

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA  
CENTRO DE CIENCIAS FISICAS E MATEMATICAS.

CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

MAGNETISMO DE SUPERFÍCIE EM SISTEMAS COMPRESSÍVEIS DE ISING

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA À UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA PARA  
OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS

ANTÔNIO FLÁVIO DA SILVA MOREIRA

FLORIANÓPOLIS

SANTA CATARINA - BRASIL

ABRIL-1991

MAGNETISMO DE SUPERFÍCIE EM SISTEMAS COMPRESSÍVEIS DE ISING

Antônio Flavio da Silva Moreira

Esta dissertação foi julgada adequada para a obtenção do grau de

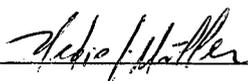
MESTRE EM CIÊNCIAS

Especialização em física e aprovada em sua forma final pelo programa de pós-graduação.



---

Prof. Dr. Wagner Figueiredo  
Orientador



---

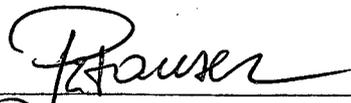
Prof. Dr. Hédio José Müller  
Coordenador de curso

Banca Examinadora



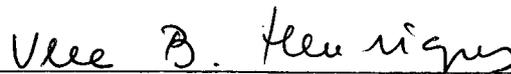
---

Prof. Dr. Wagner Figueiredo



---

Prof. Dr. Paulo Roberto Hauser



---

Prof. Dr. Vera Bohomoletz Henriques

## AGRADECIMENTOS

Ao departamento de física da UFSC.

Ao Professor Wagner Figueiredo pelo dedicado e competente trabalho de orientação.

À funcionária Neusa pela datilografia do trabalho de dissertação.

Ao professor Joaquim Moraes pelo auxílio prestado quando do início dos cálculos computacionais.

Aos professores em geral, cuja orientação nos conduziu a este trabalho.

À minha família.

Ao CNPQ pela bolsa de estudos cedida.

## RESUMO

Neste trabalho estudamos o modelo de Ising em uma rede cúbica semi-infinita. Consideramos um modelo magneto-elástico com uma pressão uniaxial, onde os íons vibram somente em uma direção perpendicular aos planos cristalinos. Na aproximação de campo médio, determinamos o diagrama de fases para os acoplamentos críticos de superfície em função da pressão, e o perfil da magnetização. Utilizando o grupo de renormalização de campo médio, determinamos as superfícies críticas do modelo de Ising na rede cúbica semi-infinita considerando blocos de até 25 spins. O resultado que obtivemos para o acoplamento crítico de superfície é comparável àquele obtido através de simulação de Monte Carlo nesse mesmo modelo.

## ABSTRACT

In this work we study the Ising model on a semi-infinite cubic lattice. We consider a magneto-elastic model under the influence of a uniaxial pressure and where the ions oscillate only in a direction perpendicular to the crystalline planes. In the mean-field approximation, we have determined the phase diagram for the surface critical couplings as a function of pressure, and the profile of magnetization. By using the mean-field renormalization group, we have determined the critical properties of the Ising model on a semi-infinite cubic lattice, considering blocks of up to 25 spins. The result we have obtained for the surface critical coupling is comparable to that determined through Monte-Carlo simulations on the same model.

## LISTA DE FIGURAS

- FIGURA 1 - Representação esquemática da rede considerada com as interações utilizadas neste trabalho.....04
- FIGURA 2 - Magnetização dos planos 1, 2 e do interior do volume em função de  $K_B T/J$  para duas equações acopladas com  $m_{n+1}=m_n$  e  $J^1/J=1$ ,  $J_s/J=2.5$ ,  $\lambda=0$ .....22
- FIGURA 3 - Magnetização dos planos 1, 2, 3, 4 e do interior do volume em função de  $K_B T/J$  para quatro equações acopladas com  $m_{n+1}=m_n$  e  $J^1/J=1$ ,  $J_s/J=2.5$ ,  $\lambda=0$ .....22
- FIGURA 4 - Magnetização dos planos 1, 2, 3, 8 e do interior do volume em função de  $K_B T/J$  para oito equações acopladas com  $m_{n+1}=m_n$  e  $J^1/J=1$ ,  $J_s/J=2.5$ ,  $\lambda=0$ .....23
- FIGURA 5 - Magnetização dos planos 1, 2, 3, 4 e do interior do volume em função de  $K_B T/J$  para quatro equações acopladas com  $m_{n+1}=m_n$  e  $J^1/J=1$ ,  $J_s/J=1.5$ ,  $\lambda=0$ ,.....23
- FIGURA 6 - Magnetização dos planos 1, 2, 3, 8 e do interior do volume em função de  $K_B T/J$  para oito equações acopladas com  $m_{n+1}=m_n$  e  $J^1/J=1$ ,  $J_s/J=1.0$ ,  $\lambda=0$ .....24
- FIGURA 7 - Magnetização dos planos 1, 2, 3, 8 e do interior do volume em função de  $K_B T/J$  para duas equações acopladas com  $m_{n+1}=m_n$  e  $J^1/J=1$ ,  $J_s/J=1.0$ ,  $\lambda=0$ .....24
- FIGURA 8 - Superfície delimitadora para a condição  $T_{cs}=T_{cv}$ , no subespaço de parâmetros  $(J_s/J, J^1/J, \lambda)$ , com  $J_s/J > 0$ . São mostradas as parábolas geradoras da superfície em  $\lambda = -0.5, 0, 1$  e  $2$ ; a linha sobre a qual estão os seus vértices e a secção no plano

$(J_s/J, J^1/J)$ .....	32
FIGURA 9 - Diagrama de fases no plano $(J_s/J, J^1/J)$ para $\lambda=0$ obtido através da teoria de campo médio considerando-se que a magnetização de 2, 4, 6, ou infinitos planos, diferem daquela do volume.....	32
FIGURA 10 - Superfície no espaço $(J_s/J, \lambda, T_{cs}/T_{cv})$ , para $J^1/J=0.5$ .....	36
FIGURA 11 - Superfície no espaço $(J_s/J, \lambda, T_{cs}/T_{cv})$ , para $J^1/J=1.0$ .....	37
FIGURA 12 - Superfície no espaço $(J_s/J, \lambda, T_{cs}/T_{cv})$ , para $J^1/J=1.5$ .....	37
FIGURA 13 - Blocos de 1, 2, e 8 spins, mostrando as interações com os campos efetivos $\underline{b}$ em uma rede cúbica simples.....	39
FIGURA 14 - Blocos de 1 e dois spins para cada plano cristalino.....	41
FIGURA 15 - Bloco de 4 spins no $i$ -ésimo plano.....	45
FIGURA 16 - Diagrama de fases no plano $J_s/J$ versus $J^1/J$ para $T_{cs}=T_{cv}$ , proveniente do GRM para blocos com um e dois spins.....	46
FIGURA 17 - Blocos de 2 e 4 spins entre o primeiro e segundo planos.....	48
FIGURA 18 - Curvas relacionando $J^1/J$ e $J_s/J$ para $T_{cs}=1.50T_{cv}$ , $T_{cs}=1.25T_{cv}$ e $T_{cs}=T_{cv}$ , obtidas a partir da equação (4-30).....	53
FIGURA 19 - Blocos de 2, 4, e 8 spins pertencentes a dois planos.....	59

## SUMARIO

Agradecimentos.....	ii
Resumo.....	iii
Abstract.....	iv
Lista de Figuras.....	v
CAPÍTULO 1 - Introdução.....	01
CAPÍTULO 2 - Modelos magneto-elásticos em redes semi-infinitas de spins de Ising.....	04
CAPÍTULO 3 - Perfil da magnetização na aproximação de campo médio.....	17
CAPÍTULO 4 - Comportamento crítico na aproximação do grupo de renormalização de campo médio.....	38
CAPÍTULO 5 - Conclusões.....	64
BIBLIOGRAFIA.....	67

## CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO

O interesse pelo estudo do magnetismo de superfície tem aumentado muito nos últimos anos. Com o desenvolvimento de técnicas experimentais que permitem obter informações acerca do ordenamento magnético na superfície dos cristais, houve também, simultaneamente, um grande interesse teórico com aplicações de diversas técnicas e métodos desenvolvidos em Mecânica Estatística. Entre as técnicas experimentais de maior sucesso no estudo do ordenamento magnético de superfície estão a difração de elétrons polarizados de baixa energia, espectroscopia de captura de elétrons e a ressonância de spins eletrônicos. No trabalho de revisão de Celotta e Pierce [1], podemos encontrar uma descrição das técnicas recentemente utilizadas.

Um problema que despertou um enorme interesse foi o aparecimento de uma fase ferromagnética acima da temperatura crítica do cristal. Ou seja, para uma rede semi-infinita de spins, que apresenta assim uma superfície livre, é possível de se ter uma configuração do sistema a uma dada temperatura, na qual apenas os planos próximos à superfície livre do cristal estejam magneticamente ordenados, enquanto que os planos mais internos já se encontram em uma fase paramagnética. Por exemplo, para o íon terra rara, Gadolínio, observou-se que a temperatura crítica do cristal é de 293K, enquanto que é possível de se encontrar um ordenamento magnético de superfície até a temperatura de 307K [2]. Esse tipo de comportamento também tem sido observado em diversos elementos da família das terras raras.

Os mecanismos que levam a esse tipo de comportamento não são suficientemente conhecidos, pois existem poucas informações acerca do tipo de ordenamento, se ferro ou antiferromagnético, se os spins são localizados ou itinerantes. Por outro lado faltam também informações sobre as magnitudes dos acoplamentos de intercâmbio próximo à superfície, se existe uma reconstrução cristalina próximo à temperatura crítica do cristal, etc...

Do ponto de vista teórico, diversas técnicas tem sido utilizadas: Teoria de Campo Efetivo [3-5], Expansões em Séries de Altas Temperaturas [6], Simulações de Monte Carlo [7,8], Grupo de Renormalização [9-11], Método das Funções de Green [12-14]. Uma revisão sobre os diversos tratamentos teóricos utilizados pode ser encontrada no trabalho de revisão de Binder [15].

Neste trabalho consideramos um modelo de Ising em uma rede cúbica semi-infinita. Além disso, vamos supor que os ions possam realizar pequenas oscilações em torno de suas posições de equilíbrio, numa direção que seja perpendicular aos planos cristalinos. Uma pressão uniaxial também é aplicada nos planos da superfície.

O estudo de modelos magnéticos compressíveis já vem sendo realizado há bastante tempo. Entre os modelos mais discutidos temos o modelo proposto por Domb [16], no qual a integral de intercâmbio depende apenas do espaçamento da rede; o modelo de Baker e Essam [17], onde as flutuações microscópicas da rede são consideradas, porem são desprezadas as tensões de cisalhamento entre as cadeias e o modelo de Jasnow e Wagner [18], onde as flutuações microscópicas são consideradas, mas a tensão de cisalhamento é considerada infinita. Em um trabalho recente Henriques e Salinas [19] revisaram esses modelos no contexto do grupo de renormalização e obtiveram diferentes Hamiltonianos efetivos de spins de acordo com as condições de contorno utilizadas.

No capítulo 2 deste trabalho, derivamos diferentes Hamiltonianos efetivos de spins para o modelo de Ising numa rede cúbica semi-infinita, submetida a uma pressão uniaxial.

No capítulo 3, estudamos o perfil da magnetização e o diagrama de fases obtidos para diferentes combinações dos parâmetros de intercâmbio da superfície e do volume. Discutimos o problema da descontinuidade da derivada da curva de magnetização dos planos superficiais na temperatura crítica de volume. Como em nosso Hamiltoniano efetivo de spins a integral de intercâmbio entre planos é dependente da pressão externa, discutimos também o comportamento do diagrama de fases em função deste parâmetro. Os resultados nesse capítulo foram obtidos na aproximação de campo médio.

No capítulo 4, realizamos um estudo do modelo de Ising

numa rede cúbica semi-infinita através do grupo de renormalização de campo médio. Utilizamos as duas versões deste método, a fim de determinar o acoplamento crítico de superfície e os expoentes críticos do modelo. Consideramos blocos com até 25 spins e os resultados indicam que, dentro do grupo de renormalização de campo médio, à medida que os blocos começam a crescer os valores dos parâmetros críticos não variam apreciavelmente. Em particular, para os sistemas acima de duas dimensões, ocorrem oscilações nos valores dos parâmetros críticos, fato já apontado anteriormente por Indekeu e colaboradores[21] para o modelo de Ising em três dimensões. Os valores obtidos para o acoplamento crítico de superfície, são cada vez mais próximos daqueles determinados por simulações de Monte Carlo, à medida que aumentamos o tamanho dos blocos. Finalmente, apresentamos no capítulo 5 as principais conclusões deste trabalho e discutimos algumas possíveis extensões do mesmo.

## CAPÍTULO 2 - MODELOS MAGNETO-ELÁSTICOS EM REDES SEMI-INFINITAS DE SPINS DE ISING

Neste primeiro capítulo, estamos interessados, unicamente, em obter Hamiltonianos efetivos de spins para alguns modelos magneto-elásticos. Nosso objetivo é eliminar as variáveis puramente mecânicas do Hamiltoniano original (momento e posição dos íons), para obtermos uma expressão para a energia em função da distribuição dos spins e da pressão exercida sobre o sistema. O modelo por nós considerado, pode ser visualizado na figura 1.

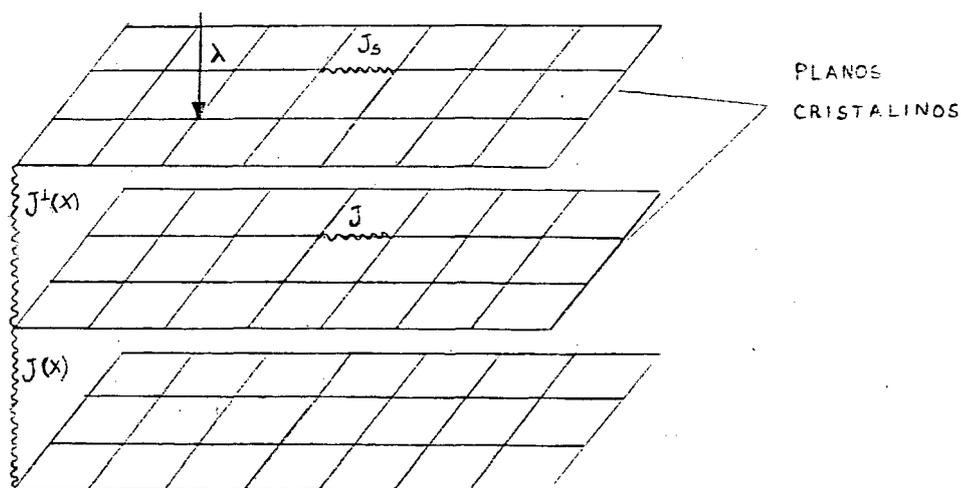


Fig.1- Representação esquemática da rede considerada com as interações utilizadas neste trabalho.

Consideramos uma rede cúbica simples de spins de Ising, com uma superfície livre. Vamos supor ainda que, a nossa rede possa ser dividida em  $N$  planos paralelos à superfície. Estaremos particularmente interessados no comportamento uniaxial do modelo: apenas o movimento dos íons na direção perpendicular aos planos será considerado. Sob este aspecto, o modelo mecânico é essencialmente unidimensional. Como veremos, podemos considerar o movimento dos átomos dentro de um dado plano como independentes, ou ainda, como se movendo rigidamente com o plano.

Em ambas as situações, assumamos que a constante de troca entre os íons do mesmo plano é independente das vibrações dos mesmos, já que mecanicamente o sistema é unidimensional.

Relativamente à cinética da rede, esta pode sofrer deformações macroscópicas e microscópicas, a saber: macroscópicas são aquelas variações do parâmetro de rede, devido às mudanças de temperatura em relação a uma dada temperatura de referência  $T_0$  e a ação da força  $\lambda$ . Assim, chamando-se de  $a$  o parâmetro de rede, à temperatura  $T$  e pressão  $\lambda$ ,  $a = a(T, \lambda)$ ,  $a_0 = a(T_0, 0)$ . As oscilações microscópicas são aquelas que surgem aleatoriamente como decorrência dos deslocamentos dos íons em relação às suas posições de equilíbrio na rede.

Os dois tipos de deformações são igualmente importantes e devem ser incluídas no problema, para melhor descrever as propriedades termodinâmicas do sistema, pois possuem a mesma constante elástica e participam com energias da mesma ordem de grandeza. Por exemplo o modelo utilizado por Baker e Essam [17], leva em conta os dois tipos de deformação, ao contrário do modelo de Domb [16], que só leva em conta as flutuações macroscópicas.

Devemos mencionar ainda, o fato de que o sistema puramente elástico, possui algumas anomalias. Em primeiro lugar, o sistema é mecanicamente instável na ausência de interação com os segundos vizinhos [19]. Sabemos ainda que, para que possa haver contração da rede, deve existir um termo anarmônico no potencial elástico, problema este, bem conhecido em física do estado sólido [22].

Como estamos interessados no movimento dos íons, apenas na direção perpendicular à superfície, podemos considerar um conjunto de linhas de íons perpendiculares à superfície. Portanto, não consideraremos vibrações iônicas dentro dos planos cristalinos ou variações do parâmetro de rede em geral, sendo que suas constantes de troca, serão independentes de quaisquer efeitos de temperatura e pressão.

Dentre os cinco tipos de condições de contorno que usaremos, em três o volume da rede será fixado e o trabalho da força  $\lambda$  não aparecerá explicitamente no Hamiltoniano. Neste caso, obteremos o Hamiltoniano efetivo de spins com a dependência da variação do volume da rede ( $a - a_0$ ). Quando não fixarmos o volume,

estaremos trabalhando no ensemble de pressões e o Hamiltoniano efetivo será obtido como função de  $\lambda$ .

Neste trabalho, vamos considerar que as deformações sejam do tipo harmônico e só dependa da distância entre os íons vizinhos. O potencial de interação é dado por,

$$\varphi(x_{i+1} - x_i) = \varphi_0 + \frac{1}{2} K (x_{i+1} - x_i - a_0)^2 \quad i=1,2,\dots,N-1 \quad (2-1)$$

Onde  $x_i$  e  $x_{i+1}$  são as coordenadas dos íons vizinhos,  $\varphi_0$  e  $K$  são constantes positivas. As constantes de intercambio são linearmente dependentes da distância entre os íons e são dadas por,

$$J(x_{i+1} - x_i) = J - j(x_{i+1} - x_i - a_0) \quad (2-2)$$

onde  $\underline{J}$  e  $\underline{j}$  são constantes positivas no caso ferromagnético. No primeiro plano representamos por  $\underline{J}_s$  a constante de intercambio e nos demais planos por  $\underline{J}$ . Apenas entre o primeiro e o segundo planos a constante será dada por,

$$J^1(x_2 - x_1) = J^1 - j^1(x_2 - x_1 - a_0) \quad (2-3)$$

A seguir, estudaremos cinco casos particulares com condições de contorno distintas.

