



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

*Super Antiferromagneto de Ising com Campo Uniforme*

Isabel Cristina Souza Dinóla

Tese apresentada ao  
Departamento de Física da  
Universidade Federal do  
Amazonas, como parte dos  
requisitos para a obtenção do  
Título de Mestre em Física.

Orientadora: Prof<sup>ª</sup>. Dra. Beatriz Maria Boechat Ponciano  
Co-orientadora: Prof<sup>ª</sup>. Dra. Andreia Mendonça Saguia

Manaus – Amazonas  
Maio de 2009



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

## **Super Antiferromagneto de Ising com Campo Uniforme**

Isabel Cristina Souza Dinóla

Orientadora: Prof<sup>a</sup>. Dra. Beatriz Maria Boechat Ponciano  
Co-orientadora: Prof<sup>a</sup>. Dra. Andreia Mendonça Saguia

Manaus – Amazonas  
Maio de 2009

Este trabalho é dedicado à  
Francisco Dinóla Bisneto e Isabelle Souza Dinóla

## Agradecimentos

Em primeiro lugar agradeço a Deus, que pela sua luz, sempre me abençoa e capacita para tudo aquilo que me destina.

Esta parte de agradecimentos é uma tarefa difícil, pois muitas vezes cometemos injustiças e por esquecimento não mencionamos nomes de pessoas que também contribuíram para o trabalho.

Nada na vida conquistamos sozinhos. Sempre precisamos de outras pessoas para alcançar os nossos objetivos. Muitas vezes um simples gesto pode mudar a nossa vida e contribuir para o nosso sucesso. Várias pessoas contribuíram para que este trabalho chegasse à esperada conclusão. Aqui registro minha gratidão.

Agradeço à professora Beatriz Boechat, sempre com uma simpatia contagiante, pela orientação e principalmente pelo bom convívio neste tempo de trabalho.

À Professora Andreia, que além de ter sido minha co-orientadora, se tornou uma grande amiga. Obrigada por suas sugestões e suporte durante a elaboração do trabalho. Sua amizade tornou muito mais humano este trabalho que poderia ser puramente científico.

Ao Professor Mucio Continentino, sinto-me agradecida pela oportunidade de conviver e ser aluna deste grande físico.

Um agradecimento ao Professor José Ricardo, que me acompanha desde a graduação, pelo estímulo à pesquisa e à vida acadêmica.

Aos meus professores na Pós-graduação, Marta Gusmão, Oleg Grigorievch, Angsula Ghosh e Evandro Vidor.

Ao coordenador da PPG-FIS da UFAM, Prof. Puspitapallab, que sempre que possível atendeu todos os meus pedidos.

Também sou muito grata aos professores do Instituto de Física da UFF, João Florêncio (pela colaboração com seus resultados de Monte Carlo e pelas sugestões na correção do trabalho), Marcelo Sarandy, Claudeutte Cordeiro, Delfino, Vanda e Sônia Krapas, pelos agradáveis momentos de convivência.

Aos funcionários da secretaria da Pós-graduação da UFAM e da UFF, Vânia, Rafael, Valéria, Luana e João (em memória), sempre prestativos, obrigada pela cortesia com que sempre fui atendida.

Aos meus pais, pelo exemplo, agradeço por terem sempre atendido meus desejos e por estarem me ajudando a levá-los adiante.

Ao meu companheiro querido, marido, amigo e orientador Francisco Dinóla Neto, sempre presente nos momentos de alegria e dificuldades, por tudo. Uma importante fonte de apoio intelectual e afetivo.

Aos meus familiares pelo apoio incondicional.

Aos amigos Álvaro, Luciana, Daniel Reyes, Scheilla, Eduardo, Miguel, Pâmela, Igor e família, D. Marta e família, Elis Regina, Marcio, Paulinho,

Robson, Deniz, Andréa, Rosana, Rodrigo, Griffith e tantos outros que foram tão importantes durante este tempo de mestrado. Enfim à todos os amigos, pelo incentivo e amizade.

Agradeço à agência CAPES pelas bolsas concedidas, que possibilitaram a realização deste trabalho.

# Sumário

<b>Resumo</b>	<b>v</b>
<b>Abstract</b>	<b>vi</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Transições de fases e Expoentes Críticos</b>	<b>6</b>
2.1 O ferromagneto de Ising . . . . .	6
2.2 Transições de Fase . . . . .	9
2.3 Expoentes críticos . . . . .	12
2.4 Leis de escala . . . . .	15
<b>3 Introdução ao Grupo de Renormalização no Espaço Real</b>	<b>17</b>
3.1 Equações de GR para o modelo de Ising . . . . .	17
3.2 A transmissividade . . . . .	21
<b>4 Estudo do Super antiferromagneto de Ising com campo uniforme</b>	<b>25</b>
4.1 Modelo de Ising com campo magnético uniforme . . . . .	25
4.2 O SAF de Ising em duas dimensões . . . . .	29
4.3 Formalismo do GRER . . . . .	32
4.4 Resultados e discussões . . . . .	35
<b>5 Conclusão</b>	<b>38</b>

<b>A</b>	<b>Resolução do Modelo de Ising</b>	<b>40</b>
1.1	Resolução Exata em Uma Dimensão . . . . .	40
1.2	Solução Exata em Uma Dimensão na Presença de um Campo . . . . .	43
1.3	Resultados exatos na rede quadrada . . . . .	47
<b>B</b>	<b>Programa</b>	<b>50</b>

# Lista de Figuras

1-1	Estados fundamentais possíveis de um SAF . . . . .	3
1-2	Diagrama de fases do SAF no plano $H/J$ x $k_B T/J$ . (a) Aproximação de Campo Médio (b) Aproximação de Cadeia Linear (c) Aproximação de Bethe-Peierls (d) Resultado de Wang e Kim (e) Linha crítica obtida pelo método da interface. . . . .	5
2-1	Esquema do modelo de spins para um ferromagneto . . . . .	7
2-2	Diagrama de fases no plano campo versus temperatura (em unidades de $J$ ) para um ferromagneto. . . . .	10
2-3	Parâmetro de ordem (magnetização espontânea) em função da temperatura para um ferromagneto. . . . .	11
2-4	Curva da magnetização $m$ em função do campo magnético $H$ . . . . .	12
3-1	Segmento de uma cadeia de spins. Os círculos abertos representam os spins que serão dizimados. Os círculos fechados representam os spins remanescentes na cadeia. . . . .	18
3-2	Diagrama de fluxo para o ferromagneto de Ising em $d=1$ . . . . .	21
3-3	Células utilizadas na renormalização do ferromagneto de Ising em $d = 1$ . . . . .	22
3-4	Grafos utilizados na transformação de GR na rede quadrada (a) Cluster da rede quadrada. (b) Célula com os spins terminais colapsados. (c) Célula renormalizada. . . . .	24
4-1	Estado fundamental do AF em $d = 2$ . . . . .	28

4-2	Células utilizadas na renormalização do antiferromagneto em $d = 2$ (a) Cluster da rede quadrada (b) Células com spins colapsados (c) célula renormalizada. . . . .	28
4-3	Diagrama de fases do sistema AF no plano campo versus temperatura (em unidades de $J$ ). . . . .	30
4-4	Esquema da rede bidimensional para o modelo SAF. . . . .	31
4-5	Grafos usados na transformação de GR para o modelo SAF com $ J_x  =  J_y  = J$ . (a) Cluster em $d = 2$ (b) Célula original. (c) Célula renormalizada. . . . .	33
4-6	Diagrama de fases esquemático do modelo SAF bidimensional no plano $(H/J, k_B T/J)$ . (a) nosso resultado para o SAF (b) o resultado da aproximação de Campo Médio [12]. (c) resultado de Wang e Kim [14] (d) linha crítica obtida com o método da interface [18]. . . . .	36

# Resumo

Utilizamos uma técnica de grupo de renormalização no espaço real para estudar o sistema super antiferromagneto (SAF) de Ising bidimensional sob a influência de um campo magnético externo. Neste modelo as interações de primeiros vizinhos na direção  $x$  são ferromagnéticas e na direção  $y$  são antiferromagnéticas. Este sistema apresenta uma fase ordenada, para baixas temperaturas e campos nulos, com uma estrutura de linhas ferromagnéticas e colunas antiferromagnéticas. A aplicação do campo magnético induz uma competição entre as energias de interação do modelo e o comportamento resultante desta competição tem sido objeto de estudo e gerado algumas controvérsias nos últimos anos. Na presença do campo magnético observa-se, além da fase SAF, a fase ferromagnética induzida pelo campo (FIC). Apresentamos neste trabalho o diagrama de fases completo do sistema SAF no plano temperatura versus campo magnético. O diagrama de fases obtido mostra uma linha de transição de segunda ordem separando a fase SAF da fase FIC. Nossos resultados contrariam resultados anteriores que prevêem um comportamento reentrante no diagrama de fases do sistema SAF.

# Abstract

The phase diagram of the two-dimensional super-antiferromagnetic (SAF) Ising model in the presence of a magnetic field is investigated within the framework of a real-space renormalization-group approximation. We consider nearest neighbor ferromagnetic interactions along the  $x(y)$  direction and antiferromagnetic interactions in the  $y(x)$  direction. The system presents a ordered phase at low temperatures and zero fields. The presence of a magnetic field induces a competition between the energy interactions of the SAF Hamiltonian. The resulting behavior has been a matter of controversy in the last years. We depicted the main results in the magnetic field versus temperature phase diagram. A second-order transition line separates a super-antiferromagnetic phase from a field induced ferromagnetic phase. Our study reveals that the magnetic field induces a phase transition at a single temperature value, thus, we did not find any evidence of reentrant behavior as claimed by some authors.

# Capítulo 1

## Introdução

Os estudos realizados em sistemas magnéticos foram responsáveis pelo enorme progresso alcançado no entendimento de fenômenos coletivos em Matéria Condensada. Os conceitos de quebra de simetria, escalonamento e universalidade, assim como o desenvolvimento da poderosa teoria do grupo de renormalização (GR) surgiram a partir destes esforços. O estudo do comportamento coletivo em magnetos pode ser realizado através da modelagem dos sistemas reais encontrados na natureza. Para este fim, diversos modelos foram propostos para descrever os sistemas magnéticos e alcançaram enorme sucesso. Dentre estes modelos, nos concentraremos naquele que é considerado o mais simples capaz de descrever a transição de fase que acontece no ferromagneto, denominado de modelo de Ising[1].

O modelo de Ising original é um dos mais simples na área de física da matéria condensada que apresenta propriedades críticas. Devido a esta importante característica tem sido utilizado como protótipo em diferentes campos, tais como, mecânica estatística[2, 3], sistemas biológicos[4, 5] e econofísica[6, 7]. Outra valiosa utilização tem sido empregá-lo para testar métodos aproximativos diversos já que sua solução exata em uma e duas dimensões é conhecida[8]. O Hamiltoniano do modelo de Ising tem a forma,

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \quad (1.1)$$

onde a soma é sobre todos os pares de spins primeiros vizinhos e  $J$ , que assumimos como sendo uma grandeza positiva, é conhecida como interação de troca. Se dois spins vizinhos na rede possuem a mesma orientação, teremos uma energia de interação  $-J$ , se são antiparalelos a energia é  $+J$ . Como assumimos  $J$  sendo positivo, a interação de troca favorece o alinhamento paralelo dos spins vizinhos.

Quando adicionamos ao modelo de Ising original outros termos de energia de interação, podemos utilizá-lo para estudar uma grande variedade de compostos magnéticos. Muitos destes compostos exibem diagramas de fases interessantes e muitas vezes bastante complexos (veja por exemplo[9]). Do ponto de vista teórico, as pesquisas têm se concentrado em entender as possíveis mudanças no comportamento crítico destes sistemas quando comparamos com os sistemas modelados pelo Hamiltoniano de Ising original (Eq.1.1). Podemos citar como exemplo, o caso geral do modelo de Ising com interações competitivas de primeiros ( $J_{nn}$ ) e segundos ( $J_{nnn}$ ) vizinhos, ou seja, ambas antiferromagnéticas[10]. Neste caso o sistema exhibe transição de fase de segunda ordem na rede quadrada e transição de fase de primeira ordem na rede triangular dependendo da razão  $R = J_{nn}/J_{nnn}$ . Apesar dos grandes esforços que têm sido empregados para estudar estes sistemas magnéticos e outros com versões ainda mais interessantes do modelo de Ising, muitas questões acerca de suas propriedades termodinâmicas e diagrama de fases ainda permanecem em aberto.

Nosso interesse aqui é abordar um sistema que tem sido objeto de estudo recente, o modelo super antiferromagnético (SAF) de Ising com campo magnético uniforme. Em duas dimensões o sistema é representado pelo modelo de Ising com acoplamentos entre spins primeiros vizinhos que são ferromagnéticos numa dada direção e antiferromagnéticos na direção perpendicular. O estado fundamental deste modelo está representado no esquema apresentado na Fig.(1-1). O sistema apresenta uma estrutura de linhas (colunas) de spins ordenados ferromagneticamente, cuja orientação de ordenamento ( $+z$  ou  $-z$ ) alternam-se ao longo da direção  $y(x)$ . Para campo magnético nulo, este sistema apresenta uma transição de fase de segunda ordem para um valor de temperatura dado por

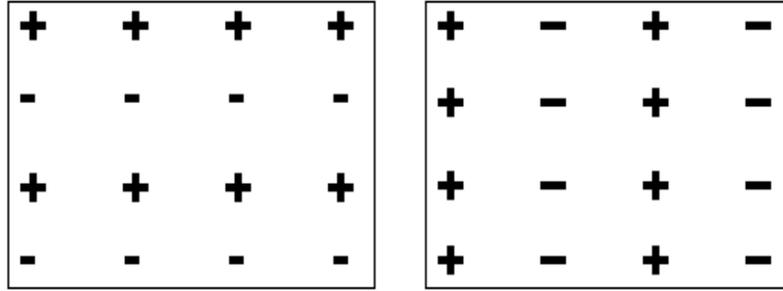


Figura 1-1: Estados fundamentais possíveis de um SAF

$\frac{k_B T_c}{J} = 2.269$ [11]. Acima desta temperatura o sistema encontra-se na fase paramagnética. Ao aplicarmos um campo magnético externo longitudinal ( $+z$ ) no sistema, aparece uma competição entre as energias de interação do Hamiltoniano, que são, no caso, os acoplamentos entre os pares de spins e o campo magnético. Esta competição leva o sistema a um comportamento crítico que tem sido objeto de estudo e gerado algumas controvérsias nos últimos anos.

