



**ISAAC MARTINS CARVALHO**

**FUNÇÕES DE CORRELAÇÃO PARA UMA CADEIA DE ISING  
DECORADA COM SPINS HEISENBERG NUMA ESTRUTURA  
DIAMANTE**

**LAVRAS – MG**

**2018**

**ISAAC MARTINS CARVALHO**

**FUNÇÕES DE CORRELAÇÃO PARA UMA CADEIA DE ISING DECORADA COM  
SPINS HEISENBERG NUMA ESTRUTURA DIAMANTE**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física, área de concentração em Matéria Condensada, para a obtenção do título de Mestre.

Prof. Dr. Onofre Rojas

Orientador

Prof. Dr. Sérgio Martins de Souza

Prof. Dr. Moisés Porfírio Rojas Leyva

Coorientador

Dra. Jordana Torrico Ferreira

Coorientadora

**LAVRAS – MG**

**2018**

**Ficha catalográfica elaborada pela Coordenadoria de Processos Técnicos  
da Biblioteca Universitária da UFLA**

Carvalho, Isaac Martins.

Funções de Correlação para uma Cadeia de Ising Decorada com Spins Heisenberg numa Estrutura Diamante / Isaac Martins Carvalho. – Lavras : UFLA, 2018.

74 p. : il.

Dissertação (mestrado acadêmico)–Universidade Federal de Lavras, 2018.

Orientador: Prof. Dr. Onofre Rojas.

Bibliografia.

1. Cadeias de spin Ising-Heisenberg. 2. Pseudo-transições. 3. Quase-fases. I. Santos, Onofre Rojas. II. de Souza, Sérgio Martins. III. Rojas, Moisés Porfírio. IV. Torrico, Jordana. V.

**ISAAC MARTINS CARVALHO**

**FUNÇÕES DE CORRELAÇÃO PARA UMA CADEIA DE ISING DECORADA COM  
SPINS HEISENBERG NUMA ESTRUTURA DIAMANTE**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física, área de concentração em Matéria Condensada, para a obtenção do título de Mestre.

APROVADA em 31 de Julho de 2018.

Dr. Francisco César de Sá Barreto UFMG  
Dra. Maria Socorro Seixas Pereira UFAL  
Dr. Sérgio Martins de Souza UFLA  
Dr. Onofre Rojas Santos UFLA

  
Prof. Dr. Onofre Rojas  
Orientador

Prof. Dr. Sérgio Martins de Souza  
Prof. Dr. Moisés Porfírio Rojas Leyva  
Co-Orientador

Dra. Jordana Torrico Ferreira  
Co-Orientadora

**LAVRAS – MG  
2018**

## AGRADECIMENTOS

Agradeço aos meus Pais, Tania e Nicolau, por me apoiarem em todos aspectos nessa jornada acadêmica e por me darem dois presentes: meus irmãos Sara e Davi, que temperam minha vida com muito amor.

Agradeço aos meus orientadores: Prof. Dr. Onofre Rojas, Prof. Dr. Sérgio Martins, Prof. Dr. Moisés Rojas e a Dra. Jordana Torrico pela dedicação e exemplo mostrados no desenvolvimento desta dissertação e trabalhos extras.

Agradeço ao Professor Oleg Derzhko pelas contribuições imprescindíveis na realização desse trabalho.

Agradeço aos queridos professores Dr. Rodrigo Búfalo e Dra. Tatiana Cardoso pelas inúmeras colaborações nesta tarefa e, em especial, por serem uma referência profissional na minha vida.

Agradeço à minha companheira e amiga Camila por todo carinho e cuidado, além dos diversos momentos de felicidade.

Agradeço aos meus amigos Rafa e Pedro por viverem *Românovitch Raskólnikov*, *Sansão*, *Winston Smith* e *Alexander DeLarge* comigo.

Agradeço aos amigos: Benta por todos requintes gourmet e cachaça, Piva pelas histórias engraçadas da UFF, João pela ajuda no Latex e conselhos sobre computação, Amanda pelos abraços, Lauzy pelas histórias “casos de família”, Pedro Tchê pelas viagens filosóficas, Belzinha e a Dudinha pelo exemplo de coragem e dedicação, Nayara pelos chás, biscoitos e bom humor, Aline pelos conselhos sobre o departamento, Pablo por ouvir meus desabafos, Romão e Ju (típica menina eslovena) pelas boas risadas, Débora e Fábio pelo excelente trabalho na secretaria do DFI e ao Professor Joaquim pelos "bons dias" recheados de bom humor.

Agradeço aos Professores Antônio Marcelo e Iraziet Charret, os quais jamais esquecerei de seus ensinamentos.

Agradeço à CAPES, FAPEMIG e CNPq pelo apoio financeiro prestado durante a realização deste trabalho. Por último, agradeço à Universidade Federal de Lavras pelo fornecimento da excelente estrutura física e pessoal.

## RESUMO

Sistemas unidimensionais com interações de curto alcance não podem exibir uma ordem de longo alcance em temperaturas diferentes de zero. No entanto, existe uma classe específica de modelos unidimensionais, tais como os modelos de spin de Ising-Heisenberg em uma variedade de estruturas geométricas, que exibem um comportamento inesperado em temperatura finita, similar a uma transição de fase. Embora essas pseudo-transições não sejam verdadeiras transições de fase orientadas pela temperatura, elas apresentam mudanças abruptas ou picos acentuados nas quantidades termodinâmicas, podendo gerar confusões na interpretação dos dados experimentais. Neste trabalho, consideramos uma cadeia de spin- $\frac{1}{2}$  Ising-XYZ numa estrutura de diamante no regime quando o modelo exibe as pseudo-transições orientadas pela temperatura. Fornecemos uma investigação detalhada de várias funções de correlação entre spins distantes que ilustram as propriedades das quase-fases separadas pelas pseudo-transições. Inevitavelmente, todas as funções de correlação apresentam evidências das pseudo-transições, que são suportadas por soluções analíticas, as quais foram investigadas de maneira rigorosa em torno da temperatura pseudo-crítica. Vale a pena mencionar que as funções de correlação entre spins distantes têm um comprimento de correlação extremamente grande na temperatura pseudo-crítica.

**Palavras-chave:** Cadeias de spin Ising-Heisenberg. Pseudo-transições. Quase-fases.

## ABSTRACT

One-dimensional systems with short-range interactions cannot exhibit a long-range order at nonzero temperature. However, there are some particular one-dimensional models, such as the Ising-Heisenberg spin models with a variety of lattice geometries, which exhibit unexpected behavior similar to the temperature-driven phase transition. Although these pseudo-transitions are not true temperature-driven transitions showing only abrupt changes or sharp peaks in thermodynamic quantities, they may be confused while interpreting experimental data. Here we consider the spin- $\frac{1}{2}$  Ising-XYZ diamond chain in the regime when the model exhibits temperature-driven pseudo-transitions. We provide a detailed investigation of various correlation functions between distant spins that illustrate the properties of quasi-phases separated by pseudo-transitions. Inevitably, all correlation functions present evidence of pseudo-transitions, which are supported by analytical solutions, which have been rigorously investigated around the pseudo-critical temperature. It is worth to mention that the correlation functions between distant spins have an extremely large correlation length at pseudo-critical temperature.

**Keywords:** Ising-Heisenberg chains. Pseudo-transitions. Quasi-phases

## LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Modelo vetorial do átomo aplicado na situação $l = 2$ na ausência de campo externo. . . . .	16
Figura 2.2 – Modelo vetorial do spin do elétron. O vetor que representa o spin total, possui comprimento $\sqrt{3/4}\hbar$ e precessa com a frequência de Larmor na direção do campo externo aplicado. Ele possui duas projeções $\pm\hbar/2$ ao longo do eixo-z, correspondente aos estados $ \uparrow\rangle$ e $ \downarrow\rangle$ . . . . .	19
Figura 2.3 – Dependência com a temperatura do inverso da suscetibilidade ( $1/\chi$ ) de um material paramagnético ( <i>lei de Curie</i> ) e de um material ferromagnético acima da temperatura de ordem magnética ( <i>lei de Curie-Weiss</i> ) . . . . .	22
Figura 2.4 – Dependência da susceptibilidade magnética $\chi$ em paramagnéticos (a) e antiferromagnéticos (b). Abaixo da temperatura de Neel $T_N$ de um sistema antiferromagnético os spins tem um orientação antiparalela; a susceptibilidade atinge o máximo em $T_N$ . Essa transição é marcada por uma divergência no calor específico. . . . .	23
Figura 3.1 – Diagrama de fase, pressão por temperatura, de um fluido. . . . .	29
Figura 3.2 – (a) Gráfico da entropia $\mathcal{S}$ em função da temperatura $T$ ; (b) Gráfico da magnetização $M$ em função da temperatura $T$ ; (c) Gráfico da energia interna $U$ em função da temperatura $T$ . Nesses gráficos, $T_a$ demarca a temperatura associada a transição de primeira ordem. . . . .	29
Figura 3.3 – (a) Gráfico do calor específico $C$ em função da temperatura; (b) Gráfico da susceptibilidade magnética $\chi$ em função da temperatura; (c) Gráfico do comprimento de correlação $\xi$ em função da temperatura. Nesses gráficos, $T_a$ demarca a temperatura associada a transição de primeira ordem. . . . .	30
Figura 3.4 – Diagrama de fase, campo magnético por temperatura, de um ferromagneto. Nesses gráficos o ponto crítico é identificado pelo círculo em branco. . . . .	31
Figura 3.5 – (a) Gráfico da entropia $\mathcal{S}$ em função da temperatura $T$ ; (b) Gráfico da magnetização $M$ em função da temperatura $T$ para campo magnético $h \rightarrow 0^+$ ; (c) Gráfico da energia interna $U$ em função da temperatura $T$ . . . . .	31
Figura 3.6 – (a) Gráfico do calor específico $C$ em função da temperatura; (b) Gráfico da susceptibilidade magnética $\chi$ em função da temperatura; (c) Gráfico do comprimento de correlação $\xi$ em função da temperatura. Nesses gráficos, $T_a$ demarca a temperatura associada a transição de primeira ordem. . . . .	32

Figura 5.1 – Representação esquemática de uma cadeia de spin- $\frac{1}{2}$ Ising-XYZ de estrutura diamante. . . . .	41
Figura 5.2 – Diagrama de fase do estado fundamental no plano $\gamma-h$ para $h_z = h$ , considerando valores fixos de $J = 100$ , $J_z = 24$ e $J_0 = -24$ . . . . .	42
Figura 5.3 – Parâmetros efetivos da cadeia de spins-Ising, considerando $J = 100$ , $J_z = 24$ , e $J_0 = -24$ . (a) Parâmetro de troca efetivo $J_{\text{eff}}$ em função de $T$ para $\gamma = 0.7$ . (b) Campo magnético efetivo $h_{\text{eff}}$ em função de $T$ para $\gamma = 0.7$ . (c) $J_{\text{eff}}$ em função de $T$ para $\gamma = 0.75$ . (d) $h_{\text{eff}}$ em função de $T$ para $\gamma = 0.75$ . (e) $J_{\text{eff}}$ em função de $T$ para $\gamma = 0.8$ . (f) $h_{\text{eff}}$ em função de $T$ para $\gamma = 0.8$ . . . . .	46
Figura 5.4 – Diagrama de fase $T$ por $h$ , obtido por meio da condição $h_{\text{eff}}(T_p) = 0$ , assumindo os parâmetros fixos $J = 100$ , $J_z = 24$ , $J_0 = -24$ , e $\gamma = 0.7$ . . . . .	48
Figura 5.5 – (a) Magnetização dos spins Ising em função da temperatura para $r = 1$ . (b) Média térmica $\langle \sigma_i \sigma_{i+r} \rangle$ em função da temperatura, considerando $r = 1$ . (c) Funções de correlação dos spins Ising em função da temperatura, assumindo $r = 1$ e os parâmetros fixos $J = 100$ , $J_z = 24$ , $J_0 = -24$ , e $\gamma = 0.75$ . . . . .	52
Figura 5.6 – (a) Magnetização dos spins Heisenberg em função da temperatura para $r = 1$ . (b) Média térmica $\langle S_j^z S_{j+r}^z \rangle$ , assumindo $r = 1$ , em função da temperatura. (c) Funções de correlação para os spins Heisenberg, considerando $r = 1$ , em função da temperatura. Todos esses gráficos foram plotados assumindo os seguintes parâmetros fixos $J = 100$ , $J_z = 24$ , $J_0 = -24$ , e $\gamma = 0.75$ . . . . .	57
Figura 5.7 – Média térmica para o par de spins Heisenberg da célula unitária, $r = 0$ , em função da temperatura. (a) $\langle S_a^x S_b^x \rangle$ ; (b) $\langle S_a^y S_b^y \rangle$ ; (c) $\langle S_a^z S_b^z \rangle$ . Assumindo os parâmetros fixos $J = 100$ , $J_z = 24$ , $J_0 = -24$ , e $\gamma = 0.75$ . . . . .	60
Figura 5.8 – (a) e (b) Média $\langle S_i^z \sigma_{i+1} \rangle$ em função da temperatura. (c) e (d) Funções de correlação em relação a temperatura. Considerando os parâmetros fixos $J = 100$ , $J_z = 24$ , $J_0 = -24$ , e $\gamma = 0.75$ . . . . .	62
Figura 5.9 – Decaimento das funções de correlação em relação a $r$ , assumindo os parâmetros fixos $J = 100$ , $J_z = 24$ , $J_0 = -24$ , e $\gamma = 0.75$ . (a) Para $\langle S_i^z S_{i+r}^z \rangle - \langle S_i^z \rangle \langle S_i^z \rangle$ em função de $r$ . (b) Assim como (a), mas em escala logarítmica. (c) $\langle S_i^z \sigma_{i+r} \rangle - \langle S_i^z \rangle \langle \sigma_i \rangle$ em função de $r$ . (d) Assim como (c), mas em escala logarítmica. (e) $\langle \sigma_i \sigma_{i+1} \rangle - \langle \sigma_i \rangle^2$ em função de $r$ . (f) Assim como (e), mas em escala logarítmica. . . . .	64

Figura 5.10 – Comprimento de correlação em função da temperatura, assumindo os parâmetros fixos dados na Fig. 5.2. (a)  $\gamma = 0.7$ ; (b)  $\gamma = 0.75$ ; (c)  $\gamma = 0.8$ . . . . 66

Figura 11 – A coluna à esquerda corresponde a  $\gamma = 0.7$  e ao conjunto de parâmetros fixos  $J = 100$ ,  $J_z = 24$ , e  $J_0 = -24$ . (a) Magnetização dos spins Ising em função da temperatura. (b) Magnetização dos spins Heisenberg em função da temperatura. (e), (f) Função de correlação dos spins Heisenberg. (i), (j) Função de correlação dos spins Ising. (m), (n) Função de correlação entre os spins Ising e Heisenberg. Similarmente, a coluna à direita corresponde a  $\gamma = 0.8$ , mantendo fixo o mesmo conjunto de parâmetros. (c), (d) Magnetizações em função da temperatura. (g), (h) Função de correlação dos spins Heisenberg. (k), (l) Função de correlação dos spins Ising. (o), (p) Função de correlação entre os spins Ising e Heisenberg. . . . . 74

## LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 – Principais tipos de comportamento magnético conhecidos. . . . .	21
Tabela 5.1 – Temperatura pseudo-crítica para para vários valores de campo magnético, assumido os parâmetros fixos dados pela Figura 5.4. As duas primeira colunas correspondem a $\gamma = 0.7$ , a terceira e a quarta a $\gamma = 0.75$ e duas últimas a $\gamma = 0.8$ . . . . .	48
Tabela 5.2 – Decaimento das funções de correlação com a distância $r$ . Nessa Tabela é apresentado de modo percentual a razão de $\frac{C(r)}{C(1)}$ na temperatura pseudo-crítica $T_p$ . Os três tipos de funções de correlação $C_I$ , $C_H$ e $C_{IH}$ são denotados por $C$ . Essas funções foram avaliadas considerando os parâmetros fixos de anisotropia-xy $\gamma = \{0.7, 0.75, 0.8\}$ . . . . .	65

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>11</b>
<b>2</b>	<b>Spin e Magnetismo</b>	<b>13</b>
<b>2.1</b>	<b>História</b>	<b>13</b>
<b>2.2</b>	<b>A Origem dos Fenômenos Magnéticos</b>	<b>15</b>
<b>2.2.1</b>	<b>Matrizes de Pauli</b>	<b>17</b>
<b>2.3</b>	<b>Magnetização e Susceptibilidade</b>	<b>20</b>
<b>2.3.1</b>	<b>Diamagnetismo</b>	<b>21</b>
<b>2.3.2</b>	<b>Paramagnetismo</b>	<b>22</b>
<b>2.3.3</b>	<b>Ferromagnetismo, Antiferromagnetismo e Ferrimagnetismo</b>	<b>23</b>
<b>3</b>	<b>Mecânica Estatística e Termodinâmica</b>	<b>25</b>
<b>3.1</b>	<b>Função de Partição e Energia Livre</b>	<b>25</b>
<b>3.2</b>	<b>Transições de Fase</b>	<b>27</b>
<b>3.2.1</b>	<b>Transições de Fase de Primeira Ordem</b>	<b>28</b>
<b>3.2.2</b>	<b>Transições de Fase Contínua</b>	<b>30</b>
<b>4</b>	<b>Modelos Magnéticos de Baixa Dimensionalidade</b>	<b>33</b>
<b>4.1</b>	<b>Magnetismo em Baixa Dimensão</b>	<b>33</b>
<b>4.2</b>	<b>Modelo de Ising Unidimensional</b>	<b>34</b>
<b>4.2.1</b>	<b>Matriz de transferência para uma dimensão</b>	<b>35</b>
<b>4.3</b>	<b>Modelo de Heisenberg</b>	<b>36</b>
<b>4.3.1</b>	<b>Ausência de transição de fase para o modelo de Ising unidimensional em temperatura finita</b>	<b>37</b>
<b>4.3.2</b>	<b>Função de Correlação</b>	<b>38</b>
<b>5</b>	<b>Funções de Correlação uma Cadeia de Spin-<math>\frac{1}{2}</math> Ising-XYZ de Estrutura Diamante</b>	<b>40</b>
<b>5.1</b>	<b>Hamiltoniano do Modelo e seu Diagrama de Fase do Estado Fundamental</b>	<b>41</b>
<b>5.2</b>	<b>Termodinâmica do Modelo</b>	<b>43</b>
<b>5.3</b>	<b>Constantes Efetivas e Pseudo-Transições de Fase</b>	<b>44</b>
<b>5.4</b>	<b>Correlação entre os Spins: Resultados e Discussões</b>	<b>49</b>
<b>5.5</b>	<b>Conclusões</b>	<b>67</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>69</b>
	<b>APENDICE A – Matrizes dos Spin Heisenberg</b>	<b>72</b>

<b>APENDICE B – Quantidades Adicionais de Correlação . . . . .</b>	<b>74</b>
--	-----------

## 1 INTRODUÇÃO

Amplamente conhecido por seu célebre artigo de 1925 (ISING, 1925), Ernst Ising buscou uma transição de fase em temperatura finita para um sistema unidimensional em equilíbrio termodinâmico com interações de curto alcance (ISING et al., 2017). Para sua decepção, não encontrou nenhuma. Este foi o início de uma vasta literatura sobre a mecânica estatística dos fenômenos críticos, incluindo uma série de investigações sobre por que é impossível haver transições de fase em temperatura finita em tais sistemas (LIFSHITZ, 1969; HOVE, 1950; GALLAVOTTI; MIRACLE-SOLE; RUELLE, 1968; CUESTA; SÁNCHEZ, 2004). A dimensão crítica inferior é agora definida como aquela abaixo da qual as transições de fase em temperatura finita não podem ocorrer. Landau e Lifschitz apresentaram um argumento superficial sugerindo que as contribuições significativas da entropia impedem que ocorra transições de fase em temperatura finita na dimensão crítica inferior (LIFSHITZ, 1969). A abordagem de van Hove, por outro lado, foi baseada em provas sobre a analiticidade dos autovalores da matriz de transferência e energia livre (HOVE, 1950). Ruelle et al., estendeu essas provas apresentando teoremas rigorosos (GALLAVOTTI; MIRACLE-SOLE; RUELLE, 1968) e, mais recentemente, Cuesta e Sanches (CUESTA; SÁNCHEZ, 2004) mostraram resultados mais gerais sobre a inexistência de transições de fase em temperatura finita para sistemas clássicos unidimensionais com interações de curto alcance.

Por outro lado, há um conjunto particular de modelos unidimensionais com interações de curto alcance que exibem transições de fase em temperatura finita, tais como o modelo de Kittel (KITTEL, 1969), modelo de Chui-Weeks (CHUI; WEEKS, 1981) e o modelo de Dauxois-Peyrard (DAUXOIS; PEYRARD, 1995). Além disso, recentemente, verificou-se que as moléculas de água confinadas dentro de nanotubos de carbono exibem um comportamento completamente diferente do seu análogo macroscópico: tal sistema unidimensional formado pelas moléculas de água confinadas exibe uma transição de quase-fase controlada pela temperatura (MA et al., 2017).

Nos últimos anos, vários modelos unidimensionais foram investigados no âmbito de estruturas decoradas, em particular, sistemas de spins Ising e Heisenberg em uma variedade de estruturas geométricas, tais como os modelos de spins Ising-Heisenberg em uma cadeia de estrutura diamante (TORRICO et al., 2016; TORRICO et al., 2014); a cadeia unidimensional dupla-tetraédrica, na qual os spins Ising localizados nos sítios nodais alternam regularmente com os elétrons móveis deslocalizados nos sítios intersticiais sobre uma plaqueta triangular (GA-

LISOVA; STREČKA, 2015); o modelo alternativo de Ising-Heisenberg (ROJAS; STREČKA; SOUZA, 2016) e o modelo de tubo triangular de Ising-Heisenberg (STREČKA et al., 2016). Esses modelos apresentam em temperatura finita um comportamento inesperado semelhante à uma transição de fase de primeira ordem ou contínua. A análise da primeira derivada da energia livre, a qual está relacionada à entropia, energia interna e magnetização, apresenta uma mudança abrupta orientada pela temperatura, sendo muito similar a uma transição de primeira ordem. Além disso, a investigação da segunda derivada da energia livre, relacionada ao calor específico e a susceptibilidade magnética, revela uma semelhança bastante próxima a uma transição de segunda ordem. Embora as pseudo-transições não possam ser consideradas verdadeiras transições de fase induzidas pela temperatura, as mudanças repentinas e os picos agudos que aparecem nas quantidades termodinâmicas poderiam levar a conclusões equivocadas na interpretação dos dados experimentais.

Nessa direção, este trabalho tem como objetivo lançar luz sobre o entendimento das pseudo-transições e quase-fases, examinando as funções de correlação em torno da temperatura pseudo-crítica. Assim, será considerado o exemplo de uma cadeia de spin- $\frac{1}{2}$  Ising-XYZ numa estrutura diamante no cenário onde esse modelo apresenta as quase-fases e pseudo-transições. Observa-se que todas as funções de correlação apresentam evidências das pseudo-transições, as quais são sustentadas por cálculos analíticos.

Este trabalho está dividido da seguinte maneira: primeiramente, é apresentada uma introdução ao magnetismo, onde é feita uma revisão sobre a origem dos fenômenos magnéticos e fases magnéticas; logo após é realizada uma introdução à mecânica estatística e termodinâmica, assim como as transições de fase; na sequência é apresentada uma iniciação aos modelos magnéticos de baixa dimensionalidade, fazendo-se um estudo sobre os modelos unidimensionais de Ising e Heisenberg, matriz de transferência para uma dimensão, funções de correlação e a ausência de transições de fase em temperatura finita para sistemas unidimensionais com interações de curto alcance; por último, são investigadas as funções de correlação para uma cadeia de spin- $\frac{1}{2}$  Ising-XYZ de estrutura diamante, apresentando os principais resultados deste trabalho.