### 1<sup>o</sup> caso - Planos rígidos - último plano fixo:

Neste caso, os planos de íons se movem rigidamente, com a superfície livre móvel e o último plano imóvel. O Hamiltoniano para este caso é o seguinte:

$$\begin{aligned} H = N_s \sum_{i=1}^{N-1} \frac{p_i^2}{2m} + N_s \sum_{i=1}^{N-1} \left[ \varphi_0 + \frac{1}{2} K (x_{i+1} - x_i - a_0)^2 \right] + N_s \lambda [x_N - x_1 - (N-1)a_0] + \\ - J_s \sum_{\lambda\lambda'} G_{1\lambda} G_{1\lambda'} - J \sum_{i=2}^N \sum_{\lambda\lambda'} G_{i\lambda} G_{i\lambda'} - \sum_{\lambda\lambda'} \left[ J^1 - j^1(x_2 - x_1 - a_0) \right] G_{1\lambda} G_{2\lambda} + \\ - \sum_{i=2}^{N-1} \sum_{\lambda} \left[ J - j(x_{i+1} - x_i - a_0) \right] G_{i\lambda} G_{i+1\lambda} \quad (2-4) \end{aligned}$$

Onde  $N_s$  é o número de spins em cada plano,  $N$  em cada linha,  $p_i$  o momento linear da  $i$ -ésima partícula e  $m$  a sua massa;  $\lambda$  é a força que atua em cada uma das linhas. O primeiro termo representa a energia cinética dos íons, o segundo a energia potencial elástica, o terceiro, o trabalho realizado pela força externa. Os demais termos são as contribuições devido à interação de intercâmbio entre os spins de Ising ( $\sigma_r = \pm 1$ ). Os índices  $r$  e  $r'$  são para designar posições dentro dos planos. Escrevendo que,

$$\chi_i = \lambda a_i + \mu_i$$

e fazendo-se a seguinte mudança de variáveis,

$$N_i = \mu_{i+1} - \mu_i$$

$$N_N = \mu_N$$

(2-5)

podemos escrever a seguinte expressão para a função de partição desse modelo:

$$Z(T, \lambda, N_T) = \sum_{\{\sigma_{ir}\}} \int_{-\infty}^{\infty} \left( \prod_{i=1}^{N-1} dp_i \right) \left( \prod_{i=1}^N dN_i \right) e^{-\beta H} \delta(N_N), \quad (2-6)$$

onde introduzimos a função delta de Dirac para fixar o último plano.  $N_T = NN_s$  é o número total de spins e  $\beta = 1/KT$  (sendo  $K$  a constante de Boltzmann e  $T$  a temperatura). Podemos integrar em  $\{p_i\}$  separadamente,

$$Z(T, \lambda, N_T) = \sum_{\{\sigma_{ir}\}} \int_{-\infty}^{\infty} \left( \prod_{i=1}^N dN_i \right) \delta(N_N) \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^{N-1} dp_i e^{-\beta H}, \quad (2-7)$$

ou seja,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^{N-1} dp_i \exp\left(-\beta N_s \sum_{i=1}^{N-1} \frac{p_i^2}{2m}\right) = \left(\frac{2\pi m}{\beta N_s}\right)^{\frac{N-1}{2}} \quad (2-8)$$

Explicitando a função de partição,

$$Z(T, \lambda, N_T) = \left( \frac{2\pi m}{\beta N_s} \right)^{\frac{N-1}{2}} \sum_{\{\sigma_{1n}\}} \exp \beta \left\{ J_s \sum_{n,n'} \sigma_{1n} \sigma_{1n'} + J \sum_{i=2}^N \sum_{n,n'} \sigma_{in} \sigma_{in'} \right\}.$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\lambda=1}^N d\nu_{\lambda} \exp -\beta \left[ N_s \sum_{\lambda=1}^{N-1} \left( \varphi_0 + \frac{1}{2} k \nu_{\lambda}^2 \right) + N_s \lambda \sum_{\lambda=1}^{N-1} \nu_{\lambda} - (J^{\perp} - J^{\parallel} \nu_{\lambda}) \sum_n \sigma_{1n} \sigma_{2n} + \right. \\ \left. - \sum_{\lambda=2}^{N-1} \sum_n (J - J \nu_{\lambda}) \sigma_{in} \sigma_{i+1n} \right] \delta(\nu_N). \quad (2-9)$$

Como o integrando independe de  $\nu_n$ , podemos escrever que,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(\nu_N) d\nu_N = 1$$

Separando o que vai ser integrado em  $\langle \nu_i \rangle$ ,

$$Z(T, \lambda, N_T) = \left( \frac{2\pi m}{\beta N_s} \right)^{\frac{N-1}{2}} \exp \left[ -\beta N_s (N-1) \varphi_0 \right] \sum_{\{\sigma_{1n}\}} \exp \beta \left\{ J_s \sum_{n,n'} \sigma_{1n} \sigma_{1n'} + \right. \\ \left. + J \sum_{i=2}^N \sum_{n,n'} \sigma_{in} \sigma_{in'} + J^{\perp} \sum_n \sigma_{1n} \sigma_{2n} + J \sum_{i=2}^{N-1} \sum_n \sigma_{in} \sigma_{i+1n} \right\} \cdot \\ \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\lambda=1}^{N-1} d\nu_{\lambda} \exp -\beta \left\{ \frac{N_s k}{2} \sum_{\lambda=1}^{N-1} \nu_{\lambda}^2 + (J^{\perp} \sum_n \sigma_{1n} \sigma_{2n} + N_s \lambda) \nu_{\lambda} + \right. \\ \left. + N_s \lambda \sum_{\lambda=2}^{N-1} \nu_{\lambda} + J \sum_{\lambda=2}^{N-1} \left( \sum_n \sigma_{in} \sigma_{i+1n} \right) \nu_{\lambda} \right\} \quad (2-10)$$

Integrando, temos finalmente,

$$Z(T, \lambda, N_T) = \left( \frac{2\pi m^{4/2}}{\beta N_s k^{1/2}} \right)^{N-1} \exp \left[ -\beta N_s (N-1) \left( \varphi_0 - \frac{\lambda^2}{2k} \right) \right] \sum_{\{\sigma_{1n}\}} \exp \beta \cdot \\ \cdot \left\{ \frac{1}{2N_s k} \left[ J^{\perp 2} \left( \sum_n \sigma_{1n} \sigma_{2n} \right)^2 + J^2 \sum_{i=2}^{N-1} \left( \sum_n \sigma_{in} \sigma_{i+1n} \right)^2 + \left( J^{\perp} + \frac{\lambda J^{\perp}}{k} \right) \sum_n \sigma_{1n} \sigma_{2n} + \right. \right. \\ \left. \left. + \left( J + \frac{\lambda J}{k} \right) \sum_{i=2}^{N-1} \sum_n \sigma_{in} \sigma_{i+1n} + J_s \sum_{n,n'} \sigma_{1n} \sigma_{1n'} + J \sum_{i=2}^N \sum_{n,n'} \sigma_{in} \sigma_{in'} \right\} \quad (2-11)$$

O Hamiltoniano efetivo de spins para este caso fica :

$$H_{ef} = \frac{-1}{2N_s k} \left[ J^{\perp 2} \left( \sum_n \sigma_{1n} \sigma_{2n} \right)^2 + J^2 \sum_{i=2}^{N-1} \left( \sum_n \sigma_{in} \sigma_{i+1n} \right)^2 \right] - \left( J^{\perp} + \frac{\lambda J^{\perp}}{k} \right) \sum_n \sigma_{1n} \sigma_{2n} + \\ - \left( J + \frac{\lambda J}{k} \right) \sum_{i=2}^{N-1} \sum_n \sigma_{in} \sigma_{i+1n} - J_s \sum_{n,n'} \sigma_{1n} \sigma_{1n'} - J \sum_{i=2}^N \sum_{n,n'} \sigma_{in} \sigma_{in'}. \quad (2-12)$$

Podemos observar que a medida que a força  $\lambda$  aumenta, a magnitude das constantes de intercâmbio também aumenta, como era de se esperar, pois a distância entre os spins tende a diminuir. Notamos o aparecimento de interações de longo alcance entre spins de planos vizinhos, o que na prática, ajuda a impedir flutuações de spins [19], pois agrupamentos  $\uparrow\uparrow\uparrow$  e  $\uparrow\uparrow\downarrow$  são menos energéticos que  $\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow$ .

## 2º caso - Planos rígidos - primeiro e último planos fixos:

Aqui não aparece explicitamente o trabalho da força  $\lambda$ , pois o primeiro plano é fixo. O Hamiltoniano neste caso é o seguinte:

$$\begin{aligned}
 H = N_s \sum_{\lambda=2}^{N-1} \frac{p_\lambda^2}{2m} + N_s \sum_{\lambda=1}^{N-1} \left[ \varphi_0 + \frac{k}{2} (x_{\lambda+1} - x_\lambda - a_0)^2 \right] - \sum_{\lambda} \left[ J^1 - J^1 (x_2 - x_1 - a_0) \right] \sigma_{1\lambda} \sigma_{2\lambda} + \\
 - \sum_{\lambda=2}^{N-1} \sum_{\lambda'} \left[ J - J (x_{\lambda+1} - x_\lambda - a_0) \right] \sigma_{\lambda\lambda'} \sigma_{\lambda+1\lambda'} - J_5 \sum_{\lambda\lambda'} \sigma_{\lambda\lambda'} \sigma_{2\lambda} - J \sum_{\lambda=2}^N \sum_{\lambda'} \sigma_{\lambda\lambda'} \sigma_{\lambda+1\lambda'} .
 \end{aligned} \tag{2-13}$$

A função de partição para esse modelo torna-se,

$$\begin{aligned}
 Z(T, N_T) &= \sum_{\{\sigma_{\lambda\lambda'}\}} \int_{-\infty}^{\infty} \left( \prod_{\lambda=2}^{N-1} dp_\lambda \right) \left( \prod_{\lambda=1}^N dx_\lambda \right) \delta(x_1 - a) \delta(x_N - Na) e^{-\beta H} \\
 &= \sum_{\{\sigma_{\lambda\lambda'}\}} \int_{-\infty}^{\infty} \left( \prod_{\lambda=2}^{N-1} dp_\lambda \right) \left( \prod_{\lambda=c}^{N-1} dN_\lambda \right) \delta(N_c) \delta\left(\sum_{\lambda=c}^{N-1} N_\lambda\right) e^{-\beta H}
 \end{aligned} \tag{2-14}$$

Observando que escrevemos,

$$x_\lambda = \lambda a + \mu_\lambda$$

e fazendo-se a seguinte mudança de variáveis,

$$N_c = \mu_1$$

$$N_\lambda = \mu_{\lambda+1} - \mu_\lambda$$

(2-15)

e notando que a função delta, que fixa o último plano, pode ser

representada por,

$$\delta\left(\sum_{\lambda=0}^{N-1} n_{\lambda}\right) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(i\beta s \sum_{\lambda=0}^{N-1} n_{\lambda}\right) ds, \quad (2-16)$$

obtemos, após integrarmos sobre todos os valores de  $p_i$ ,  $v_i$  e  $s$ , a seguinte expressão para a função de partição:

$$\begin{aligned} Z(T, N_T) = & \left(\frac{2\pi}{\beta N_S}\right)^{N-2} \sqrt{\frac{m^{N-2}}{K^{N-2}(N-1)\beta^2}} \exp -\beta \left\{ N_S(N-1) \left[ \varphi_0 + \frac{K}{2} (a-a_0)^2 \right] - \right. \\ & - [J^{\perp} - J^{\parallel}(a-a_0)] \sum_{\lambda} \sigma_{1\lambda} \sigma_{2\lambda} - [J - J(a-a_0)] \sum_{\lambda=2}^{N-1} \sum_{\lambda} \sigma_{\lambda\lambda} \sigma_{\lambda+1\lambda} - \frac{1}{2N_S K} \left[ J^{\perp 2} \left( \sum_{\lambda} \sigma_{1\lambda} \sigma_{2\lambda} \right)^2 + \right. \\ & \left. \left. + J^{\parallel 2} \sum_{\lambda=2}^{N-1} \left( \sum_{\lambda} \sigma_{\lambda\lambda} \sigma_{\lambda+1\lambda} \right)^2 \right] + \frac{1}{2N_S(N-1)K} \left( J^{\perp} \sum_{\lambda} \sigma_{1\lambda} \sigma_{2\lambda} + J \sum_{\lambda=2}^{N-1} \sum_{\lambda} \sigma_{\lambda\lambda} \sigma_{\lambda+1\lambda} \right)^2 \right\} \quad (2-17) \end{aligned}$$

cujo Hamiltoniano efetivo de spins será:

$$\begin{aligned} H_{ef} = & - [J^{\perp} - J^{\parallel}(a-a_0)] \sum_{\lambda} \sigma_{1\lambda} \sigma_{2\lambda} - [J - J(a-a_0)] \sum_{\lambda=2}^{N-1} \sum_{\lambda} \sigma_{\lambda\lambda} \sigma_{\lambda+1\lambda} - J_S \sum_{\lambda\lambda'} \sigma_{1\lambda} \sigma_{1\lambda'} + \\ & - J \sum_{\lambda=2}^N \sum_{\lambda\lambda'} \sigma_{\lambda\lambda} \sigma_{\lambda\lambda'} - \frac{1}{2N_S K} \left[ J^{\perp 2} \left( \sum_{\lambda} \sigma_{1\lambda} \sigma_{2\lambda} \right)^2 + J^{\parallel 2} \sum_{\lambda=2}^{N-1} \left( \sum_{\lambda} \sigma_{\lambda\lambda} \sigma_{\lambda+1\lambda} \right)^2 \right] + \\ & + \frac{1}{2N_S(N-1)K} \left( J^{\perp} \sum_{\lambda} \sigma_{1\lambda} \sigma_{2\lambda} + J \sum_{\lambda=2}^{N-1} \sum_{\lambda} \sigma_{\lambda\lambda} \sigma_{\lambda+1\lambda} \right)^2. \quad (2-18) \end{aligned}$$

Observamos portanto, que no caso de planos rígidos e volume constante, surgem no Hamiltoniano efetivo, interações de pares de spins de planos vizinhos, por toda a extensão destes planos e interações de pares de spins de planos vizinhos com pares semelhantes de quaisquer outros dois planos.

### 3º caso - Planos não rígidos - último plano fixo:

No caso de planos não rígidos, as linhas de spins podem se movimentar independentemente umas das outras, já que nosso

modelo mecânico é essencialmente unidimensional. Neste caso, temos o seguinte Hamiltoniano:

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_n \sum_{\lambda=1}^{N-1} \frac{p_{\lambda n}^2}{2m} + \sum_n \sum_{\lambda=1}^{N-1} \left[ \varphi_0 + \frac{k}{2} (x_{\lambda+1} - x_\lambda - a_0)^2 \right] + \sum_n \lambda [x_N - x_1 - (N-1)a_0] + \\
 & - J_s \sum_{n,n'} \sigma_{1n} \sigma_{1n'} - \sum_n \left[ J^1 - J^2 (x_{2n} - x_{1n} - a_0) \right] \sigma_{1n} \sigma_{2n} - J \sum_{n,n'} \sigma_{1n} \sigma_{1n'} - \\
 & - \sum_n \sum_{\lambda=2}^{N-1} \left[ J - J (x_{\lambda+1 n} - x_{\lambda n} - a_0) \right] \sigma_{1n} \sigma_{\lambda+1 n} \quad (2-19)
 \end{aligned}$$

Escrevendo que:

$$x_i = i a_0 + \mu_i$$

e fazendo-se a conveniente mudança de variáveis,

$$\nu_i = \mu_{i+1} - \mu_i$$

$$\nu_N = \mu_N$$

(2-20)

podemos escrever a seguinte expressão para a função de partição:

$$Z(T, \lambda, N_T) = \sum_{\{\sigma_{1n}\}} \prod_n \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \left( \prod_{\lambda=1}^{N-1} d p_{\lambda n} \right) \left( \prod_{\lambda=1}^N d \nu_{\lambda n} \right) \delta(\nu_N) e^{-\beta H} \right] \quad (2-21)$$

Realizando-se essas integrais, obtemos,

$$\begin{aligned}
 Z(T, \lambda, N_T) = & \left( \frac{2\pi}{\beta} \right)^{(N-1)N_s} \left( \frac{m}{k} \right)^{\frac{(N-1)N_s}{2}} \exp -\beta \left\{ N_s(N-1) \left( \varphi_0 - \frac{\lambda^2}{2k} \right) - \right. \\
 & - \frac{N_s}{2k} \left[ J^1{}^2 + (N-2) J^2 \right] \left. \right\} \sum_{\{\sigma_{1n}\}} \exp \beta \left\{ \left( J^1 + \frac{\lambda J^1}{k} \right) \sum_n \sigma_{1n} \sigma_{2n} + \right. \\
 & \left. + \left( J + \frac{\lambda J}{k} \right) \sum_{\lambda=2}^{N-1} \sum_n \sigma_{1n} \sigma_{\lambda+1 n} + J_s \sum_{n,n'} \sigma_{1n} \sigma_{1n'} + J \sum_{\lambda=2}^N \sum_{n,n'} \sigma_{1n} \sigma_{1n'} \right\}. \quad (2-22)
 \end{aligned}$$

O Hamiltoniano efetivo que obtemos é o seguinte:

$$H_{\text{ef}} = -\left(J^1 + \frac{\lambda d^1}{K}\right) \sum_n \sigma_{1n} \sigma_{2n} - \left(J + \frac{\lambda d}{K}\right) \sum_{l=2}^{N-1} \sum_n \sigma_{ln} \sigma_{l+1n} +$$

$$- J_5 \sum_{n, n'} \sigma_{1n} \sigma_{1n'} - J \sum_{l=2}^N \sum_{n, n'} \sigma_{ln} \sigma_{ln'}$$

(2-23)

Observamos que o Hamiltoniano efetivo de spins obtido no ensemble de pressões não apresenta interação de quatro spins.

4<sup>o</sup> caso - Planos não rígidos - Primeiro e último planos fixos:

O Hamiltoniano para esta condição de contorno é o seguinte:

$$H = \sum_n \sum_{l=2}^{N-1} \frac{p_{ln}^2}{2m} + \sum_n \sum_{l=1}^{N-1} \left[ \psi_0 + \frac{K}{2} (x_{l+1} - x_l - a_0)^2 \right] - J_5 \sum_{n, n'} \sigma_{1n} \sigma_{1n'} +$$

$$- \sum_n \left[ J^1 - J^1 (x_2 - x_1 - a_0) \right] \sigma_{1n} \sigma_{2n} - J \sum_{l=2}^N \sum_{n, n'} \sigma_{ln} \sigma_{ln'} +$$

$$- \sum_n \sum_{l=2}^{N-1} \left[ J - J (x_{l+1} - x_l - a_0) \right] \sigma_{ln} \sigma_{l+1n}$$

(2-24)

Com a seguinte mudança de variáveis,

$$x_i = i a + \mu_i$$

$$r_l = \mu_{l+1} - \mu_l$$

$$r_0 = \mu_1$$

(2-25)

a função de partição torna-se,

$$Z(T, N_T) = \sum_{\{\sigma_{ln}\}} \prod_n \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \left( \prod_{l=2}^{N-1} d\beta_{ln} \right) \left( \prod_{l=0}^{N-1} dr_{ln} \right) \delta(r_0) \delta\left(\sum_{l=0}^{N-1} r_l\right) e^{-\beta H} \right]$$

(2-26)

A função delta toma a mesma representação do segundo caso, e a função de partição fica,

$$\begin{aligned}
 Z(T, N_T) = & \left( \frac{2\pi m}{\beta} \right)^{\frac{(N-2)N_S}{2}} \left( \frac{2\pi}{\beta} \right)^{\frac{(N-1)N_S}{2}} \left[ \frac{K}{2\pi\beta(N-1)} \right] \exp -\beta \left\{ N_S [(N-1)\varphi_0 + \right. \\
 & + \frac{K}{2}(N-1)(a-a_0)^2 - [j^1 + (N-2)j^2] \left. \right\} \sum_{\{G_{1n}\}} \exp \beta \left\{ [J^1 - j^1(a-a_0) \sum_n G_{1n} G_{2n} + \right. \\
 & + [J - j(a-a_0)] \sum_{\lambda=2}^{N-1} \sum_n G_{\lambda n} G_{\lambda+1 n} - \frac{1}{2(N-1)K} \sum_n (j^1 G_{1n} G_{2n} + j \sum_{\lambda=2}^{N-1} G_{\lambda n} G_{\lambda+1 n})^2 + \\
 & \left. + J_S \sum_{n,n'} G_{1n} G_{1n'} + J \sum_{\lambda=2}^N \sum_{n,n'} G_{\lambda n} G_{\lambda n'} \right. \quad (2-27)
 \end{aligned}$$

O Hamiltoniano efetivo é,

$$\begin{aligned}
 H_{ef} = & -[J^1 - j^1(a-a_0)] \sum_n G_{1n} G_{2n} - [J - j(a-a_0)] \sum_{\lambda=2}^{N-1} \sum_n G_{\lambda n} G_{\lambda+1 n} + \\
 & + \frac{1}{2(N-1)K} \sum_n (j^1 G_{1n} G_{2n} + j \sum_{\lambda=2}^{N-1} G_{\lambda n} G_{\lambda+1 n})^2 - J_S \sum_n G_{1n} G_{1n'} - \\
 & - J \sum_{\lambda=2}^N \sum_n G_{\lambda n} G_{\lambda n'} \quad (2-28)
 \end{aligned}$$

e vemos, que neste caso, as interações entre pares de spins, só ocorrem dentro da mesma linha.