O diagrama de fases do modelo SAF no plano temperatura versus campo magnético já foi estudado por diversos autores. Uma linha crítica separando duas fases distintas pode ser observada. Uma fase é a mesma existente na ausência do campo magnético, ou seja, a SAF. A outra é a fase ferromagnética induzida pelo campo (FIC). Para o caso específico  $|J_x| = |J_y| = J$ , no qual concentraremos nossos estudos, os principais resultados encontrados na literatura especializada estão mostrados no diagrama apresentado na Fig(1-2) e são descritos a seguir. A teoria de campo médio convencional[12] (CM) prediz a existência de um ponto tricrítico conectando dois tipos de transição entre a fase SAF e a fase FIC (curva a): a transição é de primeira ordem a baixas temperaturas e campos altos e de segunda ordem à altas temperaturas  $\left(\frac{k_B T_c}{J} < 2.269\right)$ [11]. O resultado obtido com a aproximação de cadeia linear (LCA)[13], uma mistura de resultados exatos e teoria de campo médio, fornece uma linha de transição de segunda ordem entre as fases, SAF e FIC, e um comportamento reentrante a baixas temperaturas (curva b). No

comportamento reentrante um único valor de campo magnético induz a transição para dois valores diferentes de temperatura. Este último resultado também foi encontrado por outros autores que utilizaram diferentes técnicas da Mecânica Estatística para tratar este problema. Primeiramente, Wang e Kim[14] com uma aproximação que envolve o cálculo de zeros da função de partição de Ising em um dado ciclo elementar da rede quadrada (curva c) e, em seguida, por Neto, dos Anjos e de Sousa[15], considerando a teoria de campo efetivo[16] e a aproximação de Bethe-Peierls[17], (curva d). Por outro lado, Rottman[18] usando o método de interface obteve o diagrama similar ao diagrama do modelo de Ising antiferromagnético isotrópico[19], ou seja, sem transições de primeira ordem e sem comportamento reentrante a baixas temperaturas (curva e).

Todos esses resultados e controvérsias nos motivaram a realizar um estudo teórico do sistema SAF em duas dimensões, utilizando a técnica de grupo de renormalização no espaço real (GRER)[20]. Portanto, nosso interesse ao realizar este trabalho foi obter o diagrama de fases deste modelo e acrescentar algum resultado novo a esta discussão acerca da existência ou não da reentrância na linha crítica observada por alguns autores. Para este estudo utilizamos uma aproximação de GRER denominada de transmissividade[21]. Esta aproximação nos permite mapear todo o diagrama de fases do modelo.

A tese encontra-se organizada na seguinte forma. Iniciamos o capítulo 2 fazendo uma breve apresentação sobre fenômenos críticos. Utilizaremos o modelo de Ising para ilustrar a transição de fase ferromagnética-paramagnética.

No capítulo 3 faremos uma introdução ao GRER. A visão que apresentaremos é bastante simples e mostra a vantagem de utilizar esta técnica para calcular a função de partição de um sistema de muitas partículas. Ao final iremos introduzir o método de GR denominado de transmissividade e que será utilizado no capítulo 4.

No capítulo 4 descrevemos nosso estudo para o sistema SAF com campo uniforme. Apresentamos o diagrama de fases no plano temperatura versus campo magnético e fazemos a comparação com os resultados obtidos por outros autores.

No capítulo 5 apresentamos as conclusões e perspectivas de trabalhos futuros.

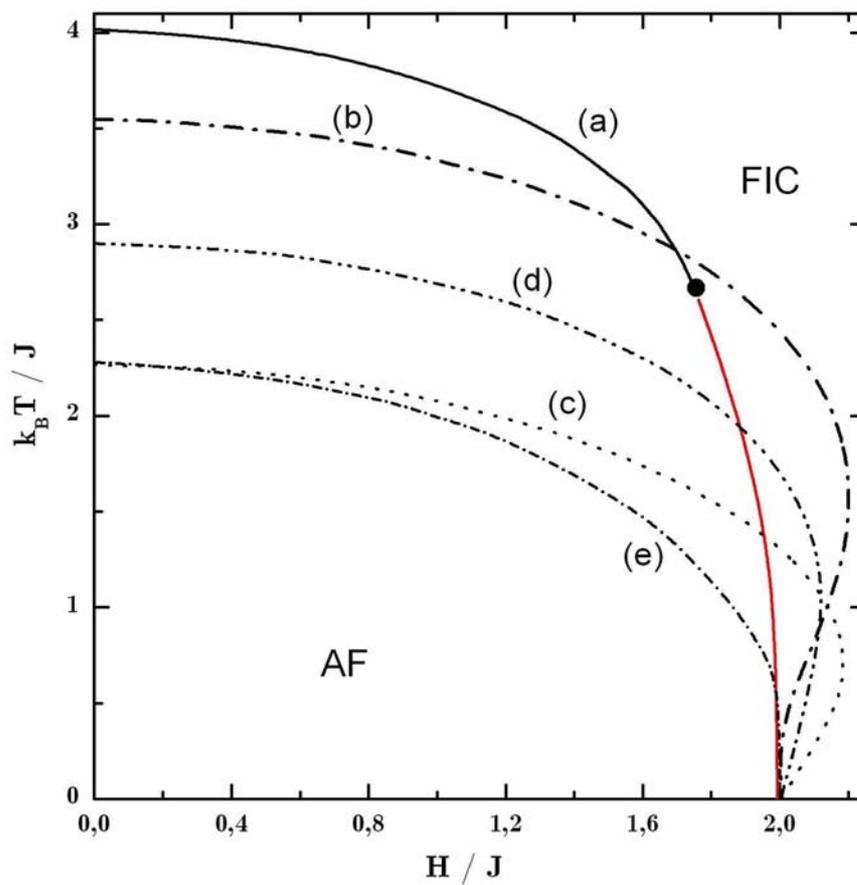


Figura 1-2: Diagrama de fases do SAF no plano  $H/J \times k_B T/J$ . (a) Aproximação de Campo Médio (b) Aproximação de Cadeia Linear (c) Aproximação de Bethe-Peierls (d) Resultado de Wang e Kim (e) Linha crítica obtida pelo método da interface.

# Capítulo 2

## Transições de fases e Expoentes Críticos

Numa transição de fase observamos uma mudança abrupta das propriedades termodinâmicas de um sistema em decorrência da variação de um ou mais de seus parâmetros externos. Essas transições podem ser estudadas pela termodinâmica e são caracterizadas por singularidades em algumas grandezas termodinâmicas, tais como calor específico e susceptibilidade, no ponto de transição.

Neste capítulo abordaremos as transições de fases *clássicas*, ou seja, movidas pelo efeito térmico. Ilustraremos esta abordagem com o exemplo do ferromagnetismo.

### 2.1 O ferromagneto de Ising

Em nossa abordagem sobre transições de fases utilizaremos o modelo de ferromagneto mostrado esquematicamente na Fig.(2-1). Este modelo consiste de átomos com momentos magnéticos de  $\text{spin} = 1/2$  (representados por setas), arranjados em uma rede de dimensão  $d$ . Este modelo é por natureza um modelo quântico e requer que sejam observadas todas as regras da mecânica quântica para lidar com momento angular de spin. Entretanto, iremos considerar um modelo mais simplificado e que captura toda a essência da física

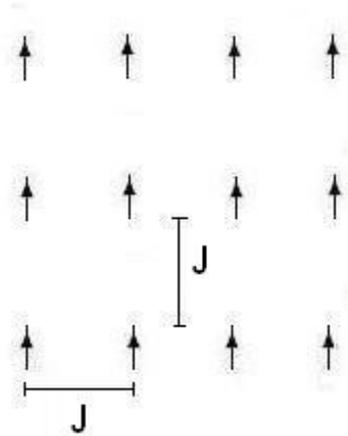


Figura 2-1: Esquema do modelo de spins para um ferromagneto

do ferromagnetismo.

Consideramos que cada spin pode somente ter duas orientações,  $+z$  ou  $-z$  e portanto, o  $i$ -ésimo spin desta rede pode assumir somente dois valores,  $S_i = \pm 1$ . Cada um destes spins interage com seus vizinhos mais próximos da rede, já que em um magneto real as interações decaem rapidamente com o aumento da distância entre dois spins. Este modelo é descrito pelo Hamiltoniano de Ising [1] e tem a forma,

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \quad (2.1)$$

onde a soma é sobre todos os pares de spins primeiros vizinhos, e  $J > 0$  é a interação de troca. Se dois spins vizinhos na rede possuem a mesma orientação, teremos uma energia de interação  $-J$ , se são antiparalelos a energia é  $+J$ . Como  $J$  é positivo, a interação de troca favorece o alinhamento paralelo dos spins vizinhos. A Eq.(2.1) representa, portanto, a energia  $E_\alpha$  de um estado particular  $\alpha$  de todo o sistema, devido a um determinado arranjo dos spins na rede, ou de outro modo, devido aos valores particulares das variáveis de spin  $S_i$  naquele estado particular  $\alpha$ . Estes estados particulares são denominados de microestados do sistema. Para um sistema de  $N$  spins teremos  $2^N$

possíveis microestados diferentes. Se a maioria dos spins da rede estiverem paralelos teremos um momento magnético não nulo para o sistema dando origem a um ferromagneto. Um sistema apresenta magnetização espontânea quando possui momento magnético na ausência de campo magnético.

Para introduzirmos os efeitos da desordem causados pela temperatura assumiremos que o sistema de spin está em equilíbrio com um reservatório de calor à temperatura  $T$ . O comportamento do sistema será descrito pelo ensemble canônico. A probabilidade  $P_\alpha$  de encontrarmos o sistema no estado  $\alpha$ , de energia  $E_\alpha$  e à temperatura  $T$  é dada por

$$P_\alpha = \exp\left(-\frac{E_\alpha}{k_B T}\right) / Z \quad (2.2)$$

onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann e

$$Z = \sum_\alpha \exp\left(-\frac{E_\alpha}{k_B T}\right) \quad (2.3)$$

O contato do sistema com o reservatório de calor faz com que o sistema sofra transições de um microestado para outro. Cada spin pode transicionar entre os dois estados possíveis +1 ou -1 a medida que ganha ou perde energia para o reservatório de calor. A medida de uma grandeza macroscópica é obtida por uma média sobre todos os microestados visitados durante a medição. Considerando  $m_\alpha$  a magnetização de um microestado  $\alpha$  do sistema,

$$m_\alpha = \sum_i S_i, \quad (2.4)$$

onde os  $S_i$  desta soma representam os valores das variáveis de spin no microestado  $\alpha$ . A magnetização do sistema será

$$m = \sum_\alpha m_\alpha P_\alpha. \quad (2.5)$$

Similarmente, outras grandezas termodinâmicas podem ser obtidas em termos das probabilidades  $P_\alpha$ . Um magneto real, como por exemplo, um pedaço de ferro contém um grande número de spins (cerca de  $10^{23}$ ) e como estamos interessados no comportamento

de um sistema real, temos que considerar sistemas para os quais  $N \rightarrow \infty$  possuindo assim um grande número de microestados.

O modelo de Ising apresentado acima será a base do estudo que apresentaremos aqui. Este modelo captura muitas das características essenciais da transição de fase para o estado ferromagnético o que, aliado a sua simplicidade, o torna ideal para estudar transições de fases.

Existem outros modelos para tratar o ferromagnetismo que são bastantes conhecidos e já foram exaustivamente estudados. Por exemplo, modelos nos quais as interações entre os spins se dão ao longo de cada uma das três dimensões espaciais, conhecido como modelo de Heisenberg[22], ou em duas direções, modelo XY[23]. Os spins também podem ser inteiros ( $S = 1, 2, \dots$ ) ou semi-inteiros ( $S = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$ ). Podemos ter ainda modelos nos quais as interações entre os spins podem ter um maior alcance, ou seja, modelos com interações de segundos, terceiros ou ainda mais distantes vizinhos da rede[10],[24]. Todos estes modelos exibem propriedades interessantes e têm sido muito estudados nos últimos 50 anos.

## 2.2 Transições de Fase

O comportamento termodinâmico do ferromagneto de Ising é determinado pela competição entre a energia de troca e a temperatura. Para dimensões maiores que um ( $d > 1$ ), o sistema pode se apresentar, a  $T > 0$ , em duas fases distintas; paramagnética e ferromagnética (ver Fig.2-2). Para temperaturas altas, comparadas com  $J$ , a entropia domina a energia livre e os spins flutuam praticamente independentemente, caracterizando a fase paramagnética. Por outro lado, para baixas temperaturas, quase todos os spins permanecem alinhados em uma das duas direções possíveis, dando origem a uma ordem magnética de longo alcance. Nesta fase ferromagnética cada spin apresenta um valor médio  $\langle S_i \rangle$  diferente de zero, onde  $\langle \rangle$  denota a média termodinâmica sobre o ensemble canônico. A magnetização espontânea assume diferentes valores em cada fase

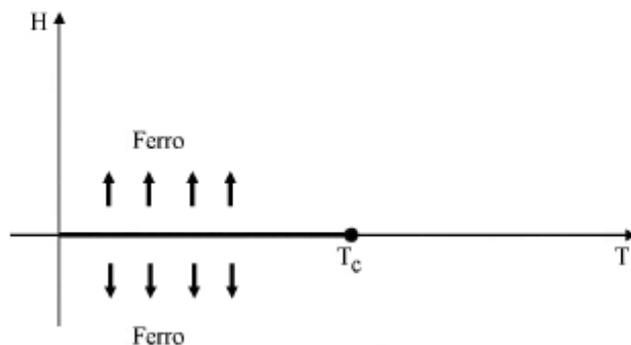


Figura 2-2: Diagrama de fases no plano campo versus temperatura (em unidades de J) para um ferromagneto.

e é utilizada como parâmetro de ordem, uma quantidade termodinâmica que serve para caracterizar a natureza de uma fase (ver Fig.(2-3)). Em toda a fase paramagnética, encontrada na região de temperatura  $T > T_c$ , sendo  $T_c$  a temperatura crítica da transição, a magnetização assume o valor zero. Na fase ferromagnética, na região de temperatura  $T < T_c$  a magnetização assume um valor não nulo. Para  $T$  logo acima de  $T_c$ , existem grandes regiões ou domínios nos quais uma certa porção dos spins estão alinhados paralelamente. Existe ordem nestes domínios mas não é possível que uma fração finita destes concordem em alinhamento. Para  $T$  logo abaixo de  $T_c$  a grande maioria dos domínios estão com o mesmo alinhamento e observa-se o ordenamento de longo alcance. Quando os tamanhos dos domínios tornam-se grandes, o tempo requerido para o ordenamento ou desordenamento torna-se longo. Dizemos que o tempo de relaxação (equilíbrio térmico) próximo a  $T_c$  é longo. Este tipo de transição descrita acima é chamada de transição de segunda ordem.