## 2 SPIN E MAGNETISMO

### 2.1 História

O magnetismo é um assunto que vem sendo investigado por quase três mil anos. Os primeiros relatos históricos sobre fenômenos magnéticos provavelmente aconteceram numa região asiática, que até então pertencia à Grécia. O lugar ficou conhecido como Magnésia por ser rico em um minério que hoje conhecemos como magnetita ou óxido de ferro ( $Fe_3O_4$ ), um tipo de ímã natural. Esse elemento atraiu grande interesse dos estudiosos e filósofos gregos, pois era capaz de atrair ou repelir pedaços de ferro. É possível, no entanto, que muito antes dos gregos, os chineses não só tivessem conhecimento desses fenômenos, mas o aplicassem tecnologicamente, inventando a bússola, cujo papel foi fundamental nas orientações geográficas durante as viagens. Há, portanto, controvérsias entre os historiadores a respeito da descoberta do magnetismo (COEY, 2010).

Por muito tempo os fenômenos magnéticos permaneceram sem uma explicação científica. Acreditava-se, por exemplo, que as pedras de magnetita eram capazes de dar uma espécie de vida ao ferro, o que justificaria a atração à distância. Novas descobertas a respeito do magnetismo vieram somente a partir do século XIII por meio de Pierre de Maricourt, o qual observou a presença de polos magnéticos em um ímã, que se mantinham ainda que o ímã fosse fragmentado.

Em 1600, William Gilbert, propõe o primeiro tratado sobre o magnetismo, descrito em um livro intitulado “De Magnet”, na qual ele conclui a existência do magnetismo terrestre e a diferenciação entre as cargas magnéticas e as cargas elétricas, distinguindo o magnetismo da eletricidade. Essas explicações permitiram, por exemplo, entender como uma agulha magnética se orientava na Terra.

Em vista da diferenciação feita por William Gilbert, os fenômenos magnéticos e elétricos permaneceram desvinculados. Somente no século XIX essas duas áreas voltaram a se encontrar, em um experimento casual feito por Oesterd em 1819, no qual foi possível verificar que correntes elétricas eram capazes de produzir efeitos magnéticos ao seu redor. Esse evento foi mais tarde explicado por Amperè, o qual formulou as leis das correntes que se repelem ou se atraem mutuamente. Em 1834 Faraday e Lenz descobriram o fenômeno de indução magnética, dando um novo *status* aos fenômenos magnéticos. Em paralelo, Maxwell formulou todo embasamento matemático para a eletrodinâmica. Próximo ao final do século, 1894, Pierre Cu-

rie observou que a magnetização diminui com o aumento da temperatura até se anular numa temperatura crítica.

No início do século XX, na tentativa de explicar a magnetização espontânea em ferromagnetos, Weiss desenvolve a teoria do campo médio, que pode ser sintetizada em duas hipóteses: o entendimento do magnetismo como um fenômeno coletivo (no sentido de interação entre os constituintes do sistema) e a ideia de um potencial efetivo de interação que atua sobre as partículas de sistema físico. Esse último pode ser entendido com um potencial médio, que substitui todas as interações em pares que a partícula de um sistema faz. Aqui a ideia de partícula é entendida como “sítios” ou “células”.

Embora a teoria de Weiss tenha trazido uma nova perspectiva para o entendimento do magnetismo, ainda não explicava de maneira elementar os eventos magnéticos. Assim como ela, outras teorias que se baseavam em explicações clássicas foram apresentando inconsistências. O teorema de Van Leeuwen (1919), por exemplo, afirma que a qualquer temperatura, a magnetização total de um conjunto de elétrons em equilíbrio térmico é nula. Isso, no entanto, não esclarecia os comportamentos paramagnético, diamagnético e ferromagnético nos materiais. Somente com o advento da mecânica quântica o magnetismo é explicado de forma elementar.

Diversos autores participaram do processo de interligação entre o magnetismo e mecânica quântica. Bohr (1913) foi o responsável por estabelecer a unidade fundamental para o momento magnético, denominada “magneton de Bohr”. Dirac, Pauli e Van Vleck, na conferência de Solvay (MEHRA, 1975), explicaram a origem do magnetismo: os elétrons possuem  $\text{spin} = \frac{1}{2}$ , os quais dão origem aos momentos magnéticos, enquanto a interação desses momentos dá origem ao ordenamento magnético.

Os dois últimos séculos foram marcados por avanços significativos a respeito do entendimento dos fenômenos magnéticos. Podemos enfatizar dois importantes resultados, ligando o magnetismo a outros fenômenos físicos. Primeiro, o magnetismo e a eletricidade são ligados de forma inextricável, sendo eles os constituintes da luz, que é chamada de onda eletromagnética. Em segundo lugar, esta ligação tem origem na teoria da relatividade e, portanto, o magnetismo pode ser descrito com um fenômeno com caráter relativístico. Apesar dessas descobertas, o grande interesse hoje está sobre o magnetismo em matéria condensada, incluindo ferromagnetos, vidros de spin e sistemas de baixa dimensão. O motivo para isso, decorre que sistemas macroscópicos exibem propriedades magnéticas que são fundamentalmente diferentes

dos átomos e moléculas, apesar deles serem compostos dos mesmos constituintes básicos. Isso surge porque o magnetismo é um fenômeno coletivo, envolvendo a cooperação mútua de um enorme número de partículas com spin. Como evento que emerge da cooperatividade entre as componentes do sistema, o magnetismo é similar à supercondutividade e à superfluidez.

## 2.2 A Origem dos Fenômenos Magnéticos

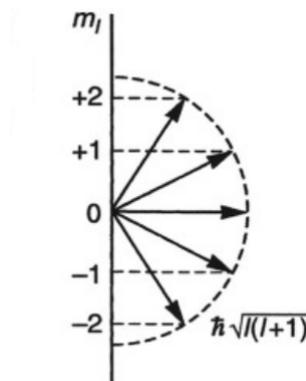
O teorema de Bohr-van Leeuwen permitiu perceber que a física clássica era incapaz de descrever os comportamentos magnéticos dos materiais, tais como o paramagnetismo, ferromagnetismo e diamagnetismo. Somente com o advento da mecânica quântica foi possível compreender de maneira elementar o magnetismo nos sistemas físicos, o qual é explicado por meio dos momentos magnéticos presentes em átomos e moléculas. Esses momentos, por sua vez, estão relacionados a duas componentes: o spin do elétron e o seu momento angular em torno do núcleo.

Essas componentes, na mecânica quântica, são estudadas a partir das soluções da equação de Schrödinger. Os estados quânticos associados a essas energias são caracterizados por quatro números quânticos: três relacionados ao orbital e um ao spin do elétron. Esses números quânticos são descritos a seguir.

1. O número quântico principal  $n$ , que assume valores inteiros  $n = 1, 2, 3, \dots$ , indica o nível de energia ou camada eletrônica do elétron. Essa energia está relacionada ao movimento orbital do elétron em torno do núcleo. Por exemplo, elétrons com número quântico principal  $n = 1, 2, 3, \dots$  estão nas camadas K, L, M, ..., respectivamente.
2. O número quântico secundário  $l$ , que assume valores inteiros  $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ , indica o subnível de energia do elétron. Por meio desse número é possível conhecer a magnitude do momento angular do elétron, dada por  $\hbar\sqrt{l(l+1)}$ . Por exemplo, os números  $l = 1, 2, 3$ , referem-se aos elétrons nos subníveis s, p, d, f, ..., respectivamente.
3. O número quântico magnético  $m_l$ , que assume valores  $m_l = -l, -l + 1, \dots, 0, \dots, l - 1, l$ , refere-se as componentes do momento angular orbital  $l$  ao longo de uma dada direção. Na maioria dos casos, essa direção se dá ao longo de um campo magnético externo. Por exemplo, para um elétron com número quântico secundário  $l = 2$  tem-se os possíveis números quânticos magnéticos  $m_l = -2, -1, 0, 1, 2$ , como ilustrado na Figura 2.1.

4. O número quântico de spin  $m_s$ , que assume valores  $m_s = -s, -s + 1, \dots, 0, \dots, s - 1, s$ , está relacionado ao spin  $s$ . Por exemplo, para um elétron de spin-1/2 tem-se os seguintes números quânticos de spin  $m_s = \pm 1/2$ .

Figura 2.1 – Modelo vetorial do átomo aplicado na situação  $l = 2$  na ausência de campo externo.



Fonte: Autor (2018).

É importante destacar que, de acordo com o princípio de exclusão de Pauli, dois elétrons não podem ocupar o mesmo estado quântico. Por esse motivo, os estados deles serão caracterizados por um conjunto diferente de números quânticos  $n$ ,  $l$ ,  $m_l$  e  $m_s$ .

O movimento dos elétrons em torno do núcleo pode, basicamente, ser associado a uma corrente fluindo em um fio que coincide com sua órbita. Esse objeto é equivalente a um dipolo magnético o qual está diretamente relacionado ao momento angular orbital. Um elétron com momento angular orbital  $\hbar l$  tem um momento magnético  $\vec{\mu}_l$  associado:

$$\vec{\mu}_l = -\frac{|e|\hbar}{2m_e} \vec{l} = -\mu_B \vec{l}, \quad (2.1)$$

onde  $\mu_B$  é denominado magneton de Bohr,  $e$  é a carga do elétron e  $m_e$  é a sua massa. A magnitude do momento magnético é dada através de:

$$|\vec{\mu}_l| = \mu_B \sqrt{l(l+1)}. \quad (2.2)$$

As componentes de  $\vec{\mu}_l$  ao longo de um eixo fixo  $z$ , usualmente na direção do campo aplicado, são dadas por:

$$|\vec{\mu}_l|_z = -m_l \mu_B. \quad (2.3)$$

Portanto, a componente do momento magnético ao longo do eixo-z é  $-m_l\mu_B$  e a magnitude do momento de dipolo magnético é  $\mu_B\sqrt{l(l+1)}$ .

Essa situação merece mais detalhe pelo fato dos elétrons possuírem um momento magnético intrínseco, denominado spin, o qual está associado com o momento angular intrínseco:

$$\vec{\mu}_s = -g\frac{|e|\hbar}{2m_e}\vec{s} = -g\mu_B\vec{s}, \quad (2.4)$$

do qual  $g$  é uma constante conhecida como fator- $g$ , o qual possui valor aproximado 2 para o elétron. As componentes do momento angular ao longo de um eixo particular é  $-g\mu_B m_s$  e a sua magnitude  $g\mu_B\sqrt{s(s+1)} = \sqrt{3}g\mu_B/2$ , visto que o número quântico  $s$  para o elétron é igual a  $1/2$ . Repare que, neste caso, o momento magnético é antiparalelo ao momento angular. Isso ocorre por causa da carga negativa do elétron. Assim, se  $m_s = +1/2$  o momento magnético associado é  $-\mu_B$ , se  $m_s = -1/2$  o momento associado é  $+\mu_B$ .

A energia dos elétrons em um campo magnético  $h$  é dada por:

$$E = g\mu_B\mu_0 m_s h, \quad (2.5)$$

do qual  $\mu_0$  constante de permeabilidade do vácuo. Os níveis de energia de um elétron, portanto, dividem-se na presença de um campo magnético por uma quantidade  $g\mu_B\mu_0 h$ , a qual é denominada divisão Zeeman.

Na ausência de um campo magnético, os dois estados caracterizados por  $m_s = \pm 1/2$  são degenerados, com energia nula. A aplicação de um campo magnético quebra essa degenerescência. Um momento magnético não nulo também pode ocorrer como consequência do campo produzido pelo movimento orbital. Neste caso, a degenerescência é quebrada pela interação spin-orbita. Esse é o cenário mais geral para elétron em átomos. Assim sendo, o fator- $g$  pode assumir diferentes valores, dependendo das contribuições relativas entre os momentos orbitais e os spin.

### 2.2.1 Matrizes de Pauli

Em mecânica quântica, o comportamento dos spins dos elétrons é conectado a uma álgebra bastante abstrata, baseada nas três matrizes de Pauli e na matriz Identidade, as quais são

definidas como:

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.6)$$

Será conveniente pensar nessas matrizes como componentes de um vetor, os quais são conectados aos operadores de spins da seguinte forma:

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z), \quad (2.7)$$

cujas componentes são  $S^x = \frac{\hbar}{2}\sigma^x$ ,  $S^y = \frac{\hbar}{2}\sigma^y$  e  $S^z = \frac{\hbar}{2}\sigma^z$ . Somente o operador  $S^z$  é diagonal e nessa representação se o spin do elétron aponta ao longo do eixo-z, a representação é particularmente simples. Os autovalores  $m_s$  de  $S^z$ , podem assumir valores  $m_s = \pm 1/2$ , os quais correspondem, respectivamente aos autoestados  $|\uparrow\rangle$  e  $|\downarrow\rangle$ . Esses vetores representam respectivamente as projeções dos spins no sentido do eixo-z positivo e negativo. Conseqüentemente:

$$S^z |\uparrow\rangle = +\frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle, \quad S^z |\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle. \quad (2.8)$$

De modo análogo, os autoestados correspondentes às projeções paralela e antiparalela do spin nos eixos  $x$  e  $y$  são:

$$|\uparrow\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle \right), \quad |\downarrow\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle \right), \quad (2.9)$$

$$|\uparrow\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\uparrow\rangle + i|\downarrow\rangle \right), \quad |\downarrow\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\uparrow\rangle - i|\downarrow\rangle \right). \quad (2.10)$$

Essa representação de duas componentes para o spin de uma função de onda é conhecida como representação espinorial, e os estados dos sistema são chamados espinores. Um estado  $|\Psi\rangle$  mais geral pode ser escrito como:

$$|\Psi\rangle = c_1 |\uparrow\rangle + c_2 |\downarrow\rangle, \quad (2.11)$$

onde os coeficientes  $c_1$  e  $c_2$  são números complexos que obedecem à relação  $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$ . A probabilidade do sistema colapsar em  $|\uparrow\rangle$ , por exemplo, é dada por  $|\langle \uparrow | \Psi \rangle|^2$ .

As relações de comutação entre os operadores de spin seguem as seguintes permutações cíclicas:

$$[S^x, S^y] = iS^z, \quad [S^z, S^x] = iS^y, \quad [S^y, S^z] = iS^x. \quad (2.12)$$

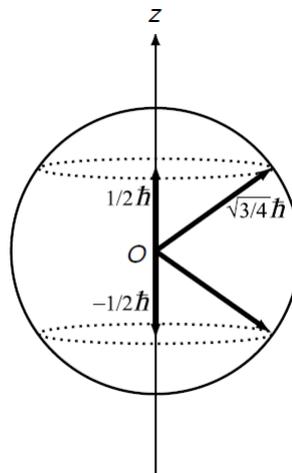
Além disso, cada um desses operadores comutam com o operador  $\mathbf{S}^2$ , de modo que:

$$[\mathbf{S}^2, S^x] = [\mathbf{S}^2, S^y] = [\mathbf{S}^2, S^z] = 0. \quad (2.13)$$

Em mecânica quântica, duas ou mais quantidades físicas podem ser medidas simultaneamente somente se seus correspondentes operadores comutam. As três componentes do operador momento angular de spin não comutam e, portanto, não podem ser medidas ao mesmo tempo. Uma medida precisa da componente  $z$ , por exemplo, implica que as componentes  $x$  e  $y$  serão indeterminadas. Contudo, é possível medir simultaneamente o spin total e uma das suas componentes, sendo convencionalmente escolhida a projeção ao longo do eixo- $z$ .

De maneira ilustrativa, o momento angular de spin pode ser representado por um vetor de comprimento  $\sqrt{3/4}\hbar$ , o qual precessa em torno da direção do campo magnético aplicado. Na Figura 2.2 o campo é aplicado ao longo do eixo- $z$ .

Figura 2.2 – Modelo vetorial do spin do elétron. O vetor que representa o spin total, possui comprimento  $\sqrt{3/4}\hbar$  e precessa com a frequência de Larmor na direção do campo externo aplicado. Ele possui duas projeções  $\pm\hbar/2$  ao longo do eixo- $z$ , correspondente aos estados  $|\uparrow\rangle$  e  $|\downarrow\rangle$ .



Fonte: Autor (2018).

### 2.3 Magnetização e Susceptibilidade

Sistemas magnéticos consistem em um grande número de átomos com momentos magnéticos. A magnetização  $\vec{M}$  de um sistema é definida como o momento magnético por unidade de volume (MOHN, 2006):

$$\vec{M} = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \sum_i \vec{\mu}_i, \quad (2.14)$$

do qual  $\vec{\mu}_i$  é o momento magnético do  $i$ -ésimo átomo e  $\Delta V$  é o volume do material. Usualmente essa quantidade vetorial é considerada em uma aproximação contínua, isto é, sobre uma escala grande o suficiente para que não se veja a granulação devido aos momentos magnéticos individuais. Assim, a magnetização pode ser vista como um campo vetorial suave, contínua em todos os pontos, exceto nas bordas. Essa descontinuidade nas bordas pode ser explicada do ponto de vista clássico: sob ação de um campo magnético os elétrons movem-se em órbitas circulares (ciclotrônicas), as quais estão associadas a um momento dipolo magnético. Nas bordas, entretanto, os elétrons se movem em sentido oposto devido às colisões elásticas com a superfície do material. O momento magnético associado a esse movimento é, por sua vez, contrário ao momento magnético associado ao movimento dos elétrons que não estão próximos à superfície.

A magnetização do vácuo é nula. O campo magnético pode ser descrito pelos vetores  $\vec{B}$  e  $\vec{h}$ , relacionados por  $\vec{B} = \mu_0 \vec{h}$ , do qual  $\mu_0$  é a permeabilidade magnética do vácuo. Neste caso  $\vec{B}$  é o campo magnético no vácuo e  $\vec{h}$  o campo magnético em um meio distinto ao vácuo. Repare que esses campos são versões escalares um do outro.

Em materiais que interagem com o campo magnéticos a relação entre  $\vec{B}$  e  $\vec{h}$  é mais complicada, pois esses dois vetores podem assumir diferentes magnitudes e direções. A correspondência entre eles tem a forma:

$$\vec{B} = \mu_0 (\vec{h} + \vec{M}). \quad (2.15)$$

No caso especial onde  $\vec{M}$  é linearmente relacionado ao campo magnético  $\vec{h}$ , o sólido é dito ter uma resposta linear ao campo aplicado (OLIVEIRA; JESUS, 2001), e portanto:

$$\vec{M} = \chi \vec{h}, \quad (2.16)$$

do qual  $\chi$  é uma quantidade adimensional chamada susceptibilidade magnética. Nesse caso, é possível construir uma relação linear entre os vetores  $\vec{B}$  e  $\vec{h}$ , dada por:

$$\vec{B} = \mu_0 (1 + \chi) \vec{h}, \quad (2.17)$$

da qual  $(1 + \chi)$  é denominada permeabilidade relativa.

## Fenômenos Magnéticos

Os materiais magnéticos são tradicionalmente classificados de acordo com sua resposta à aplicação de um campo magnético. Essa resposta pode ser quantificada por meio da susceptibilidade magnética  $\chi$ , Tabela 2.1

Tabela 2.1 – Principais tipos de comportamento magnético conhecidos.

Material	$\chi$
Paramagnético	$> 0$
Diamagnético	$< 0$
Ferromagnético	$\gg 0$
Ferrimagnético	$\gg 0$
Antiferromagnético	$> 0$

Outra forma de categorizar o comportamento magnético é dada a partir da análise de como a magnetização muda com a temperatura ou com a intensidade de um campo aplicado.

Cabe destacar que todos materiais exibem algum tipo de comportamento magnético, embora o termo “magnético” seja usualmente utilizado para ferromagnetos. A seguir, serão apresentadas uma breve descrição a respeito desses fenômenos.

### 2.3.1 Diamagnetismo

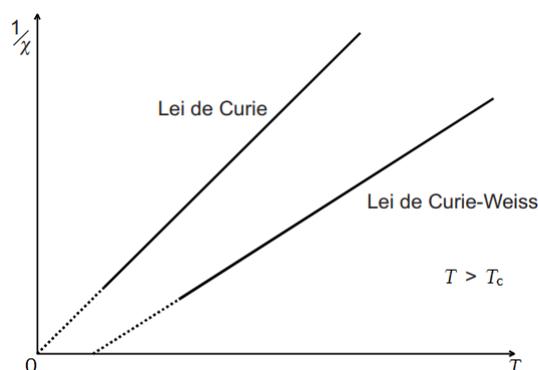
O diamagnetismo é uma forma muito fraca de magnetismo presente em todos os materiais, o qual é caracterizada por uma susceptibilidade negativa. Esse efeito pode ser interpretado com base na lei de Lenz do eletromagnetismo: a variação do fluxo magnético na área delimitada pelo movimento orbital dos elétrons induz uma corrente microscópica de tal forma que o novo fluxo se opõe à variação do fluxo original. Classicamente, qualquer corrente induzida cessaria após um tempo por causa dos processos dissipativos. Isso, no entanto, não ocorre nas correntes microscópicas dentro dos átomos. Somente com argumentos da mecânica quântica é possível explicar esse fenômeno: quando um elétron é submetido a um campo magnético ele precessiona

com a *frequência de Larmor* em torno da direção do campo, a qual cria uma componente de rotação adicional à sua órbita, associada a um momento diamagnético. O sentido dessa rotação tende a ser opor ao movimento orbital do elétron.

### 2.3.2 Paramagnetismo

O paramagnetismo é caracterizado por uma pequena susceptibilidade positiva, cujo inverso varia linearmente com a temperatura. Esse tipo de dependência com a temperatura, denominado *lei de Curie*, é encontrada em qualquer temperatura nos materiais paramagnéticos, ou acima de uma certa temperatura crítica em materiais ferromagnéticos ou antiferromagnéticos (chamado nestes casos de *lei de Curie-Weiss*), Figura 2.3.

Figura 2.3 – Dependência com a temperatura do inverso da suscetibilidade ( $1/\chi$ ) de um material paramagnético (*lei de Curie*) e de um material ferromagnético acima da temperatura de ordem magnética (*lei de Curie-Weiss*)



Fonte: Autor (2018).

A queda da susceptibilidade com temperatura ocorre como consequência da agitação térmica dos momentos magnéticos atômicos.

O momento magnético dos elétrons de condução também exibe um paramagnetismo, denominado paramagnetismo de Pauli (BLUNDELL, 2001). Neste caso, a susceptibilidade é praticamente constante com a temperatura.

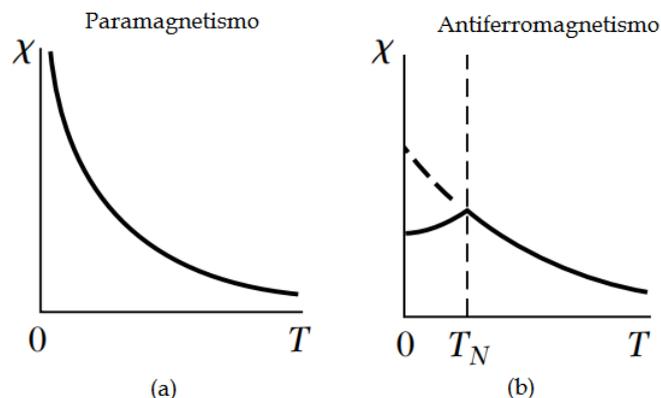
Os materiais paramagnéticos apresentam uma orientação aleatória de seus momentos magnéticos, ocasionada por flutuações térmicas induzidas pela temperatura. Por esse motivo, eles apresentam magnetização nula quando não estão sob ação de um campo magnético externo. Na presença de um campo magnético, a orientação média dos momentos tende a se alinhar paralelamente ao campo, o que induz no material uma fraca magnetização.

### 2.3.3 Ferromagnetismo, Antiferromagnetismo e Ferrimagnetismo

Os materiais ferromagnéticos apresentam uma magnetização espontânea abaixo de uma determinada temperatura (*temperatura de Curie*). Esse fenômeno ocorre como consequência do alinhamento dos momentos magnéticos ao longo de uma dada direção. Isso, no entanto, não é verdade para muitos ferromagnetos devido à formação de domínios magnéticos (BUSCHOW; BOER, 2003). Esses domínios são divisões da amostra com momentos magnéticos apontando na mesma direção. Em cada um deles existe uma magnetização uniforme, mas os vetores associados à magnetização desses domínios apontam em direções diferentes dos seus vizinhos. Nesse sentido, a magnetização espontânea surge quando o valor médio desses vetores é diferente de zero. A explicação desse fenômeno será discutida mais adiante nas transições de fase em modelos de spins. A natureza dos fenômenos ferromagnetismo, antiferromagnetismo e ferrimagnetismo é a mesma, e está relacionada às interações de troca entre os spins do sistema.