5º caso - Planos não Rígidos - comprimento total das linhas é constante:

Assumimos, por razões físicas, que o último plano é fixo e usamos como condição de contorno, que o comprimento total das linhas é constante, ou seja, a soma dos comprimentos de todas as linhas não varia. Mas como o volume do sistema é proporcional ao comprimento total das linhas, então este será constante e conseqüentemente, o trabalho da força  $\lambda$  não estará representado explicitamente no Hamiltoniano. O Hamiltoniano do sistema é dado

pela seguinte expressão:

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{\mathcal{N}} \sum_{\lambda=1}^{N-1} \frac{p_{\lambda\mathcal{N}}^2}{2m} + \sum_{\mathcal{N}} \sum_{\lambda=1}^{N-1} \left[ \varphi_0 + \frac{\kappa}{2} (x_{\lambda+1\mathcal{N}} - x_{\lambda\mathcal{N}} - a_0) \right] - \\
 & - J_s \sum_{\mathcal{N}\mathcal{N}'} \sigma_{1\mathcal{N}} \sigma_{1\mathcal{N}'} - J \sum_{\mathcal{N}\mathcal{N}'} \sum_{\lambda=2}^N \sigma_{\lambda\mathcal{N}} \sigma_{\lambda\mathcal{N}'} - \sum_{\mathcal{N}} \left[ J^1 - J^1 (x_2 - x_1 - a_0) \right] \sigma_{1\mathcal{N}} \sigma_{2\mathcal{N}} + \\
 & - \sum_{\mathcal{N}} \sum_{\lambda=2}^{N-1} \left[ J - J (x_{\lambda+1\mathcal{N}} - x_{\lambda\mathcal{N}} - a_0) \right] \sigma_{\lambda\mathcal{N}} \sigma_{\lambda+1\mathcal{N}} .
 \end{aligned}$$

(2-29)

Com a mudança de variáveis,

$$x_i = i a + \mu_i$$

$$\nu_i = \mu_{i+1} - \mu_i$$

$$\nu_N = \mu_N$$

$$\sum_{\mathcal{N}} (x_N - x_1)_{\mathcal{N}} - N_s(N-1) a = \sum_{\mathcal{N}} \sum_{i=1}^{N-1} \nu_i .$$

(2-30)

A função de partição torna-se,

$$Z(T, N_T) = \sum_{\{\sigma_{i\mathcal{N}}\}} \prod_{\mathcal{N}} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \left( \prod_{\lambda=1}^{N-1} dp_{\lambda\mathcal{N}} \right) \left( \prod_{i=1}^N d\nu_i \right) \delta(\nu_N) e^{-\beta H} \right] \delta\left(\sum_{\mathcal{N}} \sum_{i=1}^{N-1} \nu_i\right) .$$

(2-31)

Representando a função delta por,

$$\delta\left(\sum_{\mathcal{N}} \sum_{i=1}^{N-1} \nu_i\right) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} ds \exp(i\beta s \sum_{\mathcal{N}} \sum_{i=1}^{N-1} \nu_i) .$$

Obtemos a seguinte expressão para a função de partição:

$$\begin{aligned}
Z(T, N_T) = & \left( \frac{2\pi m}{\beta} \right)^{\frac{(N-1)N_S}{2}} \left( \frac{2\pi}{k\beta} \right)^{\frac{(N-1)N_S}{2}} \left( \frac{2\pi k}{(N-1)N_S\beta} \right)^{1/2} \exp -\beta \left\{ N_S(N-1) [\psi_0 + \right. \\
& + \frac{k}{2} (a-a_0)^2] - \frac{N_S}{2k} [j^1{}^2 + j^2(N-2)] \left. \right\} \sum_{\{\sigma_{1n}\}} \exp \beta \left\{ [J^1 - j^1(a-a_0)] \sum_n \sigma_{1n} \sigma_{2n} + \right. \\
& + [J - j(a-a_0)] \sum_n \sum_{\lambda=2}^{N-1} \sigma_{1n} \sigma_{\lambda+1n} + J_S \sum_{n, n'} \sigma_{1n} \sigma_{1n'} + J \sum_{n, n'} \sum_{\lambda=2}^N \sigma_{1n} \sigma_{\lambda n'} + \\
& \left. - \frac{1}{2(N-1)N_S k} \left( j^1 \sum_n \sigma_{1n} \sigma_{2n} + j \sum_n \sum_{\lambda=2}^{N-1} \sigma_{1n} \sigma_{\lambda+1n} \right) \right\} \quad (2-32)
\end{aligned}$$

O Hamiltoniano efetivo neste caso é dado por:

$$\begin{aligned}
H_{ef} = & - [J^1 - j^1(a-a_0)] \sum_n \sigma_{1n} \sigma_{2n} - [J - j(a-a_0)] \sum_n \sum_{\lambda=2}^{N-1} \sigma_{1n} \sigma_{\lambda+1n} + \\
& + \frac{1}{2(N-1)N_S k} \left( j^1 \sum_n \sigma_{1n} \sigma_{2n} + j \sum_n \sum_{\lambda=2}^{N-1} \sigma_{1n} \sigma_{\lambda+1n} \right)^2 - J_S \sum_{n, n'} \sigma_{1n} \sigma_{1n'} + \\
& - J \sum_{n, n'} \sum_{\lambda=2}^N \sigma_{1n} \sigma_{\lambda n'} \quad . \quad (2-33)
\end{aligned}$$

Observamos que as interações de quatro spins são entre pares de spins sobre toda a rede.

Podemos agora tirar algumas conclusões dos resultados obtidos. Em primeiro lugar, quanto à força  $\underline{\lambda}$ , atuante sobre cada íon da superfície, podemos observar que, se o seu sentido positivo é aquele mostrado na figura 1 (que comprime a rede) então o trabalho desta força, é definido como negativo sobre o sistema, pois a deformação volumétrica faz-se em sentido contrário  $(X_n - X_{i-(n-1)a})$ . Por outro lado, vemos que  $J(x)$  cresce com a aproximação dos spins, e conseqüentemente, com  $\underline{\lambda}$ , como podemos constatar nos Hamiltonianos Efetivos ( $J(\lambda) = J_0 + j\lambda/k$ ). Então, como  $J_0$  é constante, poderíamos solicitar a rede com uma força  $\underline{\lambda}$  negativa, no sentido de traçá-la, e tornar  $J(\lambda)$  negativo, passando o acoplamento, de ferromagnético para antiferromagnético.

Desejamos agora, tecer algumas considerações a respeito do aparecimento de interações de quatro spins. Nos casos 4<sup>o</sup> e 5<sup>o</sup>, observamos que, se fixarmos o comprimento de cada linha (caso 4), aparecem interações de quatro spins entre pares de spins dentro da

mesma linha, e, se fixamos o comprimento total das linhas (caso 5) surgem interações entre pares de spins de qualquer linha. Notamos também, que estes termos são sempre positivos no Hamiltoniano efetivo. No 2<sup>o</sup> caso, em que os planos são rígidos, também fixamos o comprimento das linhas, e embora haja dois termos no Hamiltoniano efetivo com interações de quatro spins, o termo positivo é dominante, pois apresenta um produto de pares por toda a rede e contém todas as combinações do termo negativo. Portanto, se fixamos o comprimento das linhas, teremos no Hamiltoniano efetivo um acréscimo de energia devido aos termos com produtos de pares de spins.

No caso de planos não rígidos, se não fixamos o comprimento das linhas, não surgem interações de quatro spins. Mas no caso 1, planos rígidos, onde não fixamos o comprimento das linhas, surgem interações de quatro spins entre dois planos, porém, de sinal negativo. A diferença, é que neste caso, as flutuações microscópicas são também flutuações macroscópicas, pois os planos são rígidos, e isto o torna semelhante ao modelo de Domb [16], no qual também surge um termo, de produtos de pares de spins, que é negativo diferentemente do modelo com linhas de spins independentes, modelo de Baker-Essam [17], em que as interações de quatro spins são positivas.

### CAPITULO 3 - PERFIL DA MAGNETIZAÇÃO NA APROXIMAÇÃO DE CAMPO MÉDIO

Neste capítulo determinaremos a energia livre de Gibbs, do sistema de spins na aproximação de campo médio, e conseqüentemente as magnetizações dos planos cristalinos a partir de um dado Hamiltoniano específico, obtido no capítulo anterior.

Assumiremos que a magnetização é uniforme em cada plano, variando analiticamente da superfície ao interior do cristal. Poderíamos tratar qualquer um dos Hamiltonianos efetivos de spins obtidos anteriormente, mas optamos por aquele que obtivemos para o caso de planos não rígidos com o último plano fixo (3<sup>o</sup> caso). Os cálculos serão mais fáceis de se realizar e os resultados obtidos podem ser comparados com os existentes na literatura.

### 3.1 - Obtenção das magnetizações planares:

Vamos obter a energia livre, através da desigualdade de Bogoliubov, já que não temos como desenvolver exatamente a função de partição. Representamos o Hamiltoniano genericamente por,

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j, \quad (3-1)$$

onde  $J_{ij}$  descreve a interação de troca entre ions nos pontos  $i$  e  $j$ , que são primeiros vizinhos. Vamos utilizar a desigualdade de Bogoliubov para determinar um limite superior para a energia livre do sistema. A desigualdade de Bogoliubov pode ser escrita na forma,

$$F(H) \leq F(H_0) + \langle H - H_0 \rangle_{H_0}, \quad (3-2)$$

onde  $F(H)$  e  $F(H_0)$  são as energias livres relativas aos Hamiltonianos  $H$  e  $H_0$  respectivamente. Escolhemos como Hamiltoniano tentativa,

$$H_0 = - \sum_l \eta_l \sigma_l, \quad (3-3)$$

onde os  $\eta_l$  são parâmetros variacionais. Calculamos o valor médio de  $\sigma_l$  no ensemble definido por  $H_0$ :

$$\langle \sigma_l \rangle = \frac{\sum_{\{\sigma_l\}} \sigma_l e^{-\beta H_0}}{\sum_{\{\sigma_l\}} e^{-\beta H_0}} = \text{tgh } \beta \eta_l = m_l, \quad (3-4)$$

onde  $m_l$  é a magnetização por spin, que será portanto, a magnetização do plano que o contém. Calculando a função de partição para  $H_0$ ,

$$Z_0 = \sum_{\{\sigma_l\}} e^{-\beta H_0} = \prod_l (2 \cosh \beta \eta_l) \quad (3-5)$$

e a energia livre torna-se,

$$F(H_0) = -k_B T \ln Z_0 = -k_B T N_s N \ln 2 + \frac{k_B T}{2} \sum_l \ln (1 - m_l^2), \quad (3-6)$$

onde  $N_s$  é o número de spins por plano e  $N$  é o número de planos cristalinos. O valor médio de  $H_0$  é,

$$\langle H_0 \rangle_{H_0} = \frac{\sum_{\{\sigma_i\}} (-\sum_j \eta_j \sigma_j) \exp(\beta \sum_l \eta_l \sigma_l)}{\sum_{\{\sigma_i\}} \exp(\beta \sum_l \eta_l \sigma_l)} = \sum_j -\eta_j m_j \quad (3-7)$$

e o valor médio de  $H$  fica,

$$\langle H \rangle_{H_0} = \frac{\sum_{\{\sigma_i\}} [-\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j] e^{-\beta H_0}}{\sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta H_0}} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} m_i m_j \quad (3-8)$$

Então,

$$F(H) \leq F(H_0) + \langle H - H_0 \rangle_{H_0} = -k_B T N_s N \ln 2 + \frac{K_B T}{2} \sum_l \ln(1 - m_l^2) - \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} m_i m_j + \sum_l \eta_l m_l \quad (3-9)$$

A equação (3-4) pode ser escrita como,

$$\eta_l = \frac{1}{\beta} \operatorname{arctg} h m_l = \frac{1}{\beta} \frac{1}{2} \ln \left( \frac{1 + m_l}{1 - m_l} \right) ,$$

que substituindo-se em (3-9), torna-se,

$$F(T, m_l, N_s, N) \leq -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} m_i m_j + k_B T \sum_l \left[ \left( \frac{1 + m_l}{2} \right) \ln \left( \frac{1 + m_l}{2} \right) - \left( \frac{1 - m_l}{2} \right) \ln \left( \frac{1 - m_l}{2} \right) \right] \quad (3-10)$$

Como a energia livre é mínima no estado de equilíbrio,

$$\frac{\partial F}{\partial m_l} = 0 \quad , \quad i=1, 2, \dots, n \quad (3-11)$$

obtemos o sistema de equações,

$$-2(Z_0 J_s m_1 + Z_1 J^1(\lambda) m_2) + K_B T \ln \left( \frac{1+m_1}{1-m_1} \right) = 0$$

$$-2(Z_1 J^1(\lambda) m_1 + Z_0 J m_2 + Z_1 J(\lambda) m_3) + K_B T \ln \left( \frac{1+m_2}{1-m_2} \right) = 0$$

$$-2(Z_1 J(\lambda) m_{i-1} + Z_0 J m_i + Z_1 J(\lambda) m_{i+1}) + K_B T \ln \left( \frac{1+m_i}{1-m_i} \right) = 0$$

(3-12)

onde  $Z_0$  é o número de primeiros vizinhos no mesmo plano e  $Z_1$ , entre planos adjacentes. No caso de uma rede cúbica simples,  $Z_0=4$  e  $Z_1=1$ . As constantes de intercâmbio para o modelo compressível que estamos considerando são,

$J_s$  - constante de troca do plano superficial

$J$  - constante de troca dos demais planos

$J^1(\lambda) = J^1 + \lambda j^1/K$  → constante de troca entre os spins do plano superficial e do segundo plano

$J(\lambda) = J + \lambda J/K$  → constante de troca entre os spins dos planos  $i$  e  $i+1$

Distante da superfície, no interior do sistema, as magnetizações dos diversos planos serão as mesmas

$$m_{i-1} = m_i = m_{i+1} = m$$

Fazendo-se  $\lambda=0$ , teremos,

$$2(Z_0 + 2Z_1) J m - K_B T \ln \left( \frac{1+m}{1-m} \right) = 0$$

(3-13)

Expandindo o termo que contém o logaritmo em série de Taylor

e tomando apenas o termo linear,

$$2(Z_0 + 2Z_1) J m - k_B T_{cv} \cdot 2 m = 0$$

$$k_B T_{cv} = Z J \quad , \quad (3-14)$$

onde  $Z=Z_0+2Z_1$  é o número de coordenação da rede e  $T_{cv}$  é a temperatura crítica na aproximação de campo médio para o sistema infinito. No caso da rede cúbica simples,

$$J/k_B T_{cv} = 1/6 = 0,167 \quad .$$

Para conhecermos as curvas de magnetização de um número finito de planos, devemos resolver o conjunto de equações não lineares (3-12). Para que um conjunto de  $N$  equações seja autoconsistente, devemos escolher uma condição de contorno apropriada para a magnetização do  $(N+1)$ -plano. Podemos assumir que esta tenha a mesma magnetização do plano  $N$ , ou seja,  $m_{n+1} = m_n$ , ou ainda que  $m_{n+1} = m_v$ , onde  $m_v$  é a magnetização de um plano no interior do volume do cristal, cuja magnetização é dada pela eq. (3-13).

Nas figuras 2,3,4,5,6 e 7 mostramos os gráficos com as curvas de magnetização obtidas para alguns casos particulares. Fazemos  $\lambda=0$  e  $J^1/J=1$ . Nas figuras 2,3 e 4 resolvemos simultaneamente duas, quatro e oito equações com  $J_s/J=2,5$  e fazemos  $m_{n+1}=m_v$ . Podemos ver que quanto maior o número de equações acopladas, mais se aproxima a magnetização do último plano considerado em relação a do volume. Na figura 5, temos as mesmas curvas para quatro equações acopladas, mas com  $J_s/J=1.5$ . Nas figuras 6 e 7 fazemos  $J_s/J=1$  para os casos de  $m_{n+1}=m_n$  e  $m_{n+1}=m_v$ . Observamos que as curvas estão abaixo daquela da magnetização do volume.

Vemos que quando  $J_s/J=2.5$  ou  $1.5$ , as curvas de magnetização dos planos considerados ficam acima da curva correspondente ao interior do volume do cristal e quando  $J_s/J=1$  aquelas passam abaixo (obviamente considerando  $J^1/J=1$ ). Perguntamos então, para quais valores de  $J_s/J$  e  $J^1/J$  as curvas de magnetização de todos os planos são idênticas? Para calcular estes valores, substituímos nas equações (3-12), todos os  $m_i$  por um único valor  $m$ , mas como a equação (3.13) será preservada, consequentemente todas as curvas de magnetização serão idênticas àquela do volume. As

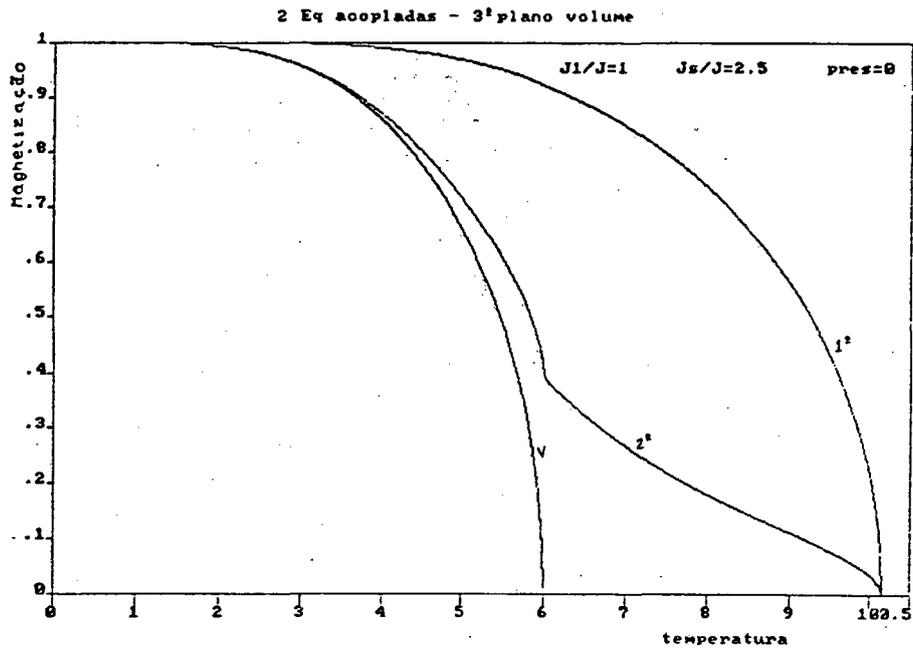


FIGURA 2 - Magnetização dos planos 1, 2 e do interior do volume em função de  $K_B T/J$  para duas equações acopladas com  $m_{n+1}=m_n$  e  $J^1/J=1$ ,  $J_s/J=2.5$ ,  $\lambda=0$ .

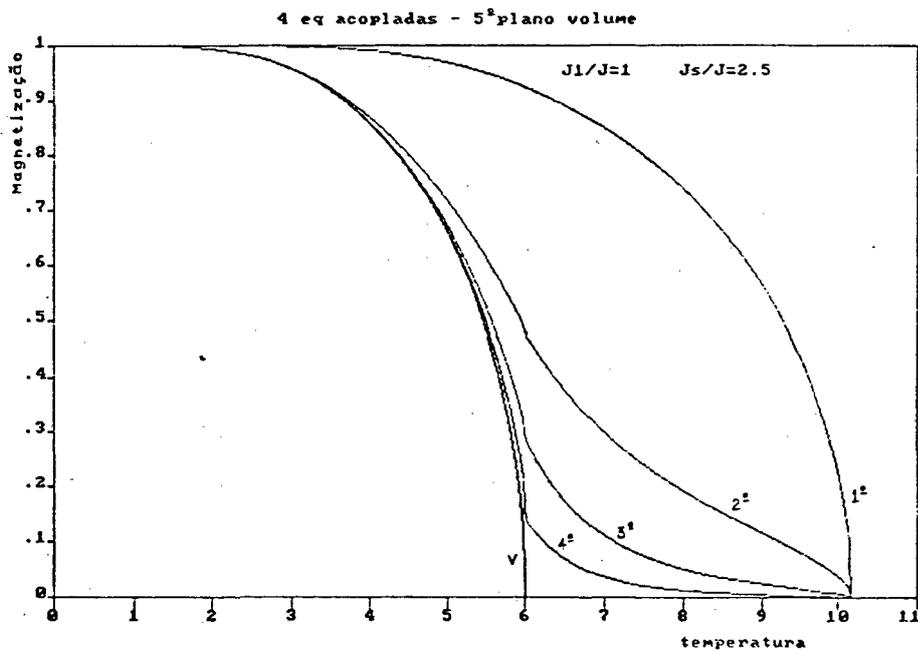


FIGURA 3 - Magnetização dos planos 1, 2, 3, 4 e do interior do volume em função de  $K_B T/J$  para quatro equações acopladas com  $m_{n+1}=m_n$  e  $J^1/J=1$ ,  $J_s/J=2.5$ ,  $\lambda=0$ .

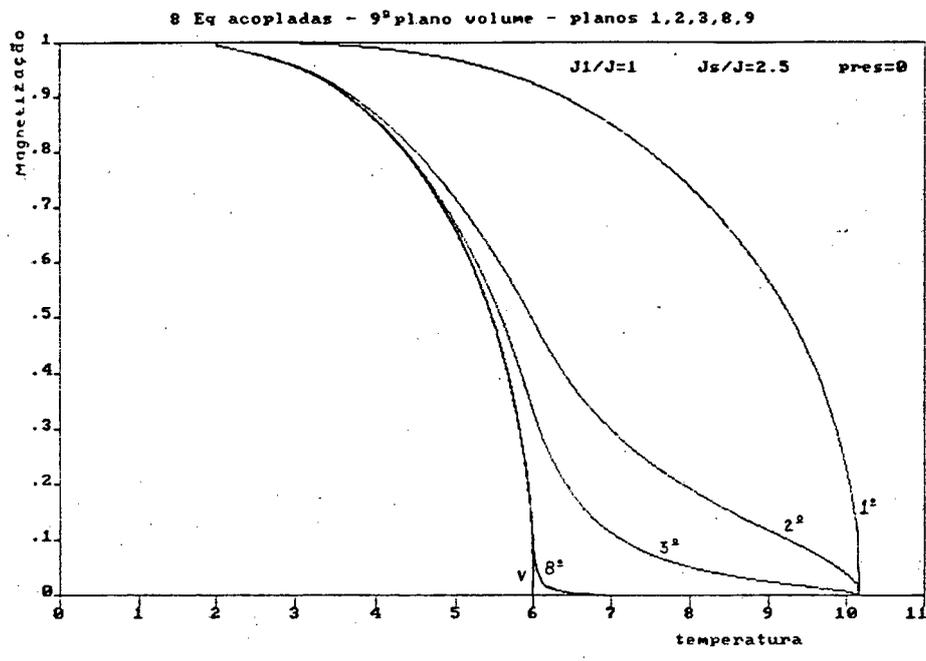


FIGURA 4 - Magnetização dos planos 1, 2, 3, 8 e do interior do volume em função de  $k_B T/J$  para oito equações acopladas com  $m_{n+1}=m_n$  e  $J^1/J=1$ ,  $J_s/J=2.5$ ,  $\lambda=0$ .