Para o caso unidimensional os spins estão conectados entre si por apenas duas ligações, favorecendo que as flutuações térmicas destruam qualquer alinhamento ferromagnético. Neste caso, ocorre ordem apenas em  $T = 0$ . Em qualquer temperatura finita, a entropia sempre domina a energia interna impedindo o surgimento de uma fase ordenada. Assim, diz-se que a dimensão crítica inferior do modelo de Ising, isto é, a dimensão acima da

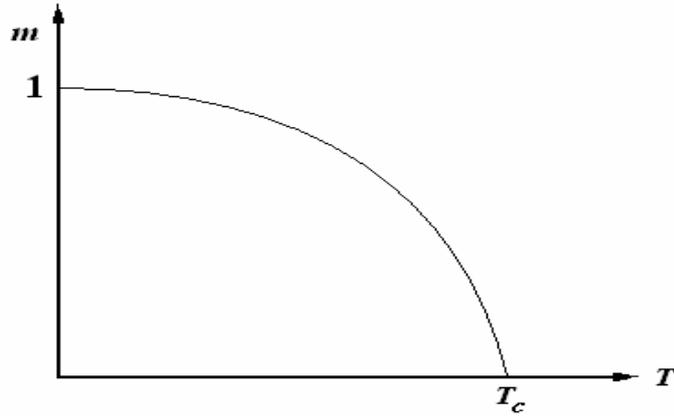


Figura 2-3: Parâmetro de ordem (magnetização espontânea) em função da temperatura para um ferromagneto.

qual pode-se ter uma fase ordenada para  $T \neq 0$  é então  $d_l = 1$ .

Uma outra quantidade termodinâmica de interesse na descrição das transições de segunda ordem é o comprimento de correlação  $\xi$ . O comprimento de correlação mede o tamanho linear de uma região sobre a qual as flutuações de spins estão correlacionadas. Podemos também dizer que é o comprimento médio dos domínios com uma porção finita de spins alinhados na mesma direção. No caso de uma transição de segunda ordem, como aquela observada na transição ferromagnética-paramagnética descrita acima, as flutuações estão correlacionadas em todas as escalas de distância, de modo que o comprimento de correlação torna-se infinito.

Na fase ferromagnética existem dois estados de equilíbrio equivalentes que estão relacionados pela simetria de inversão de spins exibida pela Hamiltoniana da Eq.(2.1). O sistema apresenta uma quebra de simetria espontânea ao escolher um dos dois estados possíveis de equilíbrio. O diagrama de fases no plano  $m - H$ , (ver Fig.(2-4)), apresenta uma descontinuidade na magnetização, quando  $H \rightarrow 0_+$  com valor  $+m_0$  e  $H \rightarrow 0_-$  com valor  $-m_0$ . Esta descontinuidade caracteriza uma transição de primeira ordem. Algumas quantidades termodinâmicas sofrem descontinuidades ao passar pela linha de transição,

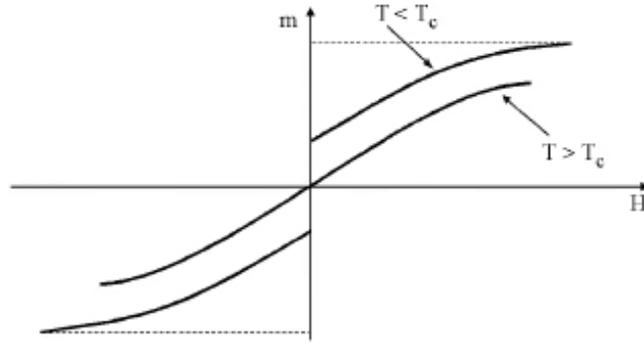


Figura 2-4: Curva da magnetização  $m$  em função do campo magnético  $H$

$H = 0$  e  $T < T_c$  (ver Fig.(2-4)), e o comprimento de correlação permanece finito.

## 2.3 Expoentes críticos

O comportamento singular ou divergente de certas funções termodinâmicas numa transição de fase é descrito em termos de expoentes críticos[25]. Estas transições são caracterizadas por uma temperatura de transição, ou temperatura crítica  $T_c$ . Portanto, próximo a uma transição de fase descrevemos o comportamento singular das grandezas físicas do sistema através de comportamentos assintóticos em função da variável térmica,

$$t = \frac{T - T_c}{T}$$

Para o calor específico, o comportamento assintótico é dado por

$$C \sim |t|^{-\alpha}, H = 0. \quad (2.6)$$

De forma análoga, para a magnetização espontânea  $m$ , a susceptibilidade  $\chi$  e a magnetização  $M$  em função do campo magnético  $H$ , temos:

$$m \sim |t|^\beta, T < T_c, H = 0; \quad (2.7)$$

$$\chi \sim |t|^{-\gamma}, H = 0; \quad (2.8)$$

$$M \sim H^{\frac{1}{\delta}}, T = T_c. \quad (2.9)$$

O comprimento de correlação  $\xi$  e as funções de correlação se comportam como

$$\xi \sim |t|^{-\nu}, H = 0. \quad (2.10)$$

$$G(r) \sim r^{-(d-2+\eta)}, T = T_c, H = 0. \quad (2.11)$$

As definições acima referem-se a parte singular destas quantidades e, salvo quando explícito, as singularidades são as mesmas para  $T$  se aproximando de  $T_c$  por cima ou por baixo. Os expoentes  $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \nu$  e  $\eta$  são denominados expoentes críticos. Observamos que de forma geral o expoente crítico associado ao comportamento assintótico de uma grandeza  $F$  é denifido por

$$\lambda = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\ln |F(t)|}{\ln |t|}. \quad (2.12)$$

Os expoentes críticos não são independentes e estão relacionados entre si por algumas desigualdades obtidas através de considerações fundamentadas na Termodinâmica e na Mecânica Estatística. Na criticalidade, essas desigualdades são satisfeitas como igualdades e são conhecidas como leis de escala. Veremos a seguir algumas das desigualdades mais conhecidas entre estes expoentes.

Para tanto, iniciemos por lembrar de um lema, que pode ser encontrado em qualquer livro de cálculo, de particular utilidade à demonstração que faremos.

LEMA: Sejam  $f(x)$  e  $g(x)$  duas funções tais que

$$f(x) = x^\lambda \quad (2.13)$$

$$g(x) = x^\varphi \quad (2.14)$$

e consideremos

$$f(x) \leq g(x) \quad (2.15)$$

para  $x > 0$ , porém suficientemente próximo da origem  $x = 0$ . Então podemos afirmar que

$$\lambda \geq \varphi. \quad (2.16)$$

onde  $\lambda$  e  $\varphi$  podem assumir quaisquer valores reais, positivos ou não.

Começemos demonstrando a desigualdade de Rushbrooke. Partiremos da seguinte relação:

$$\chi_T(C_H - C_M) = T \left[ \left( \frac{\partial M}{\partial T} \right)_H \right]^2, \quad (2.17)$$

onde  $\chi_T$  denota a susceptibilidade magnética à temperatura constante e é definida por

$$\chi_T = \left( \frac{\partial M}{\partial H} \right)_T. \quad (2.18)$$

$C_H$  e  $C_M$  em (2.17) são respectivamente, os calores específicos a campo ( $H$ ) e magnetização ( $M$ ) constantes, e que são definidos por:

$$C_H = -T \left( \frac{\partial^2 G}{\partial T^2} \right)_H \quad (2.19)$$

$$C_M = -T \left( \frac{\partial^2 A}{\partial T^2} \right)_M \quad (2.20)$$

sendo  $G$  o potencial de Gibbs e  $A$  o potencial de Helmholtz. É fácil verificar que tanto  $C_H$  como  $C_M$  são positivos se os definimos em função da entropia  $S$  do sistema,

$$C_H = T \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_H \quad (2.21)$$

e

$$C_M = T \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_M \quad (2.22)$$

visto que a entropia do sistema cresce quando cresce a temperatura. Considerando o fato de  $C_M$  ser um número positivo, a relação, (Eq.(2.17)), pode ser reduzida a

$$C_H \geq \frac{T}{\chi T} \left[ \left( \frac{\partial M}{\partial T} \right)_H \right]^2. \quad (2.23)$$

Usando as relações que definem expoentes críticos do calor específico  $C$  (Eq.(2.6)), da magnetização  $m$  (Eq.(2.7)) e da susceptibilidade  $\chi$ (Eq.(2.8)), podemos então, através do lema anteriormente destacado, obter a relação:

$$\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2 \quad (2.24)$$

que é a desigualdade de Rushbrook.

Apresentaremos agora, sem qualquer demonstração, algumas outras desigualdades que podem ser encontradas nos livros textos usuais de Mecânica Estatística:

$$Griffths : \gamma \geq \beta(\delta - 1), \quad (2.25)$$

$$Griffths : \gamma(\delta + 1) \geq (2 - \alpha)(\delta - 1), \quad (2.26)$$

$$Fisher : \gamma \leq \nu(2 - \eta), \quad (2.27)$$

$$Josephson : \nu d \geq 2 - \alpha \quad (2.28)$$

onde, na última expressão,  $d$  é a dimensionalidade do sistema.

## 2.4 Leis de escala

Na região crítica as relações de desigualdade entre os expoentes críticos são satisfeitas como igualdades e são conhecidas como leis de escala. Estas leis são obtidas a partir de uma conjectura acerca de como algumas quantidades se transformam quando o sistema sofre uma transformação de escala. A idéia básica é que próximo ao ponto crítico as

correlações de longo alcance das flutuações de spins são responsáveis por todos os comportamentos singulares das grandezas físicas. Portanto, o comprimento de correlação  $\xi$  é o único comprimento característico do sistema, e todos os demais serão medidos em termos dele. Esta conjectura juntamente com a afirmação de que, próximo ao ponto crítico, as funções termodinâmicas são funções homogêneas generalizadas levam-nos as conhecidas leis de escala,

$$\gamma = \beta(\delta - 1), \quad (2.29)$$

$$\gamma(\delta + 1) = (2 - \alpha)(\delta - 1), \quad (2.30)$$

$$\gamma = \nu(2 - \eta), \quad (2.31)$$

$$\nu D = 2 - \alpha \quad (2.32)$$

Estas relações são de grande importância na teoria de fenômenos críticos. É conhecido experimentalmente que os expoentes críticos que governam o comportamento das quantidades termodinâmicas nas vizinhanças de um dado ponto crítico têm os mesmos valores para vários sistemas. Quando sistemas diferentes possuem o mesmo conjunto de expoentes críticos dizemos que eles pertencem a uma mesma classe de universalidade.

# Capítulo 3

## Introdução ao Grupo de Renormalização no Espaço Real

O GR, introduzido por K. Wilson[26] desempenha papel de grande relevância nos diversos contextos da física, especialmente no estudo de fenômenos críticos. No âmbito dos fenômenos críticos, um dos objetivos principais do GR é determinar expoentes críticos e obter diagramas de fases. Portanto, a ênfase da teoria do GR está na obtenção da função de partição no ponto crítico. O desenvolvimento do GR é bastante complexo e baseia-se em conceitos como escalonamento, universalidade e correlações na região crítica. Por outro lado, podemos, de uma forma mais simplista, ver o GR como uma ferramenta prática e aproximada para calcular as somas envolvidas em uma função de partição de um sistema de muitas partículas[27]. É esta a visão que apresentaremos a seguir.

### 3.1 Equações de GR para o modelo de Ising

Vamos considerar um ferromagneto de Ising em uma dimensão. Na Fig.(3-1) temos uma porção de uma cadeia de spins. A função de partição da cadeia de spins que queremos calcular tem a forma,

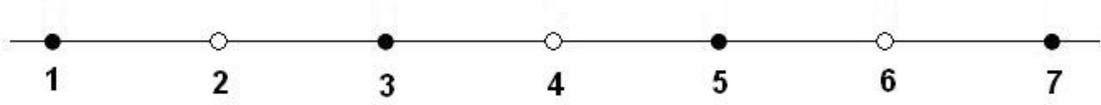


Figura 3-1: Segmento de uma cadeia de spins. Os círculos abertos representam os spins que serão dizimados. Os círculos fechados representam os spins remanescentes na cadeia..

$$Z = \sum \exp[K(\dots S_1 S_2 + S_2 S_3 + S_3 S_4 + \dots)] \quad (3.1)$$

onde a soma é sobre todos os valores possíveis para  $S_1, S_2, \dots$  e usamos  $K = J/k_B T$ .

Vamos reescrever  $Z$  agrupando termos na seguinte forma

$$Z = \sum \dots \exp K(S_1 S_2 + S_2 S_3) \exp K(S_3 S_4 + S_4 S_5) \dots \quad (3.2)$$

A seguir iremos eliminar o spin  $S_2$  que aparece somente na primeira exponencial. Fazemos isso realizando a soma sobre  $S_2 = \pm 1$ . A função de partição toma a forma,

$$Z = \sum \dots [\exp K(S_1 + S_3) + \exp(-K(S_1 + S_3))] \cdot \exp K(S_3 S_4 + S_4 S_5) \dots \quad (3.3)$$

onde a soma agora é sobre todos os spins remanescentes na cadeia, exceto o spin  $S_2$ .

