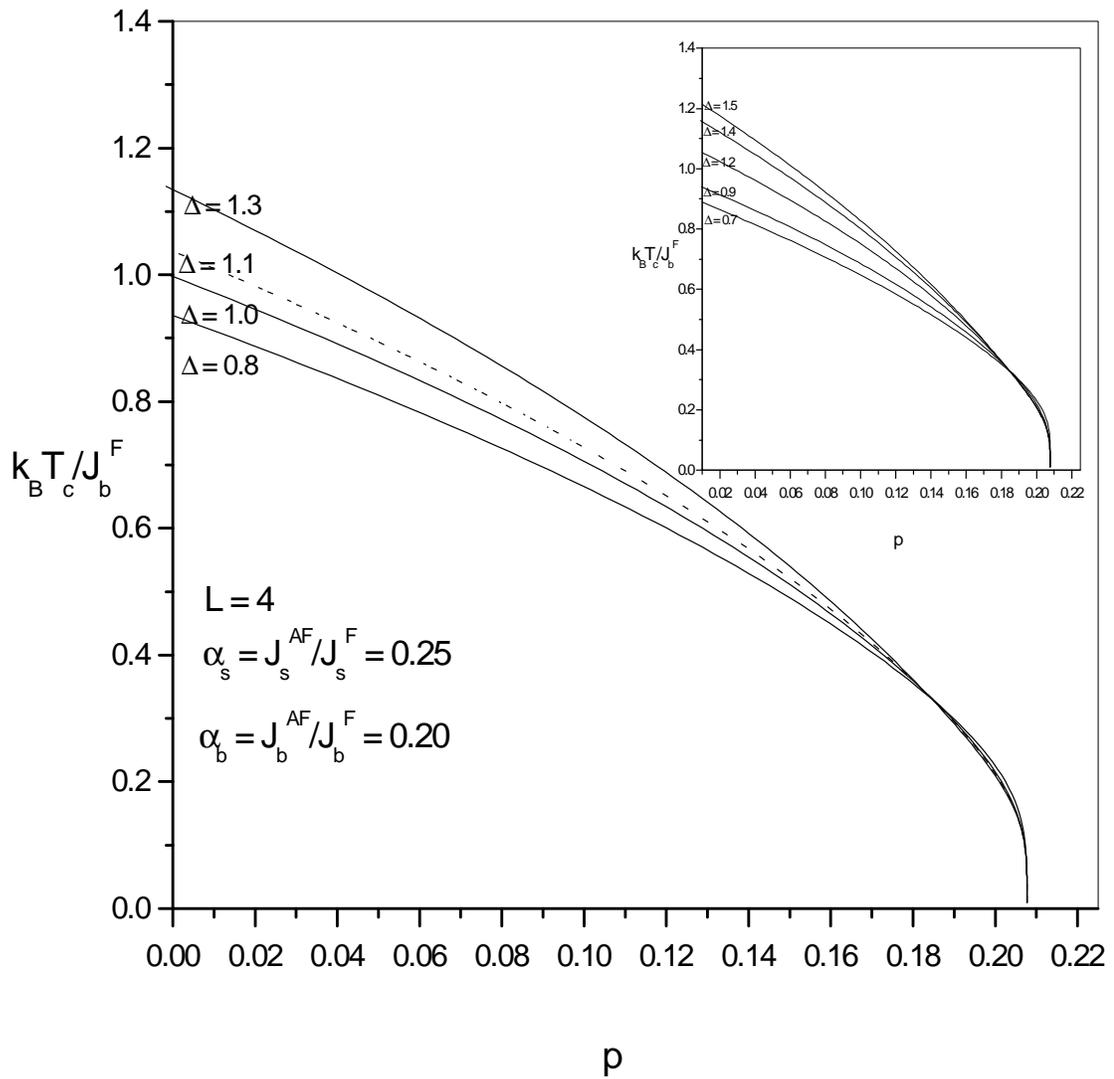


Figura 3.11: Temperatura crítica em função da concentração para camada $l = 4$.