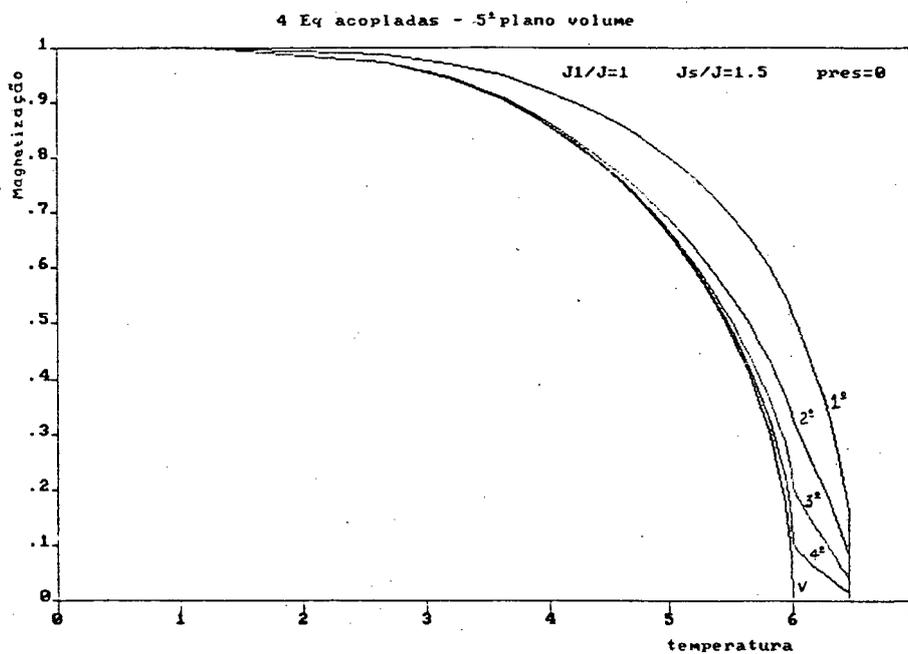


FIGURA 5 - Magnetização dos planos 1, 2, 3, 4 e do interior do volume em função de  $k_B T/J$  para quatro equações acopladas com  $m_{n+1}=m_n$  e  $J^1/J=1$ ,  $J_s/J=1.5$ ,  $\lambda=0$ .

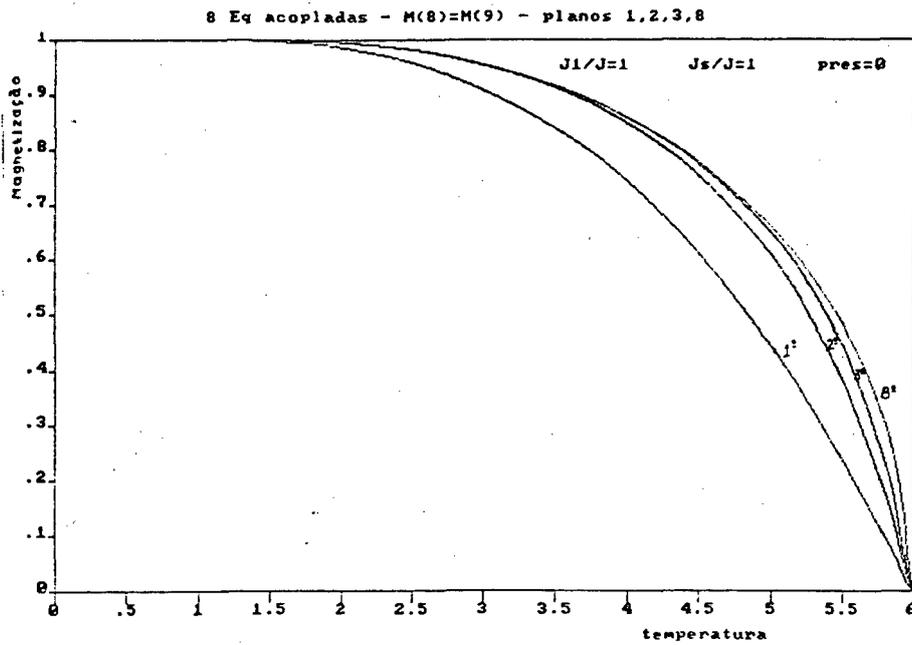


FIGURA 6 - Magnetização dos planos 1, 2, 3, 8 e do interior do volume em função de  $K_B T/J$  para oito equações acopladas com  $m_{n+1}=m_n$  e  $J^1/J=1$ ,  $J_s/J=1.0$ ,  $\lambda=0$ .

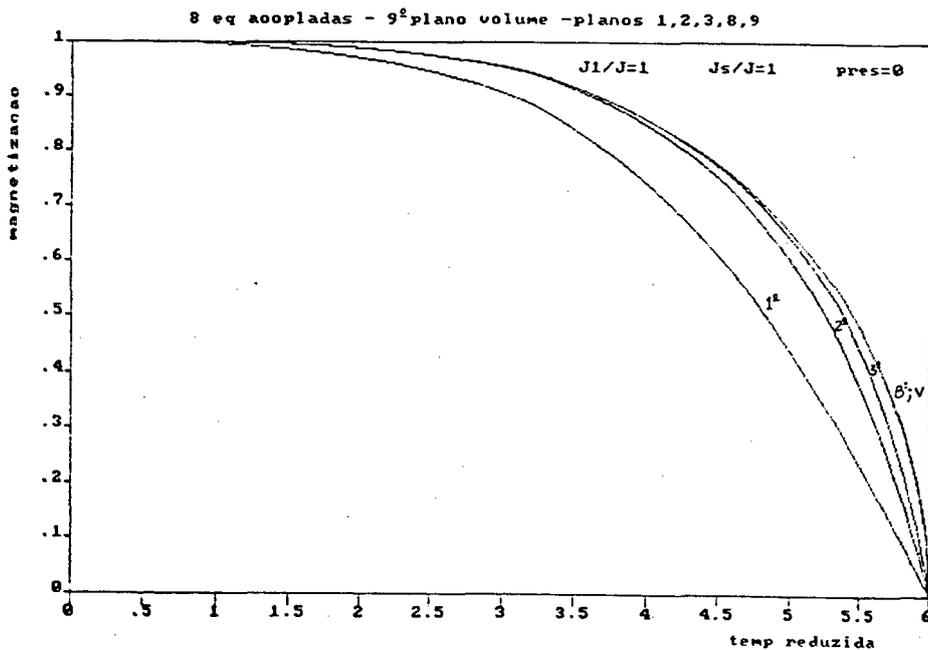


FIGURA 7 - Magnetização dos planos 1, 2, 3, 8 e do interior do volume em função de  $K_B T/J$  para duas equações acopladas com  $m_{n+1}=m_v$  e  $J^1/J=1$ ,  $J_s/J=1.0$ ,  $\lambda=0$ .

equações (3-12) tomam a forma:

$$Z_0 \frac{J_s}{J} + Z_1 \frac{J^1}{J} = \frac{1}{2m} \frac{k_B T}{J} \ln \left( \frac{1+m}{1-m} \right)$$

$$Z_1 \frac{J^1}{J} + Z_0 + Z_1 = \frac{1}{2m} \frac{k_B T}{J} \ln \left( \frac{1+m}{1-m} \right)$$

$$Z_0 + 2Z_1 = \frac{1}{2m} \frac{k_B T}{J} \ln \left( \frac{1+m}{1-m} \right) \quad (3-15)$$

sendo que todas as outras equações tornam-se idênticas à terceira. Da primeira e segunda equações, tiramos que

$$\frac{J_s}{J} = \frac{Z_0 + Z_1}{Z_0} \quad , \quad (3-16)$$

que para o caso da rede cúbica simples,  $J_s/J=1.25$ . Da segunda e terceira equações,

$$\frac{J^1}{J} = 1 \quad . \quad (3-17)$$

Vemos assim, que a condição necessária e suficiente para que todas as curvas de magnetização, para qualquer número de equações acopladas, sejam idênticas é que  $J_s/J=1.25$  e  $J^1/J=1$ .

Nos dirigimos agora para a análise de um outro problema, referente ao comportamento das curvas de magnetização nas proximidades do ponto crítico do sistema infinito, quando estas curvas estão acima daquela do volume. Observamos que estas curvas são contínuas, porém não deriváveis no ponto mencionado. Este problema só ocorre quando assumimos que a magnetização do plano  $N+1$  é aquela do volume ( $m_{N+1}=m_v$ ). Derivando as equações (3-12) em relação a  $\gamma = k_B T/J$ , obtemos,

$$\left( Z_0 \frac{J_s}{J} - \frac{\gamma}{1-m_1^2} \right) \frac{dm_1}{d\gamma} + Z_1 \frac{J^1}{J} \frac{dm_2}{d\gamma} - \frac{1}{2} \ln \left( \frac{1+m_1}{1-m_1} \right) = 0$$

$$Z_1 \frac{J^1}{J} \frac{dm_1}{d\gamma} + \left( Z_0 - \frac{\gamma}{1-m_2^2} \right) \frac{dm_2}{d\gamma} + Z_1 \frac{dm_3}{d\gamma} - \frac{1}{2} \ln \left( \frac{1+m_2}{1-m_2} \right) = 0$$

⋮  
⋮  
⋮

$$z_1 \frac{dm_{i-1}}{d\gamma} + \left( z_0 - \frac{\gamma}{1-m_i^2} \right) \frac{dm_i}{d\gamma} + z_1 \frac{dm_{i+1}}{d\gamma} - \frac{1}{2} \ln \left( \frac{1+m_i}{1-m_i} \right) = 0 .$$

(3-18)

Tomando a mesma equação para o interior do cristal,

$$\left( z_0 + 2z_1 - \frac{\gamma}{1-m^2} \right) \frac{dm}{d\gamma} = \frac{1}{2} \ln \left( \frac{1+m}{1-m} \right) .$$

(3-19)

Quando  $\gamma$  aproxima-se de  $z_0 + 2z_1$ ,  $m$  tende a zero, e neste limite, o termo logarítmico pode ser expandido em série de Taylor, como feito anteriormente, tornando a equação (3-19),

$$\frac{dm}{d\gamma} = -\frac{1}{2} \left( \frac{1}{m} - m \right) .$$

Logo,

$$\lim_{m \rightarrow 0} \frac{dm}{d\gamma} = -\infty .$$

Fazendo,

$$\alpha_i = \frac{dm_i}{d\gamma}$$

$$a_i = \frac{1}{z_1} \left( z_0 - \frac{\gamma}{1-m_i^2} \right)$$

$$b_i = \frac{1}{2z_1} \ln \left( \frac{1+m_i}{1-m_i} \right) .$$

A última das equações (3-18) toma a forma,

$$\alpha_{i-1} + a_i \alpha_i + \alpha_{i+1} = b_i .$$

(3-20)

Teremos então para o conjunto de equações (3-18),

$$a_0 \alpha_1 + \alpha_2 = b_1$$

$$\alpha_1 + a_2 \alpha_2 + \alpha_3 = b_2$$

$$\alpha_2 + a_3 \alpha_3 + \alpha_4 = b_3$$

⋮

$$\alpha_{N-1} + a_N \alpha_N + \alpha_V = b_N$$

(3-21)

onde o índice N significa o último plano considerado e V o volume. Por exemplo, podemos considerar dois planos independentes, como feito no caso da figura 2 e teremos

$$\alpha_1 = \frac{b_2 - \alpha_V - a_2 b_1}{1 - a_1 a_2}$$

$$\alpha_2 = b_1 - a_1 \alpha_1$$

Como  $\gamma \rightarrow Z_0 + 2Z_1$ ,  $a_i < -2$  e  $b_i > 0$ , então, quando  $\alpha_V \rightarrow -\infty$ ,  $\alpha_1 \rightarrow -\infty$  e  $\alpha_2 \rightarrow -\infty$ .

Não é difícil mostrar que se tomarmos um conjunto de N planos, que  $\alpha_1$  pode ser escrito como uma função linear de  $\alpha_V$ . Desta forma, se considerarmos  $m_{n+1} = m_V$ ,  $\alpha_1$  e todos os  $\alpha_i$  ( $i=1,2,\dots,N$ ) terão um comportamento divergente quando nos aproximamos da temperatura crítica do sistema infinito. Cálculos baseados no grupo de renormalização [9-11] e no método das funções de Green [12-14] também predizem que a derivada das curvas de magnetização é descontínua na temperatura crítica de volume. Por outro lado simulações de Monte Carlo [7,8], predizem que não há descontinuidade na derivada. Embora Moran-Lopes e Sanches [23], considerem que a descontinuidade seja devida ao limitado número de planos independentes do volume, nossa análise acima indica que ela deverá sempre existir. Do ponto de vista experimental, medidas realizadas no Gadolínio [2] parecem indicar que de fato não há nenhuma descontinuidade, muito embora não possamos afirmar que o modelo de Ising seja apropriado para descrever esse sistema.

### 3.2 - Acoplamento crítico de superfície

Vamos analisar as relações entre as constantes de intercâmbio, quando a temperatura crítica de superfície é igual à de volume. Próximo à temperatura crítica de volume ( $T_{cv}$ ), os logaritmos nas equações (3-12) podem ser expandidos em séries de Taylor, como anteriormente. Tomando-se  $N$  planos independentes, chegamos a uma equação matricial da seguinte forma:

$$\underline{A} \underline{M} = 0 \quad , \quad (3-22)$$

onde  $\underline{A}$  é a matriz dos coeficientes e  $\underline{m}$ , a matriz coluna das magnetizações. Podemos escrever que,

$$\underline{A} = \begin{bmatrix} K_B T - Z_0 J_s & -Z_1 J^1(\lambda) & 0 & 0 \dots 0 \\ -Z_1 J^1(\lambda) & K_B T - Z_0 J & -Z_1 J(\lambda) & 0 \\ 0 & -Z_1 J^1(\lambda) & K_B T - Z_0 J & -Z_1 J(\lambda) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix} \quad (3-23)$$

Para que ocorra uma solução não trivial, deveremos ter,

$$\det \underline{A} = 0 \quad . \quad (3-24)$$

Resolvendo o determinante da matriz  $\underline{A}$ ,

$$\det \underline{A} = (K_B T - Z_0 J_s) \Delta_{n-1} - Z_1 J^1(\lambda) \Delta'_{n-1} \quad ,$$

onde  $\Delta_{n-1}$  e  $\Delta'_{n-1}$  são os determinantes, uma vez retiradas a linha e a coluna do elemento respectivo do determinante original.

$$\begin{aligned} \det \tilde{A} &= (K_0 T - Z_0 J_S) \left[ (K T - Z_0 J) \Delta_{m-2} + Z_1 J(\lambda) \Delta'_{m-2} \right] - (Z_1 J^1(\lambda))^2 \Delta_{m-2} \\ &= (K_0 T - Z_0 J_S) \left[ (K T - Z_0 J) \Delta_{m-2} - (Z_1 J(\lambda))^2 \Delta_{m-3} \right] - (Z_1 J^1(\lambda))^2 \Delta_{m-2} . \end{aligned}$$

No ponto  $T=T_{cv}$ ,  $K_0 T_{cv} = Z_0 J + 2 Z_1 J(\lambda)$ , então,

$$\det \tilde{A} = (Z_0 J + 2 Z_1 J(\lambda) - Z_0 J_S) \left[ 2 Z_1 J(\lambda) \Delta_{m-2} - (Z_1 J(\lambda))^2 \Delta_{m-3} \right] - (Z_1 J^1(\lambda))^2 \Delta_{m-2} . \quad (3-25)$$

Podemos então escrever que,

$$\Delta_m = (-Z_1 J)^m D_m , \quad (3-26)$$

onde,

$$D_m = \begin{vmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & & \\ 0 & 1 & -2 & 1 & & \\ \vdots & & & & & \\ 0 & & & & & \end{vmatrix} . \quad (3-27)$$

Porém, como

$$D_m = -2 D_{m-1} - D_{m-2} ,$$

obtemos a seguinte expressão para  $D_m$ :

$$D_m = (m+1) (-1)^m . \quad (3-28)$$

Substituindo as expressões para  $D_{m-2}$  e  $D_{m-3}$  em (3-25) e dividindo por  $(Z_1 J(\lambda))^2$ , chegamos a

$$\frac{Z_0 J + 2 Z_1 J(\lambda) - Z_0 J_S}{Z_1 J(\lambda)} \left( \frac{m}{m-1} \right) = \left[ \frac{J^1(\lambda)}{J(\lambda)} \right]^2 . \quad (3-29)$$

Esta equação está baseada no seguinte: próximo ao ponto crítico, ela fornece os valores dos parâmetros de intercâmbio, tais que as magnetizações dos  $n$  primeiros planos sejam diferentes

daquela do volume. Ela fornece os valores críticos para os parâmetros de troca, com os quais se pode obter uma magnetização de superfície acima do volume paramagnético.

Se, por outro lado, a equação matricial (3-22) fosse obtida fazendo-se  $m_{n+1}=m_n$ , então o elemento  $A_{nn}$  da matriz em (3-23) seria  $K_B T - Z_0 J - Z_1 J(\lambda)$  e por sua vez teríamos o seguinte valor para o determinante  $D_m$ , da equação (3-27):

$$D_m = (-1)^m \quad (3-30)$$

e a expressão (3-29) torna-se-ia

$$\frac{K_B T - Z_0 J_s}{Z_1 J(\lambda)} = \left[ \frac{J^1(\lambda)}{J(\lambda)} \right]^2 \quad (3-31)$$

Se colocarmos que  $T=T_{cv}$ , a equação anterior se reduz à equação (3-29) no limite que  $n \rightarrow \infty$ . Isso de certa forma é evidente, pois a hipótese que  $m_n = m_{n+1}$ , só deve ser válida quando penetramos profundamente dentro do cristal.

Podemos considerar alguns casos particulares à partir da análise da eq. (3-29), quando  $n \rightarrow \infty$ . Se  $J^1(\lambda) = J(\lambda)$ , determinamos que,

$$J_s = J + \frac{Z_1}{Z_0} J(\lambda) \quad (3-32)$$

no caso da rede cúbica simples, quando  $\lambda=0$ , fornece  $J_s/J=1.25$ . Outro caso de interesse especial é aquele para o qual,  $J^1(\lambda)=0$  para todo  $\lambda$ , ou seja, o primeiro plano está magneticamente isolado do resto do sólido semi-infinito. A equação (3-29) nos dá,

$$J_s = J + \frac{2 Z_1}{Z_0} J(\lambda) \quad (3-33)$$

que para o nosso caso, quando  $\lambda=0$ , proporciona  $J_s/J=3/2$ . Podemos ainda indagar sobre como se relacionam as constantes de troca, quando  $J_s=0$ , ou seja, os spins da superfície, não interagem entre si. Nesse caso obtemos,

$$\frac{[J^1(\lambda)]^2}{J(\lambda)} = Z_0 J + 2 Z_1 J(\lambda) \quad (3-34)$$

sendo que para  $\lambda=0$ ,  $J^1/J = (6)^{1/2}$  ou  $J^1/J = -(6)^{1/2}$ . Por último, se  $J_s=J$ , obtemos de (3-29) a seguinte expressão:

$$J^1(\lambda) = \pm \sqrt{2} J(\lambda) , \quad (3-35)$$

que nos fornece  $J^1/J = \pm (2)^{1/2}$  quando  $\lambda=0$  na rede cúbica simples.

As expressões acima (3-32) a (3-34), nos impõem aquelas relações entre as constantes de troca para que a temperatura crítica do plano da superfície seja igual àquela do volume.

Finalmente, vemos na figura 8, a superfície no espaço de parâmetros ( $J_s/J$ ,  $J^1/J$ ,  $\lambda$ ) na qual  $T_{cs}=T_{cv}$ , ou seja, qualquer ponto abaixo ou sobre a superfície corresponde à igualdade entre as temperaturas críticas de volume e superfície. Acima desta superfície temos uma superfície magnética ordenada sobre um volume paramagnético. Podemos entender a superfície da figura, como um conjunto de parábolas, dadas pela expressão,

$$\frac{J_s}{J} = \frac{1}{4} \left[ 6 + 2 \alpha \lambda - \frac{\left( \frac{J^1}{J} + \alpha \lambda \right)^2}{1 + \alpha \lambda} \right] , \quad (3-36)$$

sendo que para cada valor particular de  $\lambda$ , existe uma parábola de  $J_s/J$  em função de  $J^1/J$ . Mostramos na figura algumas destas curvas particulares ( $\lambda = 2, 1, 0, -0,5$ ). A linha no plano  $J_s=0$ , sobre a qual estão os vértices das parábolas, e a secção no plano  $J^1=0$  são mostradas na figura.