Nosso próximo objetivo é somar sobre todos os spins pares restantes, ou seja,  $S_4, S_6, \dots$

(Fig.3-1). Após a dizimação de todos estes spins podemos reescrever  $Z$  como,

$$Z = \sum \dots [\exp K(S_1 + S_3) + \exp(-K(S_1 + S_3))] \times [\exp K(S_3 + S_5) + \exp(-K(S_3 + S_5))] \dots \quad (3.4)$$

onde agora o somatório inclui apenas os spins ímpares da cadeia. O próximo passo é achar uma função  $G$ , tal que, independentemente de  $S_1$  e  $S_3$  forneça

$$\exp K(S_1 + S_3) + \exp(-K(S_1 + S_3)) = G(K) \exp K'(S_1 S_3) \quad (3.5)$$

onde  $K'$  representa o acoplamento entre  $S_1$  e  $S_3$ . A solução para a Eq.(3.5) é facilmente obtida substituindo todos os valores possíveis para  $S_1$  e  $S_3$ . Para  $S_1 = S_3 = +1$  ou  $-1$ , temos

$$\exp 2K + \exp(-2K) = G(K) \exp K' \quad (3.6)$$

Para  $S_1 = 1$  e  $S_3 = -1$  ou  $S_1 = -1$  e  $S_3 = 1$ ,

$$2 = G(K) \exp K', \quad (3.7)$$

que resulta em

$$K' = \frac{1}{2} \ln[\cos(2K)] \quad (3.8)$$

$$G(K) = \cosh(2K)^{\frac{1}{2}}. \quad (3.9)$$

Logo, podemos escrever

$$\begin{aligned} Z &= \sum \dots G(K) \exp K' S_1 S_3 \cdot G(K) \exp K' S_3 S_5 \dots \\ &= [G(K)]^{\frac{N}{2}} \sum \exp K' (\dots S_1 S_3 + S_3 S_5 + \dots) \end{aligned} \quad (3.10)$$

Note que nós ainda não realizamos a soma da função de partição, mas, agora temos que realizar esta tarefa apenas para um sistema com  $N/2$  spins acoplados pela interação  $K'$ , ou seja,

$$Z(N, K) = G(K)^{\frac{N}{2}} Z'(N/2, K') \quad (3.11)$$

e mostramos, portanto, que a função de partição  $Z(N, K)$  para  $N$  spins está relacionada a função de partição  $Z'(N', K')$  de um sistema de  $N' = N/2$  spins.

Para um sistema de muitas partículas sabemos como  $Z$  depende de  $N$ . Sendo a energia livre proporcional ao tamanho do sistema, podemos escrever

$$\ln Z = N\xi \quad (3.12)$$

onde  $\xi$  é função de  $K$  mas é independente do tamanho do sistema. Usando as Eq.(3.11) e (3.12) podemos escrever,

$$\xi(K) = \frac{1}{N} \left[ \ln G(K)^{\frac{N}{2}} + \ln Z' \right]. \quad (3.13)$$

e

$$\xi(K) = \frac{1}{2} \ln G(K) + \frac{1}{N} \ln Z'. \quad (3.14)$$

$$\xi(K) = \frac{1}{2} \ln G(K) + \xi'(K'), \quad (3.15)$$

logo

$$\xi'(K') = 2\xi(K) - \ln[\cosh(2K)^{1/2}]. \quad (3.16)$$

Essas equações acima são os resultados essenciais do *GREER*. Analisando-as podemos concluir que conhecendo a função de partição para um certo valor de  $K$  (ou equivalentemente de  $T$ ), estas equações fornecem uma relação de recorrência para obtermos a função de partição para outro valor de acoplamento ou temperatura. Usando a relação de recorrência (Eq.(3.8)) obtemos um fluxo na direção  $K \rightarrow 0$ . Esta equação foi obtida para  $d = 1$  e possui apenas dois pontos fixos triviais localizados em  $K = 0$  e  $K = \infty$  (ver Fig.(3-2)).

O mesmo procedimento pode ser realizado para dimensões maiores. Na tentativa de facilitar a obtenção das equações de GR dos mais variados sistemas físicos, diversas outras aproximações vêm sendo adotadas. Apresentaremos a seguir a aproximação que

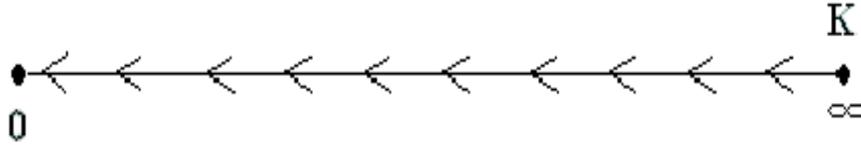


Figura 3-2: Diagrama de fluxo para o ferromagneto de Ising em  $d=1$ .

utilizamos para obter as relações de recorrência do GR para o estudo que realizamos no SAF com campo uniforme. Esta aproximação é denominada de método da transmissividade.

### 3.2 A transmissividade

Sabe-se atualmente que a transmissividade, grandeza formalmente introduzida em 1981 por Tsallis e Levy[21], é a função de correlação entre dois spins na ausência de campo externo[28]. Mostraremos, como utilizar a transmissividade ao tratarmos o modelo de Ising e apresentaremos os resultados desta grandeza para obter a relação de recorrência do GR.

Vamos considerar um sistema unidimensional. A partir da cadeia de spins definiremos duas células de tamanhos diferentes: A célula maior possui 4 sítios e seus spins estão acoplados pela interação de troca  $J$ . A célula menor, que chamaremos de célula renormalizada, possui dois sítios cujo acoplamento é  $J'$  (ver Fig.(3-3)).

O Hamiltoniano de Ising para a célula de 4 spins é dada por,

$$\mathcal{H} = -JS_1S_2 - JS_2S_3 - JS_3S_4 \quad (3.17)$$

e para a célula renormalizada temos,

$$\mathcal{H} = -J'S_1S_4 + G' \quad (3.18)$$

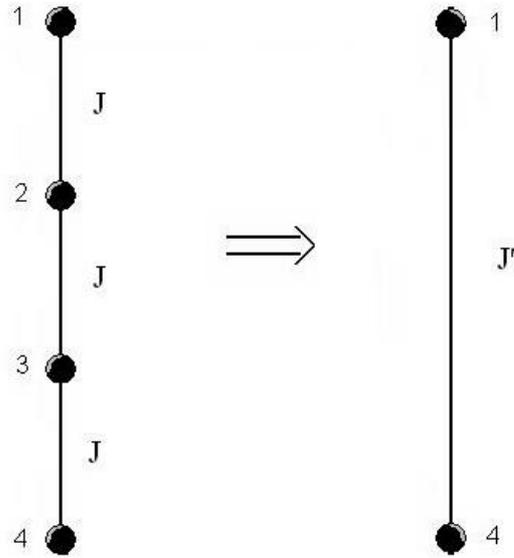


Figura 3-3: Células utilizadas na renormalização do ferromagneto de Ising em  $d = 1$ .

onde  $G'$  é gerada no processo de renormalização. A função de partição para a célula maior é

$$Z = \sum_{S_1, S_2, S_3, S_4} \exp K(S_1 S_2 + S_2 S_3 + S_3 S_4). \quad (3.19)$$

Para a célula renormalizada temos

$$Z' = \exp \beta G' \sum_{S_1, S_4} \exp (K' S_1 S_4), \quad (3.20)$$

onde usamos  $K = \beta J$  e  $K' = (\beta J)'$ . Definimos a transmissividade a partir da preservação de parcelas da função de partição nas quais os spins terminais estão fixos. Assim, para  $S_1 = S_4 = 1$ .

$$Z'_{++} = \exp (K' + \beta G') = \sum_{S_2, S_3} \exp K(S_2 + S_2 S_3 + S_3) = Z_{++} \quad (3.21)$$

e para  $S_1 = 1$  e  $S_4 = -1$ ,

$$Z'_{+-} = \exp(-K' + \beta G') = \sum_{S_2, S_3} \exp K(S_2 + S_2 S_3 - S_3) = Z_{+-} \quad (3.22)$$

onde os somatórios agora são somente sobre as variáveis de spin  $S_2$  e  $S_3$  da célula maior. Estas duas expressões, Eq. (3.21) e Eq.(3.22), fornecem a relação de recorrência para a variável  $K'$ . Dividindo as duas expressões e realizando a soma sobre os spins  $S_2$  e  $S_3$ , obtemos

$$K' = \frac{1}{2} \ln \left[ \frac{e^{4K} + 3e^{-K}}{e^{-4K} + 3e^K} \right] \quad (3.23)$$

O fluxo desta equação é sempre em direção ao atrator da fase paramagnética  $K' = 0$  como é esperado para  $d = 1$ .

O mesmo procedimento pode ser realizado em duas dimensões. Para isto considere a porção extraída da rede quadrada apresentada na Fig.(3-4). Novamente iremos calcular parcelas da função de partição, nas quais os spins  $S_1$  e  $S_4$  são mantidos fixos. Usando os grafos (b) e (c) da Fig. (3-4) temos,

$$Z'_{++} = \exp(K' + \beta G') = \sum_{S_2, S_3} \exp K(2S_2 + 2S_3 + S_2 S_3) = Z_{++} \quad (3.24)$$

$$Z'_{+-} = \exp(-K' + \beta G') = \sum_{S_2, S_3} \exp K(S_2 S_3) = Z_{+-} \quad (3.25)$$

$$K' = \frac{1}{2} \ln \left[ \frac{e^{5K} + 2e^{-K} + e^{-3K}}{2e^K + 2e^{-K}} \right] \quad (3.26)$$

Esta equação possui dois pontos fixos triviais localizados em  $K = 0$  (fase ordenada) e  $K = \infty$  (fase paramagnética). O terceiro ponto fixo,  $K_c = 0,44$ , é um ponto crítico repulsor que separa a fase ordenada da fase paramagnética. Este resultado deve ser comparado com o resultado exato de Onsager para o modelo de Ising em  $d = 2$ [11]. A escolha da célula desempenha um papel crucial dentro desta aproximação. Como o

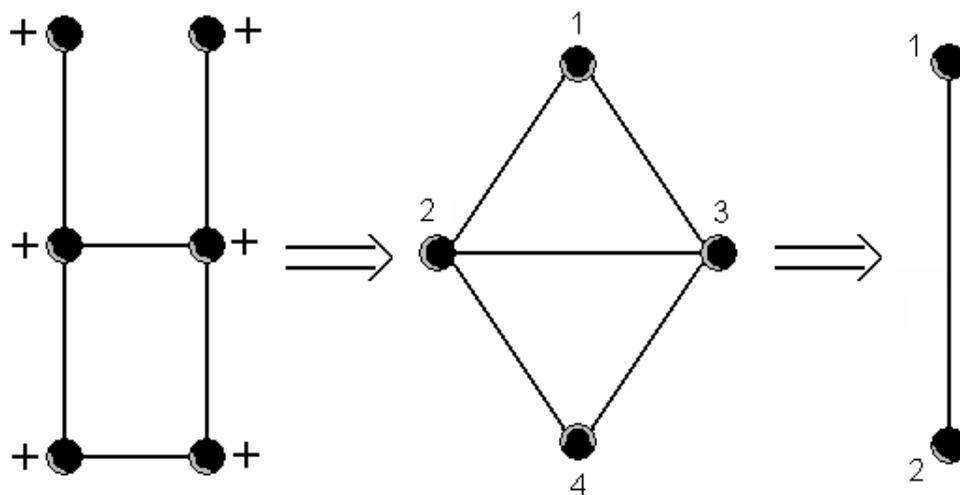


Figura 3-4: Grafos utilizados na transformação de GR na rede quadrada (a) Cluster da rede quadrada. (b) Célula com os spins terminais colapsados. (c) Célula renormalizada.

método envolve o colapso de spins da rede, deve-se tomar o cuidado para que a célula preserve o estado fundamental do sistema que será estudado.

O método da transmissividade já foi utilizado para tratar vários modelos de spins clássicos. Em geral, os resultados podem ser aprimorados aumentando-se o tamanho das células usadas no processo de renormalização. Entretanto, quando usamos um tratamento de GREER nossa maior expectativa é quanto ao resultado qualitativo que será obtido.

No próximo capítulo empregaremos o método da transmissividade para estudar o SAF de Ising com campo magnético.

# Capítulo 4

## Estudo do Super antiferromagneto de Ising com campo uniforme

Neste capítulo iremos apresentar o estudo que desenvolvemos sobre o SAF de Ising com campo uniforme utilizando como método de renormalização a transmissividade. Faremos inicialmente uma breve apresentação de alguns dos resultados mais importantes para o modelo de Ising. Ao final discutiremos os principais resultados que obtivemos neste estudo.

### 4.1 Modelo de Ising com campo magnético uniforme

O modelo de Ising foi proposto por Lenz[29] em 1920 para o seu aluno Ising. Este obteve uma solução exata para o caso unidimensional e constatou não haver transição de fase em temperatura finita (ver Apêndice B). O modelo de Ising tem sido usado também na descrição de sistemas não físicos, como modelo de aprendizagem[30], armazenamento de informação em redes neurais[31], biologia molecular[32],[33] e sociologia[34].

Na presença de campo uniforme  $H$  o modelo de Ising pode ser escrito na forma

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z - H \sum_i S_i^z, \quad (4.1)$$

onde a primeira soma refere-se às configurações de spin e a outra cobre todos os sítios da rede. A função de partição para este problema é então,

$$Z(\beta, H) = \exp \left[ \beta \left( J \sum_{\{i,j\}} S_i^z S_j^z + H \sum_i S_i^z \right) \right]. \quad (4.2)$$

Em duas dimensões e na ausência de campo magnético, o modelo de Ising apresenta uma transição de fase ferro-paramagnética e pode ser resolvido exatamente. Em 1941, Kramers e Wannier[35], determinaram a temperatura crítica do sistema usando a dualidade entre sítios e ligações de uma rede quadrada. Em 1944, Onsager[11], resolveu exatamente o modelo de Ising na ausência de campo e obteve uma expressão analítica para a energia livre, de onde se obtém uma singularidade logarítmica para o calor específico. Outros tratamentos visando simplificar a solução foram dados posteriormente por Kaufmann[36], Schultz, Mattis e Lieb[37]. Soluções didáticas deste problema podem ser encontradas nas Refs.[38] e [39], seguindo o tratamento de matrizes de transferência, e Refs.[40], [41], via método combinatorial.

A temperatura crítica do modelo é dada por

$$\sinh \left( \frac{2J}{K_B T_c} \right) = 1, \quad (4.3)$$

ou

$$\frac{k_B T_c}{J} = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} \approx 2,269 \quad (4.4)$$

O calor específico apresenta uma singularidade logarítmica em  $T_c$ ,

$$C \approx -NK_B \frac{2}{\pi} \left( \frac{2J}{K_B T_c} \right)^2 \ln \left| 1 - \frac{T}{T_c} \right| + const. \quad (T \approx T_c). \quad (4.5)$$

A magnetização por spin, obtida por Yang[42], pode ser expressa como

$$m(T) = \begin{cases} 0 & T > T_c \\ \left(1 - \left[\sinh\left(\frac{2J}{K_B T_c}\right)\right]^{-4}\right)^{1/8} & T < T_c, \end{cases} \quad (4.6)$$

revelando uma transição de fase em  $T = T_c$ .

Na presença de um campo magnético, a solução exata para o modelo em  $d = 2$  não é conhecida. A questão então consiste em obtermos uma idéia do comportamento crítico sem que seja preciso recorrer diretamente à soma em (4.2). Para evitar o ataque frontal, é conveniente transformar o problema original num outro mais tratável, onde, a singularidade ocorra naturalmente quando o ponto crítico é atingido. Esta é a tarefa que o GR se propõe a realizar.