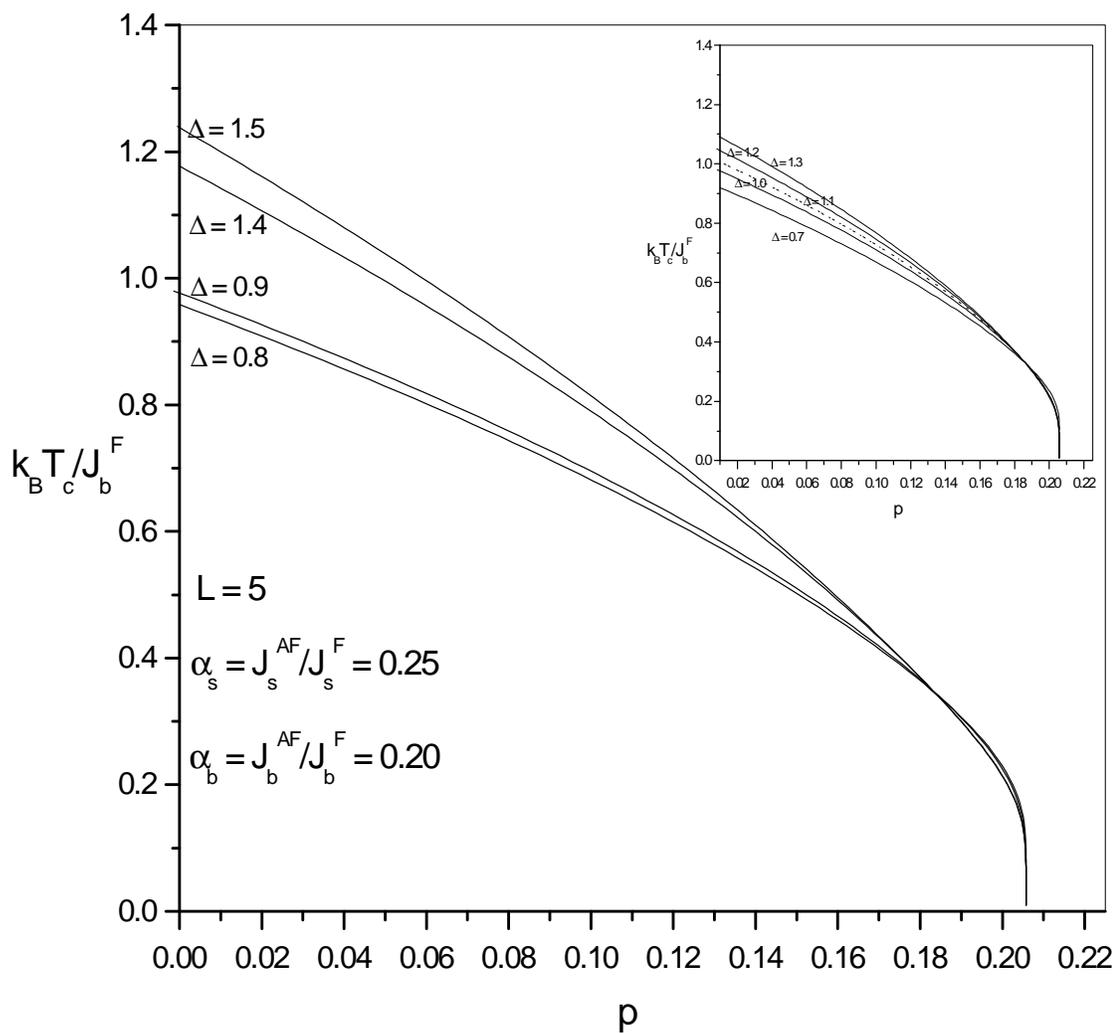


Figura 3.12: Temperatura crítica em função da concentração para camada $l = 5$.