Em sistemas antiferromagnéticos, os spins tendem a apontar em direções opostas abaixo de uma determinada temperatura (*temperatura de Néels*). Acima dessa temperatura, esses sistemas se comportam como paramagnetos (NÉEL, 1952). Na Figura 2.4(a) é ilustrado o comportamento típico da susceptibilidade de sistemas paramagnéticos. Em vista de fornecer uma base de comparação, na Figura 2.4(b) é ilustrado o comportamento da susceptibilidade de um sistema antiferromagnético. Repare que acima da da temperatura de Neel  $T > T_N$ , o sistema está na fase paramagnética, na qual a susceptibilidade decai com o inverso da temperatura.

Figura 2.4 – Dependência da susceptibilidade magnética  $\chi$  em paramagnéticos (a) e antiferromagnéticos (b). Abaixo da temperatura de Neel  $T_N$  de um sistema antiferro os spins tem um orientação antiparalela; a susceptibilidade atinge o máximo em  $T_N$ . Essa transição é marcada por uma divergência no calor específico.



Fonte: Autor (2018).

O ferrimagnetismo é frequentemente associado com os fenômenos ferromagnéticos devido às curvas da magnetização, como função do campo magnético ou da temperatura, terem um comportamento semelhante. Contudo, em nível atômico o ferrimagnetismo é similar ao antiferromagnetismo. A diferença entre esses fenômenos reside no fato que em sistemas ferrimagnéticos os spins possuem magnitudes diferentes, enquanto que em sistemas antiferromagnéticos eles possuem a mesma magnitude.

### 3 MECÂNICA ESTATÍSTICA E TERMODINÂMICA

A termodinâmica é uma teoria que sistematiza as leis empíricas sobre o comportamento térmico de sistemas macroscópicos. O grande objetivo da mecânica estatística consiste em fornecer uma explicação para leis e resultados da termodinâmica a partir de considerações sobre o imenso número de partículas que constituem tais sistemas. Em princípio, o comportamento dos corpos macroscópicos poderia ser explicado por meio das leis da mecânica (quântica ou clássica). No entanto, esse número é da ordem do número de Avogrado  $10^{23}$ , o que torna essa tarefa inviável devido à complexidade dos possíveis resultados. Dessa quantidade de partículas interagindo emergem novas propriedades, as quais não possuem fundamento quando aplicadas em sistemas com poucos graus de liberdade. Por exemplo, a magnetização espontânea em materiais ferromagnéticos é uma consequência do comportamento coletivo dos constituintes básicos do sistema.

Neste capítulo será descrito de maneira detalhada o comportamento e a ordem dos fenômenos de transição de fase em sistemas magnéticos. Antes desse detalhamento, primeiro é feita uma revisão sucinta de alguns conceitos do formalismo da mecânica estatística, tais como: função de partição, energia livre, magnetização, susceptibilidade magnética, entropia e calor específico.

#### 3.1 Função de Partição e Energia Livre

A função de partição canônica é uma grandeza estatística usada para descrever as propriedades termodinâmicas de um sistema em equilíbrio termodinâmico. Assim definindo um sistema de  $N$  partículas, a função de partição é dada por:

$$\mathcal{Z}_N = \sum_i e^{-\beta \varepsilon_{N,i}}, \quad (3.1)$$

em que  $i$  é a soma sobre todos os microestados com energia  $\varepsilon_{N,i}$  e  $\beta = 1/k_B T$ , sendo  $k_B$  a constante de Boltzmann e  $T$  a temperatura absoluta.

A partir disso, a energia livre  $f$  no limite termodinâmico ( $N \rightarrow \infty$ ) por sítios é definida como:

$$f = - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} k_B T \ln(\mathcal{Z}_N).$$

A maioria das propriedades termodinâmicas de um sistema são obtidas a partir da energia livre. Além disso, a probabilidade de um sistema estar em um dado estado microscópico  $i$  com energia  $\varepsilon_{N,i}$  é dada por  $e^{-\beta\varepsilon_{N,i}}/\mathcal{Z}_N$ .

Nesse sentido, o valor esperado de qualquer quantidade  $Q$  do sistema, tais como energia total e magnetização, com valor  $Q_{N,i}$  para microestado com energia  $\varepsilon_{N,i}$ , segue a estrutura:

$$\langle Q \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \sum_i Q_{N,i} e^{-\beta\varepsilon_{N,i}}. \quad (3.2)$$

Por outro lado, para sistemas magnéticos a primeira lei da termodinâmica pode ser escrita como:

$$dU = Td\mathcal{S} - Mdh, \quad (3.3)$$

do qual  $dU$ ,  $d\mathcal{S}$  e  $dh$  são as variações infinitesimais na energia interna, entropia e campo magnético, respectivamente.

A seguir são apresentadas as relações termodinâmicas para variáveis pertinentes a sistemas magnéticos. Em geral, a energia livre  $f$  depende de diversos parâmetros. Tomando o caso particular, onde ela depende somente do campo  $h$  e da temperatura  $T$ , as propriedades termodinâmicas podem ser dadas por:

- Magnetização em temperatura constante:

$$M = - \left( \frac{\partial f}{\partial h} \right)_T; \quad (3.4)$$

- Susceptibilidade em temperatura constante:

$$\chi = \left( \frac{\partial M}{\partial h} \right)_T; \quad (3.5)$$

- Entropia em campo constante:

$$\mathcal{S} = - \left( \frac{\partial f}{\partial T} \right)_h; \quad (3.6)$$

- Calor específico em campo constante:

$$C = T \left( \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial T} \right)_h; \quad (3.7)$$

- Energia interna em campo constante:

$$U = - \left( \frac{\partial \ln(\mathcal{Z}_N)}{\partial \beta} \right)_h. \quad (3.8)$$

As variáveis termodinâmicas descritas acima são quantidades macroscópicas que o sistema possui em equilíbrio termodinâmico. Essas quantidades, no entanto, não oferecem uma descrição do que ocorre em nível microscópico. Nesse sentido, em vista de oferecer um maior entendimento dos fenômenos magnéticos em nível atômico, são introduzidas as funções de correlação, as quais serão discutidas mais adiante, Seção 4.3.2, em uma aplicação no modelo unidimensional de Ising.

### 3.2 Transições de Fase

Transições de fase ocorrem quando há uma singularidade na energia livre ou em uma de suas derivadas, caracterizada por um comportamento não analítico das quantidades físicas. Isso é marcado por uma mudança brusca nas propriedades macroscópicas das substâncias. Exemplos comuns desse fenômeno são as transições de líquido para gás, condutor para supercondutor e paramagnético para ferromagnético.

De acordo com a classificação de Ehrenfest da década de trinta, a transição de fase é de *n-ésima* ordem se a *n-ésima* derivada da energia livre com respeito a uma variável termodinâmica apresentar uma descontinuidade. Por exemplo, as transições sólido-líquido ou líquido-gasoso em fluidos são transições de primeira ordem. Por outro lado, as transições condutor para supercondutor em um metal são de segunda ordem. Seguindo essa classificação, seria possível haver transições até de ordem infinita. Isso de fato ocorre para uma classe geral de modelos de spin (SERVA; FULCO; ALBUQUERQUE, 2014).

No entanto, a classificação proposta por Ehrenfest tornou-se incompleta, uma vez que na época em que foi formulada ainda não se sabia que em algumas transições existem quantidades termodinâmicas que divergem ao invés de exibir uma descontinuidade. Por exemplo, a susceptibilidade magnética e o calor específico divergem em sistemas magnéticos na criticalidade.

Em vista disso, a classificação moderna é uma generalização da proposta de Ehrenfest (JAEGER, 1998). De acordo com essa classificação as transições de fase são divididas da seguinte maneira:

- Transição de primeira ordem se existir uma descontinuidade na primeira derivada da energia livre, caracterizada pela existência de um calor latente.
- Transição de segunda ordem, contínua ou crítica se a primeira derivada da energia livre for contínua, mas a segunda derivada for descontínua ou divergente.

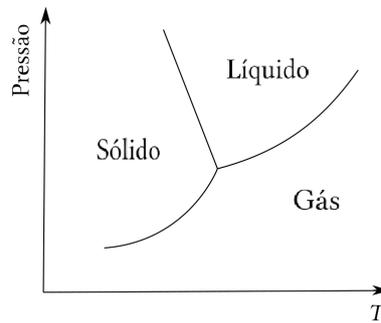
Em sistemas físicos, a presença das transições de fase está condicionada a diversos fatores, como a dimensão do modelo, topologia da rede, quantidade de interações por sítio, entre outros. No caso especial de modelos de baixa dimensionalidade há exceções quanto a presença desse fenômeno. Como exemplo disso, modelos unidimensionais com interações de curto alcance não exibem transição de fase em temperatura finita (CUESTA; SÁNCHEZ, 2004). O motivo para isso, como explicado de maneira simples por Landau (LIFSHITZ, 1969), é que as contribuições excessivas da entropia impedem que no sistema apareça uma fase ordenada. Por outro lado, alguns modelos unidimensionais com interações de longo alcance apresentam esse evento em temperatura finita (DYSON, 1969a). Isso pode, em princípio, ser explicado pelo fato de que aumentando o alcance das interações, os excessos entrópicos anteriormente citados seriam superados pela formação de domínios magnéticos, os quais estão relacionados a uma ordem magnética. Além disso, há um conjunto peculiar de modelos unidimensionais que exibem transições de primeira ordem em temperatura finita, tais como modelo de Kittel (KITTEL, 1969), modelo de Chui-Weeks (CHUI; WEEKS, 1981) e o modelo de Dauxois-Peyrard (DAUXOIS; PEYRARD, 1995).

A seguir, baseando-se na classificação moderna, serão apresentadas algumas características das transições de fase para sistemas físicos.

### 3.2.1 Transições de Fase de Primeira Ordem

Um transição de fase é denominada de primeira ordem quando as derivadas de primeira ordem da energia livre apresentam uma descontinuidade. Essas transições, em especial, apresentam um calor latente  $\ell$ , o qual aparece como um salto na entropia do sistema. As transições sólido-líquido ou líquido-gasoso, são exemplos comuns desse fenômeno. Isso é melhor visualizado por meio do diagrama de fase de um fluido, dado pela Figura 3.1. Nesse diagrama, ao se cruzar a linha de coexistência de fase tem-se uma transição de primeira ordem. Outro exemplo é dado na Figura 5.2 do Capítulo 5, na qual tem-se o diagrama de fase do estado fundamental de uma certa cadeia de spin- $\frac{1}{2}$ , em que as transições de primeira ordem ocorrem ao passar pela interface entre as fases magnéticas.

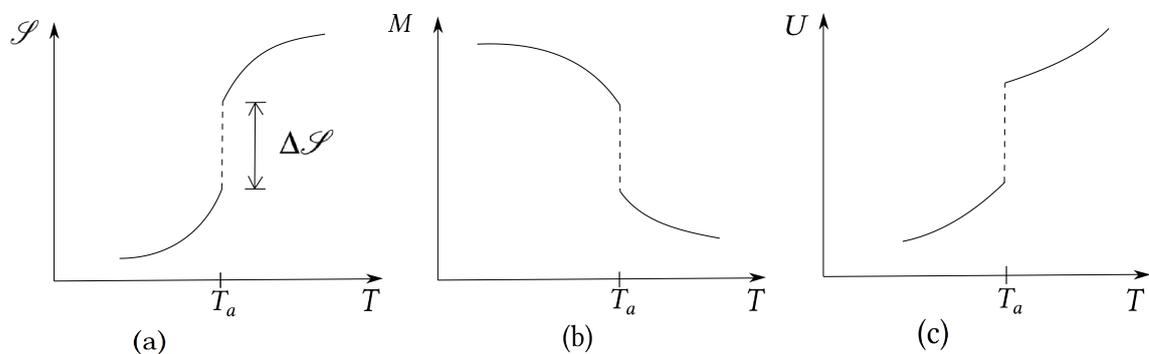
Figura 3.1 – Diagrama de fase, pressão por temperatura, de um fluido.



Fonte: Autor (2018).

As transições de primeira ordem são marcadas pela presença de um calor latente  $\ell$  associado a mudança de fase do sistema. Esse calor aparece como uma descontinuidade  $\Delta\mathcal{S} = \ell/T$  no gráfico da entropia em função da temperatura, a qual pode ser visto na Figura 3.2(a). Além disso, outras quantidades termodinâmicas relacionadas a primeira derivada da energia livre também são descontínuas nessas transições, como pode ser visto no gráfico da magnetização  $M(T)$  na Figura 3.2(b) e no gráfico da energia interna  $U(T)$  na Figura 3.2(c). Na Figura 3.2(b) o parâmetro de ordem, definido em sistemas magnéticos como a magnetização, apresenta uma descontinuidade nessas transições, a qual está relacionada a um salto na energia interna do sistema. Para fluidos, por sua vez, o parâmetro de ordem é definido pela densidade, a qual também apresenta uma descontinuidade.

Figura 3.2 – (a) Gráfico da entropia  $\mathcal{S}$  em função da temperatura  $T$ ; (b) Gráfico da magnetização  $M$  em função da temperatura  $T$ ; (c) Gráfico da energia interna  $U$  em função da temperatura  $T$ . Nesses gráficos,  $T_a$  demarca a temperatura associada a transição de primeira ordem.

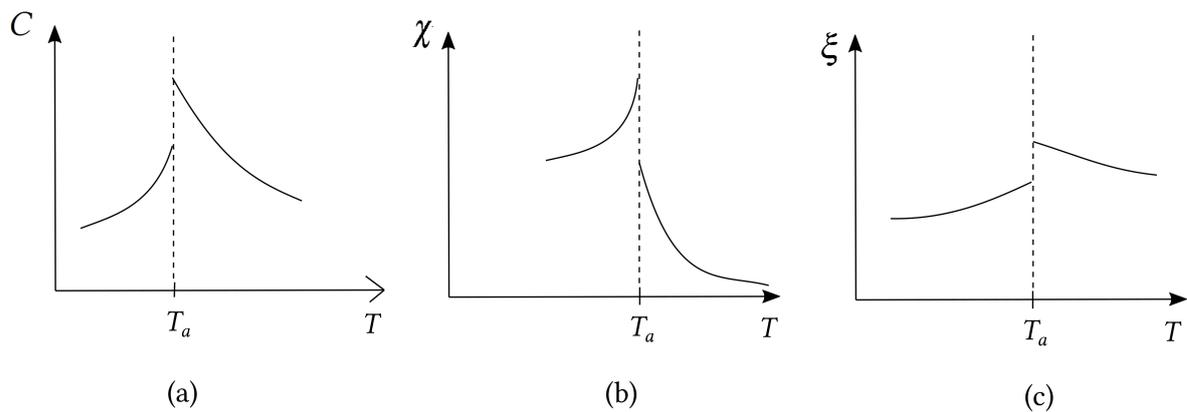


Fonte: Autor (2018).

Por outro lado, a segunda derivada da energia livre nas transições de primeira ordem também são funções descontínuas. Isso é visto pelo comportamento do calor específico  $C(T)$  e da susceptibilidade magnética  $\chi(T)$  nas Figuras 3.3(a) e (b), respectivamente. Além disso,

nessas transições o comprimento de correlação  $\xi(T)$  apresenta uma descontinuidade em  $T_a$ , como apresentado na Figura 3.3(c). Mais adiante, em contraste com as transições de primeira ordem, será mostrado o comportamento dessas quantidades em transições de segunda ordem ou contínuas.

Figura 3.3 – (a) Gráfico do calor específico  $C$  em função da temperatura; (b) Gráfico da susceptibilidade magnética  $\chi$  em função da temperatura; (c) Gráfico do comprimento de correlação  $\xi$  em função da temperatura. Nesses gráficos,  $T_a$  demarca a temperatura associada a transição de primeira ordem.



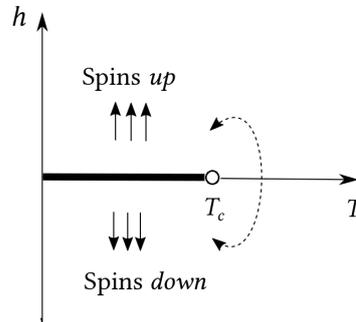
Fonte: Autor (2018).

Cabe destacar que os gráficos das quantidades termodinâmicas acima ilustradas não são genéricos. O foco aqui esteve sobre o comportamento dessas quantidades nas transições de primeira ordem.

### 3.2.2 Transições de Fase Contínua

As transições de fase são denominadas de segunda ordem, contínua ou crítica se as derivadas de primeira ordem da energia livre forem contínuas, mas as derivadas de segunda ordem apresentarem uma descontinuidade ou divergência. Essas transições ocorrem quando o sistema passa pelo ponto crítico. Por exemplo, na Figura 3.4 está o diagrama de fase de um dado sistema magnético, onde a linha em negrito demarca a coexistência de duas fases magnéticas a qual termina no ponto crítico.

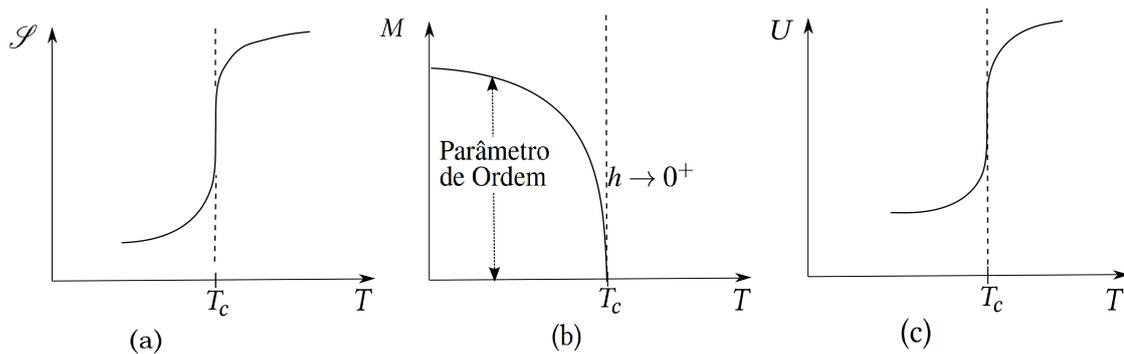
Figura 3.4 – Diagrama de fase, campo magnético por temperatura, de um ferromagneto. Nesses gráficos o ponto crítico é identificado pelo círculo em branco.



Fonte: Autor (2018).

Em transições contínuas as derivadas de primeira ordem da energia livre são funções contínuas, como pode ser visualizado em algumas quantidades físicas tais como a entropia  $\mathcal{S}(T)$ , a magnetização  $M(T)$  e a energia interna  $U(T)$  descritas nas Figuras 3.5(a), (b) e (c), respectivamente. Essas transições são caracterizadas pelo aparecimento de um parâmetro de ordem, mostrado por meio da magnetização de um sistema ferromagnético sob ação de um campo magnético  $h \rightarrow 0^+$  na Figura 3.5(b).

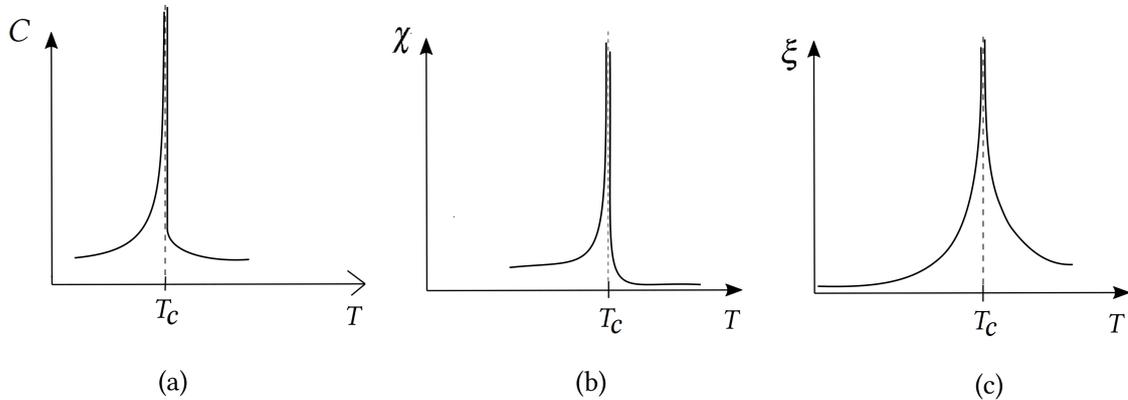
Figura 3.5 – (a) Gráfico da entropia  $\mathcal{S}$  em função da temperatura  $T$ ; (b) Gráfico da magnetização  $M$  em função da temperatura  $T$  para campo magnético  $h \rightarrow 0^+$ ; (c) Gráfico da energia interna  $U$  em função da temperatura  $T$ .



Fonte: Autor (2018).

Por outro lado, o calor específico  $C(T)$  e a susceptibilidade  $\chi(T)$ , relacionados à segunda derivada da energia livre, apresentam uma descontinuidade ou divergência nas transições do ponto crítico. O comportamento dessas quantidades nas transições de fase contínua é mostrado nas Figuras 3.6(a) e (b). Além disso, essas transições são marcadas por um comprimento de correlação  $\xi(T)$  infinito, como apresentado na Figura 3.6(c). Isso demonstra que próximo ao ponto crítico o sistema torna-se altamente correlacionado.

Figura 3.6 – (a) Gráfico do calor específico  $C$  em função da temperatura; (b) Gráfico da susceptibilidade magnética  $\chi$  em função da temperatura; (c) Gráfico do comprimento de correlação  $\xi$  em função da temperatura. Nesses gráficos,  $T_c$  demarca a temperatura associada a transição de primeira ordem.



Fonte: Autor (2018).

Nas proximidades do ponto crítico, em especial, o sistema exibe uma propriedade importante chamada universalidade. Essa propriedade significa que sistemas com a mesma dimensionalidade, alcance das interações e graus de liberdade possuem o mesmo comportamento nessa região. À medida em que o sistema se aproxima do ponto crítico, as variáveis termodinâmicas apresentam um comportamento singular ou não analítico. Essas singularidades, por sua vez, são caracterizadas por um conjunto de expoentes críticos que apresentam um caráter universal. Uma leitura adicional sobre esse assunto pode ser encontrada nas Referências (YEOMANS, 1992; BAXTER, 1982).

Por último, cabe frisar que os gráficos das quantidades termodinâmicas apresentados nessa seção não correspondem a um caso genérico. O foco aqui esteve sobre o comportamento de algumas quantidades nas transições de fase contínua.

## 4 MODELOS MAGNÉTICOS DE BAIXA DIMENSIONALIDADE

### 4.1 Magnetismo em Baixa Dimensão

Em 1925 Ernst Ising propôs uma solução para o modelo teórico de uma cadeia linear de momentos magnéticos interagindo com seus primeiros vizinhos (ISING, 1925), mais tarde conhecido como modelo de Ising. O objetivo do modelo era descrever a magnetização espontânea presente em materiais ferromagnéticos. Entretanto, os resultados obtidos por Ising mostraram que esse modelo não apresentava transição de fase em temperatura finita. Poucos anos depois Heisenberg propôs uma nova versão do modelo de Ising, na qual substituiu os momentos magnético de Ising por operadores de spin, conhecida como modelo de Heisenberg (HEISENBERG, 1928).

No início da década de quarenta, Kramer e Wannier (KRAMERSS; WANNIER, 1941), encontraram a temperatura de transição  $T_c$  para o modelo de Ising em uma rede quadrada. Pouco tempo depois, Lars Onsager (ONSAGER, 1944) obteve a expressão analítica da função de partição e da energia livre para o modelo de Ising bidimensional na ausência de um campo magnético.

Em geral, modelos de spins- $\frac{1}{2}$  ou superior sob ação de um campo magnético externo só podem ser resolvidos numericamente. Tais modelos apresentam soluções analíticas somente para casos particulares. Desde que Onsager encontrou a solução exata para o modelo de Ising de rede quadrada na ausência de um campo magnético, outras tentativas foram feitas para resolver analiticamente modelos similares como, por exemplo, a rede *honeycomb* (HORIGUCHI, 1986; KOLESÍK; SAMAJ, 1992). Pode-se dizer que o principal interesse por soluções exatas está no fato delas serem manipuladas algebricamente com facilidade.

Nesse sentido, modelos unidimensionais podem descrever materiais reais com uma boa aproximação (HEUVEL; CHIBOTARU, 2010; BELLUCCI; OHANYAN; ROJAS, 2014; TORRICO et al., 2016; CARVALHO et al., 2018). Além disso, os resultados exatos de tais modelos podem oferecer um maior entendimento sobre muitos fenômenos que posteriormente levaram a avanços em um contexto mais amplo como, por exemplo, o transporte eletrônico no DNA (CARPENA et al., 2002).