Para o sistema ferromagnético (F), a presença do campo destrói a transição existente a campo nulo. Neste caso, qualquer valor de  $H \neq 0$  fará com que os spins do sistema orientem-se na direção do campo e, para qualquer valor de  $T$ , teremos apenas a fase FIC, também denominada de fase paramagnética com campo.

Para o sistema antiferromagnético (AF) a presença do campo magnético não é suficiente para destruir a transição observada a campo nulo. Podemos observar através do esquema mostrado na Fig.(4-1) que o valor do campo crítico necessário para destruir a ordem em  $T = 0$  é  $H_c = 4J$ . O método da transmissividade foi utilizado por [19] para estudar o AF de Ising bidimensional. Nós refizemos este estudo e apresentamos a seguir um resumo com os principais resultados.

A célula utilizada na transformação de GR é apresentada na Fig.(4-2a). A célula hierárquica (4-2b) é adequada para tratar o AF pois preserva a simetria do estado fundamental. O Hamiltoniano usado na transformação tem a forma,

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - \frac{H}{4} \sum_i z_i S_i$$

onde  $J > 0$  é o acoplamento antiferromagnético,  $H$  é o campo magnético e  $z_i$  é chamado de número de coordenação do sítio  $i$ . No sistema AF, o número de coordenação coincide

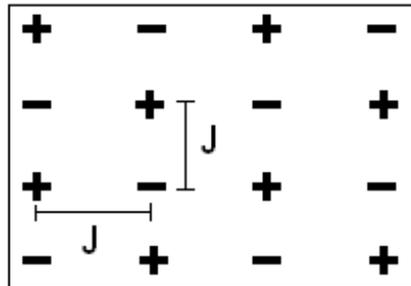


Figura 4-1: Estado fundamental do AF em  $d = 2$ .

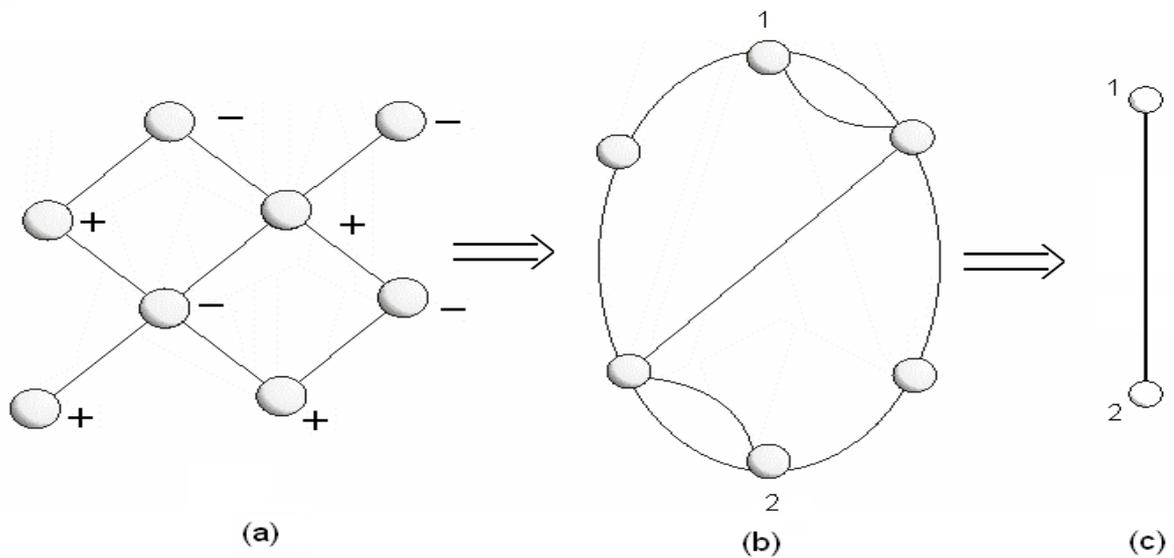


Figura 4-2: Células utilizadas na renormalização do antiferromagneto em  $d = 2$  (a) Cluster da rede quadrada (b) Células com spins colapsados (c) célula renormalizada.

com o número de ligações que convergem para um dado sítio. A transformação de GRER é definida por

$$Z' = \exp(-\beta' \mathcal{H}'_{1,2}) = \sum \exp(-\beta \mathcal{H}_{1,2,\dots,6}) = Z \quad (4.7)$$

A Eq.(4.7) indica que a soma será realizada apenas sobre os spins internos da célula maior(ver Fig.(4-2b)). Preservando parcelas da função de partição obtemos as relações de recorrência na forma,

$$J' = f(\beta J, \beta H)$$

$$H' = g(\beta J, \beta H)$$

A iteração das equações acima fornece uma linha crítica de segunda ordem separando as fases AF e FIC (ver Fig.4-3). Em temperatura zero o campo magnético crítico obtido foi  $H = 4J$  que é o valor esperado para a rede quadrada. O fluxo das equações do GR ao longo da linha crítica é em direção ao ponto crítico do sistema de Ising sem campo ( $T_c = 2.26$ ,  $H = 0$ ). Neste caso temos que o comportamento do sistema AF não foi afetado pela presença do campo magnético.

## 4.2 O SAF de Ising em duas dimensões

Embora o modelo de Ising tenha sido exaustivamente estudado, muitas questões sobre propriedades magnéticas e diagrama de fases de versões mais gerais ainda estão abertas. Entre os casos interessantes, recentemente estudados, está o modelo SAF de Ising com campo uniforme. Em duas dimensões o sistema é representado pelo modelo de Ising com um tipo de anisotropia particular: o acoplamento entre os sítios primeiros vizinhos na direção  $x(y)$  é ferromagnético enquanto que na direção  $y(x)$  é antiferromagnético (Fig.4-4). Estas interações dão origem a um estado fundamental com linhas (colunas) de spins no estado ferromagnético e colunas (linhas) de spins alinhados antiferromagneticamente. A introdução de um campo magnético no modelo induz competição entre as energias de interação do Hamiltoniano e leva o sistema a um comportamento crítico que tem sido

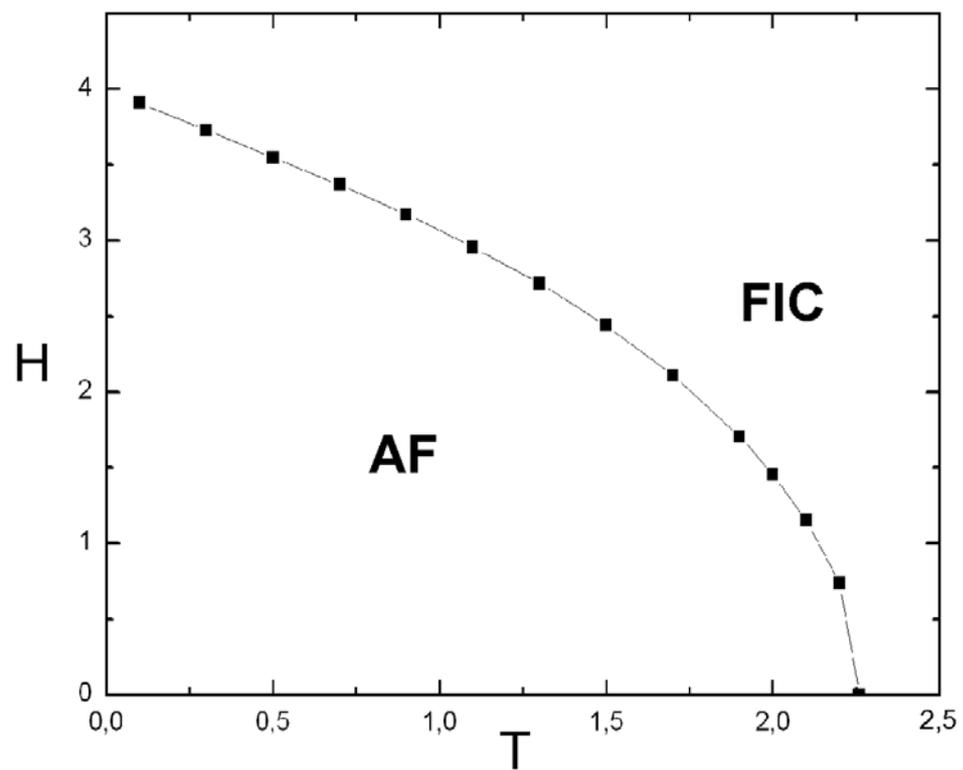


Figura 4-3: Diagrama de fases do sistema AF no plano campo versus temperatura (em unidades de  $J$ ).

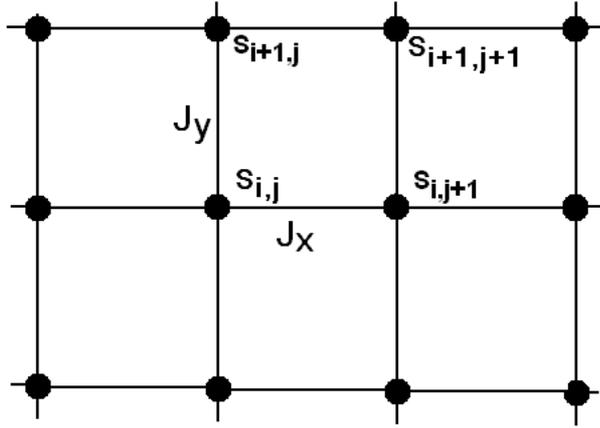


Figura 4-4: Esquema da rede bidimensional para o modelo SAF.

objeto de estudo e controvérsias nos últimos anos. O modelo Hamiltoniano mais geral para descrever o SAF de Ising com campo magnético tem a forma,

$$\mathcal{H} = -J_x \sum_{\langle i,j \rangle} S_{i,j}^z S_{i,j+1}^z + J_y \sum_{\langle i,j \rangle} S_{i,j}^z S_{i+1,j}^z - H \sum_{i,j}^N S_{i,j}^z \quad (4.8)$$

onde  $i$  é para ser tomado fixo ao longo do eixo  $x$  e  $j$  ao longo do eixo  $y$ . As interações  $J_x > 0$  e  $J_y > 0$  são os acoplamentos de troca,  $S_{i,j}^z$  é a matriz de spin de Pauli e  $H > 0$  é o campo magnético uniforme que atua em cada spin da rede quadrada.

O Hamiltoniano (Eq.4.8) tem solução exata para o caso  $H = 0$  e uma temperatura crítica dada por

$$\sinh\left(\frac{2J_x}{k_B T_c}\right) \sinh\left(\frac{2J_y}{k_B T_c}\right) = 1, \quad (4.9)$$

separa uma fase de baixas temperaturas com ordenamento SAF de outra fase, de temperaturas mais altas, dita paramagnética. Em particular, se  $|J_x| = |J_y| = J$ , temos que  $\frac{k_B T_c}{J} = 2.269$ . Para valores finitos de campo existe uma linha crítica separando o estado fundamental SAF do estado FIC induzido pelo campo magnético. Em  $T = 0$ , encontramos o valor de campo crítico,  $H_c = 2J$ , destruindo a fase SAF.

Como mencionamos na Introdução, este sistema foi estudado por diversos autores que

utilizaram-se de várias técnicas disponíveis na mecânica estatística. Vários diagramas de fases no plano,  $T$  versus  $H$ , foram propostos para o modelo SAF com  $|J_x| = |J_y| = J$ , levando a algumas controvérsias. A primeira controvérsia levantada foi acerca da existência de pontos tricríticos e de transições de primeira ordem no SAF. Estas questões estão hoje bem sedimentadas e sabe-se que toda a região da linha crítica é de 2ª ordem. Outra controvérsia que surgiu mais recentemente é sobre a presença ou não de uma reentrância na linha de transição à baixas temperaturas.

Neste trabalho aplicamos a aproximação do GRER para discutir o diagrama de fases do modelo SAF de Ising em duas dimensões. A transformação usada para tratar este problema já provou ser uma poderosa ferramenta para obter informações qualitativas sobre problemas envolvendo fenômenos críticos e é aplicada com sucesso em sistemas de spin clássicos e quânticos[10][43]. A aproximação que usamos serve para tratar transições de primeira e segunda ordem, para determinar classes de universalidade, pontos multicríticos, etc. O comportamento incomum da linha crítica observado por alguns autores foi obtido para o caso  $|J_x| = |J_y| = J$ . Portanto, por simplicidade, estaremos tratando aqui apenas este caso particular e daremos ênfase à discussão acerca da existência ou não deste comportamento reentrante no diagrama de fases do modelo SAF.

### 4.3 Formalismo do GRER

Para estudar o modelo SAF em duas dimensões propomos uma rede retangular com interações de primeiros vizinhos conforme aquela esquematizada na Fig.(4-5). Para aplicar a transformação do GRER é necessário transformar um cluster de 12 sítios (Fig.4-5- a) em uma célula hierárquica apropriada (Fig.(4-5b)). Na Fig.(4-5c) é mostrada a célula renormalizada. Os sítios 1 e 2 representam os sítios terminais em ambas as células, original e renormalizada. Estes grafos são adequados para estudar o modelo SAF pois eles preservam a estrutura de linhas e colunas, no ordenamento do estado fundamental, que são cruciais para descrever o sistema. Ressaltamos que os cálculos foram realizados com

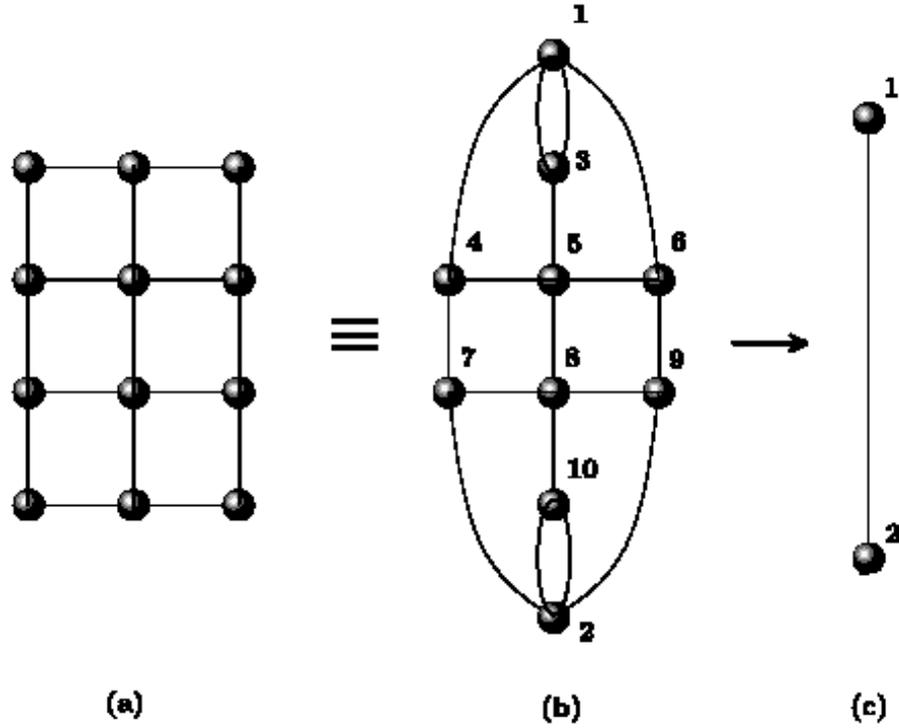


Figura 4-5: Grafos usados na transformação de GR para o modelo SAF com  $|J_x| = |J_y| = J$ . (a) Cluster em  $d = 2$  (b) Célula original. (c) Célula renormalizada.

células de diferentes tamanhos e não foi observado mudanças qualitativas nos resultados obtidos pelo GRER.