Interessante também, é analisar o comportamento das curvas ( $J_s/J$ ,  $J^1/J$ ), dadas pela equação (3-29) para um particular valor de  $\lambda$ , quando variamos o número de planos  $n$ . Mostramos, na figura 9, as curvas com  $\lambda = 0$  para 2 planos, que é o número mínimo, 4,6 e infinitos planos. Podemos notar, mais uma vez, que com um número reduzido de planos, podemos simular o sistema semi-infinito.

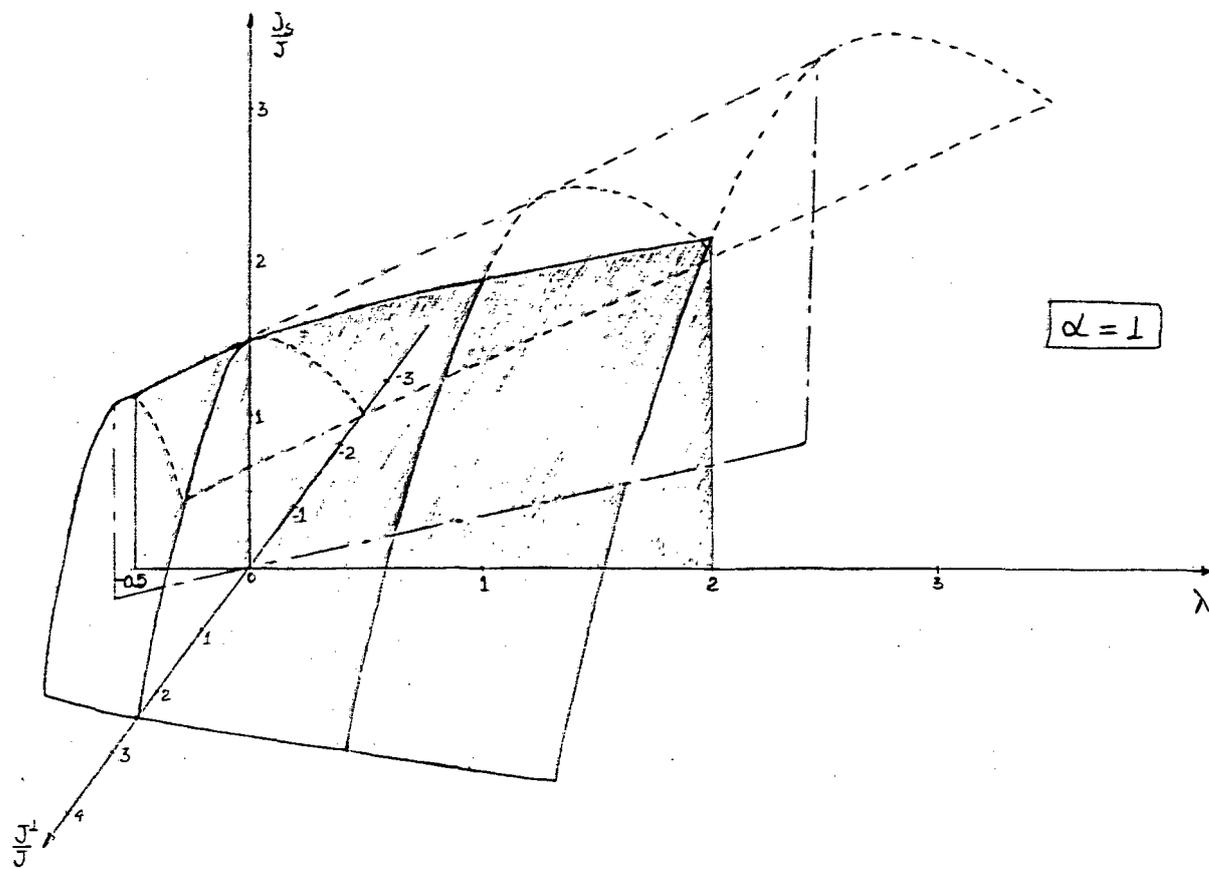


FIGURA 8 - Superfície delimitadora para a condição  $T_{cs}=T_{cv}$ , no subespaço de parâmetros  $(J_s/J, J^1/J, \lambda)$ , com  $J_s/J > 0$ . São mostradas as parábolas geradoras da superfície em  $\lambda = -0.5, 0, 1$  e  $2$ ; a linha sobre a qual estão os seus vértices e a secção no plano  $(J_s/J, J^1/J)$ .

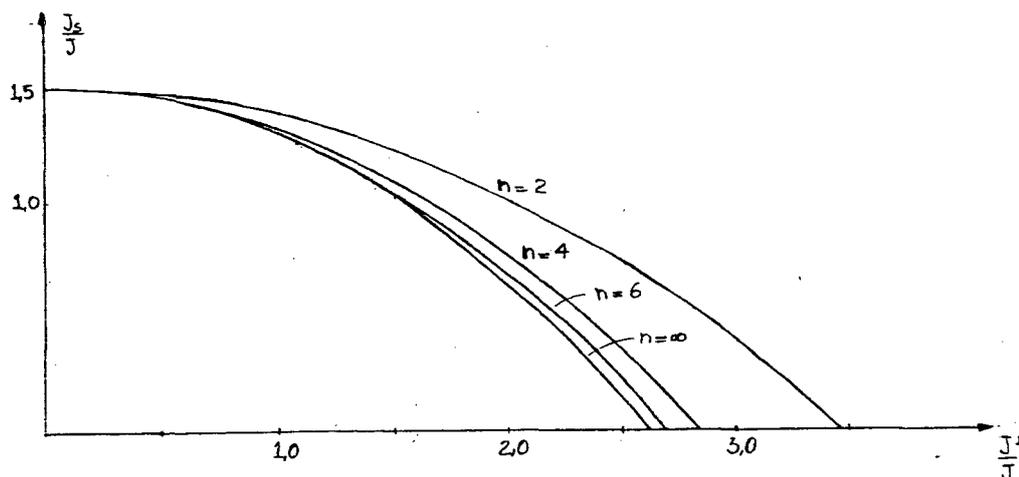


FIGURA 9 - Diagrama de fases no plano  $(J_s/J, J^1/J)$  para  $\lambda=0$  obtido através da teoria de campo médio considerando-se que a magnetização de 2, 4, 6, ou infinitos planos, diferem daquela do volume.

### 3.3 - Cálculo da temperatura crítica de superfície.

Novamente, faremos a análise da relação entre as constantes de troca, próximo ao ponto crítico, mas com a temperatura crítica de superfície sendo diferente daquela do volume. Neste caso, estaremos interessados na determinação da temperatura crítica de superfície ( $T_{cs}$ ). Na vizinhança de  $T_{cs}$ , as magnetizações são próximas de zero e a matriz dos coeficientes é dada por,

$$\tilde{A} = \begin{bmatrix} x-a & -c & 0 & 0 & \dots \\ -c & x & -1 & 0 & \\ 0 & -1 & x & -1 & \\ \vdots & & & & \\ \vdots & & & & \end{bmatrix}$$

(3-37)

onde,

$$x = \frac{K_B T_{cs} - Z_0 J}{Z_1 J(\lambda)}$$

$$a = \frac{Z_0 (J_s - J)}{Z_1 J(\lambda)}$$

$$c = \frac{J^4(\lambda)}{J(\lambda)}$$

(3-38)

Seguindo os mesmos passos dados anteriormente, podemos escrever que,

$$\det A = (x-a) \left[ x \frac{\Delta_{m-2}}{\Delta_{m-3}} - 1 \right] - c^2 \frac{\Delta_{m-2}}{\Delta_{m-3}} = 0 ,$$

(3-39)

onde,

$$\Delta_m = \begin{vmatrix} x & -1 & 0 & 0 & \dots \\ -1 & x & -1 & 0 & \\ 0 & -1 & x & -1 & \\ \vdots & & & & \\ \vdots & & & & \end{vmatrix} \quad (3-40)$$

e podemos verificar que,

$$\Delta_m = x \Delta_{m-1} - \Delta_{m-2} \quad (3-41)$$

Quando  $n \rightarrow \infty$  (sistema semi-infinito), a fração continuada tem o seguinte limite:

$$\frac{\Delta_m}{\Delta_{m-1}} = \frac{\Delta_{m-1}}{\Delta_{m-2}} = \gamma$$

Substituindo-se em (3-41), chegamos a

$$\gamma^2 - x\gamma + 1 = 0 \quad (3-42)$$

e de (3-39), vemos que,

$$\gamma^2 = \frac{c^2}{x-a} \quad (3-43)$$

Logo, obtemos a seguinte equação que fornece a temperatura crítica de superfície para o sistema semi-infinito:

$$(c^2 - 1)x^2 + a(2 - c^2)x - a^2 - c^4 = 0 \quad (3-44)$$

A equação (3-44), que relaciona as constantes de troca para  $T_{cs} \geq T_{cv}$ , é mais geral que a equação (3-29), que relaciona estes parâmetros para  $T_{cs} = T_{cv}$ . Se fizermos  $k_B T_{cs} = k_B T_{cv} = Z_0 J + 2Z_1 J(\lambda)$ , a equação (3-44) se reduz à eq. (3-29) no limite  $n \rightarrow \infty$ . Como podemos verificar, a equação (3-44) apresenta dois valores para

$T_{cs}$ , pois é uma equação de segundo grau nos mesmos parâmetros  $a$  e  $c$ . No caso em que  $c \neq 1$  é fácil mostrar que a solução fisicamente aceitável será dada por,

$$X = \frac{a}{2} \frac{2-c^2}{1-c^2} - \frac{1}{2} \frac{c^2}{1-c^2} (a^2 + 4c^2 - 4)^{1/2}, \quad (3-45)$$

onde deveremos ter  $a^2 \geq 4(1-c^2)$ .

Notamos, anteriormente, que a condição para que  $T_{cs} = T_{cv}$ , corresponde ao caso no qual  $a = 2 - c^2$ . Se colocarmos esse valor na equação (3-45), obtemos a eq. (3-29). Portanto, a eq. (3-45) fornecerá os valores de temperatura crítica de superfície quando os parâmetros envolvidos estão fora da região crítica definida pela equação (3-29). No caso particular,  $c = 1$ ,  $J^1(\lambda)/J(\lambda) = 1$ , a eq. (3-44) se reduz a,

$$K_B T_{cs} = Z_0 J_s + \frac{Z_1^2 J^2(\lambda)}{Z_0 (J_s - J)}, \quad (3-46)$$

que ficará igual à equação (3-32) se fizermos  $T_{cs} = T_{cv}$ .

Se colocarmos que  $J_s = J$ ,  $a = 0$ , teremos de (3-44) que,

$$X^2 = \frac{c^4}{c^2 - 1}, \quad )$$

que nos fornece,

$$K_B T_{cs} = Z_0 J + \frac{Z_1 J(\lambda) c^2}{\sqrt{c^2 - 1}}. \quad (3-47)$$

Se fizermos  $c = 0$ , isolando magneticamente o primeiro plano, obteremos de (3-44),

$$X = a, \quad )$$

ou seja,

$$K_B T_{cs} = Z_0 J_s.$$

(3-48)

Portanto, a temperatura crítica do plano da superfície isolado é menor que a do interior do volume como seria de se esperar. As equações (3-47) e (3-48) também podem ser reduzidas às equações (3-35) e (3-33), respectivamente, se fizermos  $K_B T_{cs} = K_B T_{cv} = Z_0 J + 2Z_1 J(\lambda)$ .

Finalmente, mostramos nas figuras 10, 11 e 12, as superfícies no espaço  $(\lambda, J_s/J, T_{cs}/T_{cv})$  para três valores selecionados da razão  $J^1/J$ .

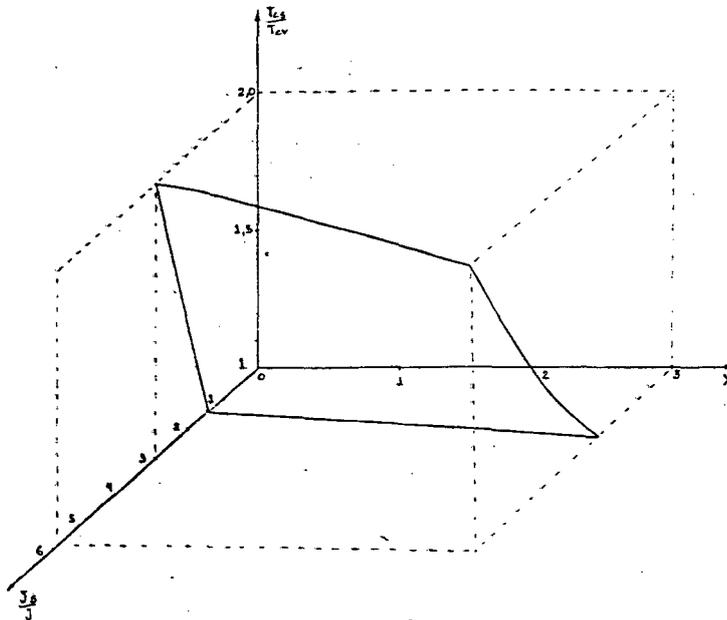


FIGURA 10 - Superfície no espaço  $(J_s/J, \lambda, T_{cs}/T_{cv})$ , para  $J^1/J=0.5$ .

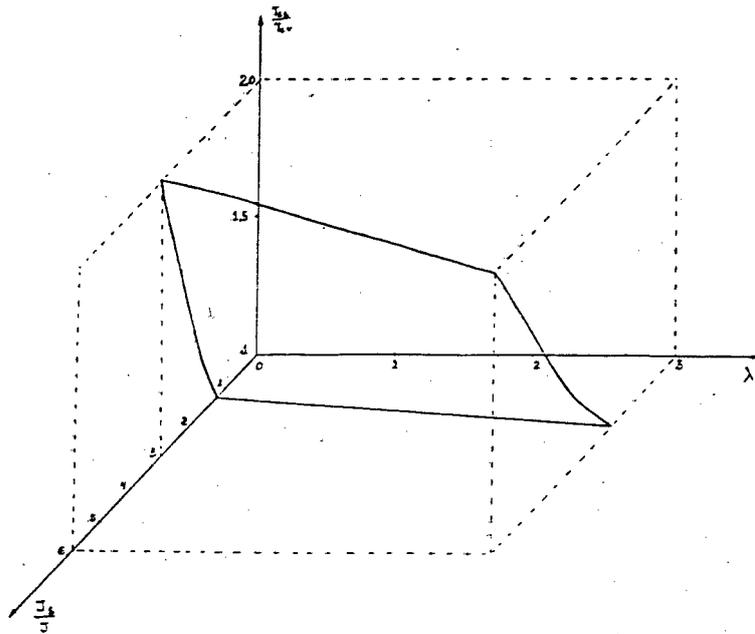


FIGURA 11 - Superfície no espaço  $(J_2/J, \lambda, T_{cs}/T_{cv})$ , para  $J^1/J=1.0$ .

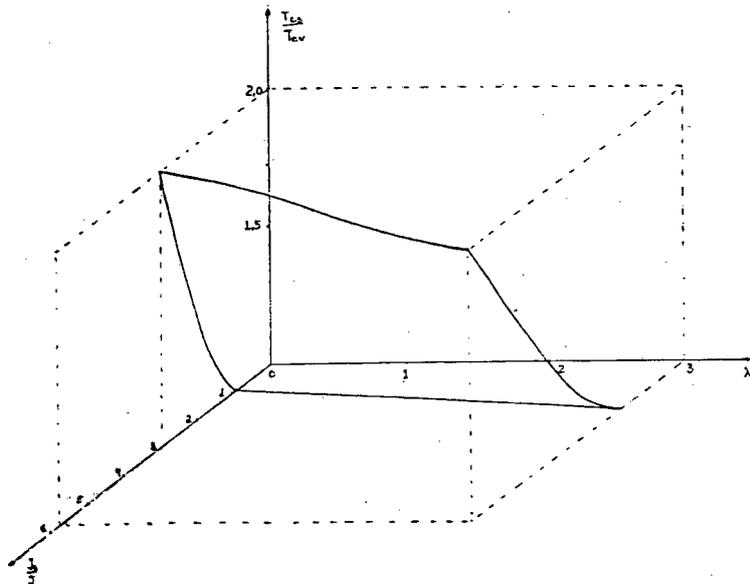


FIGURA 12 - Superfície no espaço  $(J_2/J, \lambda, T_{cs}/T_{cv})$ , para  $J^1/J=1.5$ .

CAPÍTULO 4 - COMPORTAMENTO CRÍTICO NA APROXIMAÇÃO DO GRUPO DE  
RENORMALIZAÇÃO DE CAMPO MÉDIO

Neste último capítulo, introduzimos o chamado Grupo de Renormalização de Campo Médio (GRCM), para determinar as propriedades críticas do modelo de spins apresentado nos capítulos anteriores. Inicialmente, relacionamos dois blocos de spins, da forma como o método foi inicialmente sugerido [20]. Estes blocos de spins são relacionados dois a dois em cada plano cristalino, para os casos de temperatura crítica de superfície igual ou superior à do volume. Em seguida, o método é modificado, relacionando-se três blocos de spins, do mesmo tipo que os anteriormente considerados. Em nossos cálculos, blocos com até 25 spins são analisados.

#### 4.1- Grupo de renormalização de campo médio [20]

Suponhamos uma rede cúbica simples, infinita, de spins de Ising. Tomamos agora, um bloco de um ou mais spins como vemos na figura 13 abaixo.

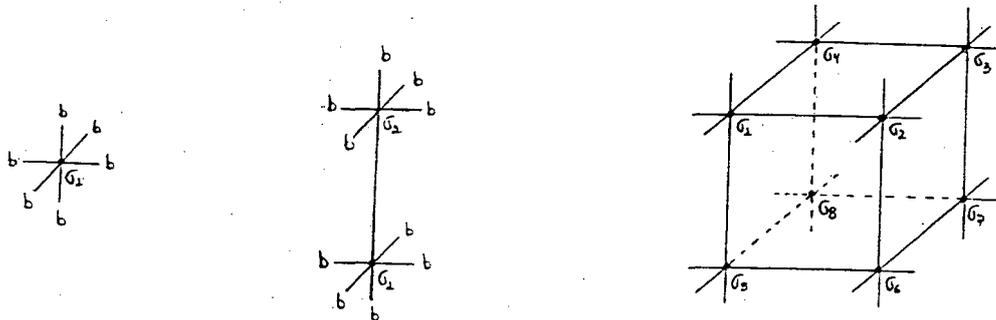


Fig. 13 - Blocos de 1, 2, e 8 spins, mostrando as interações com os campos efetivos  $\underline{b}$  em uma rede cúbica simples.

Sabemos das relações de escala para as funções termodinâmicas magnéticas, que a magnetização satisfaz à seguinte lei de escala:

$$m(L^{\gamma_T} t, L^{\gamma_H} H) = L^{d-\gamma_M} m(t, H) \quad , \quad (4-1)$$

onde  $\underline{L}$  é um comprimento em unidades da constante de rede  $\underline{a}$ ,  $t=(T-T_c)/T_c$  é a temperatura reduzida e  $\gamma_T$  e  $\gamma_H$  são os expoentes associados à temperatura e ao campo respectivamente.

Calculamos a média  $1/N\langle\sigma_1+\sigma_2+\dots+\sigma_n\rangle$  para um bloco de  $\underline{N}$  spins, tal que os spins da superfície do bloco estão sujeitos a um campo efetivo  $\underline{b}$ , que simula o efeito dos spins restantes da rede numa aproximação de campo médio. A presente média será função de  $K=J/K_B T$ , sendo  $\underline{J}$  a interação de troca entre spins primeiros vizinhos, do campo reduzido  $h = H/K_B T$ , onde  $\underline{H}$  é o campo magnético externo aplicado e de  $\underline{b}$ . Vamos denominar a média  $1/N\langle\sigma_1+\sigma_2+\dots+\sigma_n\rangle$  de magnetização calculada sobre os  $\underline{N}$  spins  $m_n(k, h, b)$ .

Tomando -se um outro bloco, de  $\underline{N}'$  spins, e calculando-se a magnetização, teremos  $m_{n'}(K', h', b')$ . De acordo com o grupo de renormalização de campo médio vamos assumir a seguinte relação entre as magnetizações dos dois blocos:

$$m_{N'}(k', h', b') = L^{d-\gamma_H} m_N(k, h, b) . \quad (4-2)$$

Na equação (4-1) definimos  $L$  como sendo um inteiro, mas para dois blocos de spins genéricos  $L=(N/N')^{1/d}$ , onde  $d$  é a dimensão espacial do sistema.