Neste capítulo será apresentado o modelo unidimensional de Ising com interações de curto alcance e sua solução exata através da técnica da matriz transferência. Em seguida, será explicado o modelo de Heisenberg e sua relação com o modelo de Ising. Logo após, será

discutida a ausência de transições de fase em modelos unidimensionais com interações de curto alcance. Por último, será apresentada a função de correlação para o caso particular de uma cadeia unidimensional de spins Ising.

## 4.2 Modelo de Ising Unidimensional

O modelo de Ising unidimensional é definido como um conjunto de variáveis discretas denominadas spins, que podem assumir valores discretos  $\pm 1/2$ . Os spin  $\sigma_i$  interagem em pares, entre os vizinhos mais próximos. O Hamiltoniano do modelo de Ising unidimensional na presença de um campo magnético  $h$  é dado por:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} - h \sum_{i=1}^N \sigma_i, \quad (4.1)$$

em que  $N$  é o número de sítios da cadeia e  $J$  é o parâmetro associado a interação de troca. A situação  $J > 0$  corresponde à interação do tipo ferromagnética, pois favorece o alinhamento paralelo dos spins. De modo análogo, a situação  $J < 0$  corresponde à interação do tipo anti-ferromagnética, pois favorece o alinhamento antiparalelo dos spins. O termo “favorecer” aqui é aplicado no sentido de menor variação da energia. Em temperaturas suficientemente baixas os spins tendem a se alinhar na direção do campo, mas em altas temperaturas as excitações térmicas destroem os efeitos do campo.

As propriedades termodinâmicas do modelo são encontradas a partir da função canônica de partição do sistema, dada por:

$$\mathcal{Z}_N = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta \mathcal{H}} = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{\beta \sum_{i=1}^N [J \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{h}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1})]}, \quad (4.2)$$

no qual  $\{\sigma_i\}$  significa a soma sobre todos os spins  $\{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\}$  e  $\beta = 1/k_B T$ , sendo  $k_B$  a constante de Boltzmann e  $T$  a temperatura absoluta. A simetrização  $\sigma_i \rightarrow \frac{1}{2}(\sigma_i + \sigma_{i+1})$  foi feita na Equação (4.2) apenas para tornar a matriz de transferência simétrica. Isso simplificará os cálculos posteriores.

Assim, a função partição (4.2) pode ser reescrita no seguinte formato:

$$\mathcal{Z}_N = \sum_{\{\sigma_i\}} \prod_{i=1}^N e^{\beta [J \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{h}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1})]}, \quad (4.3)$$

isto é possível porque os sítios  $\sigma_i$  são diagonais e comutam entre si.

A Equação (4.3) pode ser resolvida abrindo-se os somatórios e encontrando uma relação de recorrência entre os termos da soma (SALINAS, 2013). No entanto, esse procedimento é pouco usado. Uma forma mais simples é dada utilizando a técnica da matriz transferência (YEOMANS, 1992), a qual será discutido a seguir.

#### 4.2.1 Matriz de transferência para uma dimensão

Dando continuidade, será feita uma revisão dos cálculos da matriz transferência para o modelo unidimensional de Ising anteriormente discutido. Os elementos da matriz transferência  $\mathbf{W}$  são dados por  $\langle \sigma_i | \mathbf{W} | \sigma_{i+1} \rangle = e^{\beta J \sigma_i \sigma_{i+1} + \beta \frac{h}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1})}$ . Desta forma, a matriz  $\mathbf{W}$  de interações entre primeiros vizinhos é dada por:

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} w_1 & w_0 \\ w_0 & w_{-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\frac{\beta J}{4} + \frac{\beta h}{2}} & e^{-\frac{\beta J}{4}} \\ e^{-\frac{\beta J}{4}} & e^{\frac{\beta J}{4} - \frac{\beta h}{2}} \end{pmatrix}, \quad (4.4)$$

em que  $w_\mu = e^{\frac{\beta J}{2} (\mu^2 - \frac{1}{2}) + \frac{\beta h}{2} \mu}$ , sendo  $\mu = \sigma_i + \sigma_{i+1}$ .

Em seguimento, a condição periódica de contorno  $\sigma_{N+1} = \sigma_1$  será considerada por conveniência. É importante ressaltar que essa condição é desprezível no limite termodinâmico ( $N \rightarrow \infty$ ). Portanto a função de partição pode ser reescrita como:

$$\mathcal{Z}_N = \sum_{\{\sigma_i\}} \prod_{i=1}^N \langle \sigma_i | \mathbf{W} | \sigma_{i+1} \rangle = \sum_{\{\sigma_i\}} \langle \sigma_1 | \mathbf{W} | \sigma_2 \rangle \langle \sigma_2 | \mathbf{W} | \sigma_3 \rangle \dots \langle \sigma_N | \mathbf{W} | \sigma_1 \rangle = \text{tr}(\mathbf{W}^N), \quad (4.5)$$

no qual foi utilizada a relação de clausura  $\sum_{\sigma_i} |\sigma_i\rangle \langle \sigma_i| = 1$ .

Uma vez que a matriz  $\mathbf{W}$  é diagonalizável, será utilizada a transformação de similaridade  $\mathbf{P}^{-1} \mathbf{W} \mathbf{P} = \Lambda$ , onde  $\Lambda$  é uma matriz diagonal. Essa transformação não altera as propriedades do traço, então:

$$\Lambda = \mathbf{P}^{-1} \mathbf{W} \mathbf{P} = \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix}, \quad (4.6)$$

onde os termos  $\lambda_+$  e  $\lambda_-$  são os autovalores da matriz  $\mathbf{W}$  descritos da seguinte forma:

$$\lambda_{\pm} = \frac{w_1 + w_{-1} \pm \sqrt{(w_1 - w_{-1})^2 + 4w_0^2}}{2}. \quad (4.7)$$

De forma explícita, eles são descritos como:

$$\lambda_{\pm} = e^{\frac{\beta J}{2}} \cosh\left(\frac{\beta h}{2}\right) \pm \left[ e^{-\frac{\beta J}{2}} \cosh^2\left(\frac{\beta h}{2}\right) + 2 \sinh\left(\frac{\beta J}{2}\right) \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (4.8)$$

Desta forma a função de partição em termo dos autovalores de  $\mathbf{W}$  é dada por:

$$\mathcal{Z}_N = \lambda_+^N + \lambda_-^N. \quad (4.9)$$

No limite termodinâmico,  $N \rightarrow \infty$ , sabendo que  $\lambda_+ > \lambda_-$ , a energia livre por sítio  $f$  será dada por:

$$f = -\frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{\ln \mathcal{Z}_N}{N} \right) = -\frac{1}{\beta} \ln \lambda_+. \quad (4.10)$$

A partir da Equação (4.10) é possível encontrar todas as propriedades termodinâmicas do modelo descritas na seção anterior, embora seja necessário um cálculo adicional para as funções de correlação, apresentado mais adiante.

### 4.3 Modelo de Heisenberg

O modelo de Heisenberg generaliza o modelo de Ising levando em conta as projeções ao longo dos três eixos de coordenadas. Nesse sentido, o modelo de Ising pode ser interpretado com um caso particular do modelo de Heisenberg, no qual tem-se apenas a componente- $z$  do operador de spin. Para uma cadeia linear com interação entre primeiros vizinhos, o modelo de Heisenberg é definido pelo Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^N \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}, \quad (4.11)$$

onde  $\mathbf{S} = (S^x, S^y, S^z)$  são os operadores de spins e  $J$  é um parâmetro de interação. De modo análogo ao modelo de Ising, para  $J > 0$  as interações são do tipo ferromagnética e  $J < 0$  do tipo antiferromagnética. Nesse caso, no qual o parâmetro  $J$  é o mesmo para todas as direções, o modelo é chamado isotrópico. Entretanto, o caso mais geral do modelo de Heisenberg ocorre quando as interações nos três eixos de coordenadas são diferentes, denominado modelo de Heisenberg anisotrópico, em que o Hamiltoniano é dado por:

$$\mathcal{H} = - \sum_{i=1}^N (J_x S_i^x S_{i+1}^x + J_y S_i^y S_{i+1}^y + J_z S_i^z S_{i+1}^z), \quad (4.12)$$

em que os parâmetros  $J_x$ ,  $J_y$  e  $J_z$  definem as anisotropias ao longo dos eixos  $x$ ,  $y$  e  $z$ , respectivamente. Esse tipo de modelo, com anisotropia em todas direções, comumente é abreviado como XYZ. Para o caso no qual apenas uma direção possui anisotropia, por exemplo  $J_x = J_y \neq J_z$ , o modelo é abreviado como XXZ.

Sob ação de um campo magnético externo apontando ao longo da direção- $z$ , a Hamiltoniana do modelo de Heisenberg isotrópico pode se escrita como:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N (-J \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} - h S_i^z). \quad (4.13)$$

Na Equação (4.13) foi considerado, por simplicidade, o fator- $g$  e o magneton de Bohr  $\mu_B$ , relacionados ao campo magnético, iguais a 1.

#### 4.3.1 Ausência de transição de fase para o modelo de Ising unidimensional em temperatura finita

A ausência de transições de fase em modelos unidimensionais com interações de curto alcance em temperatura finita foi estabelecida em 1950 por van Hove (HOVE, 1950). Entretanto, como investigado por Cuesta e Sanches (CUESTA; SÁNCHEZ, 2004), a proposta de van Hove possui limitações quanto a sua aplicabilidade. Esse autores reforçaram essa limitações mostrando vários exemplos de modelos unidimensionais com interações de curto alcance que exibem transições de fase de primeira ordem em temperatura finita, tais como o modelo de Kittel (KITTEL, 1969), o modelo de Chui-Weeks (CHUI; WEEKS, 1981) e o modelo de Dauxois-Peyrard (DAUXOIS; PEYRARD, 1995). Além disso, esses autores forneceram um teorema muito mais geral sobre a inexistência de transições de fase em temperatura finita em sistemas unidimensionais com interação de curto alcance. Esse teorema segue um rigoroso procedimento matemático não explicado neste trabalho. A construção de um teorema geral para a ausência de transições de fase em modelos unidimensionais ainda é um desafio.

Por outro lado, modelos unidimensionais com interações de longo alcance exibem transições de fase em temperatura finita (DYSON, 1969a). Tais modelos, por sua vez, podem ser mapeados em redes bidimensionais, conhecidas por apresentar tal fenômeno.

### 4.3.2 Função de Correlação

A função de correlação  $C_I$  para dois sítios,  $\sigma_i$  e  $\sigma_{i+r}$  de uma cadeia linear de spins Ising, separadas por uma distância  $r$ , determina relação de interdependência entre o spin do sítio  $i$  e o spin do sítio  $i+r$ . A função  $C_I$  para dois spins quaisquer separados por uma distância  $r$  é definida como (YEOMANS, 1992):

$$C_I = \langle (\sigma_i - \langle \sigma_i \rangle)(\sigma_{i+r} - \langle \sigma_{i+r} \rangle) \rangle. \quad (4.14)$$

A Equação (4.14) mostra que a função de correlação está relacionada as flutuações dos spin em torno do seu valor médio. Se as contribuições energéticas do Hamiltoniano  $\mathcal{H}$  são invariantes sob translação, ou seja,  $\langle \sigma_i \rangle = \langle \sigma_{i+r} \rangle$  para todas posições, então  $C_I$  pode ser escrita como

$$C_I = \langle \sigma_i \sigma_{i+r} \rangle - \langle \sigma_i \rangle^2, \quad (4.15)$$

no qual os termos  $\langle \sigma_i \sigma_{i+r} \rangle$  e  $\langle \sigma_i \rangle$  são dados, respectivamente, por:

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+r} \rangle = \frac{1}{\mathcal{L}_N} \sum_{\{\sigma_i\}} \sigma_i \sigma_{i+r} e^{-\beta \mathcal{H}}, \quad (4.16)$$

e

$$\langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{\mathcal{L}_N} \sum_{\{\sigma_i\}} \sigma_i e^{-\beta \mathcal{H}}. \quad (4.17)$$

É sabido que o modelo linear de Ising com interações de curto alcance não apresenta transições de fase em temperatura finita (HOVE, 1950). Como mostrado de maneira simples por Landau (LIFSHITZ, 1969), o custo energético para inserir um fase ordenada nesses sistemas é superado pelos excessos de entropia, de modo que não ocorre uma quebra espontânea de simetria. Uma forma de contornar essa situação seria aumentando o alcance das interações, como provado por Dyson, o qual mostrou que sistemas unidimensionais com interação de longo alcance apresentam magnetização espontânea em temperatura finita (DYSON, 1969a). Esse tipo de transição está relacionada a uma transição de fase contínua, como descrito no Capítulo 3. Em transições de fase contínua a função de correlação  $C_I$  apresenta uma divergência.

Por outro lado, as flutuações na magnetização estão relacionadas à susceptibilidade magnética  $\chi$  por

$$\langle (M_I - \langle M_I \rangle)^2 \rangle = \langle M_I^2 \rangle - \langle M_I \rangle^2 = k_B T^2 \frac{\partial^2}{\partial h^2} \ln \mathcal{Z}_N = k_B T \chi, \quad (4.18)$$

sendo  $k_B$  a constante de Boltzmann e  $h$  o campo magnético. Nesse sentido, a presença de uma divergência na susceptibilidade  $\chi$  está relacionada a uma divergência na função de correlação. Além disso, tem-se a relação  $C_I \sim e^{-\frac{r}{\xi}}$ , sendo  $\xi$  o comprimento de correlação. No ponto crítico o comprimento de correlação diverge  $\xi \rightarrow \infty$ , mostrando que uma ordem de longo alcance surge no sistema. Fora da criticalidade, a função de correlação decai exponencialmente com a distância  $r$  entre os spins.

Aqui foi considerado o caso particular de um sistema unidimensional de spin Ising, porém as mesmas quantidades podem ser derivadas para outros sistemas de spin. O foco aqui consistiu em mostrar a relação entre a função de correlação e as flutuações magnéticas que, por sua vez, estão relacionadas à susceptibilidade. Nas transições de fase contínuas em sistemas magnéticos tais quantidades divergem. Por meio da Equação (4.14) essas transições poderiam ser interpretadas como uma grande flutuação dos spins em torno do seu valor esperado.

No próximo capítulo serão investigadas as funções de correlação para um modelo unidimensional de spin- $\frac{1}{2}$  com interação de curto alcance, as quais apresentam um comportamento inesperado em temperatura finita, bastante semelhante a uma transição de fase legítima. Uma leitura adicional sobre as funções de correlação que na sequência serão vistas é encontrada no trabalho de Belluci e Ohanyan (BELLUCI; OHANYAN, 2013).

## 5 FUNÇÕES DE CORRELAÇÃO UMA CADEIA DE SPIN- $\frac{1}{2}$ ISING-XYZ DE ESTRUTURA DIAMANTE

Na última década, Cuesta e Sánches (CUESTA; SÁNCHEZ, 2004) investigaram algumas propriedades relevantes em modelos unidimensionais, tais como o teorema geral da ausência de transição de fase em temperatura finita para modelos unidimensionais com interação de curto alcance (DYSON, 1969b), embora existam alguns modelos unidimensionais com interações de longo alcance que exibem transição de fase em temperatura finita (DYSON, 1969a). Por outro lado, há uma classe especial de modelos unidimensionais com interações de curto alcance que apresentam transições de fase em temperatura finita, tais como o modelo de Kittel (KITTEL, 1969), modelo de Chui-Weeks (CHUI; WEEKS, 1981) e o modelo de Dauxois-Peyrard (DAUXOIS; PEYRARD, 1995). Além disso, resultados mais recentes mostraram que moléculas de água confinadas dentro de nanotubos de carbono apresentam um comportamento completamente distinto do seu análogo macroscópico, semelhante a uma transição de quase-fase controlada pela temperatura (MA et al., 2017).

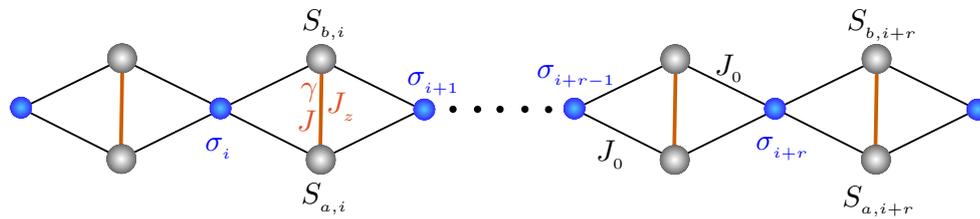
Recentemente, diversos modelos unidimensionais foram examinados no contexto das estruturas decoradas como, em particular, os sistemas de spins Ising e Heisenberg em uma variedade de estruturas geométricas (TORRICO et al., 2014; GALISOVA; STREČKA, 2015; STREČKA et al., 2016; TORRICO et al., 2016; ROJAS; STREČKA; SOUZA, 2016). Tais sistemas apresentam um comportamento inesperado em temperatura finita, semelhante a uma transição de fase de primeira ordem ou contínua induzida pela temperatura. Esse comportamento é marcado por mudanças abruptas nas quantidades termodinâmicas relacionadas às derivadas da energias livre, assim como também nas funções de correlação. Embora as pseudo-transições não sejam transições de fase legítimas induzidas pela temperatura, apresentam características que poderiam induzir conclusões equivocadas na interpretação dos dados experimentais.

Este capítulo tem como principal objetivo aprofundar o entendimento das pseudo-transições de fase, investigando as funções de correlação em torno da temperatura pseudo-crítica. Nessa direção, será considerado como exemplo o modelo de uma cadeia de spin- $\frac{1}{2}$  Ising-XYZ de estrutura diamante no regime onde ocorrem as quase-fases e pseudo-transições. Algumas propriedades desse modelo já foram estudadas detalhadamente em trabalhos anteriores (TORRICO et al., 2016; TORRICO et al., 2014). Este capítulo está organizado da seguinte forma: primeiro, será revisado o modelo e o seu diagrama de fase do estado fundamental, considerados nos trabalhos (TORRICO et al., 2014; TORRICO et al., 2016; SOUZA; ROJAS, 2018); em seguida,

é apresentada a construção da função de partição do modelo em banho térmico; na sequência são discutidas as pseudo-transições na perspectiva do modelo de Ising efetivo; logo após, será apresentada uma nova evidência para as pseudo-transições, relacionadas às funções de correlação dos pares de spin distantes em uma cadeia de spin- $\frac{1}{2}$  Ising-XYZ de estrutura diamante; por último, os resultados serão sumarizados.

### 5.1 Hamiltoniano do Modelo e seu Diagrama de Fase do Estado Fundamental

Figura 5.1 – Representação esquemática de uma cadeia de spin- $\frac{1}{2}$  Ising-XYZ de estrutura diamante.



Fonte: Autor (2018).

O Hamiltoniano  $\mathcal{H}$  de uma cadeia de spin- $\frac{1}{2}$  Ising-XYZ de estrutura diamante, representada na Figura 5.1, é construído a partir da soma dos blocos Hamiltonianos por célula unitária  $\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N H_i$ , do qual:

$$\begin{aligned}
 H_i = & - J(1 + \gamma)S_{a,i}^x S_{b,i}^x - J(1 - \gamma)S_{a,i}^y S_{b,i}^y - J_z S_{a,i}^z S_{b,i}^z - J_0(S_{a,i}^z + S_{b,i}^z)(\sigma_i + \sigma_{i+1}) \\
 & - h_z(S_{a,i}^z + S_{b,i}^z) - \frac{h}{2}(\sigma_i + \sigma_{i+1}), \quad (5.1)
 \end{aligned}$$

onde  $S_{a(b)}^\alpha$  ( $\alpha = x, y, z$ ) são os operadores de spins,  $\gamma$  é o parâmetro de anisotropia nas componentes  $xy$ ,  $J$  e  $J_z$  são as interações entre os spins Heisenberg nos sítios intersticiais,  $J_0$  é o parâmetro de troca associado às interações entre os spins Ising nos sítios nodais com os spins Heisenberg nos sítios intersticiais, e os campos magnéticos  $h_z$  e  $h$  são considerados apontando ao longo do eixo- $z$ . Ao longo deste capítulo, será considerado o caso particular  $h = h_z$ . Assim sendo, na representação matricial,  $H_i$  tem a seguinte forma:

$$H_i = \begin{pmatrix} -\frac{1}{4}J_z - (J_0 + \frac{h}{2})\mu - h_z & 0 & 0 & -\frac{J\gamma}{2} \\ 0 & \frac{J_z}{4} - \frac{h}{2}\mu & -\frac{J}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{J}{2} & \frac{J_z}{4} - \frac{h}{2}\mu & 0 \\ -\frac{J\gamma}{2} & 0 & 0 & -\frac{1}{4}J_z + (J_0 - \frac{h}{2})\mu + h_z \end{pmatrix}, \quad (5.2)$$

do qual  $\mu = \sigma_i + \sigma_{i+1}$ . Os autovalores do Hamiltoniano (5.2), associado a  $i$ -ésima célula unitária, são dados por:

$$\mathcal{E}_1 = -h\frac{\mu}{2} - \frac{J_z}{4} + \Delta_\mu, \quad (5.3)$$

$$\mathcal{E}_2 = -h\frac{\mu}{2} - \frac{J}{2} + \frac{J_z}{4}, \quad (5.4)$$

$$\mathcal{E}_3 = -h\frac{\mu}{2} + \frac{J}{2} + \frac{J_z}{4}, \quad (5.5)$$

$$\mathcal{E}_4 = -h\frac{\mu}{2} - \frac{J_z}{4} - \Delta_\mu, \quad (5.6)$$

onde  $\Delta_\mu = \sqrt{(h_z + J_0\mu)^2 + \frac{1}{4}J^2\gamma^2}$ . Os correspondentes autoestados na base natural são:

$$|\varphi_1\rangle = -\sin\theta_\mu|+\rangle + \cos\theta_\mu|-\rangle, \quad (5.7)$$

$$|\varphi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-\rangle + |+\rangle), \quad (5.8)$$

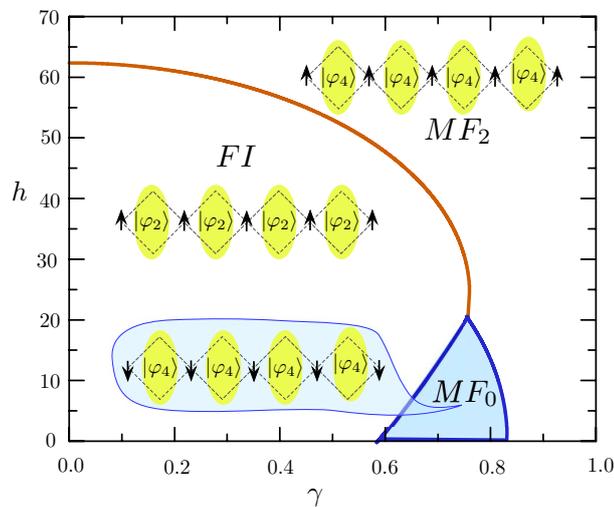
$$|\varphi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-\rangle - |+\rangle), \quad (5.9)$$

$$|\varphi_4\rangle = \cos\theta_\mu|+\rangle + \sin\theta_\mu|-\rangle, \quad (5.10)$$

do qual,  $\theta_\mu = \frac{1}{2} \tan^{-1} \frac{J\gamma}{2(h_z + J_0\mu)}$  com  $0 < \theta_\mu < \pi$ .

Em seguida, é apresentado na Figura 5.2 o diagrama de fase à temperatura zero no plano  $\gamma - h$ . Nesse diagrama foi considerado o caso particular para o conjunto de parâmetro  $J = 100$ ,  $J_z = 24$  e  $J_0 = -24$ . Esse conjunto será mantido fixo ao longo deste Capítulo.

Figura 5.2 – Diagrama de fase do estado fundamental no plano  $\gamma - h$  para  $h_z = h$ , considerando valores fixos de  $J = 100$ ,  $J_z = 24$  e  $J_0 = -24$ .



Fonte: Autor (2018).