Vamos reescrever o Hamiltoniano do modelo, Eq. (4.8) na forma equivalente,

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i,j} S_i^z S_j^z - H \sum_l c_l S_l^z + H \sum_k c_k S_k^z, \quad (4.10)$$

onde  $J > 0$  é a interação de troca ferromagnética,  $S_i^z$  é a matriz de spin de Pauli e  $H$  é o campo magnético externo. Os índices  $l$  e  $k$  referem-se aos sítios pertencentes as subredes com campo magnético apontando para cima e para baixo, respectivamente. Os parâmetros  $c_l$  e  $c_k$  são incluídos para que seja realizado um correto balanceamento dos campos nos sítios das células utilizadas. Note que, em temperatura zero, o campo  $H$  terá

que vencer apenas a energia de interação dos spins vizinhos que estão situados em linhas distintas. Spins pertencentes a mesma linha possuem acoplamentos ferromagnéticos e estas interações não oferecem oposição à tentativa de alinhamento imposta pelo campo. Neste caso, os números de coordenação  $c_l$  e  $c_k$  não correspondem ao número de ligações que convergem para um dado sítio como acontece no sistema AF[19].

Obtemos as relações de recorrência impondo que parcelas das funções de partição, nas quais fixamos os sítios terminais dos grafos, original e renormalizado, sejam preservadas. Considerando  $\mathcal{H}$  e  $\mathcal{H}'$  os Hamiltonianos dos sistemas original e renormalizado, respectivamente, a transformação de GRER é definida por

$$Z' = \exp(-\beta' \mathcal{H}'_{1,2}) = \sum_{3-10} \exp(-\beta \mathcal{H}_{1,2,\dots,10}) = Z, \quad (4.11)$$

onde somamos apenas sobre os sítios internos (de 3 até 10), da Fig.(4-5-b) e fixamos os spins terminais de ambos os grafos. O Hamiltoniano para a célula renormalizada é escrito como uma soma de termos de energia,

$$\mathcal{H}'_{1,2} = -J' S_1^z S_2^z - H' S_1^z + H' S_2^z + G', \quad (4.12)$$

sendo  $G'$  é a função gerada pelo procedimento de renormalização. O fator  $\beta' = 1/k_B T'$  foi absorvido nos parâmetros  $J'$  e  $H'$ . Portanto, para o cluster de dois spins obtemos

$$\frac{Z'_{+-}}{Z'_{++}} = \exp(2J' - 2H')$$

$$\frac{Z'_{+-}}{Z'_{--}} = \exp(2J' + 2H')$$

O mesmo procedimento deve ser executado na célula original. O Hamiltoniano neste caso também pode ser escrito como uma soma de termos de interação e, por ser uma expressão muito longa, será omitida aqui. As equações que conectam os parâmetros

originais e renormalizados são facilmente obtidas e têm a forma

$$J' = \frac{1}{4} \ln \left( \frac{Z_{+-}}{Z_{++}} \cdot \frac{Z_{+-}}{Z_{--}} \right) \quad (4.13)$$

$$H' = \frac{1}{4} \ln \left( \frac{Z_{++}}{Z_{--}} \right). \quad (4.14)$$

Devido ao grande tamanho das células usadas na transformação de GRER, o lado direito de ambas as equações (4.13) e (4.14) é obtido numericamente. Para  $H = 0$  temos que,  $Z_{++} = Z_{--}$ , e neste caso recaímos em uma única equação e a interação de troca é dada por

$$J' = \frac{1}{2} \ln \left( \frac{Z_{+-}}{Z_{++}} \right) \quad (4.15)$$

A iteração numérica das relações de recorrência, Eqs.(4.13)-(4.15) fornecem o diagrama de fluxo no plano  $(k_B \frac{T}{J}, \frac{H}{J})$ . Os pontos críticos são obtidos pela procura dos pontos fixos não triviais destas equações. As fases são identificadas de acordo com o seus pontos atratores. No apêndice B apresentamos o código numérico que foi desenvolvido para este trabalho.

## 4.4 Resultados e discussões

Na Fig.(4-6) mostramos o diagrama obtido com o GRER para o sistema SAF bidimensional no plano temperatura versus campo magnético (curva a). Para  $H = 0$ , o sistema exibe duas fases: a fase SAF com uma estrutura de ordenamento de linhas ferromagnéticas e colunas antiferromagnéticas e a fase paramagnética sem campo. Os atratores das fases SAF e paramagnéticas são  $(T = 0, H = 0)$  e  $(T = \infty, H = 0)$ , respectivamente. A transição de segunda ordem entre as duas fases é governada pelo ponto crítico repulsor  $T_c = 2.07$ . Este resultado é ligeiramente menor do que o resultado exato obtido por Onsager  $T_c = 2.269$ [11]. Aqui enfatizamos que os resultados que obtivemos através do uso de GR em células pequenas são somente aproximados na rede quadrada. Não obstante,

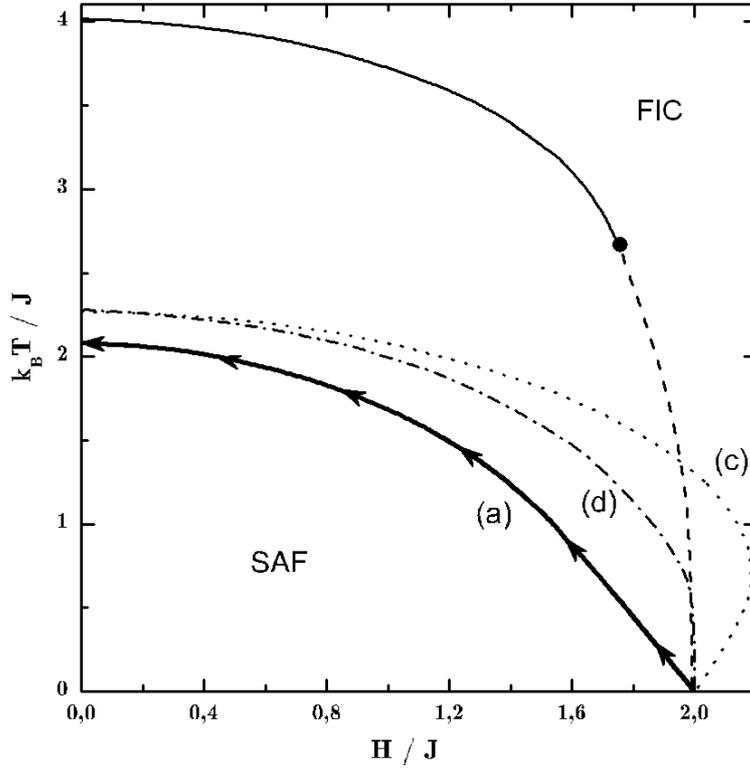


Figura 4-6: Diagrama de fases esquemático do modelo SAF bidimensional no plano  $(H/J, k_B T/J)$ . (a) nosso resultado para o SAF (b) o resultado da aproximação de Campo Médio [12]. (c) resultado de Wang e Kim [14] (d) linha crítica obtida com o método da interface [18].

as propriedades críticas dos sistemas magnéticos são quase sempre muito bem descritas, do ponto de vista qualitativo, através da aproximação do GRER, particularmente no caso bidimensional.

Na presença de um campo magnético  $H$ , uma linha crítica de segunda ordem separa a fase SAF ( $T = 0, H = 0$ ) da fase FIC ( $T = \infty, H = \infty$ ). A trajetória do fluxo das equações do GRER ao longo de toda a linha crítica tende para o ponto fixo,  $(H = 0, T = 2.07)$ , que é o mesmo do modelo de Ising original. Portanto, este ponto crítico controla a transição de fase SAF-FIF e conseqüentemente, a presença do campo

magnético não muda a classe de universalidade do sistema. De outra forma, o sistema SAF possui os mesmos expoentes críticos do sistema de Ising original.

Investigamos cuidadosamente o diagrama de fases na região de baixas temperaturas com o objetivo de procurar alguma evidência de pontos tricríticos ou transição de fase com comportamento reentrante como o que têm sido sugerido por alguns autores. Para uma melhor comparação de resultados é mostrado também na Fig.(4-6) os diagramas obtidos por outros autores. A teoria de CM prediz a existência de um ponto tricrítico nas coordenadas  $(2.667, 1.756)$  enquanto que nos resultados de Wang e Kim[14], a linha crítica apresenta um comportamento reentrante com a presença de duas temperaturas críticas para o mesmo valor de campo acima de  $H/J = 2$ . Como pode ser visto no diagrama apresentado na Fig. (4-6-a) nossos resultados não sugerem a presença de pontos tricríticos nem do comportamento reentrante mostrado em trabalhos anteriores. Nosso resultado foi obtido com células pequenas com as quais não é esperado um excelente resultado quantitativo. Diante disto não foi nosso objetivo calcular expoentes críticos. Entretanto, acreditamos que o método utilizado é bastante confiável para descrever o comportamento qualitativo de sistemas simples como este estudado aqui.

# Capítulo 5

## Conclusão

Investigamos neste trabalho o efeito de um campo magnético longitudinal externo no diagrama de fases do modelo SAF de Ising bidimensional. Utilizamos uma aproximação de GRER, conhecida como método da transmissividade, que tem sido aplicada com muito sucesso em diversos outros sistemas. Nesta transformação usamos uma célula obtida da rede quadrada que preserva a simetria do estado fundamental do sistema SAF. Esta simetria deve-se a natureza ferromagnética das interações dentro das linhas e da natureza antiferromagnética das interações entre as diferentes linhas de spin. Apresentamos o diagrama de fases no plano temperatura versus campo magnético.

Para  $H = 0$  obtivemos o valor  $T_c = 2.07$  para o ponto crítico repulsor, separando a fase ordenada SAF da fase paramagnética, que deve ser comparado com o valor exato  $T_c = 2.269$ [11].

Na presença do campo magnético as equações de GR fornecem uma linha crítica separando as fases SAF e FIC. O valor do campo magnético crítico em  $T = 0$  foi  $H_c = 2J$ , que é o resultado esperado para este sistema na rede quadrada. Para obter este valor foi necessário realizar um balanceamento correto dos campos nos sítios dos grafos utilizados. Neste balanceamento levamos em conta que, para destruir a fase SAF em  $T = 0$  o campo magnético necessita vencer os acoplamentos entre spins vizinhos situados em diferentes linhas da rede quadrada. Os acoplamentos dos spins vizinhos situados na

mesma linha não oferecem resistência à tentativa de alinhamento imposta pelo campo. Contrariando resultados de outros autores, que podem ser encontrados na literatura, obtivemos um comportamento crítico descrito pela linha crítica de segunda ordem sem nenhuma evidência de comportamento reentrante. Esses resultados estão de acordo com aquele encontrado anteriormente por Rottman[18] e é sustentado por resultados recentes de simulação de Monte Carlo obtidos por J. Roberto Viana et. al.[44] e que também reproduzimos posteriormente[45].

Geralmente é possível melhorar os resultados quantitativos de GREER em um dado sistema quando aumentamos o tamanho do grafo utilizado. Entretanto, concluímos que nosso estudo foi bem sucedido ao fornecer os resultados qualitativos corretos para o sistema SAF em duas dimensões, alcançando nosso objetivo inicial..

Como sequência a este trabalho, demos início a um estudo do SAF em  $d = 2$  com acoplamento de segundos vizinhos, utilizando simulação de Monte Carlo. Neste caso, o modelo Hamiltoniano pode ser escrito na forma,

$$\mathcal{H} = -J_x \sum_{\langle i,j \rangle} S_{i,j}^z S_{i,j+1}^z + J_y \sum_{\langle i,j \rangle} S_{i,j}^z S_{i+1,j}^z + J_2 \sum_{\langle i,j \rangle} (S_{i,j}^z S_{i+1,j+1}^z + S_{i,j+1}^z S_{i+1,j}^z) - H \sum_i S_i^z$$

onde  $J_x > 0$  e  $J_y > 0$  são as interações de primeiros vizinhos ao longo das direções  $x$  e  $y$ , respectivamente,  $J_2 > 0$  é a interação de segundos vizinhos e  $H$  é o campo magnético longitudinal que atua em todos os sítios da rede. Iniciamos este estudo considerando o caso  $|J_x| = |J_y| = J$ . Pretendemos estudar o sistema para diversas razões  $\frac{J_2}{J}$ .

# Apêndice A

## Resolução do Modelo de Ising

### 1.1 Resolução Exata em Uma Dimensão

Consideremos uma cadeia ou rede linear com  $N$  sítios. O objetivo de nossos cálculos é obter, de forma fechada, a função de partição.

$$Z_N = Z_N(J_1, J_2, J_3, \dots, J_{N-1}) = \sum_{S_1=-1}^1 \sum_{S_2=-1}^1 \dots \sum_{S_N=-1}^1 \exp \left( \sum_{i=1}^{N-1} \mathcal{J}_i S_i S_{i+1} \right) \quad (\text{A.1})$$

onde  $\mathcal{J}_i \equiv \beta J_i \equiv \frac{J_i}{k_B T}$  é um termo de energia de troca e não possui dimensão.  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $T$  a temperatura absoluta. As  $N$  somatórias se estendem sobre as  $2^N$  configurações de estado para o sistema.

O método de solução é calcular o efeito da adição de um spin a mais no fim da cadeia. Isto é, pretendemos expressar a função de partição para a rede estensa,  $Z_{N+1}$ , em termos da função de partição para a rede original  $Z_N$ . Tendo feito isso, teremos uma relação de recorrência com a qual poderemos encontrar a solução.