Expandindo a equação (4-2) para pequenos valores de  $h$  e  $b$  em torno de  $h=0, b=0$ , e para  $K$  em torno de  $K_c$ , onde  $K_c$  é o seu valor no ponto crítico, temos

$$m_{N'}(k_c + L^{\gamma_T} \Delta k, L^{\gamma_H} h, b) = L^{d-\gamma_H} m_N(k_c + \Delta k, h, b) . \quad (4-3)$$

Portanto, nós assumimos que as magnetizações  $m_N$  e  $m_{N'}$ , e os campos efetivos  $b$  e  $b'$  se relacionam da mesma forma, ou seja,  $b' = L^{d-\gamma_H} b$ . Fazendo-se  $h=0$  e linearizando a equação (4-3) para  $b$  muito pequeno, teremos a relação desejada  $K' = K'(K)$ . Como o campo  $b$  é a magnetização do sólido como um todo, desejamos que  $b$  se aproxime de zero, para encontrarmos  $K_c = K'(K_c)$ , no ponto fixo.

Podemos ainda obter os expoentes  $\gamma_H$  e  $\gamma_T$ . Uma vez linearizada a equação que relaciona as magnetizações, equação (4-3), determinamos  $\gamma_H$  igualando os coeficientes de  $h$  nos dois lados da equação. Analogamente, podemos determinar o expoente  $\gamma_T$ . No ponto crítico ele pode ser determinado pela equação  $\partial K' / \partial K |_{K_c} = L^{\gamma_T}$ .

#### 4.2- Blocos de spins no plano

Em todo este capítulo, consideraremos que  $\lambda=0$ , ou seja, não estaremos interessados nos efeitos específicos da força aplicada. Vamos inicialmente relacionar blocos de um spin com outros de dois spins, no mesmo plano, como mostrado na figura 14.

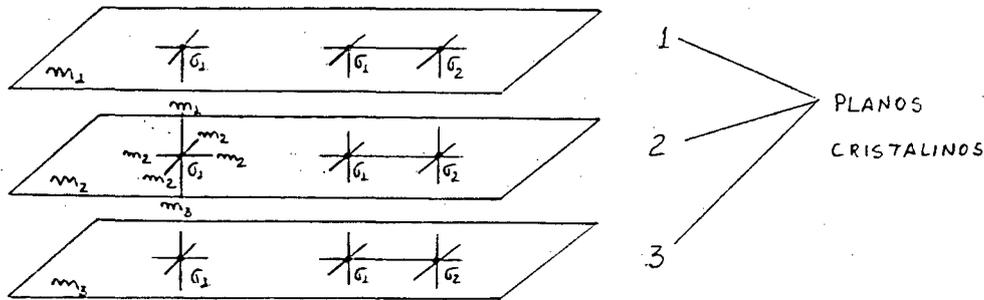


Fig. 14 - Blocos de um e dois spins para cada plano cristalino.

Para um spin no plano  $i$  de uma rede cristalina temos  $Z_0$  ligações neste plano com um campo efetivo  $\underline{m}_i$ , que é a magnetização no plano  $i$ ,  $Z_1$  ligações com o plano  $i-1$  de magnetização  $\underline{m}_{i-1}$  e  $Z_1$  ligações como plano  $i+1$ , de magnetização  $\underline{m}_{i+1}$ . Estes  $\underline{m}_i$ ,  $\underline{m}_{i-1}$  e  $\underline{m}_{i+1}$  são equivalentes aos campos  $\underline{b}$  que foram anteriormente introduzidos. Para o bloco com dois spins no plano  $i$ , cada um deles possui  $Z_0-1$  ligações com  $\underline{m}_i$ ,  $Z_1$  ligações com  $\underline{m}_{i-1}$  e  $Z_1$  com  $\underline{m}_{i+1}$ . O Hamiltoniano para um dado spin  $\sigma_i$ , no plano  $i$ , é dado por

$$H_i = -Z_1 J_{i-1} m_{i-1} \sigma_i - Z_0 J_i m_i \sigma_i - Z_1 J_{i+1} m_{i+1} \sigma_i \quad (4-4)$$

e a média sobre  $\sigma_i$  nos dá

$$\langle \sigma_i \rangle_1 = \frac{\sum_{\{\sigma_i\}} \sigma_i e^{-\beta H_i}}{\sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta H_i}} = \text{tgh} (Z_1 K_{i-1} m_{i-1} + Z_0 K_i m_i + Z_1 K_{i+1} m_{i+1}), \quad (4-5)$$

onde  $K_i = J_i / K_B T$  como já estabelecido anteriormente. Agora, expandindo-se (4-5) em série de Taylor para valores pequenos de  $\underline{m}_i$ , obtemos:

$$\langle \sigma_i \rangle_1 = Z_1 K_{i-1} m_{i-1} + Z_0 K_i m_i + Z_1 K_{i+1} m_{i+1} \quad (4-6)$$

Fazendo a mesma coisa para o bloco de dois spins do  $i$ -ésimo plano, cujo Hamiltoniano é dado pela equação abaixo:

$$H_2 = -J_1 \sigma_1 \sigma_2 - (\sigma_1 + \sigma_2) \left[ (Z_0 - 1) J_1 m_i - Z_1 J_{i-1} m_{i-1} - Z_1 J_{i+1} m_{i+1} \right], \quad (4-7)$$

obtemos o seguinte valor para a magnetização por spin do bloco:

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i \rangle_2 &= \frac{1}{2} \frac{\sum_{\{\sigma_1, \sigma_2\}} e^{-\beta H_2} (\sigma_1 + \sigma_2)}{\sum_{\{\sigma_1, \sigma_2\}} e^{-\beta H_2}} \\ &= \frac{\text{senh} \left\{ 2 \left[ Z_1 K_{i-1} m_{i-1} + (Z_0 - 1) K_i m_i + Z_1 K_{i+1} m_{i+1} \right] \right\}}{\cosh \left\{ 2 \left[ Z_1 K_{i-1} m_{i-1} + (Z_0 - 1) K_i m_i + Z_1 K_{i+1} m_{i+1} \right] \right\} + e^{-2K_i}} \quad (4-8) \end{aligned}$$

Linearizando, ficamos com,

$$\langle \sigma_i \rangle_2 = \frac{2}{1 + e^{-2K_i}} \left[ Z_1 K_{i-1} m_{i-1} + (Z_0 - 1) K_i m_i + Z_1 K_{i+1} m_{i+1} \right] \quad (4-9)$$

Escrevendo a equação (4-2), para os nossos blocos de 1 e 2 spins,

$$\langle \sigma_i \rangle_1 = L^{d-\gamma_H} \langle \sigma_i \rangle_2 \quad (4-10)$$

e assumindo que as magnetizações dos diferentes planos seguem as mesmas relações de escala, obtemos:

$$\begin{aligned} m_{i-1}' &= L^{d-\gamma_H} m_{i-1} \\ m_i' &= L^{d-\gamma_H} m_i \\ m_{i+1}' &= L^{d-\gamma_H} m_{i+1} \quad , \quad (4-11) \end{aligned}$$

onde os  $m_j'$  se referem aos blocos com um único spin e  $m_j$  aos blocos de dois spins. Podemos então escrever:

$$Z_1 k'_{i-1} m_{i-1} + Z_0 k'_i m_i + Z_1 k'_{i+1} m_{i+1} =$$

$$= \frac{1}{1+e^{-2k_i}} \left[ Z_1 k'_{i-1} m_{i-1} + (Z_0 - 1) k'_i m_i + Z_1 k'_{i+1} m_{i+1} \right] \quad (4-12)$$

Adotamos a seguinte notação:  $K_0$  para a interação entre spins do primeiro plano,  $K^1$  para a interação entre spins do primeiro e segundo planos e  $K$  para as demais interações. Teremos portanto, o seguinte conjunto de equações lineares:

$$\left[ Z_0 k'_s - \frac{2(Z_0 - 1)K_s}{1+e^{-2K_s}} \right] m_1 + \left[ Z_1 k'^1 - \frac{2Z_1 k^1}{1+e^{-2K_s}} \right] m_2 = 0$$

$$\left[ Z_1 k'^1 - \frac{2Z_1 k^1}{1+e^{-2K}} \right] m_1 + \left[ Z_0 k' - \frac{2(Z_0 - 1)k}{1+e^{-2K}} \right] m_2 + \left[ Z_1 k' - \frac{2Z_1 k}{1+e^{-2K}} \right] m_3 = 0$$

$$\vdots$$

$$\left[ Z_1 k' - \frac{2Z_1 k}{1+e^{-2K}} \right] m_{i-1} + \left[ Z_0 k' - \frac{2(Z_0 - 1)k}{1+e^{-2K}} \right] m_i + \left[ Z_1 k' - \frac{2Z_1 k}{1+e^{-2K}} \right] m_{i+1} = 0 \quad (4-13)$$

No interior do volume cristalino ( $i \gg 1$ ),  $m_{i-1} = m_i = m_{i+1}$ , então,

$$(Z_0 + 2Z_1)k' = \frac{2(Z_0 + 2Z_1 - 1)k}{1+e^{-2K}} \quad (4-14)$$

As equações (4-13) podem ser escritas como  $\underline{A} \underline{m} = 0$ , onde  $\underline{A}$  é a matriz dos coeficientes, dada por,

$$\underline{A} = \begin{bmatrix} Z_0 k'_s - \frac{2(Z_0 - 1)K_s}{1+e^{-2K_s}} & Z_1 k'^1 - \frac{2Z_1 k^1}{1+e^{-2K_s}} & 0 & \dots \\ Z_1 k'^1 - \frac{2Z_1 k^1}{1+e^{-2K^1}} & Z_0 k' - \frac{2(Z_0 - 1)k}{1+e^{-2K}} & Z_1 k' - \frac{2Z_1 k}{1+e^{-2K}} & \\ 0 & Z_1 k' - \frac{2Z_1 k}{1+e^{-2K}} & Z_0 k' - \frac{2(Z_0 - 1)k}{1+e^{-2K}} & \\ \vdots & & & \\ 0 & & & \end{bmatrix} \quad (4-15)$$

E para que ocorra uma solução não trivial, devemos impor que,

$$\det A = 0$$

(4-16)

Seguindo os mesmos passos da secção 2 do capítulo 3, obtemos a seguinte equação,

$$\left[ z_0 k_s' - \frac{2(z_0-1)k_s}{1+e^{-2k_s}} \right] \left\{ \left[ z_0 k_s' - \frac{2(z_0-1)k}{1+e^{-2k}} \right] \det A_{m-2} - \right. \\ \left. - \left[ z_1 k' - \frac{2z_1 k}{1+e^{-2k}} \right] \left[ z_1 k' - \frac{2z_1 k}{1+e^{-2k}} \right] \det A_{m-3} \right\} - \left[ z_1 k' - \frac{2z_1 k}{1+e^{-2k_s}} \right] \left[ z_1 k' - \frac{2z_1 k}{1+e^{-2k}} \right] \det A_{m-2} = 0 \quad (4-17)$$

E observando que, da equação (4-14) para o volume,

$$z_0 k' - \frac{2(z_0-1)k}{1+e^{-2k}} = -2 \left( z_1 k' - \frac{2z_1 k}{1+e^{-2k}} \right),$$

o determinante da matriz  $A_m$  em (4-17) fica,

$$\det A_m = \left( z_1 k' - \frac{2z_1 k}{1+e^{-2k}} \right)^m \begin{vmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \\ \vdots & & & & \end{vmatrix},$$

ou seja,

$$\det A_m = \left( z_1 k' - \frac{2z_1 k}{1+e^{-2k}} \right)^m (-1)^m (m+1)$$

e obtemos finalmente,

$$\left[ z_0 k_s' - \frac{2(z_0-1)k_s}{1+e^{-2k_s}} \right] \left[ \left( z_1 k' - \frac{2z_1 k}{1+e^{-2k}} \right) \left( \frac{-m}{m-1} \right) \right] = \left( z_1 k' - \frac{2z_1 k}{1+e^{-2k_s}} \right) \left( z_1 k' - \frac{2z_1 k}{1+e^{-2k}} \right) \quad (4-18)$$

Podemos agora, de posse das equações (4-14) e (4-18), e, considerando que no ponto crítico  $K=K'=K_c$ ,  $K^1=K_c^1=K_c^1$  e  $K_s=K_s'=K_{sc}$ , encontrar  $K_c$  e uma relação entre  $K_c^1$  e  $K_{sc}$ . Resolvendo (4-14) obtemos  $K_c=0.2027$ . Assumindo agora que  $K^1=K^1=K$  e  $n=\infty$ , ou seja,

o número de planos que tem magnetização diferente daquela do volume é infinito e através de (4-18), chegamos a  $K_{sc} = 0.2741$ , o que nos dá uma razão,

$$\frac{K_{sc}}{K_c} = \frac{J_s}{J} = 1,352 \quad ,$$

ou seja,  $\Delta_c = 0.35$ . Comparando este resultado com os obtidos na literatura, temos que  $\Delta_c = 0.6 \pm 0.01$  das expansões em séries [7];  $\Delta_c = 0.5 \pm 0.03$  dos resultados do método de Monte Carlo [8]. Vimos que a teoria de campo médio nos fornece  $\Delta_c = 0.25$ . O resultado acima, obtido através do grupo de renormalização de campo médio, para blocos de 1 e 2 spins, pode ser melhorado, uma vez que aumentemos o número de spins dos blocos. Quanto ao resultado  $K_c = 0.2027$ , podemos compará-lo com o valor  $K_c = 0.222$ , obtido através de expansões em série para o modelo de Ising tridimensional.

Da mesma forma como fizemos anteriormente, tomamos agora um bloco de quatro spins.

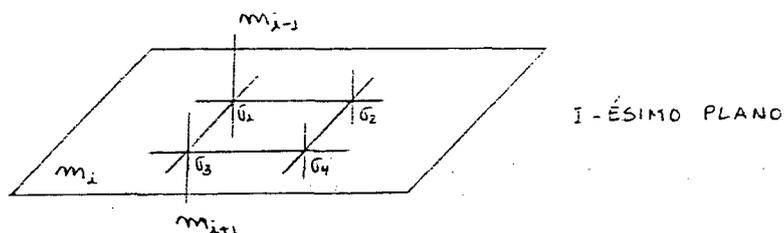


Fig. 15 - Bloco de quatro spins no i-ésimo plano.

O Hamiltoniano é,

$$H_4 = -J_1 (\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_4 + \sigma_4 \sigma_1) - (\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4) \cdot [(Z_0 - 2)J_1 m_i + Z_1 J_{i-1} m_{i-1} + Z_1 J_{i+1} m_{i+1}] \quad (4-19)$$

O valor médio da magnetização para este bloco, após linearizada fica,

$$\langle \sigma_i \rangle_4 = \frac{4 [Z_1 K_{i-1} m_{i-1} + (Z_0 - 2) K_i m_i + Z_1 K_{i+1} m_{i+1}] (e^{4K_i} + 1)}{e^{4K_i} + e^{-4K_i} + 6} \quad (4-20)$$

Relacionando com a equação (4-9), obtemos inicialmente a

equação para o interior do volume,

$$\frac{(z_0+2z_1-1)k'}{1+e^{-2k'}} = \frac{2(z_0+2z_1-2)k(e^{4k}+1)}{e^{4k}+e^{-4k}+6} \quad (4-21)$$

Impondo que  $T_{cs}=T_{cv}$  e seguindo exatamente os mesmos passos dados no cálculo anterior, chegamos à seguinte expressão final, similar à equação (4-18), que relaciona  $K_s$ ,  $K^1$  e  $K$  para o conjunto de blocos de 2 e 4 spins:

$$\left[ \frac{(z_0-1)K_s}{1+e^{-2K_s}} - \frac{(z_0-2)(e^{4K_s}+1)K_s}{\cosh(4K_s)+3} \right] K \left( \frac{-m}{m-1} \right) = \left[ \frac{z_1 K^1{}^2}{1+e^{-2K_s}} - \frac{z_1(e^{4K_s}+1)K^1{}^2}{\cosh(4K_s)+3} \right] \quad (4-22)$$

Resolvendo-se a equação (4-21) para  $K_c$  obtemos  $K_c=0.2055$ . De (4-22) e tomando-se  $K^1=K^1'=K$  e  $n=\infty$ , obtemos  $K_{ac}=0.2847$  e  $\Delta_c=0.385$ , que é um resultado um pouco melhor que o anterior.

Podemos aqui, traçar uma curva de  $J_s/J$  x  $J^1/J$  para  $\lambda=0$  e comparar com a curva similar da figura 8 (que por sua vez, está em função de  $\lambda$ ). Na figura 16 vemos esta curva traçada a partir das equações (4-14) e (4-18), que é simétrica em relação ao eixo  $J_s/J$ , como na figura 8.

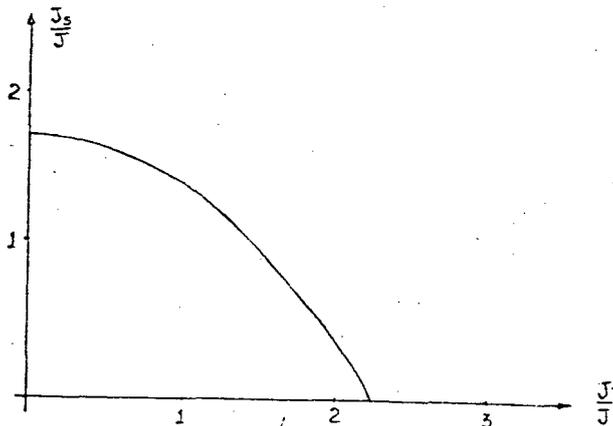


Fig. 16 - Diagrama de fases no plano  $J_s/J$  versus  $J^1/J$  para  $T_{cs}=T_{cv}$ , proveniente do GRGM para blocos com um e dois spins.

Observamos que a forma da curva é a mesma, no entanto, os valores nos quais a curva cruza os eixos  $J^1/J$  e  $J_s/J$  são diferentes.

Enquanto que na curva 8,  $J_s/J=1.5$  para  $J^1=0$  aqui temos  $J_s/J=1.71$ . Por outro lado, se  $J_s/J=0$ , tínhamos  $J^1/J=2.45$ , aqui temos  $J^1/J=2.22$ .

Como anteriormente, nos perguntamos, qual o comportamento dos resultados, com relação ao número de planos acoplados, de forma que as suas magnetizações sejam diferentes daquela do volume. Mostramos, na tabela 1, o resultado desta comparação.

Teoria de campo médio			GRCM - Blocos 1-2 spins			GRCM - blocos 2-4 spins		
n	K <sub>sc</sub>	Δ	n	K <sub>sc</sub>	Δ	n	K <sub>sc</sub>	Δ
2	0.229	0.375	2	0.310	0.530	2	0.327	0.589
4	0.219	0.313	4	0.292	0.441	4	0.305	0.486
6	0.215	0.292	6	0.286	0.411	6	0.299	0.453
∞	0.208	0.250	∞	0.274	0.352	∞	0.285	0.385

Tabela 1 - Comparação dos valores de  $K_{sc}$  e  $\Delta$  para 2, 4, 6 e infinitos planos, nas teorias de campo médio e GRCM (blocos com 1 e 2 spins e blocos com 2 e 4 spins).

Podemos observar que, quanto menor o número de planos, cujas magnetizações diferem daquela do volume, maiores são os valores de  $K_s$  e  $\Delta$  nas três tabelas. Vemos também que os valores de  $\Delta$  para  $n = 2$  são cerca de 50% maiores que para  $n=\infty$ . Devemos acreditar então, que se trata de um problema relativo ao processo de cálculo, que é o mesmo para a teoria do campo médio ou para o GRCM.

Sendo mais explicito, no nosso método, resolvemos um sistema de equações com as magnetizações planares acopladas. Como a maioria das interações dos spins, em blocos pequenos, se da com a magnetização do próprio plano, e em menor grau com os planos vizinhos, quanto mais suave for a transição da superfície para o volume, ou seja, quanto maior  $n$ , mais indireto é o contato magnético entre a superfície e o volume, sendo que a constante de troca do plano da superfície poderá assumir valores menores para satisfazer a condição  $T_{cs}=T_{cv}$ . Com base neste raciocínio, adiantamos que, quando aumentamos o tamanho dos blocos de spins que estamos usando, o número de interações com a magnetização dos planos vizinhos, tornar-se-á tão importante quanto às interações com o próprio plano. Desta forma, para um mesmo número de planos

acoplados no desenvolvimento dos cálculos, se aumentarmos o tamanho dos blocos de spins na equação do grupo de renormalização, os valores de  $\Delta$  encontrados serão crescentes.

Cálculos similares aos nossos foram realizados por Marques e Santos [23]. Eles consideraram dois planos de spins como mostrados na figura 17.

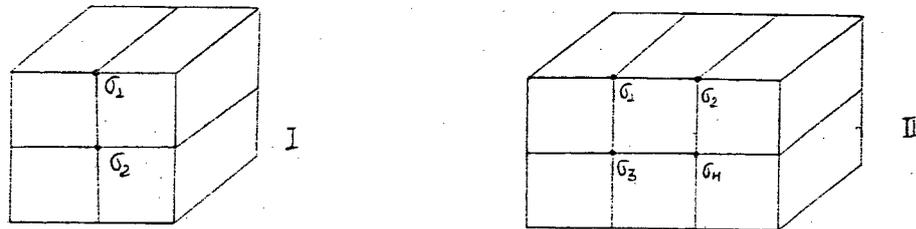


Fig. 17 - Blocos de 2 e 4 spins, entre o primeiro e segundo planos.