O diagrama de fase apresenta três fases no estado fundamental: uma fase ferrimagnética ( $FI$ ) e duas fases Heisenberg modulado ferromagnético ( $MF_0$  e  $MF_2$ ). O termo “modulado” aqui é empregado no sentido que o estado  $|\varphi_4\rangle$  tem probabilidade  $\cos^2(\theta_\mu)$  em  $|\uparrow\rangle$  e  $\sin^2(\theta_\mu)$  em  $|\downarrow\rangle$ . Essas fases, por sua vez, são representadas pelos estados fundamentais:

$$|MF_2\rangle = \prod_{i=1}^N |\varphi_4\rangle_i \otimes |\uparrow\rangle_i, \quad (5.11)$$

$$|FI\rangle = \prod_{i=1}^N |\varphi_2\rangle_i \otimes |\uparrow\rangle_i, \quad (5.12)$$

$$|MF_0\rangle = \prod_{i=1}^N |\varphi_4\rangle_i \otimes |\downarrow\rangle_i. \quad (5.13)$$

As energias correspondentes a esses estados são:

$$\varepsilon_{1,0} = E_{MF_2} = -\frac{J_z}{4} - \frac{h}{2} - \sqrt{(h_z + J_0)^2 + \frac{1}{4}J^2\gamma^2}, \quad (5.14)$$

$$\varepsilon_{0,0} = E_{FI} = \frac{J_z}{4} - \frac{J}{2} - \frac{h}{2}, \quad (5.15)$$

$$\varepsilon_{-1,0} = E_{MF_0} = -\frac{J_z}{4} + \frac{h}{2} - \sqrt{(h_z - J_0)^2 + \frac{1}{4}J^2\gamma^2}, \quad (5.16)$$

na qual os sub-índices de  $\varepsilon_{\mu,k}$  indicam a soma  $\mu = \sigma_i + \sigma_{i+1}$  e o nível  $k$  de energia. Note que a presença de um campo magnético quebra a degenerescência das fases  $MF_2$  e  $MF_0$ , uma vez que elas são degeneradas em  $h = 0$ .

## 5.2 Termodinâmica do Modelo

As propriedades termodinâmicas do modelo são estudadas a partir da função de partição, como discutido no Capítulo 3. Para construí-la, primeiramente será definido o seguinte operador em função dos spins Ising:

$$\rho(\mu) = e^{-\beta H_i(\mu)}, \quad (5.17)$$

onde  $\mu = \sigma_i + \sigma_{i+1}$  assume os valores  $\{-1, 0, 1\}$ ,  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ , sendo  $T$  a temperatura absoluta e  $k_B$  a constante de Boltzmann, e  $H_i(\mu)$  corresponde ao Hamiltoniano da  $i$ -ésima célula unitária. De maneira alternativa o operador da Equação (5.17) pode ser escrito em termos dos autovalores de  $H_i(\mu)$ :

$$\rho(\mu) = \sum_{j=1}^4 e^{-\beta \mathcal{E}_j(\mu)} |\varphi_j\rangle \langle \varphi_j|. \quad (5.18)$$

O fator de Boltzmann  $w_\mu$ , por sua vez, é obtido tomando o traço sobre o operador  $\rho(\mu)$ ,

$$w_\mu = \text{tr}[\rho(\mu)] = \sum_{j=1}^4 e^{-\beta \mathcal{E}_j(\mu)}. \quad (5.19)$$

O valor de  $w_\mu$  pode ser simplificado da seguinte forma:

$$w_\mu = 2e^{\frac{\beta\mu h}{2}} \left[ e^{-\frac{\beta J_z}{4}} \text{ch}\left(\frac{\beta J}{2}\right) + e^{\frac{\beta J_z}{4}} \text{ch}(\beta \Delta_\mu) \right]. \quad (5.20)$$

Usando a técnica da matriz de transferência dada no Capítulo 4, tem-se que a função de partição pode ser escrita por  $\mathcal{Z}_N = \text{tr}(\mathbf{W}^N)$ , onde a matriz de transferência é expressa da seguinte forma:

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} w_1 & w_0 \\ w_0 & w_{-1} \end{pmatrix}, \quad (5.21)$$

da qual  $w_1$ ,  $w_0$  e  $w_{-1}$  são dados pela equação (5.20). Os autovalores da matriz de transferência  $\mathbf{W}$  são expressos por:

$$\lambda_{\pm} = \frac{w_1 + w_{-1} \pm \sqrt{(w_1 - w_{-1})^2 + 4w_0^2}}{2}. \quad (5.22)$$

Portanto, a função de partição para uma cadeia finita sob condições periódicas de contorno assume a forma:

$$\mathcal{Z}_N = \lambda_+^N + \lambda_-^N. \quad (5.23)$$

### 5.3 Constantes Efetivas e Pseudo-Transições de Fase

Usando a transformação decoreação do modelo de Ising (FISHER, 1959), uma cadeia de spin- $\frac{1}{2}$  Ising-XYZ de estrutura diamante pode ser mapeada em uma cadeia linear de spin- $\frac{1}{2}$  de Ising, cujo o Hamiltoniano efetivo é expresso por  $\mathcal{H}_{\text{eff}} = \sum_{j=1}^N \tilde{H}_j$ , do qual:

$$\tilde{H}_j = -E_{\text{eff}}^0 - J_{\text{eff}} \sigma_j \sigma_{j+1} - h_{\text{eff}} \sigma_j, \quad (5.24)$$

onde  $E_{\text{eff}}^0$ ,  $J_{\text{eff}}$ , e  $h_{\text{eff}}$  são os parâmetros efetivos do Hamiltoniano. Esses parâmetros são obtidos relacionando-se os fatores de Boltzmann da cadeia de spins Ising  $\tilde{w}_\mu$  com os fatores de Boltzmann da cadeia diamante Ising-XYZ da Equação (5.20):

$$\tilde{w}_1 = w_1, \quad \tilde{w}_{-1} = w_{-1} \quad \text{e} \quad \tilde{w}_0 = w_0. \quad (5.25)$$

Manipulando algébricamente as equações acima, chega-se em

$$E_{\text{eff}}^0 = \frac{1}{4\beta} \ln(w_1 w_0^2 w_{-1}), \quad (5.26)$$

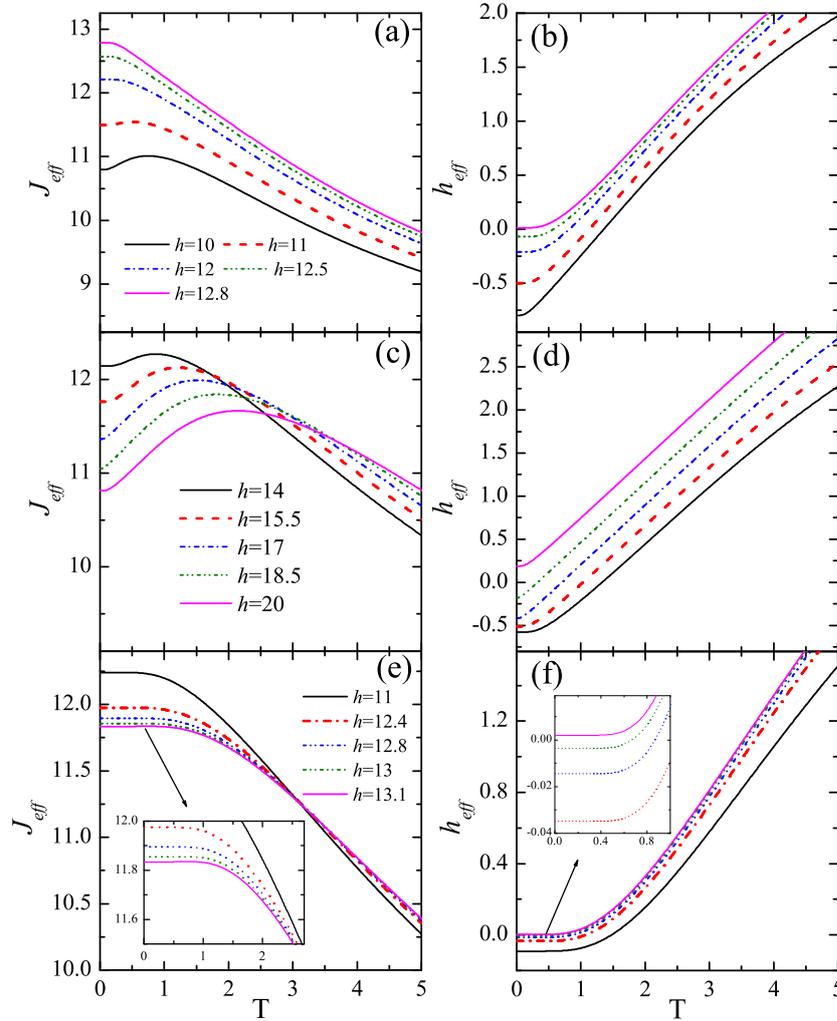
$$J_{\text{eff}} = \frac{1}{\beta} \ln\left(\frac{w_1 w_{-1}}{w_0^2}\right), \quad (5.27)$$

$$h_{\text{eff}} = \frac{1}{\beta} \ln\left(\frac{w_1}{w_{-1}}\right), \quad (5.28)$$

Ao longo da interface entre as fases  $FI$  e  $MF_0$  ou  $FI$  e  $MF_2$  os fatores de Boltzmann (5.20) satisfazem a seguinte relação  $w_1 \sim w_{-1} \geq w_0$ , a qual implica que  $w_1 w_{-1} \geq w_0^2$ . A partir disso tem-se da Equação (5.27) que  $J_{\text{eff}} \geq 0$ , onde a relação de igualdade,  $J_{\text{eff}} = 0$ , ocorre no limite  $T \rightarrow \infty$ . Assim sendo, para o caso  $T < \infty$ , o parâmetro de troca efetivo é sempre positivo  $J_{\text{eff}} > 0$  e, portanto, as interações efetivas da cadeia de spins-Ising serão do tipo ferromagnéticas.

Nas Figuras 5.3 (a), (c) e (e) o parâmetro efetivo de troca  $J_{\text{eff}}$  (5.27) é apresentado em função da temperatura para um conjunto particular de parâmetros anteriormente citado, assumindo  $h = h_z$ . Como esperado, observa-se que as interações efetivas  $J_{\text{eff}}$  são do tipo ferromagnética. Nas Figuras 5.3(b), (d) e (f) o campo magnético efetivo  $h_{\text{eff}}$  (5.28) é apresentado em função da temperatura para o mesmo conjunto de parâmetros. É importante notar que, ao contrário do parâmetro  $J_{\text{eff}}(T)$ , o campo magnético efetivo muda de sinal em uma certa temperatura. Essa situação será discutida a seguir.

Figura 5.3 – Parâmetros efetivos da cadeia de spins-Ising, considerando  $J = 100$ ,  $J_z = 24$ , e  $J_0 = -24$ . (a) Parâmetro de troca efetivo  $J_{\text{eff}}$  em função de  $T$  para  $\gamma = 0.7$ . (b) Campo magnético efetivo  $h_{\text{eff}}$  em função de  $T$  para  $\gamma = 0.7$ . (c)  $J_{\text{eff}}$  em função de  $T$  para  $\gamma = 0.75$ . (d)  $h_{\text{eff}}$  em função de  $T$  para  $\gamma = 0.75$ . (e)  $J_{\text{eff}}$  em função de  $T$  para  $\gamma = 0.8$ . (f)  $h_{\text{eff}}$  em função de  $T$  para  $\gamma = 0.8$ .



Fonte: Autor (2018).

As quase-fase em temperatura finita serão definidas como as extensões orientadas pela temperatura das fases do estados fundamental, em que:  $FI$  vai para  $qFI$ ,  $MF_0$  vai para  $qMF_0$  e  $MF_2$  vai para  $qMF_2$ . Aqui foi utilizado o prefixo “ $q$ ” para identificar o termo “quase”. Assim, na Figura 5.3(f) é visto uma comportamento interessante de  $h_{\text{eff}}$  em função da temperatura  $T$ , especificamente, para  $\gamma = 0.8$  e  $h = 13.0$ , onde o campo magnético efetivo  $h_{\text{eff}}$  permanece quase zero até  $T \approx 0.75$ . Enquanto  $h_{\text{eff}} < 0$  o sistema está em  $qMF_0$ , ao passo que para  $h_{\text{eff}} > 0$  o sistema vai para  $qMF_2$ . Essa mudança é confirmada por meio das magnetizações dos spins Ising e dos spins Heisenberg (Apêndice B).

As quase-fase em temperatura finita serão definidas como as extensões orientadas pela temperatura das fases do estados fundamental, em que:  $FI$  vai para  $qFI$ ,  $MF_0$  vai para  $qMF_0$  e  $MF_2$  vai para  $qMF_2$ . Nas Figuras 5.3(b), (d) e (f) essas quase-fases podem ser identificadas por meio da magnetização dos spins Ising e dos spins Heisenberg (Apêndice B). Por exemplo, na Figura 5.3(f), do qual  $\gamma = 0.8$ , na condição  $h_{\text{eff}} < 0$  o sistema está em  $qMF_0$  e vai para  $qMF_2$  quando  $h_{\text{eff}} > 0$ .

A condição necessária para encontrar as pseudo-transições de fase é quando o campo efetivo  $h_{\text{eff}}$  inverte sua orientação, isto é:

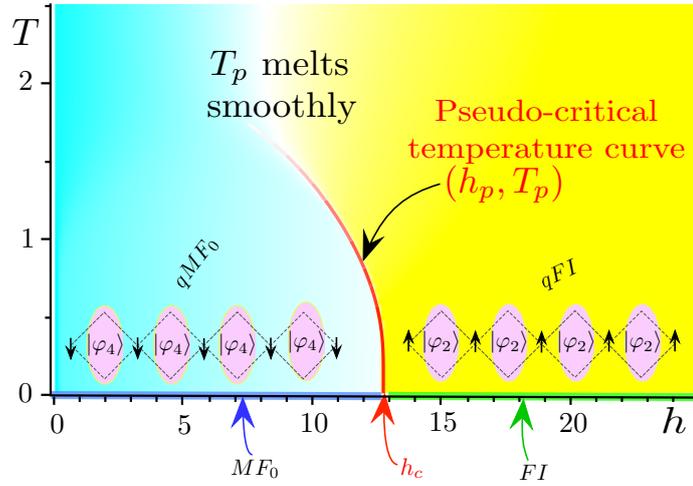
$$h_{\text{eff}}(T_p) = 0, \quad \text{e} \quad w_0 \ll \{w_1, w_{-1}\}. \quad (5.29)$$

Esta equação é utilizada para determinar a temperatura de pseudo-transição  $T_p$  e corresponde a situação  $w_{-1} = w_1$ , como sugerido na referência (SOUZA; ROJAS, 2018). Isso leva a uma equação transcendental para  $T_p$ , a qual só pode ser resolvida numericamente.

O comportamento do modelo decorado (5.24) em relação ao campo magnético efetivo contrasta com o de uma cadeia de spin- $\frac{1}{2}$  ferromagnética sob ação de um campo magnético. Isso ocorre porque o campo efetivo está relacionado à temperatura do sistema. Assim, enquanto o campo efetivo alinha os spins-Ising, a temperatura aumenta as flutuações de spin. Assim, a ordem ferromagnética é dissolvida suavemente. .

Na Figura 5.4 a temperatura pseudo-crítica  $T_p$ , determinada pela condição  $h_{\text{eff}}(T_p) = 0$ , é mostrada por meio da linha em vermelho, a qual vai desaparecendo gradativamente até  $T_p \approx 1.5$ . O diagrama de fase apresentado por essa figura demonstra a curva de temperatura pseudo-crítica que se encontra entre duas regiões: as quase-fases  $qMF_0$  e  $qFI$ , cujos parâmetros são dados na Figura 5.4. Quando o fator  $w_0$  torna-se significativo, a condição  $h_{\text{eff}}(T_p) = 0$  poderia dar, em princípio, os valores de  $T_p$ , mas esse resultado não levaria a uma pseudo-transição porque a singularidade observada quando  $w_1 = w_{-1}$  desaparece devido às contribuições de  $w_0$ . Além disso, é importante mencionar que se  $T_p \rightarrow 0$ , então  $h_p \rightarrow h_c$ , em que  $h_c$  é o autêntico campo magnético crítico em temperatura zero.

Figura 5.4 – Diagrama de fase  $T$  por  $h$ , obtido por meio da condição  $h_{\text{eff}}(T_p) = 0$ , assumindo os parâmetros fixos  $J = 100$ ,  $J_z = 24$ ,  $J_0 = -24$ , e  $\gamma = 0.7$ .



Fonte: Autor (2018).

Tabela 5.1 – Temperatura pseudo-crítica para para vários valores de campo magnético, assumido os parâmetros fixos dados pela Figura 5.4. As duas primeira colunas correspondem a  $\gamma = 0.7$ , a terceira e a quarta a  $\gamma = 0.75$  e duas últimas a  $\gamma = 0.8$ .

$\gamma = 0.7$		$\gamma = 0.75$		$\gamma = 0.8$	
$h$	$T_p$	$h$	$T_p$	$h$	$T_p$
10	1.3552499	14	1.3552499	11	1.4753981
11	1.1270292	15.5	1.1270292	12.4	1.07033229
12	0.8150481	17	0.8150481	12.8	0.86683633
12.5	0.567641	18.5	0.567641	13	0.66742119
12.7	0.3726212	18.7	0.2671694	13.06	0.45524697
12.74	0.2694923	18.9	0.2057883	13.0639	0.2973970
<b>12.75</b>	<b>0.0</b>	<b>19.22</b>	<b>0.0</b>	<b>13.063945</b>	<b>0.0</b>
12.8	Sem $T_p$	20	Sem $T_p$	13.1	Sem $T_p$

Na Tabela 5.1 a temperatura pseudo-crítica é mostrada para diversos valores de campo magnético usando as condições dadas pela Equação (5.29). Foram considerados os valores fixos  $\gamma = \{0.7, 0.75, 0.8\}$  para o parâmetro de anisotropia nas componentes  $xy$ . Para  $\gamma = 0.7$  a temperatura de pseudo-transição ocorre na interface entre  $qFI$  e  $qMF_0$ , enquanto que para  $\gamma = 0.75$  ela ocorre na interface entre  $qFI$ ,  $qMF_0$  e  $qMF_2$ . De modo análogo, para  $\gamma = 0.8$  a temperatura pseudo-crítica ocorre na interface entre  $qMF_0$  e  $qMF_2$ . A penúltima linha em negrito corresponde ao campo crítico que ocorre apenas em  $T = 0$ , enquanto que a última linha de dados indica a inexistência de pseudo-transições para  $h > h_p$ .

Para a cadeia decorada em consideração, Equação (5.24), o campo efetivo muda de sinal em uma certa temperatura. Essa mudança de sinal do campo efetivo implica em uma reorientação simultânea dos spins-Ising, os quais continuam a flutuar com o aumento da temperatura.

#### 5.4 Correlação entre os Spins: Resultados e Discussões

Nessa seção será apresentado o estudo das funções de correlação para modelo em consideração. O procedimento algébrico desenvolvido nessa seção é discutido na referência (BELLUCI; OHANYAN, 2013). Esse procedimento basea-se em utilizar a técnica da matriz de transferência para calcular as funções de correlação entre os spins.

Nessa direção, partindo dos resultados obtidos na seção 5.2 tem-se a matriz de transferência  $\mathbf{W}$ , cujos elementos são construídos a partir da Equação (5.20), pode ser diagonalizada pela seguinte transformação

$$\begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix} = \mathbf{P}^{-1} \mathbf{W} \mathbf{P} = \Lambda, \quad (5.30)$$

da qual a matriz  $\mathbf{P}$ , formado pelos autovetores de  $\mathbf{W}$ , é dada por:

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi \\ \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix}, \quad (5.31)$$

sendo  $\phi = \frac{1}{2} \tan^{-1} \frac{2w_0}{w_1 - w_{-1}}$  e  $0 < \phi < \frac{\pi}{2}$ .

Abaixo são apresentadas duas identidades, as quais serão utilizadas. São elas:

$$\begin{aligned} \cos(2\phi) &= \frac{w_1 - w_{-1}}{\sqrt{(w_1 - w_{-1})^2 + 4w_0^2}} = \frac{w_1 - w_{-1}}{|w_1 - w_{-1}|} \frac{1}{\sqrt{1 + 4\bar{w}_0^2}}, \\ \sin(2\phi) &= \frac{2w_0}{\sqrt{(w_1 - w_{-1})^2 + 4w_0^2}} = \frac{2\bar{w}_0}{\sqrt{1 + 4\bar{w}_0^2}} > 0, \end{aligned} \quad (5.32)$$

onde  $\bar{w}_0 = \frac{w_0}{|w_1 - w_{-1}|}$ . A partir disso, utilizando a técnica da matriz de transferência, o valor esperado  $\langle \sigma \rangle$  é expresso da seguinte forma:

$$\langle \sigma \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \text{tr}(\sigma \mathbf{W}^N) = \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \text{tr}(\tilde{\sigma} \Lambda^N), \quad (5.33)$$

do qual  $\tilde{\sigma} = \mathbf{P}^{-1} \sigma \mathbf{P}$  é explicitamente dado por

$$\tilde{\sigma} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \cos(2\phi) & -\sin(2\phi) \\ -\sin(2\phi) & -\cos(2\phi) \end{pmatrix}. \quad (5.34)$$

Após algumas manipulações algébricas, chega-se em

$$\langle \sigma \rangle = \frac{1}{2} \frac{(\cos 2\phi) \lambda_+^N - (\sin 2\phi) \lambda_-^N}{\lambda_+^N + \lambda_-^N} = \frac{1}{2} \left( \frac{\cos 2\phi - u^N \sin 2\phi}{1 - u^N} \right), \quad (5.35)$$

em que  $u = \frac{\lambda_-}{\lambda_+}$ . No limite termodinâmico  $\langle \sigma \rangle$  reduz-se a

$$\langle \sigma \rangle = \frac{1}{2} \cos(2\phi) = \frac{1}{2} \frac{w_1 - w_{-1}}{|w_1 - w_{-1}|} \frac{1}{\sqrt{1 + 4\bar{w}_0^2}}. \quad (5.36)$$

Portanto, a magnetização dos spins Ising, definida como  $M_I = \langle \sigma \rangle$ , nas proximidades das pseudo-transições torna-se

$$M_I = \frac{1}{2} \frac{w_1 - w_{-1}}{|w_1 - w_{-1}|} [1 - 2\bar{w}_0^2 + \mathcal{O}(\bar{w}_0^4)], \quad (5.37)$$

na qual foi utilizada a expansão em série de Taylor na região  $\bar{w}_0 \rightarrow 0$ . Explicitamente a Equação (5.37) é expressa por

$$M_I = \begin{cases} \frac{1}{2} - \bar{w}_0^2 + \mathcal{O}(\bar{w}_0^4), & w_1 \geq w_{-1}, \\ -\frac{1}{2} + \bar{w}_0^2 + \mathcal{O}(\bar{w}_0^4), & w_1 < w_{-1}. \end{cases} \quad (5.38)$$

Em continuação, será construída a média térmica entre dois spin Ising separados por uma distância  $r$ , a qual é dada por:

$$\langle \sigma_j \sigma_{j+r} \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \text{tr} (\sigma \mathbf{W}^r \sigma \mathbf{W}^{N-r}) = \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \text{tr} (\tilde{\sigma} \Lambda^r \tilde{\sigma} \Lambda^{N-r}), \quad (5.39)$$

com  $r = \{0, 1, 2, \dots\}$ . Tomando o limite termodinâmico ( $N \rightarrow \infty$ ) essa equação reduz-se a

$$\langle \sigma_j \sigma_{j+r} \rangle = \frac{1}{4} [\cos^2(2\phi) + u^r \sin^2(2\phi)] = \langle \sigma \rangle^2 + \frac{1}{4} u^r \sin^2(2\phi) = \langle \sigma \rangle^2 + \left(\frac{w_0}{B}\right)^2 u^r, \quad (5.40)$$

onde  $B = \sqrt{(w_1 - w_{-1})^2 + 4w_0^2}$ . O caso em que  $r = 0$  corresponde à identidade trivial  $\langle \sigma^2 \rangle = \frac{1}{4}$ . Assim sendo, a média térmica do par de spins (5.40) nas proximidades das pseudo-transições

( $\bar{w}_0 \rightarrow 0$ ) é dada explicitamente por:

$$\langle \sigma_j \sigma_{j+r} \rangle = \begin{cases} \langle \sigma \rangle^2 + \bar{w}_0^2 \left( \frac{w_{-1}}{w_1} \right)^r + \mathcal{O}(\bar{w}_0^4), & w_1 > w_{-1}, \\ \langle \sigma \rangle^2 + \bar{w}_0^2 \left( \frac{w_1}{w_{-1}} \right)^r + \mathcal{O}(\bar{w}_0^4), & w_1 < w_{-1}. \end{cases} \quad (5.41)$$

Portanto, após construir (5.40), a função de correlação entre os spins Ising, dada por  $C_I = \langle \sigma_j \sigma_{j+r} \rangle - \langle \sigma \rangle^2$ , torna-se

$$C_I = \left( \frac{w_0}{B} \right)^2 u^r, \quad (5.42)$$

e próximo as pseudo-transições ( $\bar{w}_0 \rightarrow 0$ ) reduz-se a

$$C_I = \begin{cases} \bar{w}_0^2 \left( \frac{w_{-1}}{w_1} \right)^r + \mathcal{O}(\bar{w}_0^4), & w_1 > w_{-1}, \\ \bar{w}_0^2 \left( \frac{w_1}{w_{-1}} \right)^r + \mathcal{O}(\bar{w}_0^4), & w_1 < w_{-1}. \end{cases} \quad (5.43)$$

Na Figura 5.5(a) é mostrada a magnetização dos spins Ising em função da temperatura para  $r = 1$ . A magnetização  $M_I$  pode ser investigada por meio do campo efetivo  $h_{\text{eff}}$  (5.28), a partir do qual é possível estudar o comportamento dos spin Ising em relação a temperatura. Nesse sentido, no estado fundamental a condição  $w_1 < w_{-1}$  leva à magnetização  $M_I = -\frac{1}{2}$ . De modo similar, para  $w_1 > w_{-1}$  a magnetização no limite de baixas temperaturas tende a  $M_I \rightarrow \frac{1}{2}$ . Essa mudança na orientação dos spins ocorre quando  $w_1 = w_{-1}$ , onde  $h_{\text{eff}}(T_p) = 0$ . Para altas temperaturas a magnetização  $M_I$  decai com a temperatura, como esperado para o comportamento ordinário de modelos de spins.