Da Equação (A.1) fazemos:

$$Z_{N+1} = \sum_{S_1=-1}^1 \sum_{S_2=-1}^1 \dots \sum_{S_N=-1}^1 \exp\left(\sum_{i=-1}^{N-1} \mathcal{J}_i S_i S_{i+1}\right) \sum_{S_{N+1}=-1}^1 \exp(\mathcal{J}_N S_N S_{N+1}) \quad (\text{A.2})$$

Observe que agora a última somatória da equação acima, (A.2), é:

$$\sum_{S_{N+1}=-1}^1 \exp(\mathcal{J}_N S_N S_{N+1}) = \exp(\mathcal{J}_N S_N) + \exp(-\mathcal{J}_N S_N) = 2 \cosh(\mathcal{J}_N S_N) \quad (\text{A.3})$$

A função cosseno hiperbólico é positiva para qualquer valor real, o que nos leva a perceber que o segundo termo da equação (A.3) não depende de  $S_N$  já que os valores possíveis para  $S_N$  são  $+1$  e  $-1$ , ou seja,  $\cosh(\mathcal{J}_N) = \cosh(\mathcal{J}_N)$ . Então

$$Z_{N+1} = Z_N 2 \cosh(\mathcal{J}_N) \quad (\text{A.4})$$

e como ocorre o mesmo com as outras somatórias e exponenciais para todos os  $2^N$  estados possíveis, resulta que

$$Z_{N+1} = Z_1 2^N (\cosh \mathcal{J}_1 \cosh \mathcal{J}_2 \cosh \mathcal{J}_3 \dots \cosh \mathcal{J}_N) \quad (\text{A.5})$$

Agora é fácil ver que  $Z_1 = 2$ , sendo que  $Z_1$  é exatamente a função de partição para um sistema simples de apenas um spin, de modo que a "soma sobre os estados" é simplesmente o "números de estados". Substituindo  $Z_{N+1}$  e  $Z_1$  na equação (A.5) teremos

$$Z_N 2 \cosh(\mathcal{J}_N) = 2 \cdot 2^N (\cosh \mathcal{J}_1 \cosh \mathcal{J}_2 \cosh \mathcal{J}_3 \dots \cosh \mathcal{J}_N) \quad (\text{A.6})$$

Eliminando os termos repetidos teremos de forma clara:

$$Z_N = 2^N (\cosh \mathcal{J}_1 \cosh \mathcal{J}_2 \cosh \mathcal{J}_3 \dots \cosh \mathcal{J}_{N-1}) \quad (\text{A.7})$$

que pode ser reescrita assim:

$$Z_N = 2^N \prod_{i=1}^{(N-1)} (\cosh \mathcal{J}_i). \quad (\text{A.8})$$

No caso uniforme, ou seja, quando quaisquer dois spins tiverem sua energia de interação constante e igual a  $J$ , ( $J_i = J$ ), teremos:

$$Z_N = 2^N \cosh^{(N-1)} \mathcal{J} \quad (\text{A.9})$$

ou, de forma ainda mais explícita

$$Z_N = 2^N \cosh^{(N-1)} \frac{J}{k_B T}. \quad (\text{A.10})$$

Voltemos agora para a expressão mais geral da função de partição,

$$Z_N = 2^N \prod_{i=1}^{(N-1)} (\cosh \mathcal{J}_i), \quad (\text{A.11})$$

cuja forma nos sugere uma relação com a ordem de temperatura  $T_C$ . Por esta razão vamos calcular a função de correlação entre dois spins

$$\Gamma_k(r) \equiv \langle S_k S_{k+r} \rangle = Z_N^{-1} \sum_{\{S\}} S_k S_{k+r} \exp \left( \sum_{i=1}^{(N-1)} \mathcal{J}_i S_i S_{i+1} \right) \quad (\text{A.12})$$

onde a somatória  $\sum_{\{S\}} S_k S_{k+r}$  é feita sobre todos os  $2^N$  estados,  $S$  representa os spins da rede,  $k$  é o valor que localiza o spin  $S$  e  $r$  é a distância de separação entre dois spins, cujo valor é dado em unidades de uma rede constante. A função de correlação para o primeiro vizinho é simplesmente  $\Gamma_k(1)$ , o que satisfaz a relação

$$Z_N \Gamma_k(r) = \sum_{\{S\}} S_k S_{k+r} \exp \left( \sum_{i=1}^{(N-1)} \mathcal{J}_i S_i S_{i+1} \right) = \frac{\partial}{\partial \mathcal{J}_k} \sum_{\{S\}} \exp \left( \sum_{i=1}^{(N-1)} \mathcal{J}_i S_i S_{i+1} \right) \quad (\text{A.13})$$

Claramente o argumento que nos levou à equação acima pode ser generalizado para um  $r$  arbitrário, resultando em

$$Z_N \Gamma_k(r) = \frac{\partial}{\partial \mathcal{J}_k} \frac{\partial}{\partial \mathcal{J}_{k+1}} \dots \frac{\partial}{\partial \mathcal{J}_{k+r-1}} Z_N \quad (\text{A.14})$$

com isso, poderemos obter, a partir da diferenciação da equação geral para  $Z_N$ , o seguinte resultado:

$$\Gamma_k(1) = \tanh(\mathcal{J}_k)$$

e

$$\Gamma_k(r) = (\tanh \mathcal{J}_k)(\tanh \mathcal{J}_{k+1}) \dots (\tanh \mathcal{J}_{k+r-1}) = \prod_{i=1}^r \tanh \mathcal{J}_{k+i-1}$$

que é simplesmente o produto das funções de correlação entre primeiros vizinhos. Para um caso uniforme, esta equação se reduz a

$$\Gamma_k(r) = \langle S_k S_{k+r} \rangle = \tanh^r \mathcal{J}$$

ou, mais explicitamente,

$$\Gamma_k(r) = \langle S_k S_{k+r} \rangle = \tanh^r \left( \frac{J}{k_B T} \right)$$

que se mostra independente do sítio  $k$ .

## 1.2 Solução Exata em Uma Dimensão na Presença de um Campo

Para este caso o modelo de Ising pode ser escrito como

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} - H \sum_{i=1}^N S_i \quad (\text{A.15})$$

Vamos começar escrevendo então a função de partição

$$Z_N = \sum_{\{S_i\}} \exp \left[ \beta J \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} + \beta H \sum_{i=1}^N S_i \right] \quad (\text{A.16})$$

usando  $K = \beta J$  e  $L = \beta H$  e escrevendo o segundo termo de uma forma mais simétrica, teremos:

$$Z_N = \sum_{\{S_i\}} \exp \left[ K \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} + \frac{L}{2} \sum_{i=1}^N S_i + S_{i+1} \right]. \quad (\text{A.17})$$

Por conveniência, vamos adotar condições periódicas de contorno  $S_{N+1} = S_1$ . Podemos escrever a parte exponencial da função acima como um produto de exponenciais:

$$\exp \left[ K \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} \right] \exp \left[ \frac{L}{2} \sum_{i=1}^N S_i + S_{i+1} \right] \quad (\text{A.18})$$

ou, de forma mais explícita:

$$\exp K(S_1 S_2) \exp K(S_2 S_3) \dots \exp K(S_N S_{N+1}) \exp \left( \frac{L}{2} \sum_{i=1}^N S_1 + S_2 \right) \times \quad (\text{A.19})$$

$$\exp \left( \frac{L}{2} \sum_{i=1}^N S_2 + S_3 \right) \dots \exp \left( \frac{L}{2} \sum_{i=1}^N S_N + S_{N+1} \right). \quad (\text{A.20})$$

Obtemos assim um produtório, que vamos representar por

$$\prod_{i=1}^N T(S_i, S_{i+1}) = \exp \left[ K \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} + \frac{L}{2} \sum_{i=1}^N S_i + S_{i+1} \right] \quad (\text{A.21})$$

de modo que a Eq.(A.17) possa ser escrita de forma simplificada:

$$Z_N = \sum_{\{S_i\}} \prod_{i=1}^N T(S_i, S_{i+1}). \quad (\text{A.22})$$

observe agora que cada fator do produtório

$$T(S_i, S_{i+1}) = \exp \left[ K \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} + \frac{L}{2} \sum_{i=1}^N S_i + S_{i+1} \right] \quad (\text{A.23})$$

pode assumir quatro valores, pois  $S_i = \pm 1$  e  $S_{i+1} = \pm 1$ , independentemente do valor de  $i$ ,

$$\exp [K(1 \cdot 1)] + \frac{L}{2}(1 + 1) = \exp(K + L) \quad (\text{A.24})$$

$$\exp [K(1 \cdot -1)] + \frac{L}{2}(1 - 1) = \exp(-K) \quad (\text{A.25})$$

$$\exp [K(-1 \cdot 1)] + \frac{L}{2}(-1 + 1) = \exp(-K) \quad (\text{A.26})$$

$$\exp [K(-1 \cdot -1)] + \frac{L}{2}(-1 - 1) = \exp(K - L). \quad (\text{A.27})$$

Se colocarmos estes valores em forma de matriz,

$$T = \begin{pmatrix} T(+, +) & T(+, -) \\ T(-, +) & T(+, -) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \exp(K + L) & \exp(-K) \\ \exp(-K) & \exp(K - L) \end{pmatrix}, \quad (\text{A.28})$$

onde  $T$  é a matriz transferência, podemos notar que o produtório da Eq.(A.22) pode ser representado como um produto de  $N$  matrizes  $2 \times 2$  idênticas. Por conseguinte, se diagonalizarmos esta matriz, a Eq.(A.22) como um todo pode ser interpretada como o traço ( $Tr$ ), ou seja, a soma dos elementos da diagonal principal, do produto de  $N$  matrizes (de transferência) idênticas,

$$Z_N = Tr(T)^N. \quad (\text{A.29})$$

Aplicando a equação secular ( $T - \lambda I = 0$ ), onde  $I$  é a matriz identidade, podemos encontrar as raízes a partir de uma matriz diagonalizada  $D$  :

$$Z_N = Tr(D)^N = \lambda_1^N + \lambda_2^N, \quad (\text{A.30})$$

onde as raízes  $\lambda_1 + \lambda_2$  são

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2} [\exp(K + L) + \exp(K - L)] \pm \frac{1}{2} \sqrt{(e^{4K} - 2e^{4K-2L} + e^{4K-4L} + 4e^{-2L}) e^{-2K+2L}} \quad (\text{A.31})$$

ou

$$\lambda_{1,2} = e^K \cosh(L) \pm \sqrt{e^{2K} \cosh^2 L - \sinh(2K)} \quad (\text{A.32})$$

É fácil perceber que esses autovalores são sempre positivos e que  $\lambda_1 > \lambda_2$ , exceto no ponto trivial  $T = H = 0$ . A campo nulo essas expressões ficam mais simples,

$$\lambda_1 = 2 \cosh K \geq \lambda_2 = 2 \sinh K, \quad (\text{A.33})$$

com a degenerescência ( $\lambda_1 = \lambda_2$ ) no limite  $K \rightarrow 0$  (ou seja,  $T \rightarrow 0$ ).

Para obter a energia livre no limite termodinâmico, é conveniente escrever

$$Z_N = \lambda_1^N \left[ 1 + \left( \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right)^N \right]. \quad (\text{A.34})$$

Como  $\lambda_2 < \lambda_1$ , temos o limite

$$f(T, H) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[ -\frac{1}{\beta N} \ln Z_N \right], \quad (\text{A.35})$$

fazendo com que na Eq. (A.34) tenhamos

$$\left( \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right)^N \rightarrow 0$$

e daí:

$$f(T, H) = -\frac{1}{\beta} \ln \lambda_1$$

ou seja,

$$f(T, H) = -\frac{1}{\beta} \ln \left[ e^{\beta J} \cosh(\beta H) + \sqrt{e^{2\beta J} \cosh^2(\beta H) - 2 \operatorname{senh}(2\beta J)} \right]$$

que é uma função analítica, de onde vêm todas as propriedades termodinâmicas do sistema.

A magnetização por spin, por exemplo, é dada por

$$m = - \left( \frac{\partial f}{\partial H} \right)_T$$

onde:

$$m = \frac{\operatorname{senh}(\beta H)}{\sqrt{\operatorname{senh}^2(\beta H) + \exp(-4\beta J)}}$$

que se anula para  $H = 0$ , servindo apenas para a explicação do paramagnetismo e não o ferromagnetismo, pois sabemos que  $m \neq 0$  quando  $H = 0$  em um material ferromagnético.

### 1.3 Resultados exatos na rede quadrada

O modelo de Ising em  $d = 2$  foi resolvido exatamente por Onsager em 1944[11] quando determinou a energia livre do sistema no limite termodinâmico. A partir da energia livre podem-se ser derivadas todas as propriedades de equilíbrio. Esta solução é de grande importância pois possibilita que vários métodos aproximativos possam ser testados. Desde a solução de Onsager vários autores utilizaram diversos outros métodos para reproduzir esta solução. Os detalhes da solução são bastante longos e remeteremos os leitores aos autores originais[36],[37]. Vamos nesta seção nos limitar ao registro de alguns resultados de Onsager.

A energia livre para um sistema de Ising bidimensional na ausência do campo mag-

nético pode ser escrita na forma,

$$-\beta f(T) = \ln 2 + \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\pi \int_0^\pi \ln [\cosh^2 2K - \operatorname{senh}2K(\cos \theta_1 + \cos \theta_2)] d\theta_1 d\theta_2, \quad (\text{A.36})$$

onde  $K = \beta J$ . Portanto, temos a energia interna

$$u = -\frac{J}{\tanh K} \left[ 1 + \frac{\operatorname{senh}^2 2K - 1}{\pi^2} \int_0^\pi \int_0^\pi \frac{d\theta_1 d\theta_2}{\cosh^2 2K - \operatorname{senh}2K(\cos \theta_1 + \cos \theta_2)} \right]. \quad (\text{A.37})$$

A integral aparecendo nessa última expressão diverge logaritmicamente quando

$$\cosh^2 2K = 2\operatorname{senh}2K, \quad (\text{A.38})$$

ou seja,

$$\operatorname{senh}2K = 1, \quad (\text{A.39})$$

que define a temperatura crítica do modelo,

$$K_c^{-1} = \frac{k_B T_c}{J} = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} = 2,269\dots \quad (\text{A.40})$$

Nas vizinhanças da temperatura crítica, é conveniente definir o parâmetro pequeno

$$\delta = (\operatorname{senh}2K - 1)^2. \quad (\text{A.41})$$

Então, em ordem dominante para  $\delta \rightarrow 0$ , temos

$$\begin{aligned} \int_0^\pi \int_0^\pi \frac{d\theta_1 d\theta_2}{\cosh^2 2K - \operatorname{senh}2K(\cos \theta_1 + \cos \theta_2)} &\sim \\ \int_0^\pi \int_0^\pi \frac{d\theta_1 d\theta_2}{\delta + \frac{1}{2}\operatorname{senh}2K(\theta_1^2 + \theta_2^2)} &= \\ 2\pi \int_0^\pi \frac{r dr}{\delta + \frac{1}{2}r^2 \operatorname{senh}2K} &\sim -2\pi \ln \delta, \end{aligned} \quad (\text{A.42})$$

onde foram utilizadas coordenadas polares para simplificar a integral da etapa intermediária. A partir dessa forma assintótica, a energia nas vizinhanças da temperatura crítica é dada por

$$u \sim -\frac{J}{\tanh K} [1 + A(K - K_c) \ln |K - K_c|], \quad (\text{A.43})$$

onde  $A$  é uma constante. Tomando a derivada em relação à temperatura, obtemos a fórmula para o calor específico a campo nulo,

$$c_{H=0} \sim B \ln |K - K_c|, \quad (\text{A.44})$$

com  $K \rightarrow K_c$  e onde  $B$  é uma constante.