Os cálculos são realizados determinando-se as médias  $\langle \sigma_i \rangle_I$  e  $\langle \sigma_i + \sigma_i \rangle_{II}$ , e assumindo que a magnetização (ou seja, o campo efetivo) do segundo plano em diante é nula. Nestes cálculos é obtido o valor  $\Delta = 0.64$ . Neste modelo, apenas a magnetização do plano da superfície é diferente daquela do volume, justificando um alto valor para  $\Delta$ . É no entanto peculiar, o fato de que os spins da superfície interagem com os spins do volume da rede, estando sujeitos à suas flutuações. Acreditamos que o modelo adotado por esses autores é demasiadamente simplificado, pois não leva em consideração a variação da magnetização com a profundidade, característica dos sistemas semi-infinitos.

Vamos generalizar o método por usado nós até agora, para que possamos relacionar dois blocos de spins de quaisquer tamanho, ainda no mesmo plano. O Hamiltoniano reduzido do bloco em um plano  $\underline{l}$  será,

$$-\beta H = T' K_l + T'' K_l m_l + T''' (K_{l-1} m_{l-1} + K_{l+1} m_{l+1}) , \quad (4-23)$$

onde  $T'$  é o termo de interação de todos os spins do bloco entre si,  $T''$  o termo de ligação dos spins com a magnetização do seu plano, e  $T'''$  é a soma de todos os spins. O primeiro, segundo e terceiro

termos de (4-23) são respectivamente, as energias de ligação dos spins entre si, com a magnetização do mesmo plano, e com as magnetizações dos planos vizinhos. A média sobre os spins de um bloco será,

$$\langle G \rangle_I = \frac{1}{N_I} \frac{\sum_I R_I T_I''' \exp [T_I' K_{\lambda} + T_I'' K_{\lambda} m_{\lambda} + T_I''' (K_{\lambda-1} m_{\lambda-1} + K_{\lambda+1} m_{\lambda+1})]}{\sum_I R_I \exp [T_I' K_{\lambda} + T_I'' K_{\lambda} m_{\lambda} + T_I''' (K_{\lambda-1} m_{\lambda-1} + K_{\lambda+1} m_{\lambda+1})]} , \quad (4-24)$$

onde  $N_I$  é o número de spins do bloco e  $R_I$  são os números de repetições que ocorrem, quando da determinação das combinações dos spins, ou seja, o número de vezes em que diferentes combinações resultam nos mesmos valores de  $T'$ ,  $T''$  e  $T'''$ . Como os termos em  $m_{\lambda-1}$ ,  $m_{\lambda}$  e  $m_{\lambda+1}$  são muito pequenos, podemos expandir as exponenciais de (4-24) em séries de Taylor, ficando,

$$\langle G \rangle_I = \frac{1}{N_I} \frac{\sum_I R_I T_I''' e^{T_I' K_{\lambda}} [1 + T_I'' K_{\lambda} m_{\lambda} + T_I''' (K_{\lambda-1} m_{\lambda-1} + K_{\lambda+1} m_{\lambda+1})]}{\sum_I R_I e^{T_I' K_{\lambda}} [1 + T_I'' K_{\lambda} m_{\lambda} + T_I''' (K_{\lambda-1} m_{\lambda-1} + K_{\lambda+1} m_{\lambda+1})]} . \quad (4-25)$$

Notando que, por simetria,

$$\sum_I R_I T_I''' e^{T_I' K_{\lambda}} = 0 ,$$

o denominador pode tomar a forma,

$$\sum_I R_I e^{T_I' K_{\lambda}} \left\{ 1 + \frac{\sum_I R_I e^{T_I' K_{\lambda}} [T_I'' K_{\lambda} m_{\lambda} + T_I''' (K_{\lambda-1} m_{\lambda-1} + K_{\lambda+1} m_{\lambda+1})]}{\sum_I R_I e^{T_I' K_{\lambda}}} \right\} ,$$

então, o termo entre chaves, que é da forma  $(1+x)^{-1}$ , pode ser expandido em série, tal que,

$$(1+x)^{-1} \cong 1 - x .$$

Então, desprezando no numerador os termos que contém produtos de magnetizações da forma  $m_j m_k$ , chegamos finalmente à,

$$\langle \sigma \rangle_I = \frac{1}{N_I \sum_j R_j e^{T_j' K_c}} \sum_I R_i T_i''' e^{T_i' K_c} [T_i' K_c m_i + T_i''' (K_{i-1} m_{i-1} + K_{i+1} m_{i+1})] \quad (4-26)$$

De posse deste resultado, podemos, através das relações (4-10) e (4-11), obter as expressões para  $K_c$  e  $K_{sc}$ . A expressão que relaciona as médias (4-26) para dois blocos com  $N_I$  e  $N_{II}$  spins no volume é:

$$\left( \frac{1}{N_I \sum_j R_j e^{T_j' K_c}} \sum_I R_i T_i'' T_i''' e^{T_i' K_c} K_c \right)_I - \left( \frac{1}{N_{II} \sum_j R_j e^{T_j' K_c}} \sum_{II} R_i T_i'' T_i''' e^{T_i' K_c} K_c \right)_{II} = -2 \left[ \left( \frac{1}{N_I \sum_j R_j e^{T_j' K_c}} \sum_I R_i T_i'''^2 e^{T_i' K_c} K_c \right)_I - \left( \frac{1}{N_{II} \sum_j R_j e^{T_j' K_c}} \sum_{II} R_i T_i'''^2 e^{T_i' K_c} K_c \right)_{II} \right] \quad (4-27)$$

e a equação que relaciona as constantes de troca na superfície equivalente às equações (4-18) ou (4-22), é dada por,

$$\left[ \left( \frac{1}{N_I \sum_j R_j e^{T_j' K_{sc}}} \sum_I R_i T_i'' T_i''' e^{T_i' K_{sc}} \right)_I - \left( \frac{1}{N_{II} \sum_j R_j e^{T_j' K_{sc}}} \sum_{II} R_i T_i'' T_i''' e^{T_i' K_{sc}} \right)_{II} \right] K_c K_{sc} \left( \frac{-m}{m-1} \right) = \left[ \left( \frac{1}{N_I \sum_j R_j e^{T_j' K_{sc}}} \sum_I R_i T_i'''^2 e^{T_i' K_{sc}} \right)_I - \left( \frac{1}{N_{II} \sum_j R_j e^{T_j' K_{sc}}} \sum_{II} R_i T_i'''^2 e^{T_i' K_{sc}} \right)_{II} \right] K_c^2 \quad (4-28)$$

Podemos agora relacionar blocos de qualquer número de spins e de qualquer forma desde que os spins dos blocos pertençam ao mesmo plano. Nos restringimos em nossos cálculos, a blocos quadrados, pois estes estão de acordo com a simetria da rede. Relacionamos através das equações (4-27) e (4-28) blocos de 4 e 9, 9 e 16 e 16 e 25 spins. O processo consiste em estabelecer o Hamiltoniano (4-23) e através deste, determinar numericamente, para cada uma das  $2^{N_I}$  configurações, o conjunto de valores de  $T'$ ,  $T''$  e  $T'''$ , e o número de repetições  $R_i$  de cada uma delas. Mostramos abaixo, na tabela 2, o resultado destes cálculos para  $K^1 = K$  e  $n \rightarrow \infty$ .

Blocos relacionados	$K_c$	$K_{cs}$	$\Delta$
1 - 2	0.2027	0.2741	0.3522
2 - 4	0.2055	0.2847	0.3850
4 - 9	0.2063	0.2880	0.3960
9 - 16	0.2070	0.2910	0.4056
16 - 25	0,2074	0,2920	0,4079

Tabela 2- valores de  $K_c$ ,  $K_{cs}$  e  $\Delta$  determinados através do GRCM para diferentes blocos de spins.

Observamos que há uma pequena melhora em todos os três parâmetros, quando do crescimento dos blocos e uma tendência dos valores se estabilizarem. Cálculos feitos com blocos de spins tridimensionais, de lados iguais, no volume da rede [20], mostram resultados de  $K_c$  quase iguais aos nossos. Na referência [20] foram relacionados blocos de 1 e 8, e, 8 e 27 spins apresentando, respectivamente, os valores  $K_c = 0.207$  e  $K_c = 0.212$ , sendo que o melhor valor encontrado na literatura é  $K_c = 0.222$  (expansões em série). Quanto aos valores de  $\Delta$ , podemos observar que nos aproximamos um pouco mais daqueles valores obtidos através do método Monte Carlo.

#### 4.3- Comportamento Crítico Acima da Temperatura Crítica do Volume

Vamos agora observar o comportamento das curvas  $J^1/J$  versus  $J_s/J$  quando a temperatura crítica da superfície está acima daquela do volume. A matriz dos coeficientes (4-15), que relaciona os blocos de um e dois spins, toma a forma,

$$\tilde{A} = \begin{bmatrix} y & a & 0 & 0 & \dots \\ b & x & 1 & 0 & \\ 0 & 1 & x & 1 & \\ 0 & 0 & 1 & x & \\ \vdots & & & & \end{bmatrix} \quad , \quad (4-29)$$

onde,

$$y = \left[ z_0 K_{sc} - \frac{2(z_0-1) K_{sc}}{1+e^{-2K_{sc}}} \right] / c$$

$$x = \left[ z_0 K_G - \frac{2(z_0-1) K_G}{1+e^{-2K_G}} \right] / c$$

$$a = \left[ z_1 K_c^1 - \frac{2z_1 K_c^1}{1+e^{-2K_{sc}}} \right] / c$$

$$b = \left[ z_1 K_c^1 - \frac{2z_1 K_c^1}{1+e^{-2K_G}} \right] / c$$

$$c = \left[ z_1 K_G - \frac{2z_1 K_G}{1+e^{-2K_G}} \right] ,$$

sendo que escrevemos  $K_G = J/K_B T_{cs}$  para diferenciar de  $K_c = J/K_T c_v$ , obtido da equação (4-14); definimos ainda que  $K_{sc} = J_s/K_B T_{cs}$  e  $K_c^1 = J^1/K_B T_{cs}$ . Seguindo os mesmos passos dados na secção 3 do capítulo 3 e calculando o determinante de A, obteremos a seguinte expressão para  $\det A = 0$ :

$$\frac{a^2 b^2}{y^2} - \frac{a b x}{y} + 1 = 0 \quad .$$

(4-30)

Na figura 18, apresentamos as curvas relacionando  $J^1/J$  e  $J_s/J$  para  $T_{cs} = T_{cv}$ ,  $T_{cs} = 1.25 T_{cv}$  e  $T_{cs} = 1.50 T_{cv}$ .

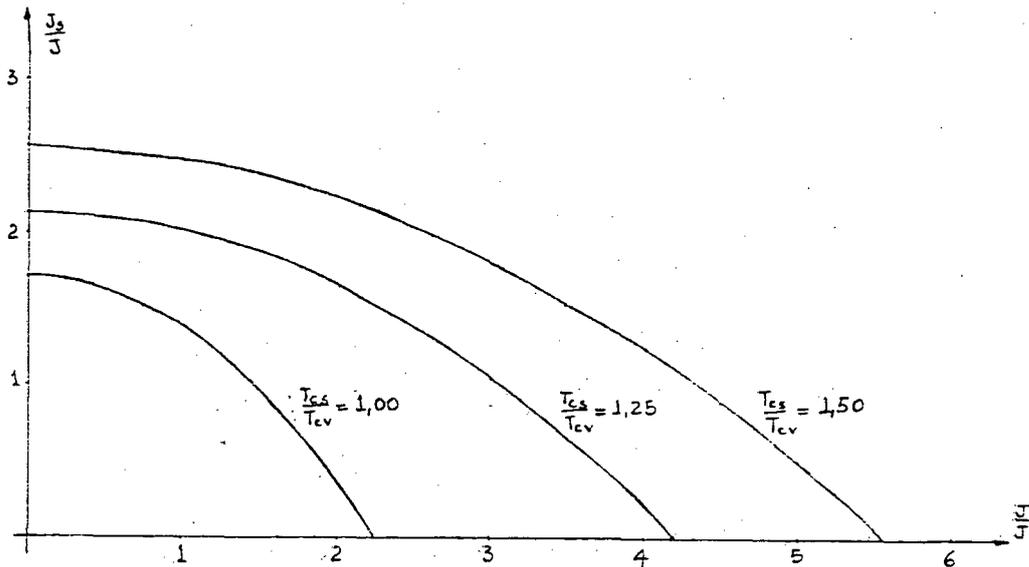


Fig.18- Curvas relacionando  $J^1/J$  e  $J_s/J$  para  $T_{cs}=T_{cv}$ ,  $T_{cs}=1.25T_{cv}$  e  $T_{cs}=1.50T_{cv}$ , obtidas a partir da equação (4.30)

Podemos comparar os resultados acima com aqueles que obtivemos anteriormente com a teoria de campo médio . para  $T_{cs}/T_{cv}=1.25$  encontramos  $J_s/J=1.875$  se  $J^1/J=0$  e se  $J_s/J=0$ ,  $J^1/J=4.86$ . Para  $T_{cs}/T_{cv}=1,50$  ,tinhamos que se  $J^1/J=0$ ,  $J_s/J=2.25$  e se  $J_s/J=0$ ,  $J^1/J=6.57$ .

4.4- Grupo de renormalização de campo médio - Relação entre três blocos de spins [21]

Na seção 1, apresentamos o grupo de renormalização de campo médio, que tem como premissa básica o fato de que as médias térmicas sobre os spins de dois diferentes blocos se escalam da mesma forma que os respectivos campos efetivos  $\underline{b}$ , a saber,

$$m_N'(k', h', b') = L^{d-\gamma_H} m_N(k, h, b)$$

$$b' = L^{d-\gamma_H} b$$

No entanto, pode ser mostrado que para blocos maiores, esta aproximação é em geral, incorreta. Quando aumentamos o tamanho dos blocos, somente os spins da superfície destes, estarão sujeitos a um campo efetivo  $h_s = kb$ . Portanto, próximo à criticalidade, a magnetização efetiva deve se escalar como um campo de superfície.

$$b' = L^{\gamma_{HS}} b \quad (4-31)$$

Consideraremos três blocos de spins de tamanho  $N$ ,  $N'$  e  $N''$  (tal que  $N > N' > N''$ ) que se escalam como anteriormente,

$$m_N'(k', h', b') = L_1^{d-\gamma_{H1}} m_N(k, h, b)$$

$$m_N''(k'', h'', b'') = L_2^{d-\gamma_{H2}} m_N'(k', h', b') \quad (4-32)$$

e cujos campos superficiais se escalam como,

$$b' = L_1^{\gamma_{HS1}} b$$

$$b'' = L_2^{\gamma_{HS2}} b' \quad (4-33)$$

onde  $L_1 = (N/N'')^{1/d}$  e  $L_2 = (N'/N'')^{1/d}$ . Linearizando-se as equações (4-32), nos permitirá determinar os valores críticos de interesse,  $K_c$  e  $K_{cs}$  e os expoentes críticos do modelo. Para que possamos determinar esses parâmetros devemos, por fim, impor a relação,

$$L_1^{d-\gamma_{H1}-\gamma_{HS1}} = L_2^{d-\gamma_{H2}-\gamma_{HS2}} = g \quad (4-34)$$

### 5.5- Relacionando três blocos bidimensionais de spins

Vamos utilizar os mesmos blocos de spins que usamos anteriormente e aplicaremos a técnica sucintamente descrita na seção anterior. Se tomarmos blocos de 1 e 2, e de , 2 e 4 spins, teremos inicialmente que,

$$L_2 = \left( \frac{N^1}{N^0} \right)^{1/d} = 2^{1/3}$$

$$L_1 = \left( \frac{N}{N^1} \right)^{1/d} = 2^{1/3} \quad (4-35)$$

Relacionando as médias (4-6) com (4-9) e (4-9) com (4-20) da seguinte forma,

$$\langle \sigma_i \rangle_1 = L^{d-\gamma_{H2}} \langle \sigma_i \rangle_2$$

$$\langle \sigma_i \rangle_2 = L^{d-\gamma_{H1}} \langle \sigma_i \rangle_4 \quad (4-36)$$

As magnetizações dos planos se escalam como,

$$m_j^0 = L^{\gamma_{HS2}} m_j^1$$

$$m_j^1 = L^{\gamma_{HS1}} m_j \quad (4-37)$$

Desta forma, obtemos imediatamente as seguintes equações já linearizadas:

$$Z_1 K_{i-1}^1 m_{i-1} + Z_0 K_i^1 m_i + Z_1 K_{i+1}^1 m_{i+1} =$$

$$L^{d-\gamma_{H2}-\gamma_{HS2}} \left[ \frac{2 Z_1 K_{i-1}^1}{1+e^{-2K_i}} m_{i-1} + \frac{2(2z_0-1)K_i^1}{1+e^{-2K_i}} m_i + \frac{2 Z_1 K_{i+1}^1}{1+e^{-2K_i}} m_{i+1} \right] \quad (4-38)$$

$$\frac{z_1 k'}{1+e^{-2k'}} m_{\lambda-1} + \frac{(z_0-1)k'}{1+e^{-2k'}} m_{\lambda} + \frac{z_1 k'}{1+e^{-2k'}} m_{\lambda+1} =$$

$$= L_1^{d-Y_{H1}-Y_{HS1}} \left[ \frac{z_1 (e^{4k_{\lambda}}+1) K_{\lambda-1}}{\cosh(4k_{\lambda})+3} m_{\lambda-1} + \frac{(z_0-2)(e^{4k_{\lambda}}+1) K_{\lambda}}{\cosh(4k_{\lambda})+3} m_{\lambda} + \frac{z_1 (e^{4k_{\lambda}}+1) K_{\lambda+1}}{\cosh(4k_{\lambda})+3} m_{\lambda+1} \right] \quad (4-39)$$

Impondo a condição (4-34) obtemos de (4-38) e (4-39) a equação de renormalização  $K' = K'(K)$  e no ponto crítico  $K = K'(K)$ , tiramos então que  $K = 0.2121$ . Obtemos também que  $g = 0.9927$ . Segundo os mesmos passos que anteriormente nos levaram às relações para  $K_{sc}$ , obtemos duas equações equivalentes às (4-18) e (4-22). Para a relação entre os blocos de um e dois spins temos

$$\left[ z_0 K_{sc2} - \frac{2g(z_0-1)K_{sc2}}{1+e^{-2K_{sc2}}} \right] K_c \left( \frac{-m}{m-1} \right) = \left( z_1 - \frac{2g z_1}{1+e^{-2K_{sc2}}} \right) K_1^2 \quad (4-40)$$

e para os blocos: de 2 e 4 spins,

$$\left[ \frac{(z_0-1)}{1+e^{-2K_{sc1}}} - \frac{g(z_0-2)(e^{4K_{sc1}}+1)}{\cosh(4K_{sc1})+3} \right] K_{sc1} K_c \left( \frac{-m}{m-1} \right) = \left[ \frac{z_1}{1+e^{-2K_{sc1}}} - \frac{g(z_0-2)(e^{4K_{sc1}}+1)}{\cosh(4K_{sc1})+3} \right] K_1^2 \quad (4-41)$$

A equação (4-40) nos fornece o valor  $K_{sc2} = 0.2836$ , sendo que  $\Delta_2 = 0.3376$ . A equação (4-41) nos dá  $K_{sc1} = 0.2907$ , sendo  $\Delta_1 = 0.3710$ . Comparando estes valores encontrados relacionando três blocos de spins, observamos que  $K_c$  e  $K_{sc}$  são maiores que aqueles determinados quando comparamos apenas dois blocos, porém os valores de  $\Delta$  são ligeiramente menores.

Vamos agora, calcular  $Y_H$ ,  $Y_{HS}$  e  $Y_T$  para os blocos de 1 e 2 spins. Para calcularmos  $Y_H$  somamos primeiramente no Hamiltoniano (4-4) um termo devido ao campo externo  $h''$ , dado por  $-h'' \sigma_1$ , que é equivalente aos campos  $K_{jm}$ . Da mesma forma, somamos no Hamiltoniano (4-7) um termo  $-h'(\sigma_1 + \sigma_2)$ . Teremos assim a relação geral, equivalente a equação (4-38), entre os dois blocos que é,

$$\begin{aligned}
& Z_1 K_{i-1}'' m_{i-1}'' + Z_0 K_i'' m_i'' + Z_1 K_{i+1}'' m_{i+1}'' + h'' = \\
& = L^{d-Y_H} \left[ \frac{2 Z_1 K_{i-1}'}{1 + e^{-2K_i'}} m_{i-1}' + \frac{2(Z_0-1) K_i'}{1 + e^{-2K_i'}} m_i' + \frac{2 Z_1 K_{i+1}'}{1 + e^{-2K_i'}} m_{i+1}' + \frac{2 h'}{1 + e^{-2K_i'}} \right] .
\end{aligned}
\tag{4-42}$$

No interior do volume da rede,  $m_j$  e  $K_j$  serão uniformes. Podemos então, fazer  $m'' = m' = 0$  e através da relação  $h'' = L_2^{Y_{H2}} h'$ , obteremos,

$$1 = L_2^{Y-2Y_{H2}} \frac{2}{1 + e^{-2K_c}} , \tag{4-43}$$

da qual determinamos  $Y_{H2} = 1.9106$ . A segunda relação será obtida fazendo-se  $h'' = h' = 0$ , e usando a relação de escala  $m'' = L^{Y_{HS2}} m'$ , podemos escrever,

$$(Z_0 + 2Z_1) K_c = L_2^{d-Y_{H2}-Y_{HS2}} \frac{2[(Z_0-1) + 2Z_1] K_c}{1 + e^{-2K_c}} , \tag{4-44}$$

encontrando  $Y_{HS2} = 1.1215$ .