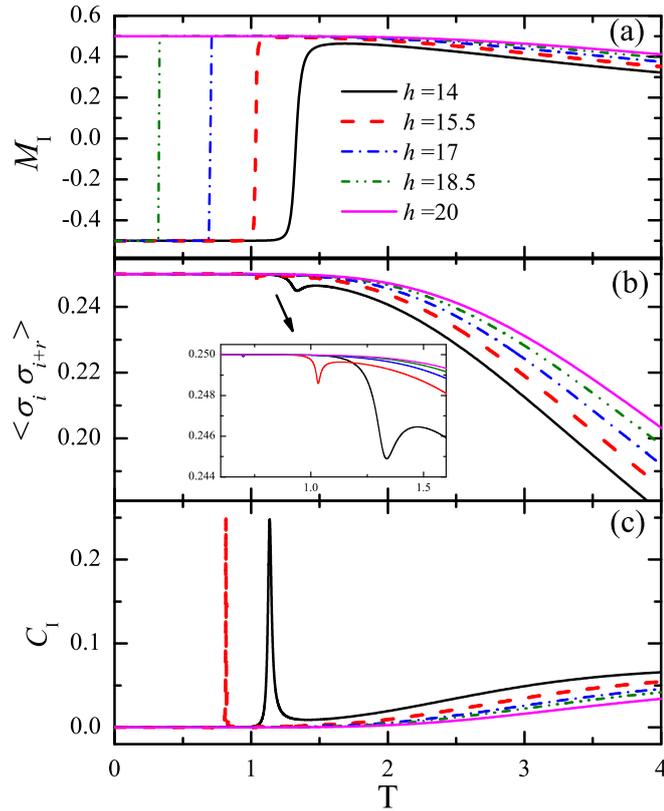
Na Figura 5.5(b) a média térmica  $\langle \sigma_j \sigma_{j+r} \rangle$  é ilustrada em função da temperatura. Na proximidade de  $T_p$  tem-se que a média tende a  $\langle \sigma_j \sigma_{j+r} \rangle \rightarrow \frac{1}{4}$  para ambas as condições  $w_1 > w_{-1}$  ou  $w_1 < w_{-1}$ . Em princípio, as curvas parecem decrescer monotonicamente, mas observando-as na proximidade das pseudo-transições elas são funções não monotônicas, como pode ser verificado na Equação (5.41).

Na Figura 5.5(c) as funções de correlação (5.42) são apresentadas em função da temperatura. Há nesse gráfico a presença de dois picos, nos quais o que ocorre na menor temperatura é mais fino e mais alto.

Note que, como discutido no Capítulo 3, o comportamento da magnetização, Figura 5.5(a), nas pseudo-transições poderia ser confundido com uma transição de fase de primeira ordem. Além disso, nas funções de correlação há a presença de picos, como pode ser visto na Fi-

gura 5.5(b), os quais estão relacionados ao aparecimento de uma ordem de longo alcance. Nesse sentido, mais adiante será investigado o comprimento de correlação nas pseudo-transições.

Figura 5.5 – (a) Magnetização dos spins Ising em função da temperatura para  $r = 1$ . (b) Média térmica  $\langle \sigma_i \sigma_{i+r} \rangle$  em função da temperatura, considerando  $r = 1$ . (c) Funções de correlação dos spins Ising em função da temperatura, assumindo  $r = 1$  e os parâmetros fixos  $J = 100$ ,  $J_z = 24$ ,  $J_0 = -24$ , e  $\gamma = 0.75$ .



Fonte: Autor (2018).

Para determinar a magnetização dos spins Heisenberg será primeiro tomado o traço parcial sobre esses spins. Nesse cálculo serão utilizados os autovalores (5.3) – (5.6) e autovetores (5.7) – (5.10) associados ao Hamiltoniano (5.1) da  $i$ -ésima célula unitária. Nessa direção, a seguir é apresentada a matriz  $\mathbf{Q}$ , formada pelos autovetores de  $H_i$ ,

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} -\sin \theta_\mu & 0 & 0 & \cos \theta_\mu \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \cos \theta_\mu & 0 & 0 & \sin \theta_\mu \end{pmatrix}, \quad (5.44)$$

lembrando que  $\theta_\mu$  já foi especificado quando os autoestados (5.7) – (5.10) foram definidos. A matriz  $\mathbf{Q}$ , por sua vez, está relacionada à transformação de similaridade que diagonaliza o

operador  $H_i$ , assim como qualquer função desse operador. Consequentemente tem-se que

$$\mathbf{D} = \mathbf{Q}^{-1} e^{-\beta H_i(\sigma, \sigma')} \mathbf{Q}, \quad (5.45)$$

em que a matriz  $\mathbf{D}$  é a representação do operador  $e^{-\beta H_i(\sigma, \sigma')}$  em termos dos autovalores (5.3) – (5.6), sendo

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} e^{-\beta \mathcal{E}_1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-\beta \mathcal{E}_2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\beta \mathcal{E}_3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-\beta \mathcal{E}_4} \end{pmatrix}. \quad (5.46)$$

Os operadores de spin  $S_a^\alpha$  e  $S_b^\alpha$  podem ser expressos por  $\mathbf{s}_a^\alpha = S^\alpha \otimes \mathbf{I}_b$  e  $\mathbf{s}_b^\alpha = \mathbf{I}_a \otimes S^\alpha$ , respectivamente, e por meio da transformação de similaridade tem-se  $\hat{\mathbf{s}}_a^\alpha = \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{s}_a^\alpha \mathbf{Q}$  e  $\hat{\mathbf{s}}_b^\alpha = \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{s}_b^\alpha \mathbf{Q}$ . A representação explícita dessas matrizes é dada no Apêndice A.

Por meio desses resultados, na sequência é calculado o traço parcial sobre os operadores de spin Heisenberg,

$$\begin{aligned} w_\mu^z &= \text{tr}(\hat{\mathbf{s}}_a^z \mathbf{D}) = \text{tr}(\hat{\mathbf{s}}_b^z \mathbf{D}) \\ &= e^{\beta \left( \frac{h\mu}{2} + \frac{J_z}{4} \right)} \cos(2\theta_\mu) \sinh(\beta \Delta_\mu) = \frac{h_z + \mu J_0}{\Delta_\mu} e^{\beta \left( \frac{h\mu}{2} + \frac{J_z}{4} \right)} \sinh(\beta \Delta_\mu). \end{aligned} \quad (5.47)$$

A notação  $w_\mu^z$  foi assim expressa devido a sua relação com  $w_\mu$ :

$$w_\mu^z = \frac{1}{2\beta} \frac{\partial w_\mu}{\partial h_z}. \quad (5.48)$$

Evidentemente, por meio da Equação (5.48) chega-se a expressão (5.47). Por conseguinte, a partir do resultado acima é possível construir a matriz  $\mathbf{W}_z$ , dada por

$$\mathbf{W}_z = \begin{pmatrix} w_1^z & w_0^z \\ w_0^z & w_{-1}^z \end{pmatrix}, \quad (5.49)$$

sendos os seus elementos dados por (5.47).

Assim, uma vez que não há distinção entre  $\langle S_a^z \rangle$  e  $\langle S_b^z \rangle$ , tem-se o seguinte valor esperado dos spins Heisenberg

$$\langle S_a^z \rangle = \langle S_b^z \rangle = \langle S^z \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \text{tr}(\mathbf{W}_z \mathbf{W}^{N-1}). \quad (5.50)$$

Usando a transformação de similaridade  $\widetilde{\mathbf{W}}_z = \mathbf{P}^{-1} \mathbf{W}_z \mathbf{P}$ , obtém-se

$$\widetilde{\mathbf{W}}_z = \begin{pmatrix} \tilde{w}_1^z & \tilde{w}_0^z \\ \tilde{w}_0^z & \tilde{w}_{-1}^z \end{pmatrix}, \quad (5.51)$$

em que os elementos de  $\widetilde{\mathbf{W}}_z$  são especificados por

$$\tilde{w}_1^z = w_1^z \cos^2 \phi + w_{-1}^z \sin^2 \phi + w_0^z \sin(2\phi), \quad (5.52)$$

$$\tilde{w}_0^z = w_0^z \cos(2\phi) - \frac{1}{2}(w_1^z - w_{-1}^z) \sin(2\phi), \quad (5.53)$$

$$\tilde{w}_{-1}^z = w_1^z \sin^2 \phi + w_{-1}^z \cos^2 \phi - w_0^z \sin(2\phi). \quad (5.54)$$

Nas pseudo-transições, as funções trigonométricas podem ser expandidas na região  $\bar{w}_0 \rightarrow 0$ , como apresentado nas Equações (99) e (100). Assim os elementos de  $\widetilde{\mathbf{W}}_z$  podem ser reescritos da seguinte forma

$$\tilde{w}_1^z = \frac{(w_1^z + w_{-1}^z)}{2} + \frac{(w_1^z - w_{-1}^z)(w_1 - w_{-1})}{2B} + \frac{2w_0^z w_0}{B}, \quad (5.55)$$

$$\tilde{w}_0^z = \frac{w_0^z(w_1 - w_{-1})}{B} - \frac{w_0(w_1^z - w_{-1}^z)}{B}, \quad (5.56)$$

$$\tilde{w}_{-1}^z = \frac{(w_1^z + w_{-1}^z)}{2} - \frac{(w_1^z - w_{-1}^z)(w_1 - w_{-1})}{2B} - \frac{2w_0^z w_0}{B}. \quad (5.57)$$

Portanto, a média térmica dos operadores de spin Heisenberg é dada por

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \text{tr} \left( \widetilde{\mathbf{W}}_z \Lambda^{N-1} \right) = \frac{1}{\lambda_+^N} (\tilde{w}_1^z \lambda_+^{N-1} + \tilde{w}_{-1}^z \lambda_-^{N-1}). \quad (5.58)$$

No limite termodinâmico a relação (5.58) resulta em

$$\langle S^z \rangle = \frac{\tilde{w}_1^z}{\lambda_+} = \frac{(w_1^z + w_{-1}^z)}{2\lambda_+} + \frac{(w_1^z - w_{-1}^z)(w_1 - w_{-1})}{2B\lambda_+} + \frac{2w_0^z w_0}{B\lambda_+}. \quad (5.59)$$

Vale a pena expressar a média  $\langle S^z \rangle$  em torno da temperatura pseudo-crítica, uma vez que esta análise condiz com o principal objetivo dessa discussão. Assim, após algumas manipulações algébricas, obtêm-se as seguintes expressões:

$$\langle S^z \rangle = \frac{\tilde{w}_1^z}{\lambda_+} = \frac{h_z + J_0}{\Delta_1 w_1} e^{\beta \left( \frac{h}{2} + \frac{J_z}{4} \right)} \sinh(\beta \Delta_1) + \frac{2h_z}{\Delta_0 w_1} e^{\frac{\beta J_z}{4}} \sinh(\beta \Delta_0) \bar{w}_0 + \mathcal{O}(\bar{w}_0^2), \quad (5.60)$$

para a condição  $w_1 > w_{-1}$  e

$$\langle S^z \rangle = \frac{\tilde{w}_1^z}{\lambda_+} = \frac{h_z - J_0}{\Delta_{-1} w_{-1}} e^{\beta \left( -\frac{h}{2} + \frac{J_z}{4} \right)} \sinh(\beta \Delta_{-1}) + \frac{2h_z}{\Delta_0 w_{-1}} e^{\frac{\beta J_z}{4}} \sinh(\beta \Delta_0) \bar{w}_0 + \mathcal{O}(\bar{w}_0^2), \quad (5.61)$$

para a condição  $w_{-1} > w_1$ . A magnetização dos spins Heisenberg é definida com  $M_H = \langle S^z \rangle$ . Utilizando o mesmo procedimento, verifica-se que as magnetizações ao longo dos eixos- $x$  e  $y$  são iguais a zero,

$$\langle S_a^x \rangle = \langle S_a^y \rangle = \langle S_b^x \rangle = \langle S_b^y \rangle = 0. \quad (5.62)$$

Antes de avaliar as funções de correlação entre células vizinhas, primeiramente será investigada a média térmica entre dois spins Heisenberg separados por uma distância  $r$ , a qual pode ser obtida por meio de

$$\langle S_j^z S_{j+r}^z \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \text{tr} \left( \widetilde{\mathbf{W}}_z \Lambda^{r-1} \widetilde{\mathbf{W}}_z \Lambda^{N-r-1} \right), \quad (5.63)$$

em que  $r = \{1, 2, 3, \dots\}$ . Após algumas manipulações algébricas, tomando o limite termodinâmico, chega-se em

$$\langle S_j^z S_{j+r}^z \rangle = \frac{(\tilde{w}_1^z)^2}{\lambda_+^2} + \frac{(\tilde{w}_0^z)^2}{\lambda_+ \lambda_-} u^r = \langle S^z \rangle^2 + \frac{(\tilde{w}_0^z)^2}{\lambda_+ \lambda_-} u^r. \quad (5.64)$$

Próximo a temperatura pseudo-crítica ( $\bar{w}_0 \rightarrow 0$ ), a expansão da média  $\langle S_j^z S_{j+r}^z \rangle$  até a primeira ordem de  $\bar{w}_0$  é dada por

$$\begin{aligned} \langle S_j^z S_{j+r}^z \rangle &= \langle S^z \rangle^2 + \frac{(w_0^z)^2}{w_1 w_{-1}} \left( 1 + 2 \frac{w_{-1}^z - w_1^z}{w_0^z} \bar{w}_0 \right) \left( \frac{w_{-1}}{w_1} \right)^r \\ &= \left( \frac{w_1^z}{w_1} \right)^2 \left( 1 + 4 \frac{w_0^z}{w_1^z} \bar{w}_0 \right) + \frac{(w_0^z)^2}{w_1 w_{-1}} \left( 1 + 2 \frac{w_{-1}^z - w_1^z}{w_0^z} \bar{w}_0 \right) \left( \frac{w_{-1}}{w_1} \right)^r \\ &= \left( \frac{w_1^z}{w_1} \right)^2 + \frac{(w_0^z)^2}{w_1 w_{-1}} \left( \frac{w_{-1}}{w_1} \right)^r + \frac{2w_0^z}{w_1} \left[ \frac{2w_1^z}{w_1} + \frac{w_{-1}^z - w_1^z}{w_{-1}} \left( \frac{w_{-1}}{w_1} \right)^r \right] \bar{w}_0, \end{aligned} \quad (5.65)$$

para a condição  $w_1 > w_{-1}$  e

$$\langle S_j^z S_{j+r}^z \rangle = \left( \frac{w_{-1}^z}{w_{-1}} \right)^2 + \frac{(w_0^z)^2}{w_1 w_{-1}} \left( \frac{w_1}{w_{-1}} \right)^r + \frac{2w_0^z}{w_{-1}} \left[ \frac{2w_{-1}^z}{w_{-1}} + \frac{w_1^z - w_{-1}^z}{w_1} \left( \frac{w_1}{w_{-1}} \right)^r \right] \bar{w}_0, \quad (5.66)$$

para a condição  $w_{-1} > w_1$ . Tomando os resultados de (5.64) e (5.59) a função de correlação  $C_H = \langle S_j^z S_{j+r}^z \rangle - \langle S^z \rangle^2$  torna-se

$$C_H = \frac{(\tilde{w}_0^z)^2}{\lambda_+ \lambda_-} u^r. \quad (5.67)$$

Nas proximidades da temperatura de pseudo-transição, a função de correlação  $C_H$  pode ser expressada por

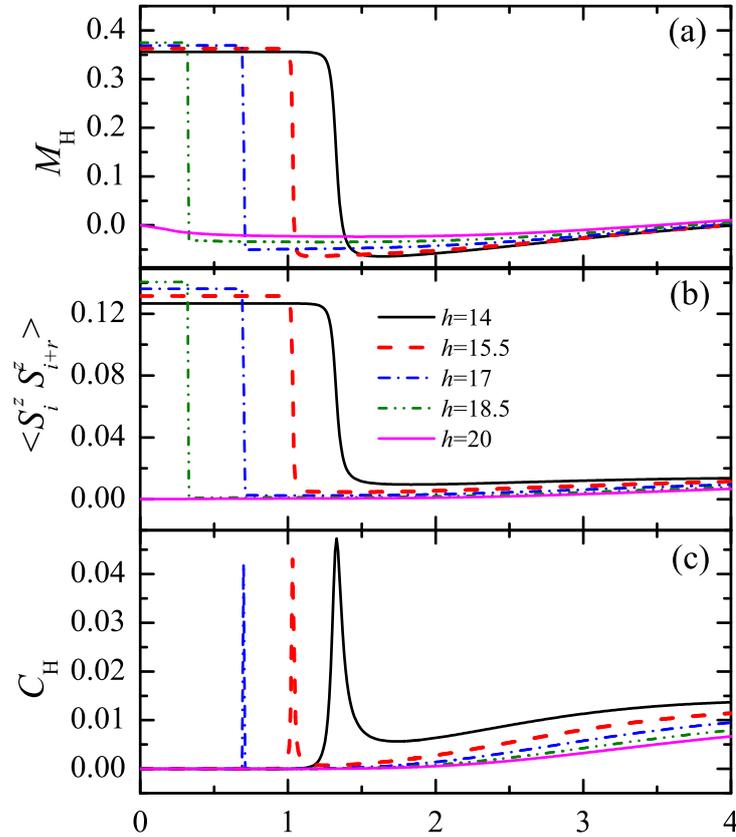
$$C_H = \begin{cases} \frac{(w_0^z)^2}{w_1 w_{-1}} \left(1 + 2 \frac{w_{-1}^z - w_1^z}{w_0^z} \bar{w}_0\right) \left(\frac{w_{-1}}{w_1}\right)^r, & w_1 > w_{-1}, \\ \frac{(w_0^z)^2}{w_1 w_{-1}} \left(1 - 2 \frac{w_{-1}^z - w_1^z}{w_0^z} \bar{w}_0\right) \left(\frac{w_1}{w_{-1}}\right)^r, & w_1 < w_{-1}. \end{cases} \quad (5.68)$$

Na Figura 5.6(a) apresentada a magnetização dos spins Heisenberg em função da temperatura, assumindo um conjunto de parâmetros fixos para  $r = 1$  e intervalos de  $h$  indicados na Figura 5.6(b). O comportamento da magnetização está em concordância com Equação (5.59), na qual nas proximidades das pseudo-transições divide-se em dois casos:  $w_1 > w_{-1}$  dado pela Equação (5.60) e  $w_{-1} > w_1$  dado pela Equação (5.61). Em  $T = 0$ , por sua vez, a magnetização desses spins está em consonância com o diagrama de fase do estado fundamental (ordem zero das expansões (5.60) e (5.61)).

Na Figura 5.6(b) a média térmica do par de spins Heisenberg  $\langle S_i^z S_{i+r}^z \rangle$  é plotado em função da temperatura. Abaixo de  $T_p$  os spins Heisenberg encontram-se praticamente ordenados e  $\langle S_i^z S_{i+r}^z \rangle \rightarrow M_H^2$ . Contudo, acima de  $T_p$  ou temperaturas relativamente altas tem-se  $\langle S_i^z S_{i+r}^z \rangle \rightarrow 0$  como consequência das flutuações térmicas.

Somente a componente- $z$  dos spins Heisenberg são correlacionadas à distância, e essa correlação se deve à presença do campo magnético apontado ao longo do eixo- $z$ . Nessa direção, a função de correlação dos spins Heisenberg  $C_H$  em relação a temperatura é ilustrada na Figura 5.6(c). Para temperaturas acima de  $T_p$  ou relativamente altas, as funções  $C_H$  decaem gradualmente quando  $T \rightarrow \infty$ , tal como esperado para o comportamento de uma cadeia tradicional de spins.

Figura 5.6 – (a) Magnetização dos spins Heisenberg em função da temperatura para  $r = 1$ . (b) Média térmica  $\langle S_j^z S_{j+r}^z \rangle$ , assumindo  $r = 1$ , em função da temperatura. (c) Funções de correlação para os spins Heisenberg, considerando  $r = 1$ , em função da temperatura. Todos esses gráficos foram plotados assumindo os seguintes parâmetros fixos  $J = 100$ ,  $J_z = 24$ ,  $J_0 = -24$ , e  $\gamma = 0.75$ .



Fonte: Autor (2018).

Note que o comportamento da magnetização dos spins Heisenberg, Figura 5.6 nas proximidades de  $T_p$  poderia ser confundido com uma transição de fase de primeira ordem ou contínua, como apresentado no Capítulo 4. Em  $T_p$ , embora ocorra uma mudança brusca na curva da magnetização, as funções são contínuas com uma tangente finita. Além disso, há a presença de picos nas funções de correlação  $C_H$ , os quais demonstram o aparecimento de uma ordem de longo alcance. Mais adiante, será investigado o alcance dessa ordem por meio do comprimento de correlação. Antes disso, primeiramente serão investigadas as quantidades que se referem a uma célula unitária.