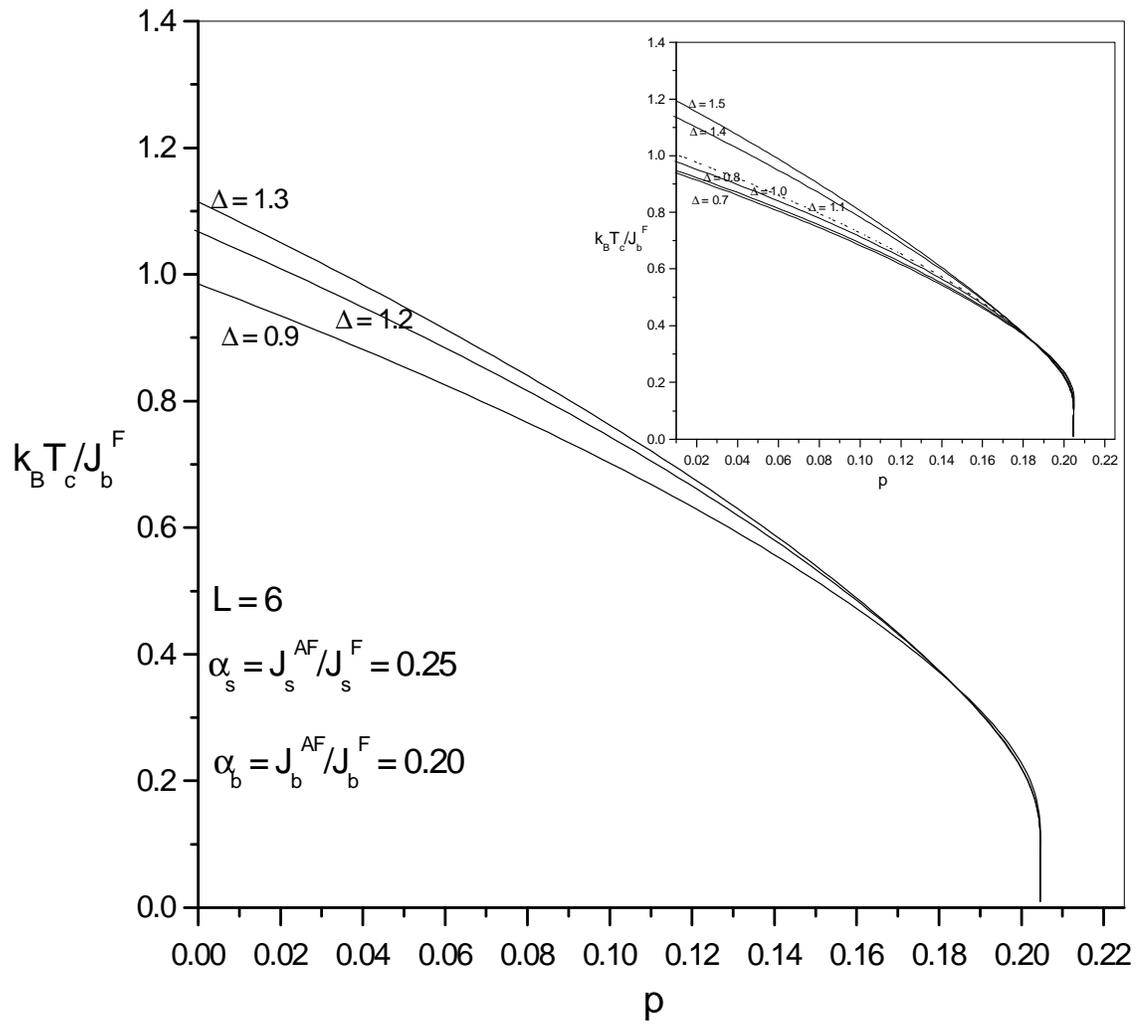


Figura 3.13: Temperatura crítica em função da concentração para camada $l = 6$.