Uma expressão analítica para a energia interna dada pela Eq. (A.37) pode ser escrita em termos de uma integral elíptica,

$$u = -\frac{J}{\tanh K} \left[ 1 + (2 \tanh^2 2K - 1) \frac{2}{\pi} K(k_1) \right], \quad (\text{A.45})$$

onde

$$k_1 = \frac{2 \sinh(2K)}{\cosh^2 2K} \quad (\text{A.46})$$

e  $K(k_1)$  é uma integral elíptica completa de primeiro grau,

$$K(k_1) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} [1 - k_1^2 \sin^2 \theta]^{-1/2} d\theta. \quad (\text{A.47})$$

# Apêndice B

## Programa

Programa utilizado para estudar a transição de fase do modelo SAF de Ising com campo magnético externo na rede quadrada.

```
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
```

```
INTEGER*4 DIM
```

```
INTEGER*4 VEC
```

```
PARAMETER (VEC=10)
```

```
PARAMETER (DIM=2**VEC)
```

```
COMMON/DADOS/xj,xh
```

— DESCRIÇÃO DAS VARIÁVEIS E PARÂMETROS —

VEC —> Quantidade de spins.Ex.:  $|S1 S2 S3 S4\rangle \Rightarrow VEC = 4$ .

DIM —> Dimensão de matrizes e vetores em uma base comum dos VEC spins. Ex.:  $|S1 S2 S3 S4\rangle \Rightarrow DIM = 16$ .

write(\*,\*)'entre com o valor de 1/xj,xh/xj'

```
read(*,*)xk1,xh1
```

```
xj=1.0d0/xk1
```

```
xh=xh1*xj
```

```
DO id=1,10
```

```
CALL MATRIX2(DIM,VEC,xt1,xt2)
```

```

write(2,*)'xt1:=',xt1,',':'',xt2:=',xt2,',':'',xt3:=',xt3,',':'
if(xh.eq.0.0) then
xj=0.5d0*dlog(xt1)
xh=0.0d0
goto 40
end if
valores renormalizados
xj=0.25d0*dlog(xt1*xt2)
xh=0.5d0*dlog(xt2/xt1)
40 write(*,*)1.0d0/xj,xh/xj
end do
STOP
END
SUBROTINAS
SUBROUTINE MATRIX2(DIM,VEC,xt1,xt2)
Subrotina que constrói e diagonaliza o Hamiltoniano
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
INTEGER*4 DIM
INTEGER*4 VEC
DIMENSION n(vec)
COMMON/DADOS/xj,xh
rhopp=0.0d0
rhopm=0.0d0
rhomp=0.0d0
rhomm=0.0d0
rho=0.0d0
do i=1,dim
call ketbin(VEC,i,n)

```

ligações na direção x

$$h_{12}=2.0d_0*n(1)*n(2)$$

$$h_{34}=n(3)*n(4)$$

$$h_{45}=n(4)*n(5)$$

$$h_{67}=n(6)*n(7)$$

$$h_{78}=n(7)*n(8)$$

$$h_{910}=2.0d_0*n(9)*n(10)$$

$$h_x=x_j*(h_{12}+h_{34}+h_{45}+h_{67}+h_{78}+h_{910})$$

ligações na direção y

$$h_{13}=n(1)*n(3)$$

$$h_{15}=n(1)*n(5)$$

$$h_{24}=n(2)*n(4)$$

$$h_{36}=n(3)*n(6)$$

$$h_{47}=n(4)*n(7)$$

$$h_{58}=n(5)*n(8)$$

$$h_{610}=n(6)*n(10)$$

$$h_{79}=n(7)*n(9)$$

$$h_{810}=n(8)*n(10)$$

$$h_y=x_j*(h_{13}+h_{15}+h_{24}+h_{36}+h_{47}+h_{58}+h_{610}+h_{79}+h_{810})$$

termo do campo

$$h_{bt}=(xh)*(n(1)+0.5d_0*n(2)+n(3)+n(4)+n(5)+n(6)+n(7)+n(8)+0.5d_0*n(9)+n(10))$$

Elemento de matriz (energia)

$$A = -h_x+h_y-h_{bt}$$

if((n(1).eq.1).and.(n(10).eq.1))then

$$r_{hopp}=r_{hopp}+d\exp(-A)$$

end if

if((n(1).eq.1).and.(n(10).eq.-1))then

$$r_{hopm}=r_{hopm}+d\exp(-A)$$

```

end if
if((n(1).eq.-1).and.(n(10).eq.1))then
rhomp=rhomp+dexp(-A)
end if
if((n(1).eq.-1).and.(n(10).eq.-1))then
rhomm=rhomm+dexp(-A)
end if
rho=rho+dexp(-A)
end do
xt1=rhopm/rhopp
xt2=rhopm/rhomm
write(*,*)xt1,xt2
RETURN
END
SUBROUTINE ketbin(VEC,idec,n)

```

idec → um número inteiro ( $1 \leq \text{idec} \leq \text{DIM}$ ) rotulando um vetor de base na representação decimal.

Ex.:  $\text{idec} = 1 \Rightarrow (1 \dots 0)$ ,  $\text{idec} = 3 \Rightarrow (0 \ 0 \ 1 \ 0 \dots 0)$ , etc.

Visto que  $\text{idec}$  representa um vetor de base, ele está associado a um vetor de dimensão  $\text{DIM}$  com um único 1 em alguma linha

e com todas as outras linhas contendo 0.

Essa subrotina retorna um vetor de dimensão  $\text{VEC}$  contendo como entradas 0 (correspondentes a +) e 1 (correspondentes a -).

Esses 0's e/ou 1's correspondem à representação binária do (número-1) que é passado como argumento ao procedimento.

Exs.:  $\text{VEC}=4$  e  $\text{idec} = 1 \Rightarrow \text{ifarray} = (0 \ 0 \ 0 \ 0) = |0000\rangle$

$\text{VEC}=4$  e  $\text{idec} = 15 \Rightarrow \text{ifarray} = (1 \ 1 \ 1 \ 0) = |1110\rangle$

$\text{VEC}=4$  e  $\text{idec} = 16 \Rightarrow \text{ifarray} = (1 \ 1 \ 1 \ 1) = |1111\rangle$

```
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
```

```
INTEGER*4 VEC
```

```
INTEGER i,idec,inum
```

```
DIMENSION ifarray(VEC),n(vec)
```

```
inum=idec-1
```

```
do i = VEC,1,-1
```

```
ifarray(i) = mod(inum,2)
```

```
inum=inum/2
```

```
end do
```

Depois da base gerada em termos de 0 e 1 eu a mudo para +1 e -1.

```
do i2=1,vec
```

```
if(ifarray(i2).eq.0) then
```

```
n(i2)=1
```

```
else
```

```
n(i2)=-1
```

```
end if
```

```
end do
```

```
return
```

```
end
```

# Referências

- [1] E. Ising, Z. Physik 31, 253 (1925)
- [2] A. Zangwill, Physics at Surfaces, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1988.
- [3] M. Bander, D.L. Mills, Phys. Rev. B 38 (1988) 12015.
- [4] S.V. Buldyrev, N.V. Dokholyan, A.L. Goldberger, S. Havlin, C.-K. Peng, H.E. Stanley,  
G.M. Viswanathan, Physica A 249 (1998) 430.
- [5] E. Stanley, S.V. Buldyrev, A.L. Goldberger, Z.D. Goldberger, S. Havlin, R.N. Mantegna,  
S.M. Ossadnik, C.-K. Peng, M. Simons, Physica A 205 (1994) 214.
- [6] D. Horvath, M. Gmitra, Z. Kuscsik, Physica A 361 (2006) 589.
- [7] A. Krawiecki, J.A. Hoyst, Physica A 317 (2003) 597.
- [8] R.J. Baxter, Exactly Solved Models in Statistical Mechanics, Academic Press, London, 1982.
- [9] Y. Li, K. Baberschke, Phys. Rev. Lett. 68 (1992) 1208; M.C. Hanf, C. Krembel, D. Bolmont, G. Gewinner, Phys. Rev. B 68 (2003) 144419; Y.J. Choi, H.T. Yi, S. Lee, Q. Huang, V. Kiryukhin, S.-W. Cheong, Phys. Rev. Lett. 100 (2008) 047601.
- [10] P.M.C. de Oliveira, J. Phys. 47 (1986) 1107.

- [11] L. Onsager, Phys. Rev. 65, 117 (1944).
- [12] J.M. Kincaid, E.G.D. Cohen, Phys. Rep. 22 (1975) 57; S. Katsura, S. Fijimori, J. Phys. C 7 (1974) 2506.
- [13] J. Chalupa and M. R. Giri, Solid State Commun. 29, 313 1979.
- [14] X.-Z. Wang, J.S. Kim, Phys. Rev. Lett. 78 (1997) 413;  
X.-Z. Wang, J.S. Kim, Phys. Rev. E 56 (1997) 2793.
- [15] M.A. Neto, R.A. dos Anjos, J.R. de Sousa, Phys. Rev. B 73 (2006) 214439.
- [16] J. Smart, Effective Field Theories of Magnetism Saunders, Philadelphia,1966
- [17] H. A. Bethe, Proc. R. Soc. London, Ser. A 150, 552 1935 ; R. E.Peierls, Proc. Cambridge Philos. Soc. 32, 477 1936 .
- [18] C. Rottman, Phys. Rev. B 41 (1990) 2547.
- [19] R.R. dos Santos, J. Phys. C 18 (1985) L1067.
- [20] I.C. Dinola, A. Saguia, B. Boechat, Physics Letters A 373 (2009) 1606–1609.
- [21] C. Tsallis e S.V.F. Levy, Phys. Rev. Lett. 47, 950 (1981).
- [22] W. Heisenberg, Z. Phys. 49, 619 (1928).
- [23] Lieb E.,Schultz T. e Mattis D. (1961) Ann. Phys. NY 16 407
- [24] R. N. Bhatt e P.A. Lee, PRL 48, 344 (1982).
- [25] H. E. Stanley, Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena (Oxford University Press, New York, 1971).
- [26] K. Wilson, Phys. Rev. B 4, 3174, 3184 (1971).
- [27] H. J. Maris e L. P. Kadanoff. Am. J. Phys. 46,652 (1978).

- [28] J.W. Essan e C.Tsallis, J.Phys. A19, 409 (1976).
- [29] W. Lenz, Z. Physik 21, 613 (1920).
- [30] C. Davis, J. ACM 38, 106 (1993).
- [31] S. Chamois et al., J. ACM 44, 213 (1994).
- [32] M. Gray, MicroBio. Today 76, 86 (1993).
- [33] T. Dauxois et al., Phys. Rev. E 47, 684 (1993).
- [34] C. Johanson, Psychol. Today 58, 46 (1994).
- [35] H. A. Kramers and G. H. Wannier, Phys. Rev 60, 252 (1941).
- [36] B. Kaufmann, Phys Rev. 76, 1232 (1949)
- [37] T. D. Schultz, D. C. Mattis and E. H. Lieb, Rev. Mod. Phys. 36, 856 (1964).
- [38] K. Huang, Statistical Mechanics, Second Edition (John Wiley & Sons, 1987)
- [39] M. Plischke and B. Bergersen, Equilibrium Statistical Physics, Second Edition (World Scientific, 1994).
- [40] L. E. Reichl, A Modern Course in Statistical Physics, Second Edition (John Wiley & Sons, 1998).
- [41] R. K. Pathria, Statistical Mechanics, Second Edition (Butterworth Heinemann, 1996).
- [42] C. N. Yang, Phys. Rev. 85, 809 (1952).
- [43] A. Saguia, T.G. Rappoport, B. Boechat, M.A. Continentino, Physica A 344 (2004) 644.
- [44] J.Roberto Viana, Minos A. Neto e J. Ricardo de Sousa, artigo aceito na Phys. Lett. A.

- [45] I.C. Dinola, A. Saguia, B. Boechat, J. Florencio, em preparação.
- [46] L. P. Kadanoff, *Rev.Mod. Phys.* 39, 395 (1967).
- [47] Th. Niemeijer e J.M.J van Leeuwen, *Physica* 71, 17 (1974)
- [48] L.P. Kadanoff, *Physics* 2, 263 (1966)
- [49] J. M.J. van Leeuwen, *Phys. Rev. Lett.* 34, 1056 (1976).
- [50] R.H. Swendsen e S.Krinsky, *Phys. Rev. Lett.* 47, 950 (1981).
- [51] R. H. Swendsen, *Phys. Rev.* B20, 2080 (1979).
- [52] J.M. Yeomans e R.B.Stinchombe, *J. Phys.* C12, 347 (1979).
- [53] S. Moss de Oliveira, Tese de Doutorado, IF/UFF (1989).
- [54] Lessa, Jean Carlos. Estudo de Propriedades Críticas de Sistemas de Spin de Ising Desordenados, IF/UFRJ (2006).
- [55] B. Boechat, R. Filgueiras, L. Marins, et al., *Mod. Phys. Lett. B* 14 (2000) 749.
- [56] M.A. Continentino, B. Boechat, R.R. dos Santos, *Phys. Rev. B* 50 (1994) 13528.
- [57] T.G. Rappoport, A. Saguia, B. Boechat, M.A. Continentino, *Phys. Rev. B* 64 (2001) 140402.