Nessa direção, tomando o traço parcial sobre todos os pares de operadores de spins Heisenberg, chega-se em

$$v_{\mu}^x = \text{tr}(\hat{\mathbf{S}}_a^x \hat{\mathbf{S}}_b^x \mathbf{D}) = \frac{1}{2} e^{\frac{\beta \mu h}{2}} \left[ e^{-\frac{\beta J_z}{4}} \text{sh} \frac{\beta J}{2} - e^{\frac{\beta J_z}{4}} \text{sh}(\beta \Delta_{\mu}) \cos(2\theta_{\mu}) \right], \quad (5.69)$$

$$v_{\mu}^y = \text{tr}(\hat{\mathbf{S}}_a^y \hat{\mathbf{S}}_b^y \mathbf{D}) = \frac{1}{2} e^{\frac{\beta \mu h}{2}} \left[ e^{-\frac{\beta J_z}{4}} \text{sh} \frac{\beta J}{2} + e^{\frac{\beta J_z}{4}} \text{sh}(\beta \Delta_{\mu}) \cos(2\theta_{\mu}) \right], \quad (5.70)$$

$$v_{\mu}^z = \text{tr}(\hat{\mathbf{S}}_a^z \hat{\mathbf{S}}_b^z \mathbf{D}) = \frac{1}{2} e^{\frac{\beta \mu h}{2}} \left[ e^{\frac{\beta J_z}{4}} \text{ch}(\beta \Delta_{\mu}) - e^{-\frac{\beta J_z}{4}} \text{ch} \left( \frac{\beta J}{2} \right) \right]. \quad (5.71)$$

Portanto, a matriz correspondente pode ser escrita como

$$\mathbf{V}_{\alpha} = \begin{pmatrix} v_1^{\alpha} & v_0^{\alpha} \\ v_0^{\alpha} & v_{-1}^{\alpha} \end{pmatrix}, \quad (5.72)$$

do qual  $\alpha = \{x, y, z\}$ . Usando a transformação de similaridade dada por  $\tilde{\mathbf{V}}_{\alpha} = \mathbf{P}^{-1} \mathbf{V}_{\alpha} \mathbf{P}$ , tem-se

$$\tilde{\mathbf{V}}_{\alpha} = \begin{pmatrix} \tilde{v}_1^{\alpha} & \tilde{v}_0^{\alpha} \\ \tilde{v}_0^{\alpha} & \tilde{v}_{-1}^{\alpha} \end{pmatrix}, \quad (5.73)$$

no qual os elementos dessa matriz são

$$\tilde{v}_1^{\alpha} = v_1^{\alpha} \cos^2 \phi + v_{-1}^{\alpha} \sin^2 \phi + v_0^{\alpha} \sin(2\phi), \quad (5.74)$$

$$\tilde{v}_0^{\alpha} = v_0^{\alpha} \cos(2\phi) - \frac{1}{2} (v_1^{\alpha} - v_{-1}^{\alpha}) \sin(2\phi), \quad (5.75)$$

$$\tilde{v}_{-1}^{\alpha} = v_1^{\alpha} \sin^2 \phi + v_{-1}^{\alpha} \cos^2 \phi - v_0^{\alpha} \sin(2\phi). \quad (5.76)$$

Eliminando as funções trigonométricas usando das Equações (99) e (100), os elementos da matriz  $\tilde{\mathbf{V}}_{\alpha}$  pode ser reescritos como

$$\tilde{u}_1^{\alpha} = \frac{(u_1^{\alpha} + u_{-1}^{\alpha})}{2} + \frac{(u_1^{\alpha} - u_{-1}^{\alpha})(w_1 - w_{-1})}{2B} + \frac{2u_0^{\alpha} w_0}{B}, \quad (5.77)$$

$$\tilde{u}_0^{\alpha} = \frac{u_0^{\alpha}(w_1 - w_{-1})}{B} - \frac{w_0(u_1^{\alpha} - u_{-1}^{\alpha})}{B}, \quad (5.78)$$

$$\tilde{u}_{-1}^{\alpha} = \frac{(u_1^{\alpha} + u_{-1}^{\alpha})}{2} - \frac{(u_1^{\alpha} - u_{-1}^{\alpha})(w_1 - w_{-1})}{2B} - \frac{2u_0^{\alpha} w_0}{B}. \quad (5.79)$$

Consequentemente, a média térmica do par de spins Heisenberg na célula unitária será

$$\langle S_{a,j}^{\alpha} S_{b,j}^{\alpha} \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \text{tr} \left( \tilde{\mathbf{V}}_{\alpha} \Lambda^{N-1} \right) = \frac{1}{\mathcal{Z}_N} (\tilde{v}_1^{\alpha} \lambda_+^{N-1} + \tilde{v}_{-1}^{\alpha} \lambda_-^{N-1}). \quad (5.80)$$

Tomando o limite termodinâmico chega-se em

$$\langle S_{a,j}^\alpha S_{b,j}^\alpha \rangle = \frac{(v_1^\alpha + v_{-1}^\alpha)}{2\lambda_+} + \frac{(v_1^\alpha - v_{-1}^\alpha)(w_1 - w_{-1})}{2B\lambda_+} + \frac{2v_0^\alpha w_0}{B\lambda_+}. \quad (5.81)$$

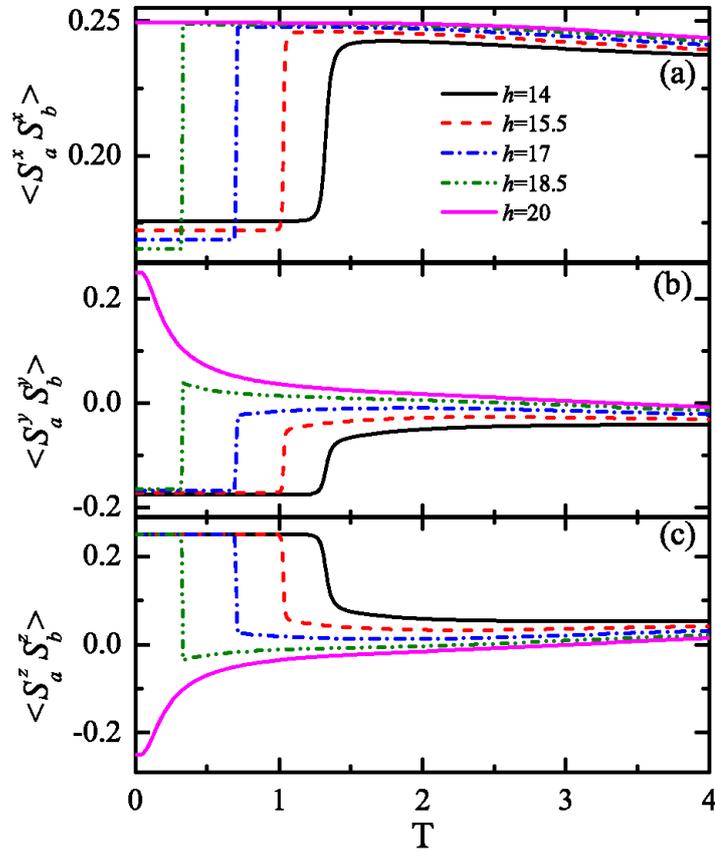
Além disso, as médias  $\langle S_a^x S_b^x \rangle$ ,  $\langle S_a^y S_b^y \rangle$  e  $\langle S_a^z S_b^z \rangle$ , satisfazem a seguinte identidade

$$\langle S_a^x S_b^x \rangle + \langle S_a^y S_b^y \rangle + \langle S_a^z S_b^z \rangle = \frac{1}{4} \quad (5.82)$$

para qualquer temperatura. Essa identidade é uma consequência da relação  $\langle (\mathbf{S}_a + \mathbf{S}_b)^2 \rangle = S(S+1) = 2$ , onde  $S = 1$  é o número quântico de spin da combinação de duas partículas de spin- $\frac{1}{2}$ .

Na Figura 5.7(a) a média térmica  $\langle S_a^x S_b^x \rangle$  do par de spins Heisenberg na célula unitária é apresentada em função da temperatura para os intervalos fixos de campo magnético e considerando o mesmo conjunto de parâmetros fixos da Figura 5.6. Para temperaturas  $T \gtrsim T_p$  a média  $\langle S_a^x S_b^x \rangle \rightarrow \frac{1}{4}$ . Na sequência, na Figura 5.7(b) é apresentando o comportamento da média  $\langle S_a^y S_b^y \rangle$  em relação a temperatura, na qual em  $T = T_p$  a função salta, tal como também ocorre em  $\langle S_a^x S_b^x \rangle$ . Essas variações são mais evidentes em temperaturas menores. Na Figura 5.7(c) a média  $\langle S_a^z S_b^z \rangle$  é ilustrada em função da temperatura. Para temperaturas menores que  $T_p$ , a média  $\langle S_a^z S_b^z \rangle \rightarrow \frac{1}{4}$ . Para os intervalos de campo magnético  $h > h_p$  não existem pseudo-transições e  $\langle S_a^z S_b^z \rangle \rightarrow -\frac{1}{4}$  quando  $T \rightarrow 0$ .

Figura 5.7 – Média térmica para o par de spins Heisenberg da célula unitária,  $r = 0$ , em função da temperatura. (a)  $\langle S_a^x S_b^x \rangle$ ; (b)  $\langle S_a^y S_b^y \rangle$ ; (c)  $\langle S_a^z S_b^z \rangle$ . Assumindo os parâmetros fixos  $J = 100$ ,  $J_z = 24$ ,  $J_0 = -24$ , e  $\gamma = 0.75$ .



Fonte: Autor (2018).

Além do mais, seja a média térmica da mistura de spins Ising e spins Heisenberg separados por uma distância  $r$ ,

$$\langle S_j^z \sigma_{j+r} \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \text{tr} \left( \widetilde{\mathbf{W}}_z \Lambda^{r-1} \tilde{\sigma} \Lambda^{N-r} \right), \quad (5.83)$$

considerando  $r = \{1, 2, 3, \dots\}$ . Após algumas manipulações algébricas similares aos casos anteriores, e tomando o limite termodinâmico, chega-se à seguinte expressão

$$\langle S_j^z \sigma_{j+r} \rangle = \frac{\tilde{w}_1^z}{2\lambda_+} \cos(2\phi) - \frac{\tilde{w}_0^z}{2\lambda_-} \sin(2\phi) u^r. \quad (5.84)$$

Escrevendo em termos  $\langle S^z \rangle$  e  $\langle \sigma \rangle$  e dos fatores de Boltzmann, tem-se

$$\langle S_j^z \sigma_{j+r} \rangle = \langle S^z \rangle \langle \sigma \rangle - \frac{\tilde{w}_0^z w_0}{B \lambda_-} u^r. \quad (5.85)$$

Em torno da temperatura pseudo-crítica, os resultados anteriores se reduzem a

$$\langle S_j^z \sigma_{j+r} \rangle = \frac{w_1^z}{2w_1} + \left[ \frac{w_0^z}{w_1} - \frac{w_0^z}{w_{-1}} \left( \frac{w_{-1}}{w_1} \right)^r \right] \bar{w}_0 + \mathcal{O}(\bar{w}_0^2) \quad (5.86)$$

para  $w_1 > w_{-1}$  e

$$\langle S_j^z \sigma_{j+r} \rangle = \frac{w_{-1}^z}{2w_{-1}} + \left[ \frac{w_0^z}{w_{-1}} - \frac{w_0^z}{w_1} \left( \frac{w_1}{w_{-1}} \right)^r \right] \bar{w}_0 + \mathcal{O}(\bar{w}_0^2) \quad (5.87)$$

para  $w_1 < w_{-1}$ . Tomando o resultado da Equação (5.85), a função de correlação  $C_{IH} = \langle S_j^z \sigma_{j+r} \rangle - \langle S^z \rangle \langle \sigma \rangle$  torna-se

$$C_{IH} = -\frac{\tilde{w}_0^z}{2\lambda_-} \sin(2\phi) u^r = -\frac{\tilde{w}_0^z w_0}{B \lambda_-} u^r, \quad (5.88)$$

a qual nas proximidades da temperatura pseudo-crítica ( $\bar{w}_0 \rightarrow 0$ ) pode ser reescrita como

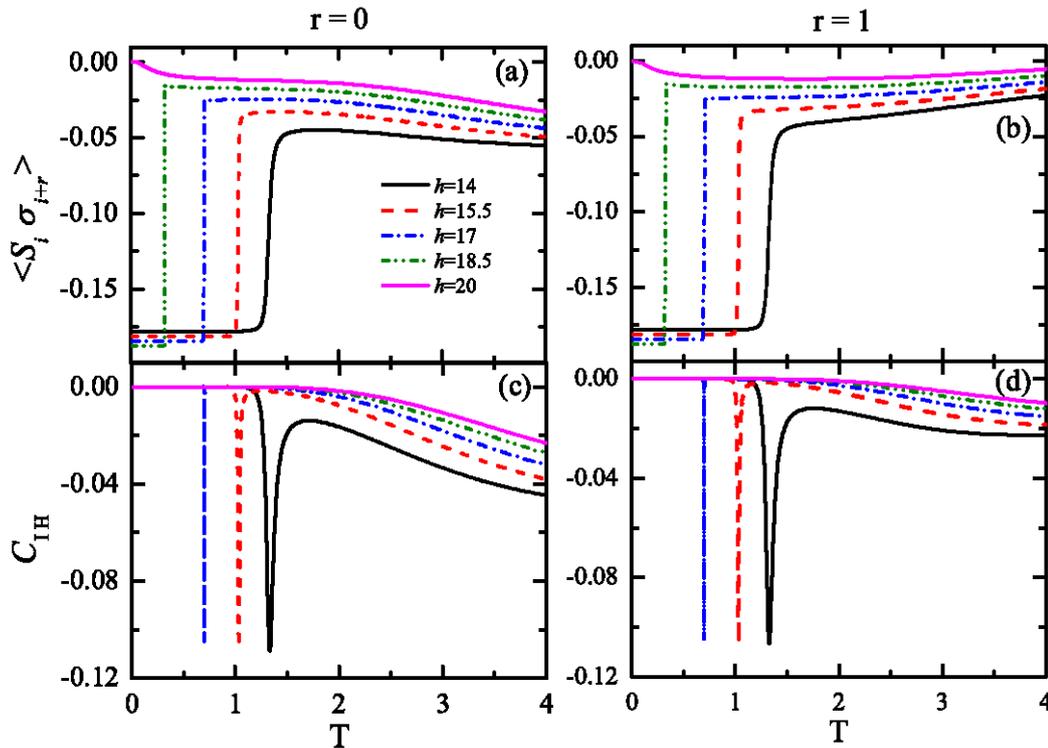
$$C_{IH} = \begin{cases} \frac{w_0^z}{w_{-1}} \left( \frac{w_{-1}}{w_1} \right)^r \bar{w}_0 + \mathcal{O}(\bar{w}_0^2), & w_1 > w_{-1}, \\ \frac{w_0^z}{w_1} \left( \frac{w_1}{w_{-1}} \right)^r \bar{w}_0 + \mathcal{O}(\bar{w}_0^2), & w_1 < w_{-1}. \end{cases} \quad (5.89)$$

Um cálculo algébrico similar para determinar as quantidades aqui investigadas é desenvolvido na referência (BELLUCI; OHANYAN, 2013). Neste trabalho, no entanto, essas quantidades foram investigadas nas proximidade da temperatura de pseudo-transição.

Na Figura 5.8 é mostrada a média térmica e as funções de correlação em relação a temperatura para os spins Ising-Heisenberg, assumindo o mesmo conjunto de parâmetros fixos e valores de  $h$  apresentados na Figura 5.6. No painel (a) é ilustrada a média do par de spins Ising-Heisenberg para o caso  $r = 0$ , os quais corresponde a célula unitária apresentada na Figura 5.1. Observa-se a presença de um salto nas proximidades da temperatura pseudo-crítica, a qual é mais evidente em baixas temperaturas. Na sequência, a mesma quantidade é plotada no painel (b), mas para o caso  $r = 1$ . No painel (c) é ilustrada a função de correlação em relação à temperatura para os spins Ising-Heisenberg da célula unitária ( $r = 0$ ), da qual observa-se que as curvas apresentam uma grande depressão em  $T_p$ . O mesmo comportamento é observado para o caso  $r = 1$ , como mostrado no painel (d). Assim sendo, todas as curvas estão inteiramente em

acordo com a média do par de spins Ising-Heisenberg de uma célula unitária (5.86) e (5.87), tal como as funções de correlação fornecidas por (5.89).

Figura 5.8 – (a) e (b) Média  $\langle S_i^z \sigma_{i+r} \rangle$  em função da temperatura. (c) e (d) Funções de correlação em relação a temperatura. Considerando os parâmetros fixos  $J = 100$ ,  $J_z = 24$ ,  $J_0 = -24$ , e  $\gamma = 0.75$ .

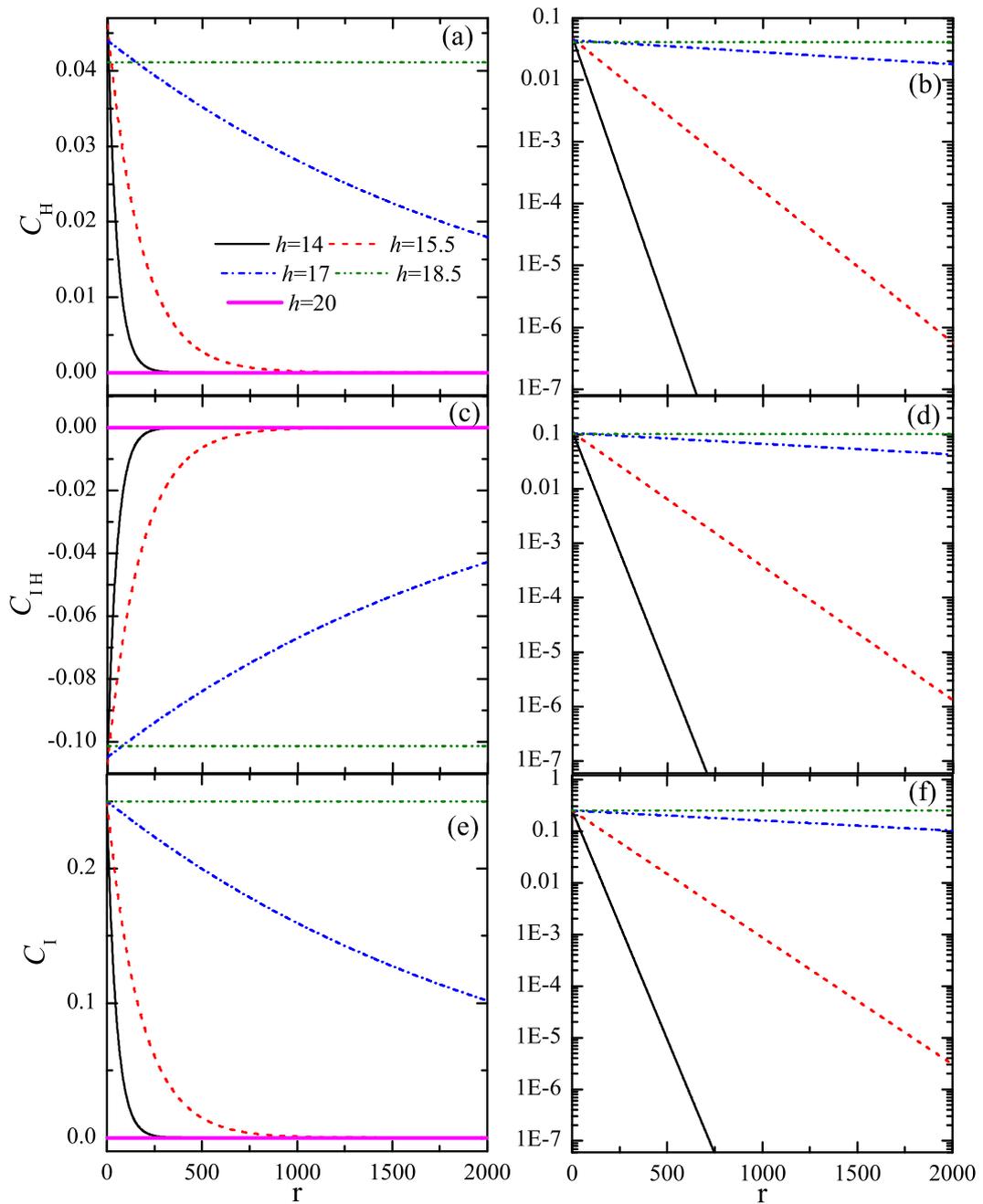


Fonte: Autor (2018).

Em seguida é discutida a dependência das funções de correlação em relação à distância  $r$  para os valores de campo magnético apresentados nas Figuras 5.9 e as correspondentes temperaturas pseudo-crítica, vista na Figura 5.4 e na Tabela 5.1. Observa-se, pelo painel (a), que a função de correlação entre os spins Heisenberg  $C_H$  decaem significativamente com a distância  $r$  para certos valores de campos magnéticos, mas quando  $h \rightarrow h_p$  ( $h < h_p$ ) esse decaimento é menos significativo, mostrando que existe uma forte correlação mesmo para spins em sítios distantes. Por exemplo, para o valor de campo magnético  $h = 18.5$  as funções de correlação são quase independentes da distância  $r$  até  $r \approx 2000$  (para mais detalhes veja a Tabela 5.2). Em escala logarítmica o mesmo gráfico é plotado no painel (b), o qual é dado por uma linha reta em declive  $\ln \frac{\lambda_-}{\lambda_+}$  que, por sua vez, é negativa devido  $\lambda_- < \lambda_+$ . Contudo, para  $h = 18.5$  esse declive é quase zero, enquanto que para valores menores de campo magnético, o módulo desse declive é grande. Gráficos basicamente similares são mostrados nas Figuras 5.9(c) e (d) para as funções de correlação em relação a distância  $r$  dos spins Ising e Heisenberg; essas funções  $C_{IH}$

são negativas. Por outro lado, as funções de correlação entre os pares de spin Ising  $C_I$  são positivas, como ilustrado na Figura 5.9(e) e (f), e apresentam o mesmo comportamento das funções de correlação dos pares de spin Heisenberg. Além do mais, em todos painéis é observado que as funções de correlação são iguais a zero quando  $h > h_p$ .

Figura 5.9 – Decaimento das funções de correlação em relação a  $r$ , assumindo os parâmetros fixos  $J = 100$ ,  $J_z = 24$ ,  $J_0 = -24$ , e  $\gamma = 0.75$ . (a) Para  $\langle S_i^z S_{i+r}^z \rangle - \langle S_i^z \rangle \langle S_i^z \rangle$  em função de  $r$ . (b) Assim como (a), mas em escala logarítmica. (c)  $\langle S_i^z \sigma_{i+r} \rangle - \langle S_i^z \rangle \langle \sigma_i \rangle$  em função de  $r$ . (d) Assim como (c), mas em escala logarítmica. (e)  $\langle \sigma_i \sigma_{i+1} \rangle - \langle \sigma_i \rangle^2$  em função de  $r$ . (f) Assim como (e), mas em escala logarítmica.



Fonte: Autor (2018).

Tabela 5.2 – Decaimento das funções de correlação com a distância  $r$ . Nessa Tabela é apresentado de modo percentual a razão de  $\frac{C(r)}{C(1)}$  na temperatura pseudo-crítica  $T_p$ . Os três tipos de funções de correlação  $C_I$ ,  $C_H$  e  $C_{IH}$  são denotados por  $C$ . Essas funções foram avaliadas considerando os parâmetros fixos de anisotropia- $xy$   $\gamma = \{0.7, 0.75, 0.8\}$ .

$\gamma = 0.7$			$\gamma = 0.75$			$\gamma = 0.8$		
$h$	$r$	$\frac{C(r)}{C(1)} [\%]$	$h$	$r$	$\frac{C(r)}{C(1)} [\%]$	$h$	$r$	$\frac{C(r)}{C(1)} [\%]$
10	20	50.15	14	30	55.35	11	20	52.90
	50	11.73		100	13.28		50	19.36
	100	2.75		200	1.73		100	3.62
11	50	53.35	15.5	100	57.11	12.4	100	47.52
	100	28.10		200	32.43		200	22.42
	300	2.16		500	5.94		400	4.99
12	500	53.05	17	1000	63.86	12.8	200	65.86
	1000	28.11		3000	26.02		500	35.09
	3000	2.21		8000	2.76		1000	12.29
12.5	$1 \times 10^4$	69.78	18.5	$1 \times 10^7$	55.05	13	2000	57.37
	$5 \times 10^4$	16.55		$2 \times 10^7$	30.30		4000	32.91
	$1 \times 10^5$	2.74		$7 \times 10^7$	1.53		$1 \times 10^4$	6.21

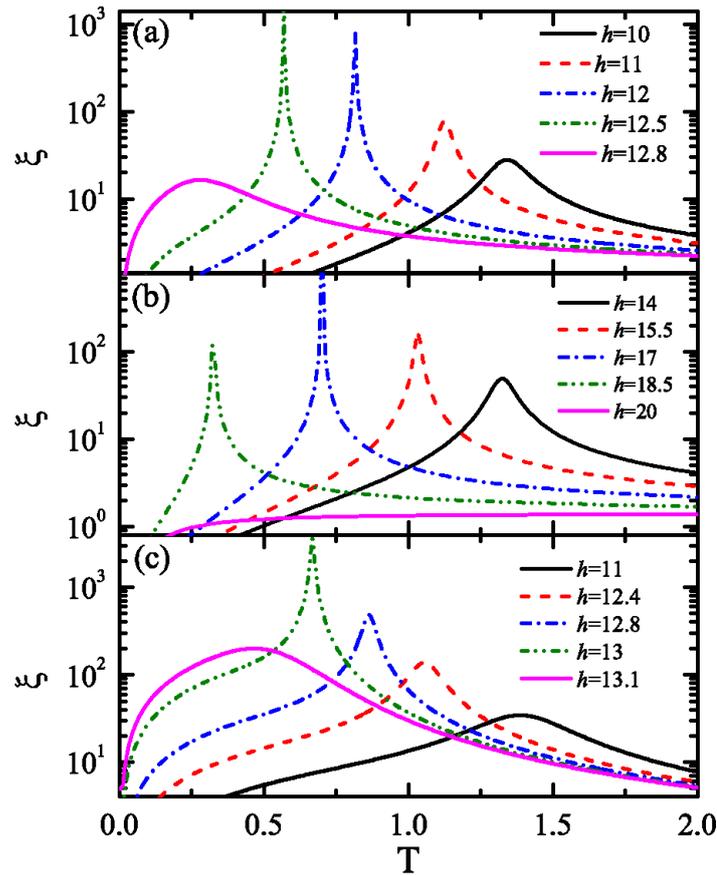
Na Tabela 5.2 a razão das funções de correlação é dada percentualmente por  $\frac{C_I(r)}{C_I(1)} = \frac{C_H(r)}{C_H(1)} = \frac{C(r)}{C(1)} = \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^{r-1}$  como função da distância  $r$  para vários valores de campo magnético, no intervalo ( $h < h_p$ ), e as correspondentes temperaturas pseudo-críticas  $T_p$ . Os dados dessa tabela mostram que as funções de correlação entre os spins crescem conforme o campo magnético é aumentado. Para  $\gamma = 0.75$  e  $h = 18.5$ , em especial, as funções de correlação decaem em 50%, comparado ao vizinho mais próximo, somente em  $r \approx 10^7$ . Certamente, esse resultado é completamente inesperado comparado ao comportamento tradicional de uma cadeia unidimensional de spins.