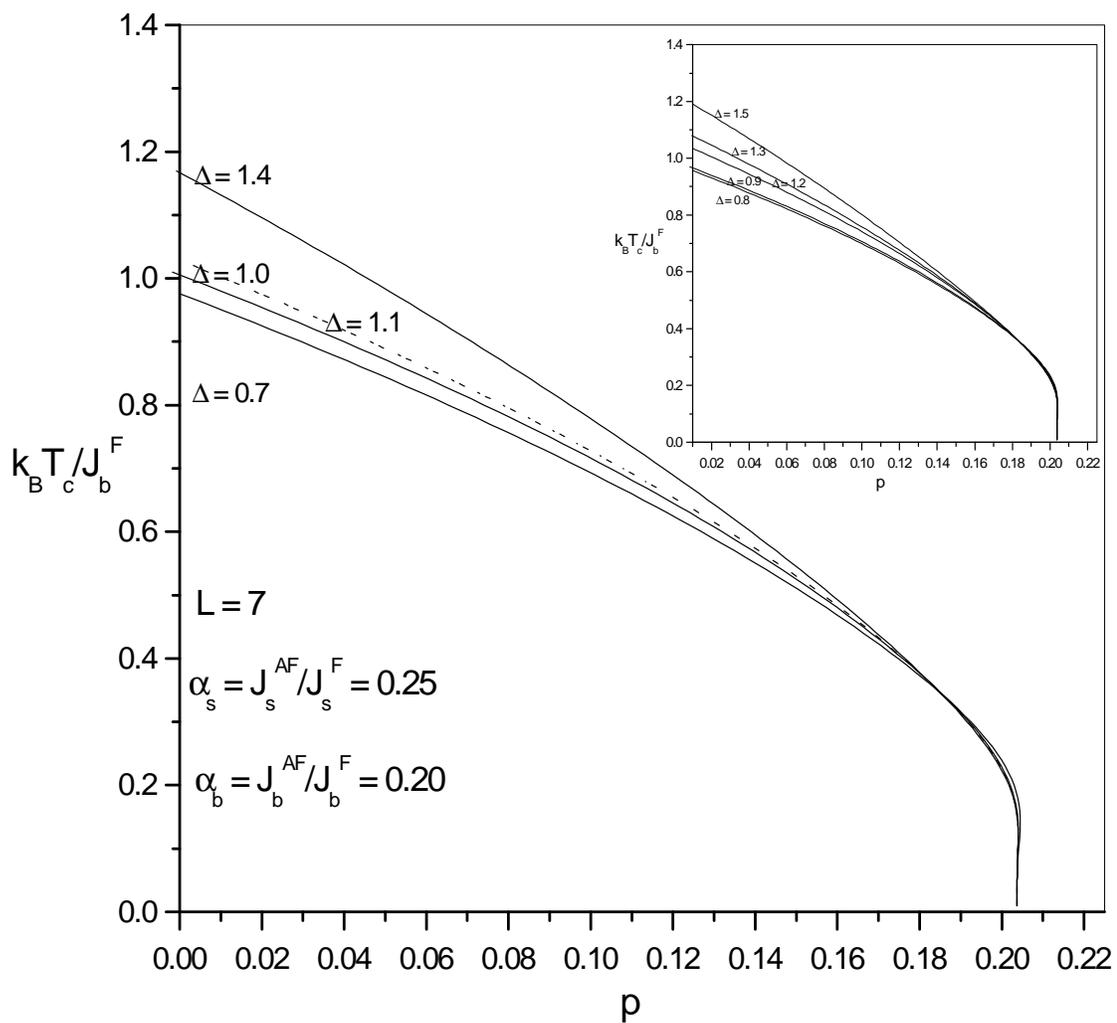


Figura 3.14: Temperatura crítica em função da concentração para camada $l = 7$.