O valor de  $Y_r$  é obtido, como já discutimos anteriormente, fazendo-se  $Y_r = \partial K' / \partial K|_{K_c}$ . Derivando  $K''$  em relação a  $K'$ , na equação (4-42) (para o volume da rede), obtemos  $Y_{r2} = 0.6710$ .

Desejamos observar a tendência dos resultados obtidos relacionando-se três blocos de spins, quando aumentamos o tamanho dos mesmos, para depois compararmos os valores encontrados com aquelas da literatura. Podemos, através das equações (4-26) relacionar três blocos de spins. Encontraremos uma relação para o volume como na equação (4-27), e relações para  $K_{sc}$ , similares à equação (4-28) (deve-se, entre as relações inserir o fator  $g$ ). Podemos generalizar também, os procedimentos para encontrar  $Y_H$ ,  $Y_{HS}$  e  $Y_r$  a partir de (4-26). Mostramos, na tabela 3, os diversos resultados obtidos para aqueles blocos de spins já considerados na seção 2.

Podemos observar que os valores determinados para  $K_c$  e para os expoentes apresentam uma certa oscilação. Essa é uma

característica do GRM, quando consideramos blocos / de spins com tamanhos crescentes em dimensões superiores a dois [21]. Essas anomalias, acreditamos, são ocasionadas possivelmente, pela falta de simetria dos blocos em relação ao sistema que tratamos. Devemos observar que os nossos blocos de spins, são planos, e por isso, todos os spins de um plano estão sujeitos ao mesmo campo efetivo dos planos vizinhos, além daquele campo do próprio plano, ou seja, os blocos grandes, por nós considerados, em geral apresentam superfícies muito grandes em relação ao número de spins, visto que esses blocos são planos.

N	N'	N''	Kc	K <sub>ec2</sub>	Δ <sub>z</sub>	K <sub>ec1</sub>	Δ <sub>1</sub>
1	2	4	0.2121	0.2836	0.3376	0.2907	0.3710
2	4	9	0.2130	0.2910	0.3659	0.2931	0.3758
4	9	16	0.2048	0.2874	0.4031	0.2911	0.4212
9	16	25	0.2062	0.2920	0.4158	0.2940	0.4256

N	N'	N''	Y <sub>T2</sub>	Y <sub>T1</sub>	Y <sub>H2</sub>	Y <sub>H1</sub>	Y <sub>Hs2</sub>	Y <sub>Hs1</sub>
1	2	4	0.6710	0.8138	1.9106	1.9989	1.1215	1.0334
2	4	9	0.6982	0.6524	2.0014	1.8902	1.1468	1.0302
4	9	16	0.6226	0.5066	1.8702	1.7979	1.1230	1.1926
9	16	25	0.5119	0.4193	1.8011	1.7448	1.1954	1.2507
Ref.[22]			1.59		2.42		0.8	

Tabela 3-Resultados dos cálculos com GRM relacionando-se três blocos de spins, onde são usados blocos de 1, 2, 4, 9, 16 e 25 spins. São mostrados os valores de K<sub>c</sub>, K<sub>ec</sub>, Δ, Y<sub>T</sub>, Y<sub>H</sub>, Y<sub>Hs</sub> e os valores de referência.

4.6- Relação entre dois e três blocos de spins distribuídos entre dois planos cristalinos.

Vamos agora formar blocos de spins que não estão num único plano cristalino, mas sim, distribuídos entre dois planos vizinhos. Blocos com dois, quatro e oito spins são mostrados na fig. 19.

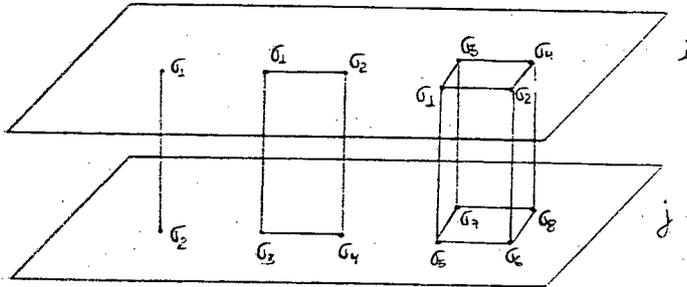


Fig.19- Blocos de 2, 4 e 8 spins pertencentes a dois planos.

O Hamiltoniano do bloco de dois spins é dado por,

$$H_2 = -J_{1j} \sigma_1 \sigma_2 - Z_1 J_{i-1} \sigma_i m_{i-1} - Z_0 J_i \sigma_1 m_i - \\ - Z_0 J_j \sigma_2 m_j - Z_1 J_{j+1} \sigma_2 m_{j+1} \quad (4-45)$$

onde os índices  $i-1$  e  $j+1$  referem-se aos planos acima de  $i$  e abaixo de  $j$  respectivamente. A média sobre os spins, depois de linearizarmos para pequenos valores de  $m_l$  é dada por,

$$\langle \sigma_i \rangle_2 = (Z_1 K_{i-1} m_{i-1} + Z_0 K_i m_i + Z_0 K_j m_j + Z_1 K_{j+1} m_{j+1}) \frac{e^{K_{ij}}}{e^{K_{ij}} + e^{-K_{ij}}} \quad (4-46)$$

O Hamiltoniano para o bloco de quatro spins é,

$$H_4 = -J_{1j} \sigma_1 \sigma_2 - J_{2j} (\sigma_1 \sigma_3 + \sigma_2 \sigma_4) - J_j \sigma_3 \sigma_4 - Z_1 J_{i-1} (\sigma_1 + \sigma_2) m_{i-1} - \\ - (Z_0 - 1) J_i (\sigma_1 + \sigma_2) m_i - (Z_0 - 1) J_j (\sigma_3 + \sigma_4) m_j - Z_1 J_{j+1} (\sigma_3 + \sigma_4) m_{j+1} \quad (4-47)$$

e a média sobre os quatro spins do bloco torna-se,

$$\begin{aligned}
\langle \sigma_i \rangle_4 = & \left\{ [2z_i k_{i-1} m_{i-1} + 2(z_0-1) k_i m_i] [ \exp(k_i + 2k_{i,j} + k_j) + \exp(k_i - k_j) ] + \right. \\
& [2(z_0-1) k_j m_j + 2z_i k_{j+1} m_{j+1}] [ \exp(k_i + 2k_{i,j} + k_j) + \exp(k_j - k_i) ] \left. \right\} / \\
& [ \exp(k_i + 2k_{i,j} + k_j) + \exp(k_i - 2k_{i,j} + k_j) + \exp(-k_i + 2k_{i,j} - k_j) + \\
& \exp(-k_i - 2k_{i,j} - k_j) + 2 \exp(k_i - k_j) + 2 \exp(k_j - k_i) ] .
\end{aligned} \tag{4-48}$$

Como feito anteriormente, impomos que as relações de escala são,

$$\langle \sigma_i \rangle_2 = L^{d-\gamma_H} \langle \sigma_i \rangle_4$$

$$m_{iL} = L^{d-\gamma_H} m_{iE}$$

e obtemos a seguinte relação para o volume:

$$\frac{[(z_0-1) + z_1] (e^{4K_c} + 1) K_c}{\cosh(4K_c) + 3} - \frac{(z_0 + z_1) e^{K_c} K_c}{e^{K_c} + e^{-K_c}} = 0 \tag{4-49}$$

Para encontrar a relação envolvendo  $K_{sc}$ , escrevemos a equação matricial,

$$\underline{AM} = 0, \tag{4-50}$$

onde

$$\begin{bmatrix}
a_1 & a_2 & a_3 & 0 & 0 & \dots \\
b_1 & c & c & b & 0 & \\
0 & b & c & c & b & \\
\vdots & & & & & \\
\vdots & & & & & \\
\vdots & & & & & 
\end{bmatrix} \tag{4-51}$$

Sendo que

$$a_1 = \frac{2(z_0-1) [\exp(k_s+2k^1+k) + \exp(k_s-k)] k_s}{\lambda} - \frac{z_0 k_s e^{k^1}}{e^{k^1} + e^{-k^1}}$$

$$a_2 = \frac{2(z_0-1) [\exp(k_s+2k^1+k) + \exp(k-k_s)] k_s}{\lambda} - \frac{z_0 k e^{k^1}}{e^{k^1} + e^{-k^1}}$$

$$a_3 = \frac{2z_1 [\exp(k_s+2k^1+k) + \exp(k-k_s)] k}{\lambda} - \frac{z_1 k e^{k^1}}{e^{k^1} + e^{-k^1}}$$

$$b_1 = \frac{z_1 (e^{4k} + 1) k^1}{\cosh(4k) + 3} - \frac{z_1 k^1 e^k}{e^k + e^{-k}}$$

$$b = \frac{z_1 (e^{4k} + 1) k}{\cosh(4k) + 3} - \frac{z_1 k e^k}{e^k + e^{-k}}$$

$$\lambda = \exp(k_s+2k^1+k) + \exp(k_s-2k^1+k) + \exp(-k_s+2k^1-k) + \exp(-k_s-2k^1-k) + 2\exp(k_s-k) + 2\exp(-k_s+k)$$

Para que ocorra uma solução não trivial,

$$\det \underline{A} = 0 \quad (4-52)$$

Assim,

$$a_1 \det A_{m-1} - b_1 a_2 \det A_{m-2} + b_1 b a_3 \det A_{m-3} = 0 \quad (4-53)$$

onde a matriz  $A_m$  é dada por,

$$A_m = \begin{bmatrix} -b & -b & b & 0 & 0 & \dots & \dots \\ b & -b & -b & b & 0 & & \\ 0 & b & -b & -b & b & & \\ 0 & 0 & b & -b & -b & & \\ \vdots & & & & & & \end{bmatrix} \quad (4-54)$$

Da equação (4-49) para o volume, sabemos que  $c=-b$ . Fazendo-se esta substituição em (4-54) podemos obter a seguinte expressão para o determinante de  $A_m$ :

$$\det A_m = \left\{ 1 + \frac{m}{2} - \frac{1}{4} [1 - (-1)^m] \right\} (-1)^m b^m \quad (4-55)$$

Substituindo em (4-53) chegamos finalmente à equação que relaciona  $K_{sc}$ ,  $K_c^1$  e  $K_c$ , a saber,

$$\begin{aligned} a_1 b^{m-1} \left\{ 1 + \frac{m-1}{2} - \frac{1}{4} [1 + (-1)^{m-1}] \right\} (-1)^{m-1} - b_1 a_2 b^{m-2} \left\{ 1 + \frac{m-2}{2} - \right. \\ \left. - \frac{1}{4} [1 - (-1)^{m-2}] \right\} (-1)^{m-2} + b_1 b a_3 b^{m-3} \left\{ 1 + \frac{m-3}{2} - \frac{1}{4} [1 - (-1)^{m-3}] \right\} (-1)^{m-3} = 0 \quad (4-56) \end{aligned}$$

Resolvendo a equação (4-49) para o volume, obtemos  $K_c=0.2055$ , que foi o mesmo resultado obtido com a equação (4-21), quando relacionamos blocos de 2 e 4 spins no mesmo plano. Este resultado já era esperado, pois no interior do volume não há distinção entre planos cristalinos. Quanto ao valor de  $K_{sc}$  para  $K_c^1 = K_c$ , obtido da equação (4-56), constatamos que este é altamente dependente do valor de  $\eta$  e só se estabiliza quando  $\eta$  torna-se muito grande. O valor encontrado para  $K_{sc}$  neste limite é  $K_{sc}=0.2756$ , que nos dá um  $\Delta = 0.3410$ . Este resultado é próximo, mas um pouco inferior ao obtido com os blocos de mesmo tamanho quando no mesmo plano.

Generalizamos o processo de cálculo, para as relações entre os atuais blocos de spins, nos mesmos moldes daquela generalização da secção 2, de forma que possamos aumentar o tamanho dos blocos de spins. Pudemos assim relacionar um bloco de 8 spins, mostrado na figura 15, com aquele de 4 spins. Obtivemos desta relação um valor de  $K_c = 0.2091$  e  $K_{sc} = 0.2881$ , o que fornece  $\Delta = 0.3778$ . Podemos ver claramente, que há uma melhora em relação aos resultados anteriores para blocos de mesmo tamanho no plano, principalmente em relação a  $\Delta$ . Isso é devido ao fato que esses blocos espelham melhor a simetria cúbica da rede.

Finalmente, relacionamos os blocos de 2, 4 e 8 spins, e aplicamos a técnica do grupo de renormalização da secção 4.

Obtivemos os resultados apresentados abaixo. Em primeiro lugar, para as constantes críticas obtivemos,

$$K_c = 0.2155 \quad , \quad K_{sc2} = 0.2858 \quad , \quad K_{sc1} = 0.2938$$
$$\Delta_2 = 0.3263 \quad , \quad \Delta_1 = 0.3633$$

e para os expoentes críticos,

$$\gamma_{H2} = 2.0073 \quad , \quad \gamma_{HS2} = 1.0416 \quad , \quad \gamma_{T2} = 0.8245 \quad ,$$
$$\gamma_{H1} = 2.1470 \quad , \quad \gamma_{HS1} = 0.9019 \quad , \quad \gamma_{T1} = 1.0406 \quad .$$

Vemos que os resultados obtidos para  $K_c$  são melhores, entretanto os resultados para  $\Delta$  e para os expoentes críticos são próximos daqueles mostrados na tabela 3, para blocos de tamanhos equivalentes.

## CAPÍTULO 5 - CONCLUSÕES

Neste trabalho consideramos um modelo de Ising numa rede cúbica semi-infinita, submetido a uma pressão uniaxial dirigida perpendicularmente aos planos cristalinos. Do ponto de vista mecânico, permitimos somente vibrações iônicas também perpendiculares aos planos cristalinos. O modelo que tratamos é mecanicamente unidimensional e do tipo Baker-Essam, visto que não levamos em consideração as tensões de cisalhamento entre as linhas de íons. Através de condições de contorno convenientes, pudemos derivar Hamiltonianos efetivos de spins, nos quais as interações de intercâmbio, em direções perpendiculares aos planos cristalinos, são dependentes da pressão externa.

Dentro do esquema da teoria de campo médio determinamos o comportamento da magnetização em função da temperatura e da profundidade à partir da superfície. Mostramos que, dependendo do acoplamento de intercâmbio na superfície, as curvas de magnetização dos planos superficiais podem estar abaixo ou acima da correspondente curva do volume. Acima de determinado valor crítico, aparece uma fase ferromagnética para os planos próximos à superfície, enquanto que no interior do cristal, temos uma fase paramagnética. Discutimos o comportamento da descontinuidade da derivada da curva de magnetização de superfície na temperatura crítica de volume. Mostramos que a descontinuidade aparecerá, para qualquer número de planos diferenciados do volume, desde que impomos a condição de contorno  $m_{n+1} = m_n$ . Sem esta condição, a derivada das curvas de magnetização em função de temperatura, torna-se contínua na temperatura crítica de volume.

Ainda na aproximação de campo médio determinamos o diagrama de fases no espaço  $K_{sc}$  (acoplamento crítico de superfície),  $K_c^1$  (acoplamento crítico para a interação entre spins da superfície e do segundo plano) e  $\lambda$  (pressão externa). Os pontos internos e na superfície do diagrama representam os valores dos parâmetros para os quais o volume e a superfície têm a mesma temperatura crítica. Por outro lado, os pontos acima dessa

superfície crítica, representam os valores dos parâmetros tais que a temperatura crítica de superfície é maior que aquela do volume. Mostramos ainda que quanto maior for o número de planos diferenciados do volume, menor será o acoplamento crítico de superfície para o aparecimento da fase ferromagnética.

Aplicamos o grupo de renormalização de campo médio para determinar as propriedades críticas do modelo de Ising numa rede cúbica semi-infinita. Utilizamos as duas versões do método: a primeira, que relaciona apenas dois blocos e onde o tamanho da superfície dos blocos não é importante; e a segunda, onde três blocos de spins são relacionados e um expoente crítico,  $\gamma_{hs}$ , é introduzido para se corrigir os efeitos de superfície dos blocos de spins.

Mostramos que os resultados obtidos para o acoplamento crítico de superfície e do volume, são tanto melhores quanto maiores os tamanhos dos blocos empregados. Por razões computacionais, utilizamos blocos com até 25 spins. Pudemos observar que há uma tendência para a estabilização dos valores críticos com o crescimento do tamanho dos blocos utilizados. Também pudemos mostrar uma certa oscilação nos valores calculados dos expoentes críticos. Essa é de fato uma característica do grupo de renormalização de campo médio, quando aumentamos o tamanho dos blocos em dimensões maiores que dois.

Determinamos os valores para o acoplamento crítico de superfície para diferentes tamanhos de blocos e número de planos. Notamos que nossos resultados estão próximos daqueles determinados através de simulações de Monte Carlo. Cálculos semelhantes aos nossos, realizados por Marques e Santos [23], dão um valor muito grande para o acoplamento crítico de superfície. Mostramos que isso é devido ao pequeno número de planos diferenciados do volume (no caso desses autores, apenas a superfície é diferente).

Em nossos cálculos, consideramos blocos de spins no mesmo plano, e em planos vizinhos. Embora o bloco de spins entre planos vizinhos apresente uma maior simetria cúbica, os resultados obtidos para os acoplamentos e expoentes críticos foram praticamente os mesmos para blocos de mesmo tamanho.

Finalmente, algumas sugestões quanto a possíveis trabalhos a serem realizados no contexto do grupo de renormalização

de campo médio para sistemas de spins semi-infinitos:

- a) Seria interessante conhecer qual o número de planos cristalinos independentes do volume e qual o tamanho ideal para os blocos de spins, para que se obtenha bons valores para os parâmetros críticos dos modelos;
- b) Um outro aspecto importante é que não estudamos os fluxos no espaço de parâmetros, o que seria desejável para um melhor conhecimento das propriedades críticas;
- c) O modelo magneto-elástico por nós considerado é demasiadamente simples, visto que desprezamos o cisalhamento entre as cadeias. Um modelo um pouco mais realista do ponto de vista mecânico poderia descrever melhor as propriedades magneto-elásticas dos sistemas de spins de Ising com uma superfície livre.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

01. R.J. Celotta e D.T. Pierce, *Science* 234, 249 (1986)
02. D. Weller, S.F. Alvarado, W. Gudat, K. Schroder e M. Campagna, *Physical Review Letters* 54, 1555 (1985).
03. D.L. Mills, *Physical Review B* 8, 4424 (1973).
04. F.A. Granja e J.L. Morán-Lopes, *Physical Review B* 31, 7146 (1985).
05. J.L. Morán Lopes e J.M. Sanchez, *Physical Review B* 39, 9746 (1989).
06. K. Binder e P.C. Hohenberg, *Physical Review B* 9, 2194 (1974).
07. K. Kinder e D.P. Landau, *Physical Review Letters* 52, 318 (1984)
08. D.P. Landau, e K. Binder, *Physical Review B* 41, 4786 (1990).
09. S. Dietrich e E. Eisenriegler, *Physical Review B* 27, 2937 (1983)
10. A.M. Mariz, U.M.S. Costa e C. Tsallis, *Europhysics Letters* 3, 27 (1987).
11. K. Ohno e Y. Okabe, *Physical Review B* 39, 9764 (1989).
12. S. Selzer e N. Majlis, *Physical Review B* 27, 544 (1983).
13. C.A. Queiroz e W. Figueiredo, *Physical Review B* 40, 4967 (1989)
14. J.N.B. de Moraes, "Magnetismo de Superfície para Modelos Ferromagnéticos Anisotrópicos", Dissertação de Mestrado, UFSC, Florianópolis, 1990.
15. K. Binder, "Critical Behavior at Surfaces", in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Eds. C. Domb e J.L. Lebowitz, vol. 8, Academic Press, 1983.
16. C. Domb, *Journal of Chemical Physics* 25, 783 (1956).
17. G.A. Baker e J.W. Essam, *Physical Review Letters* 24, 447 (1970)
18. D. Jasnow e H. Wagner, *Z. Physik* 249, 101 (1971).
19. V.B. Henriques e S.R. Salinas, *Journal of Physics C* 20, 2415 (1987).
20. J.O. Indekeu, A. Maritan e A.L. Stella, *Journal of Physics A* 15, L 291 (1982).
21. J.O. Indekeu, A. Maritan e A.L. Stella, *Physical Review B* 35, 305 (1987).
22. C. Kittel, "Introduction to Solid State Physics", 5<sup>o</sup> edition,

John Wiley e Sons, Inc., 1976.

23. M.C.Marques e M.A.Santos, Physics Letters A 118, 41 (1986).