Gráficos adicionais de magnetização e funções de correlação para  $\gamma = 0.7$  e  $\gamma = 0.8$  são relatados no Apêndice B, dos quais apresentam um comportamento similar a  $\gamma = 0.75$ .

Além do mais, por conseguinte é investigado o comprimento de correlação  $\xi(T) = \left[\ln\left(\frac{\lambda_+}{\lambda_-}\right)\right]^{-1}$ , o qual caracteriza o decaimento exponencial das correlações com a distância. Na Figura 5.10(a) o comprimento de correlação  $\xi(T)$  é ilustrado assumindo  $\gamma = 0.7$  e o mesmo conjunto de parâmetros fixos considerados na Figura 5.2. Nesse gráfico é observado que as curvas apresentam picos na temperatura pseudo-crítica  $T_p$ . Note a semelhança do comportamento dessas curvas com o gráfico  $\xi(T)$  em uma transição contínua, como apresentado no Capítulo 3. Aqui, por outro lado, o comprimento de correlação se torna extremamente grande, mas permanece finito na temperatura  $T_p$ , apresentando picos mais significativos em temperaturas

menores. A mesma análise é feita nas Figuras 5.10(b) e (c), considerando  $\gamma = 0.75$  e  $\gamma = 0.8$ , respectivamente; esses gráficos apresentam um comportamento similar a  $\gamma = 0.7$ .

Figura 5.10 – Comprimento de correlação em função da temperatura, assumindo os parâmetros fixos dados na Fig. 5.2. (a)  $\gamma = 0.7$ ; (b)  $\gamma = 0.75$ ; (c)  $\gamma = 0.8$ .



Fonte: Autor (2018).

Em princípio, a energia interna poderia ser obtida usando a relação

$$U = \langle H \rangle = -\frac{\partial \lambda_+}{\partial \beta}. \quad (5.90)$$

De modo alternativo, a energia interna  $U$  pode ser determinada por meio das médias térmicas entre os spins da célula unitária, tal como

$$U = \langle H \rangle = -J(1 + \gamma) \langle S_a^x S_b^x \rangle - J(1 - \gamma) \langle S_a^y S_b^y \rangle - J_z \langle S_a^z S_b^z \rangle - 4J_0 \langle S^z \sigma \rangle - 2h_z \langle S^z \rangle - h \langle \sigma \rangle. \quad (5.91)$$

Utilizando os resultados anteriores (5.81), (5.85), (5.59) e (5.36), chega-se a um resultado equivalente ao obtido por (5.90).

## 5.5 Conclusões

Em síntese, neste trabalho foram examinadas as funções de correlação de uma cadeia de spin- $\frac{1}{2}$  Ising-XYZ de estrutura diamante no regime onde esse modelo apresenta as pseudo-transições e quase-fases (SOUZA; ROJAS, 2018). Essas pseudo-transições não são verdadeiras transições de fase em temperatura finita, mas apresentam mudanças repentinas na entropia, energia interna e magnetização, as quais são extremamente similares a uma transição de primeira ordem. Além disso, nas pseudo-transições, outras quantidades termodinâmicas, tais como o calor específico, susceptibilidade magnética, comprimento de correlação e as funções de correlação, surgem picos pontiagudos que também são bastante semelhantes a uma transição de fase de segunda ordem.

Uma forma alternativa de entender as quase-fases e identificar a temperatura pseudo-crítica é dada por meio do mapeamento da cadeia de spin- $\frac{1}{2}$  Ising-XYZ de estrutura diamante em um modelo linear de Ising efetivamente ferromagnético ( $J_{\text{eff}} > 0$ ) sob ação de um campo magnético efetivo  $h_{\text{eff}}$ . Tal procedimento é feito por meio da transformação de decoração iteração. O campo magnético efetivo igual a zero  $h_{\text{eff}}(T_p) = 0$  ocorre quando  $\bar{w}_0 \rightarrow 0$ , indicando a presença da chamada temperatura pseudo-crítica  $T_p$ . Ao passar por  $T_p$  há uma inversão simultânea na orientação de todos os spins Ising do sistema. Um requisito equivalente para as quase-fases e pseudo-transições foi discutido anteriormente na referência (SOUZA; ROJAS, 2018), onde foi considerada a condição  $w_1 = w_{-1}$  quando  $\bar{w}_0 \rightarrow 0$ .

Assim, a partir da análise do diagrama de quase-fase em baixa temperatura foi possível determinar a região de parâmetros nos quais as pseudo-transições podem ocorrer. Nessa direção, foram investigadas de maneira detalhada várias quantidades termodinâmicas no regime onde o sistema apresenta esse fenômeno. Especificamente, foram estudadas a magnetização dos spins Ising e Heisenberg, assim como as funções de correlação de um par de spins separados por uma distância arbitrária. Basicamente, no modelo investigado, há três tipos de funções de correlação: entre o par de spin Ising  $C_I$ , entre o par de spin Heisenberg  $C_H$  e entre o par de spin Ising e Heisenberg  $C_{IH}$ . As magnetizações dos spins Ising e dos spin Heisenberg apresentam uma mudança substancial próxima à temperatura pseudo-crítica. Além disso, as funções de correlação exibem picos proeminentes na mesma temperatura, os quais são confirmados por

resultados analíticos. Por outro lado, vale a pena mencionar que as funções de correlação em  $T_p$  mostram um grande comprimento de correlação. Como exemplo disso, para  $\gamma = 0.75$  e campo magnético  $h = 18.5$ , tomando o conjunto de parâmetros fixos considerados na Figura 5.2, tem-se que as funções de correlação são praticamente insensíveis com a distância  $r$  até  $r \sim 10^6$ , um resultado inusitado para o comportamento convencional de uma cadeia unidimensional de spins.

## REFERÊNCIAS

- BAXTER, R. J. **Exactly solved models in statistical mechanics**. [S.l.]: New York:Academic, 1982. 486 p.
- BELLUCCI, S.; OHANYAN, V.; ROJAS, O. Magnetization non-rational quasi-plateau and spatially modulated spin order in the model of the single-chain magnet, [(CuL)<sub>2</sub>DyMo(CN)<sub>8</sub>]<sub>2</sub>·2ch<sub>3</sub>cn·h<sub>2</sub>o. **EPL (Europhysics Letters)**, v. 105, n. 4, p. 47012, 2014.
- BELLUCI, S.; OHANYAN, V. Correlation functions in one-dimensional spin lattices with ising and heisenberg bonds. **Eur. Phys. J. B.**, n. 446, 2013.
- BLUNDELL, S. **Magnetism in Condensed Matter**. [S.l.]: New York: Oxford University, 2001. 238 p.
- BUSCHOW, K. H. J.; BOER, F. R. de. **Physics of Magnetism and Magnetic Materials**. 1. ed. [S.l.]: Kluwer Academic, Nova Iorque, 2003. 182 p.
- CARPENA, P. et al. Metal–insulator transition in chains with correlated disorder. **Nature**, v. 418, 2002. ISSN 0375-9601.
- CARVALHO, I. et al. Quantum entanglement in the neighborhood of pseudo-transition for a spin-1/2 ising-xyz diamond chain. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, v. 465, p. 323 – 327, 2018. ISSN 0304-8853.
- CHUI, S. T.; WEEKS, J. D. Pinning and roughening of one-dimensional models of interfaces and steps. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 23, p. 2438–2441, 1981.
- COEY, J. M. D. **Magnetism and Magnetic Materials**. [S.l.]: New York: Cambridge University Press, 2010. 604 p.
- CUESTA, J. A.; SÁNCHEZ, A. General non-existence theorem for phase transitions in one-dimensional systems with short range interactions, and physical examples of such transitions. **Journal of Statistical Physics**, v. 115, n. 3, p. 869–893, 2004.
- DAUXOIS, T.; PEYRARD, M. Entropy-driven transition in a one-dimensional system. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 51, p. 4027–4040, 1995.
- DYSON, F. J. Existence of a phase-transition in a one-dimensional ising ferromagnet. **Communications in Mathematical Physics**, v. 12, n. 2, p. 91–107, 1969.
- DYSON, F. J. Non-existence of spontaneous magnetization in a one-dimensional ising ferromagnet. **Communications in Mathematical Physics**, v. 12, n. 2, p. 212–215, 1969.
- FISHER, M. E. Transformations of ising models. **Phys. Rev.**, v. 113, 1959.
- GALISOVA, L.; STREČKA, J. Vigorous thermal excitations in a double-tetrahedral chain of localized ising spins and mobile electrons mimic a temperature-driven first-order phase transition. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 91, p. 022134, 2015.
- GALLAVOTTI, G.; MIRACLE-SOLE, S.; RUELLE, D. Absence of phase transitions in one-dimensional systems with hard cores. **Physics Letters A**, v. 26, n. 8, p. 350 – 351, 1968. ISSN 0375-9601.

- HEISENBERG, W. Zur theorie des ferromagnetismus. **Zeitschrift für Physik**, v. 49, n. 9, p. 619–636, 1928.
- HEUVEL, W. Van den; CHIBOTARU, L. F. Dysprosium-based experimental representatives of an ising-heisenberg chain and a decorated ising ring. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 82, p. 174436, 2010.
- HORIGUCHI, T. A spin-one ising model on a honeycomb lattice. **Physics Letters A**, v. 113, n. 8, p. 425 – 428, 1986. ISSN 0375-9601.
- HOVE, L. V. **Physica**, n. 16, p. 137, 1950.
- ISING, E. Z. phys.6. **Physical Review Letters**, n. 31, p. 253, 1925.
- ISING, T. et al. The fate of ernst ising and the fate of his model. **Journal of Physical Studies**, v. 21, p. 19, 2017. ISSN 3002.
- JAEGER, G. The ehrenfest classification of phase transitions: Introduction and evolution. **Archive for History of Exact Sciences**, v. 53, n. 1, p. 51–81, 1998. ISSN 1432-0657.
- KITTEL, C. Phase transition of a molecular zipper. **American Journal of Physics**, v. 37, n. 9, p. 917–920, 1969.
- KOLESÍK, M.; SAMAJ, L. Solvable cases of the general spin-one ising model on the honeycomb lattice. **International Journal of Modern Physics B**, v. 06, n. 09, p. 1529–1538, 1992.
- KRAMERSS, H. A.; WANNIER, G. H. **Phys. Rev.**, v. 60, 1941.
- LIFSHITZ, E. M. Lev davidovich landau (1908–1968). **Soviet Physics Uspekhi**, v. 12, n. 1, p. 135, 1969.
- MA, X. et al. Quasiphase transition in a single file of water molecules encapsulated in (6,5) carbon nanotubes observed by temperature-dependent photoluminescence spectroscopy. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 118, p. 027402, 2017.
- MEHRA, J. **The Solvay Conferences of Physics: aspects of the development of physics since 1911**. 1. ed. [S.l.]: Springer Netherlands, 1975. 416 p.
- MOHN, P. **Magnetism in the Solid State**. 2. ed. [S.l.]: Berlim, 2006. 229 p.
- NÉEL, L. Antiferromagnetism and ferrimagnetism. **Proceedings of the Physical Society. Section A**, v. 65, n. 11, p. 869, 1952.
- OLIVEIRA, I. S.; JESUS, V. L. B. **Introdução a Física do Estado Sólido**. [S.l.]: New York: Oxford University, 2001.
- ONSAGER, L. **Phys. Rev.**, v. 65, 1944.
- ROJAS, O.; STREČKA, J.; SOUZA, S. de. Thermal entanglement and sharp specific-heat peak in an exactly solved spin-1/2 ising-heisenberg ladder with alternating ising and heisenberg inter-leg couplings. **Solid State Communications**, v. 246, p. 68 – 75, 2016. ISSN 0038-1098.
- SALINAS, S. R. A. **Introdução à Física Estatística**. 3. ed. [S.l.]: São Paulo: EDUSP, 2013. 464 p.

SERVA, M.; FULCO, U. L.; ALBUQUERQUE, E. L. Exact solutions and infinite-order phase transitions for a general class of ising models on the regularized apollonian network. **Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment**, v. 2014, n. 1, p. P01010, 2014.

SOUZA, S. de; ROJAS, O. Quasi-phases and pseudo-transitions in one-dimensional models with nearest neighbor interactions. **Solid State Communications**, v. 269, p. 131 – 134, 2018. ISSN 0038-1098.

STREČKA, J. et al. Spin frustration of a spin-1/2 ising–heisenberg three-leg tube as an indispensable ground for thermal entanglement. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, v. 409, p. 124 – 133, 2016. ISSN 0304-8853.

TORRICO, J. et al. Zero temperature non-plateau magnetization and magnetocaloric effect in an ising-xyz diamond chain structure. **Physics Letters A**, v. 380, n. 43, p. 3655 – 3660, 2016. ISSN 0375-9601.

TORRICO, J. et al. Pairwise thermal entanglement in the ising-xyz diamond chain structure in an external magnetic field. **EPL (Europhysics Letters)**, v. 108, n. 5, p. 50007, 2014.

YEOMANS, J. M. **Statistical mechanics of phase transition**. [S.l.]: New York: University of Oxford, 1992. 164 p.

### APÊNDICE A – Matrizes dos Spin Heisenberg

Neste Apêndice são apresentados em detalhe os elementos de algumas matrizes importantes. Nessa direção, como primeiro passo, seja o caso do spin Heisenberg no sítio  $a$  da Figura 5.1:

$$\hat{\mathbf{S}}_a^z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -\cos(2\theta_\mu) & 0 & 0 & -\sin(2\theta_\mu) \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ -\sin(2\theta_\mu) & 0 & 0 & \cos(2\theta_\mu) \end{pmatrix}, \quad (92)$$

onde  $\tan(\frac{\theta_\mu}{2}) = \frac{J\gamma}{2J_0\mu+2\hbar}$  e  $0 < \theta_\mu < \pi$ . Da mesma forma, as outras componentes são dadas por

$$\hat{\mathbf{S}}_a^x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \cos \hat{\theta}_\mu & -\sin \hat{\theta}_\mu & 0 \\ \cos \hat{\theta}_\mu & 0 & 0 & \sin \hat{\theta}_\mu \\ -\sin \hat{\theta}_\mu & 0 & 0 & \cos \hat{\theta}_\mu \\ 0 & \sin \hat{\theta}_\mu & \cos \hat{\theta}_\mu & 0 \end{pmatrix}, \quad (93)$$

sendo  $\hat{\theta}_\mu$  definido convenientemente por  $\hat{\theta}_\mu = \theta_\mu + \frac{\pi}{4}$ , e

$$\hat{\mathbf{S}}_a^y = \frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sin \hat{\theta}_\mu & -\cos \hat{\theta}_\mu & 0 \\ -\sin \hat{\theta}_\mu & 0 & 0 & \cos \hat{\theta}_\mu \\ \cos \hat{\theta}_\mu & 0 & 0 & \sin \hat{\theta}_\mu \\ 0 & -\cos \hat{\theta}_\mu & -\sin \hat{\theta}_\mu & 0 \end{pmatrix}. \quad (94)$$

Em seguida, como segundo passo, é construído de maneira similar o spin Heisenberg no sítio  $b$  da Figura 5.1:

$$\hat{\mathbf{S}}_b^z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -\cos(2\theta_\mu) & 0 & 0 & -\sin(2\theta_\mu) \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -\sin(2\theta_\mu) & 0 & 0 & \cos(2\theta_\mu) \end{pmatrix}, \quad (95)$$

$$\hat{\mathbf{s}}_b^x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \cos \hat{\theta}_\mu & \sin \hat{\theta}_\mu & 0 \\ \cos \hat{\theta}_\mu & 0 & 0 & \sin \hat{\theta}_\mu \\ \sin \hat{\theta}_\mu & 0 & 0 & -\cos \hat{\theta}_\mu \\ 0 & \sin \hat{\theta}_\mu & -\cos \hat{\theta}_\mu & 0 \end{pmatrix}, \quad (96)$$

e

$$\hat{\mathbf{s}}_b^y = \frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sin \hat{\theta}_\mu & \cos \hat{\theta}_\mu & 0 \\ -\sin \hat{\theta}_\mu & 0 & 0 & \cos \hat{\theta}_\mu \\ -\cos \hat{\theta}_\mu & 0 & 0 & -\sin \hat{\theta}_\mu \\ 0 & -\cos \hat{\theta}_\mu & \sin \hat{\theta}_\mu & 0 \end{pmatrix}. \quad (97)$$

Portanto,  $\tilde{w}_1^z$  será explicitamente dado por

$$\begin{aligned} \tilde{w}_1^z &= \frac{h_z + J_0}{\Delta_1} e^{\beta \left( \frac{h}{2} + \frac{J_z}{4} \right)} \sinh(\beta \Delta_1) \cos^2 \phi + \frac{h_z - J_0}{\Delta_{-1}} e^{\beta \left( -\frac{h}{2} + \frac{J_z}{4} \right)} \sinh(\beta \Delta_{-1}) \sin^2 \phi + \\ &+ \frac{h_z}{\Delta_0} e^{\frac{\beta J_z}{4}} \sinh(\beta \Delta_0) \sin(2\phi). \end{aligned} \quad (98)$$

Utilizando a relação (5.32) e assumindo  $\bar{w}_0 \rightarrow 0$ , são encontradas as seguintes expansões até a ordem  $\bar{w}_0^2$ ,

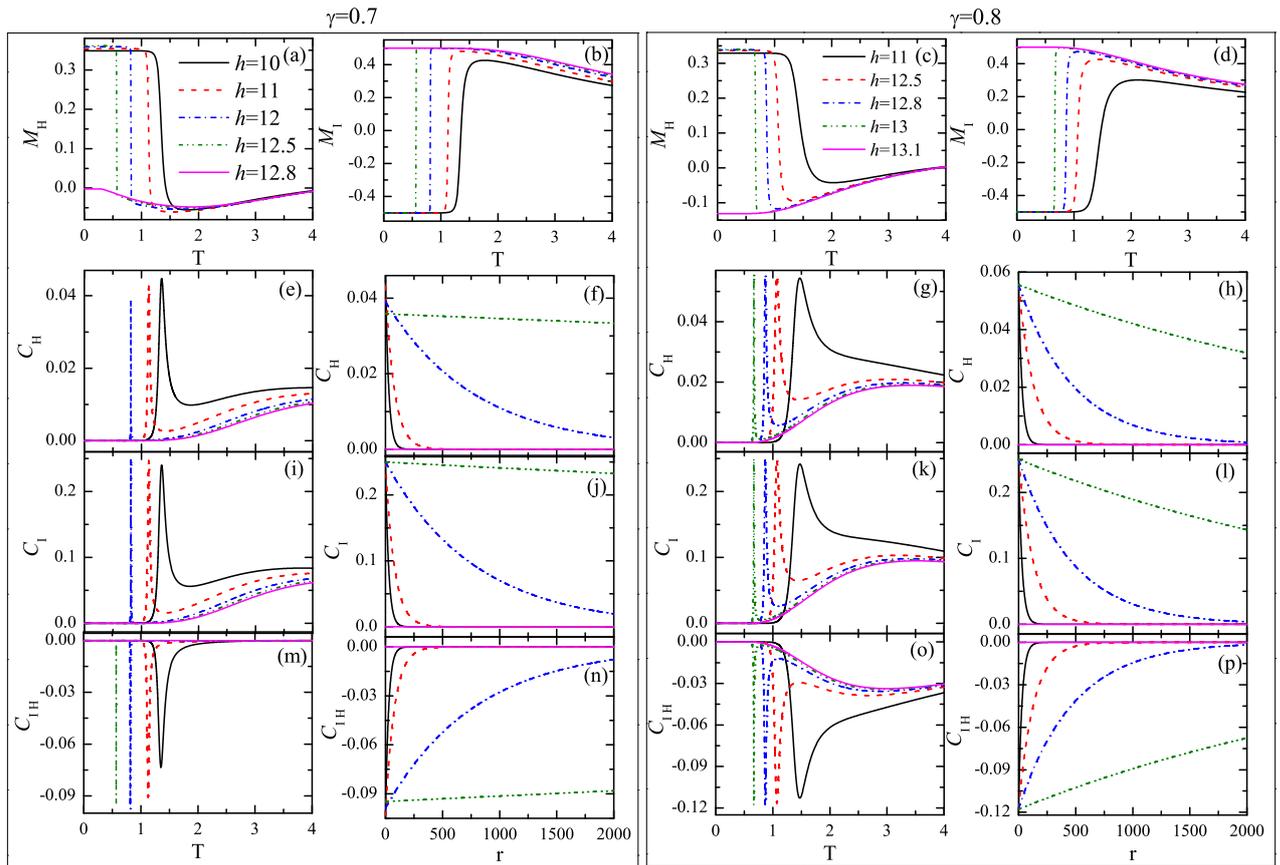
$$\cos^2 \phi = \frac{1}{2} \left[ 1 + \frac{w_1 - w_{-1}}{B} \right] = \frac{1}{2} \left[ 1 + \frac{w_1 - w_{-1}}{|w_1 - w_{-1}|} (1 - 2\bar{w}_0^2 + \mathcal{O}(\bar{w}_0^4)) \right], \quad (99)$$

$$\sin^2 \phi = \frac{1}{2} \left[ 1 - \frac{w_1 - w_{-1}}{B} \right] = \frac{1}{2} \left[ 1 - \frac{w_1 - w_{-1}}{|w_1 - w_{-1}|} (1 - 2\bar{w}_0^2 + \mathcal{O}(\bar{w}_0^4)) \right]. \quad (100)$$

## APÊNDICE B – Quantidades Adicionais de Correlação

Neste Apêndice são apresentados na Figura 11 os gráficos adicionais relacionados às magnetizações e às funções de correlação. Nesses gráficos são observados um comportamento similar ao discutido no texto principal. A única diferença que vale a pena mencionar é que as temperaturas pseudo-críticas ocorrem entre duas quase-fases: para  $\gamma = 0.7$  as pseudo-transições ocorrem entre  $qFI$  e  $qMF_0$ , enquanto que para  $\gamma = 0.8$  elas ocorrem entre  $qMF_0$  e  $qMF_2$ .

Figura 11 – A coluna à esquerda corresponde a  $\gamma = 0.7$  e ao conjunto de parâmetros fixos  $J = 100$ ,  $J_z = 24$ , e  $J_0 = -24$ . (a) Magnetização dos spins Ising em função da temperatura. (b) Magnetização dos spins Heisenberg em função da temperatura. (e), (f) Função de correlação dos spins Heisenberg. (i), (j) Função de correlação dos spins Ising. (m), (n) Função de correlação entre os spins Ising e Heisenberg. Similarmente, a coluna à direita corresponde a  $\gamma = 0.8$ , mantendo fixo o mesmo conjunto de parâmetros. (c), (d) Magnetizações em função da temperatura. (g), (h) Função de correlação dos spins Heisenberg. (k), (l) Função de correlação dos spins Ising. (o), (p) Função de correlação entre os spins Ising e Heisenberg.



Fonte: Autor (2018).