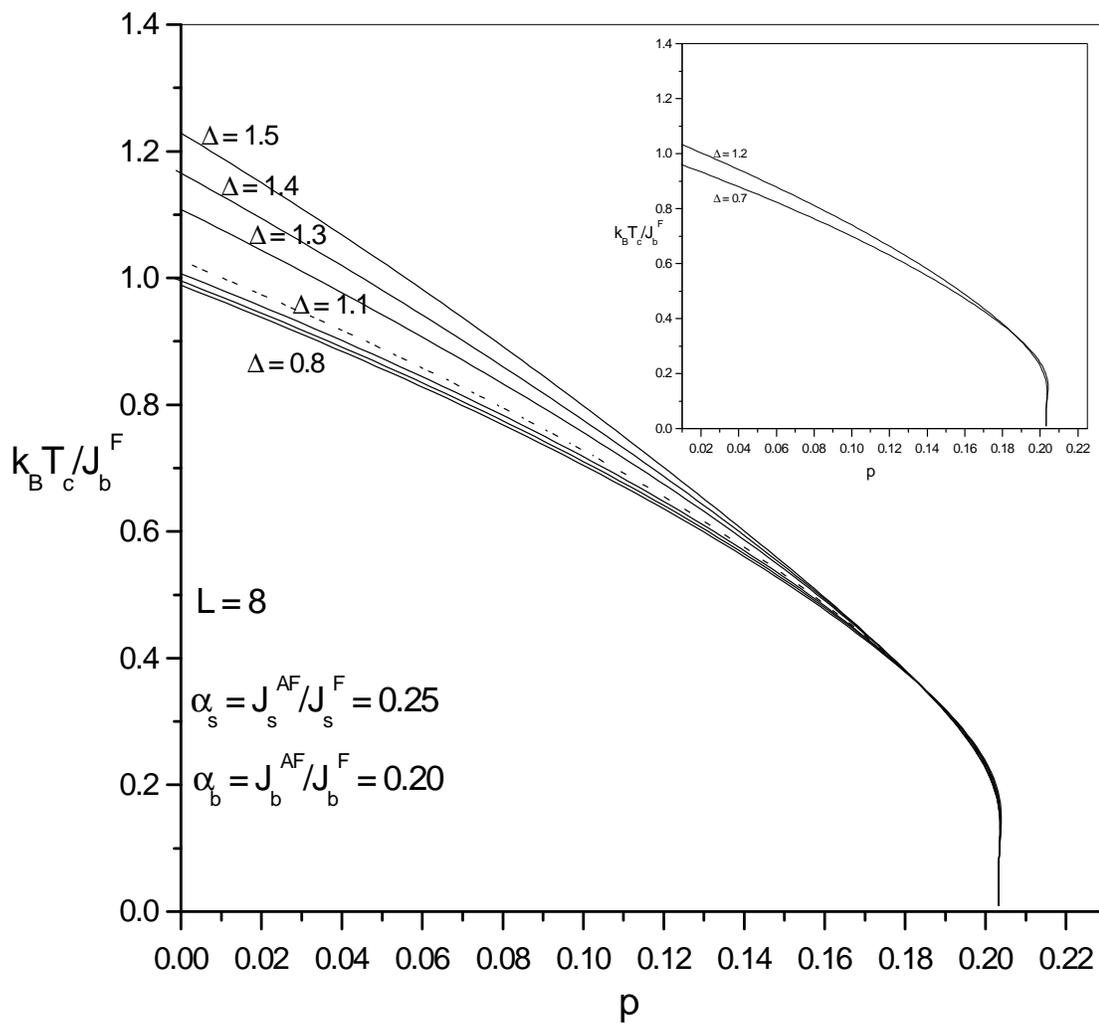


Figura 3.15: Temperatura crítica em função da concentração para camada $l = 8$.

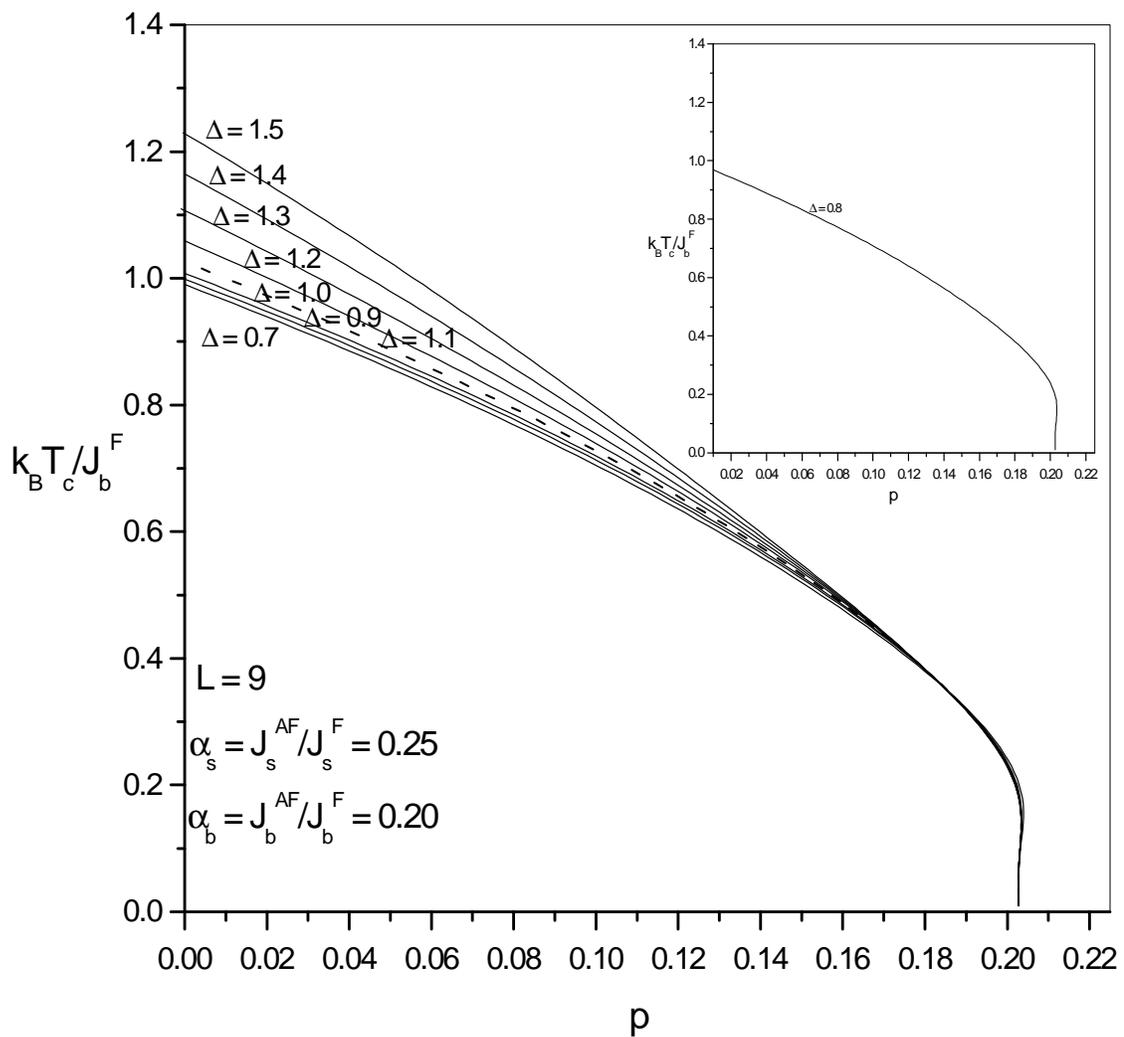


Figura 3.16: Temperatura crítica em função da concentração para camada $l = 9$.

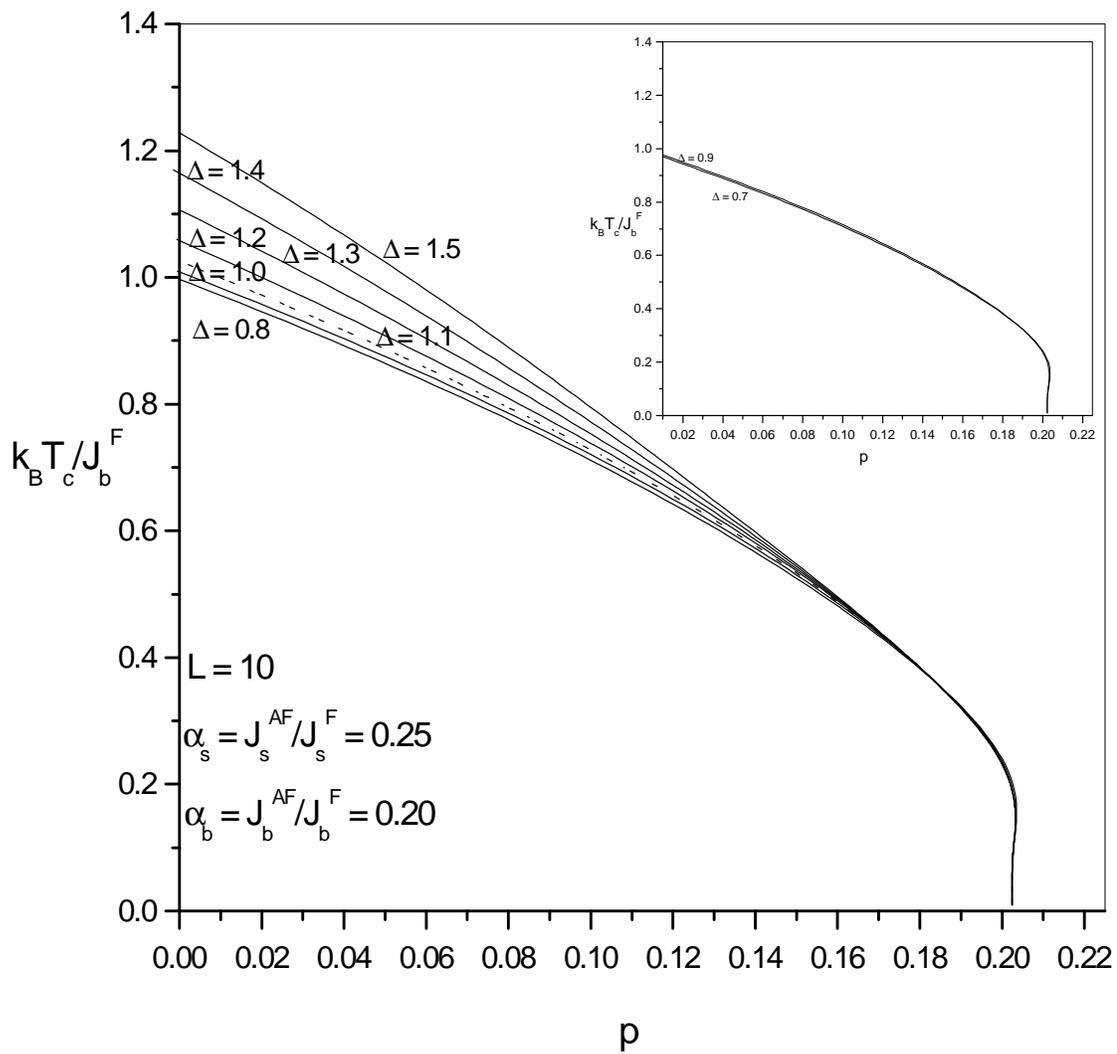


Figura 3.17: Temperatura crítica em função da concentração para camada $l = 10$.

Referências

- [1] Stinchcombe, R.B., *Phase Transitions and Critical Phenomena*, vol.7, editado por Domb,C., Lebowitz, J. L. Academic Press, 1983.
- [2] Sato, H, Arrott, A., Kikuchi, R., *J. Phys. Chem. Solids* **10**, 19 (1959).
- [3] Elliott, R.J., *J. Phys. Chem. Solids* **16**, 165 (1960).
- [4] Samart, J. S., *J. Phys. Chem. Solids* **16**, 169 (1960).
- [5] Elliott, R. J., Heap, B. R., Morgan, D. J., Rushbrooke, G.S., *Phys. Rev. Lett.* **5**, 366 (1960); Morgan, D. J., Rushbrooke, *Mol. Phys.* **4**, 291 (1963); *ibid* **6**, 477 (1966); Rushbrooke, G. S., Morgan, D. J., *Mol. Phys.* **4**, 1 (1961).
- [6] Domb, C., Sykes, M. F., *Phys. Rev.* **122**, 77 (1961).
- [7] Hammersley, J. M., Math, J., *Phys.* **2**, 728 (1961).
- [8] Stauffer, D., *Z. Phys. B* **22**, 161 (1975).
- [9] Lubensky, T. C., *Phys. Rev. B* **15**, 311 (1977).
- [10] Au-Yang, H., Fisher, M. E., Ferdinand, A. E., *Phys. Rev. B* **13**, 1238 (1976); Longa L., Konior, J., *Acta Phys. Polonica A* **59**, 223 (1981).
- [11] Harris, A. B., *J. Phys. C* **7**, 1671 (1974).
- [12] Yoshimory, A., *J. Phys. Soc. Jpn.* **14**, 807 (1959); Nagamiya, T., Nagatar, K., Kitano, Y., *Progr. Theor. Phys.* **27**, 1253 (1962); Hurd, C. M., *Contemp. Phys.* **23**, 469 (1982).
- [13] Toulouse, G., *Comm. Phys.* **2**, 115 (1977).

- [14] Anderson, P. W., *Condensed Matter* (1979), Amsterdam North Holland.
- [15] Syozi, I., *Progr. Theor. Phys.* **6**, 306 (1951).
- [16] Naya, S., *Progr. Theor. Phys.* **11**, 53 (1954).
- [17] Syozi, I., *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Domb and Green, V. 1, Cap.7, Academic Press (1972).
- [18] Fittipaldi, J. P., de Sousa, J. R., dos Santos, R. J. V., *J. Magn. Magn. Mater* **104-107**, 279 (1992).
- [19] de Sousa, J. R., Araújo, I. G., *J. Magn. Magn. Mater* **219**, 355 (2000).
- [20] Tavares, I. P., *Estudo das propriedades termodinâmica do modelo de Ising aleatoriamente decorado com interações competitivas*, dissertação de mestrado, DF-UFAM (2006).
- [21] Kaneyoshi, T., *Physica A* **229**, 166 (1996); *ibid* **303**, 507 (2002); Dakhama, A., *Physica A* **252**, 225 (1998).
- [22] Kaneyoshi, T., *J. Magn. Magn. Mater* **162**, 21 (1996).
- [23] Kaneyoshi, T., Shim, S., Maeno, T., *Physica A* **262**, 441 (1999).
- [24] Kaneyoshi, T., Shim, S., *Physica A* **278**, 1 (2000).
- [25] Saber, M., Ainame, A., Dujardin, F., Stebe, B., *Phys. Rev. B* **59**, 6908 (1999). Ver também, Cabral Neto, J., de Sousa, J. R., *J. Magn. Magn. Mater.* **268**, 298 (2004).
- [26] Honmura, R., Kaneyoshi, T., *J. Phys. C* **12**, 3979 (1979).
- [27] Callen, H. B., *Phys. Lett.* **4**, **161** (1963)
- [28] Suzuki, M., *Phys. Lett.* **19**, **267** (1965)
- [29] Zernike, F., *Physica (Utrecht)* **1**, **565**, (1940).

Capítulo IV

Conclusão

Neste trabalho estudamos a dependência da temperatura crítica com o tamanho do filme, a razão de interação de troca na superfície e no *bulk* levando em consideração o parâmetro de frustração α e da concentração de buracos. Todos os cálculos numéricos foram desenvolvidos com o uso de métodos para obtenção de raízes de um sistema não linear de equações, em particular usamos o método de Newton-Rapson e método da biseção.

Verificamos que o efeito de superfície é menos predominante do que no *bulk* quando o parâmetro delta é menor que o parâmetro multicrítico, ou seja a superfície está fracamente acoplada ao *bulk*, enquanto que, quando o parâmetro delta é maior que o parâmetro multicrítico temos um fortalecimento magnético da superfície, demonstrando que o efeito de superfície é predominante. A medida que crescemos o número de camadas do filme, há uma diminuição dos efeitos de superfície, mostrando assim que a temperatura crítica aproxima-se da temperatura do *bulk* quando o número de camada tende ao infinito. Portanto, a temperatura crítica é um fator de escala do número de camadas.

No sistema não frustrado obtemos um valor do ponto multicrítico maior que quando analisamos o sistema com frustração, e consequentemente há também uma diferença na temperatura, mostrando de forma efetiva a influência do fenômeno de frustração em uma rede.

Foi analisado, também, a temperatura crítica em função da concentração. Verificou-se que todas as curvas dependendo do parâmetro delta se juntam a partir de um valor o qual foi denominado de "concentração crítica". Para valores de concentração acima dessa concentração verificou-se que para qualquer valor de delta teremos as mesmas temperaturas críticas e para

uma concentração $p = 0.20$ teremos $T \rightarrow 0$, que significa um ponto de transição entre dois tipos de ordenamentos.

Muitos estudos ainda devem ser feitos em relação ao parâmetro delta, temperatura crítica e concentração, estudos devem incluir no diagrama de fase um parâmetro entre os planos chamado de parâmetro interplanar para analisar o quanto os planos estão acoplados entre si. Investigações podem ser feitas quando conduzimos o sistema no sentido de proporcionar explicação no diagrama de fase quando abordamos diluição por ligação. E podemos ainda abordar os parâmetros usando campo externo.