

Universidade Federal de Minas Gerais
Instituto de Ciências Exatas
Programa de Pós-Graduação em Física

DIEGO DA CUNHA CARVALHO

Estudo Analítico de Modelos tipo XY
Tridimensionais Puros e Diluídos Via Princípio
Variacional de Bogoliubov

Belo Horizonte - MG

2011

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Diego da Cunha Carvalho

Estudo Analítico de Modelos tipo XY Tridimensionais Puros e Diluídos
Via Princípio Variacional de Bogoliubov

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Minas Gerais, como parte dos requisitos para obtenção do título de **MESTRE EM FÍSICA**.

Orientador: Prof. Dr. João Antônio Plascak - UFMG

Co-orientador: Prof. Dr. Luizdarcy de Matos Castro - UESB

Belo Horizonte - MG

2011

Aos meus pais Hélio e Maria Lourdes
e à minha noiva Yana

Agradecimentos

Ao Prof. Plascak por todo apoio, dedicação e orientação.

Ao Prof. Luiz pelo incentivo, pela amizade e pelo aprendizado.

À minha noiva Yana que apesar de todas as dificuldades sempre me apoiou.

Aos meus pais, Júnior e Lourdes, que nunca mediram esforços para me proporcionar uma boa formação.

Ao meu avô Hélio pelo zelo e amizade.

Aos meus familiares que torcem pelo meu sucesso.

Resumo

Neste trabalho, estudamos analiticamente, por meio do Princípio Variacional de Bogoliubov (PVB), os modelos de Heisenberg puro e XY diluído em suas ligações, ambos, ferromagnéticos, clássicos (spins contínuos), anisotrópicos, tridimensionais e na presença de um campo cristalino. Além disso, mostramos a equivalência entre o PVB e a Aproximação Harmônica Auto-Consistente (AHAC) para o caso particular de um hamiltoniano tentativa harmônico. No modelo de Heisenberg anisotrópico, a magnetização e os diagramas de fase são obtidos como função dos parâmetros do Hamiltoniano. Casos limites, tais como: os modelos de Heisenberg isotrópico, XY e Rotor Planar, em duas e em três dimensões, são analisados e comparados com resultados prévios obtidos de aproximações analíticas bem como simulações de Monte Carlo. No modelo XY anisotrópico diluído, obtemos a concentração crítica para as ligações e a comparamos com o resultado exato bem como outros métodos aproximativos, além de analisarmos o Rotor Planar diluído como um caso limite. Ao mostrarmos a equivalência entre os PVB e a AHAC, chegamos ao sistema de equações acopladas para os parâmetros variacionais, que surgem do emprego do PVB, e ao sistema de equações acopladas para as constantes de acoplamento que aparecem ao aplicarmos a AHAC, e verificamos que tais procedimentos são idênticos.

Abstract

In this work, we have analytically studied, by means of the Bogoliubov Variational Principle (BVP), the pure Heisenberg and XY with bond dilution models, both ferromagnetic, classical (continuous spins), anisotropic, three-dimensional and in the presence of a crystalline field. Furthermore, we have shown the equivalence between the BVP and the Self-Consistent Harmonic Approximation (SCHA) a trial harmonic Hamiltonian. In the study of anisotropic Heisenberg model, the magnetization and phase diagrams are obtained as a function of parameters of the Hamiltonian. Limiting cases, such as the isotropic Heisenberg, XY and Planar Rotor models in two and three dimensions are analyzed and compared to previous results obtained from analytical approximations and Monte Carlo simulations. In the study of anisotropic XY model with bond dilution, we have obtained the critical concentration and compared with the exact result as well as from other approximation methods, besides reviewing the Planar Rotor diluted system as a limiting case. By showing the equivalence between the BVP and SCHA, we arrive at a system of coupled equations for the variational parameters, which arise by employing the BVP, and the system of coupled equations for the coupling constants that appear employing the SCHA, and we found that such systems are identical.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Organização do Trabalho	5
2	Princípio Variacional de Bogoliubov (PVB)	6
3	Equivalência entre o Princípio Variacional de Bogoliubov (PVB) e a Aproximação Harmônica Auto-Consistente (AHAC)	8
3.1	Tratamento Via PVB	8
3.2	Tratamento Via AHAC	15
4	Estudo Analítico do Modelo de Heisenberg Clássico Anisotrópico Tridimensional na Presença de um Campo Cristalino	17
4.1	O Modelo	17
4.2	Hipótese Simplificadora	21
5	Modelo XY Clássico Tridimensional Diluído Anisotrópico na Presença de um Campo Cristalino	30
5.1	Percolação	31
5.2	O Modelo	32
6	Análise Numérica do Modelo de Heisenberg Clássico Anisotrópico Tridimensional na Presença de um Campo Cristalino	41
6.1	A Anisotropia λ	41
6.2	O Parâmetro η	54
6.3	Hipótese Simplificadora <i>vs</i> Solução Numérica	59
7	Conclusão	63
7.1	Perspectivas	65
A		69

Apêndice	69
A.1 Valor médio da função cosseno com relação ao Hamiltoniano Harmônico . .	69
A.2 Diagonalização do Hamiltoniano Harmônico	70
A.3 Cálculo de integrais	72

Capítulo 1

Introdução

As transições de fase estão entre os fenômenos mais extraordinários vistos na natureza [1]. Elas envolvem súbitas mudanças em propriedades macroscópicas do sistema, tais como: descontinuidades ou singularidades nas funções termodinâmicas, refletindo as mudanças drásticas que ocorrem em nível microscópico. Os exemplos mais comuns de transições de fase incluem a transição gelo - água e água - vapor. Um exemplo menos familiar é a mudança de fase encontrada em sistemas magnéticos, a saber: a desmagnetização de um ímã ao ser aquecido acima de uma certa temperatura. Neste caso, temos uma transição ferromagnética - paramagnética. Outros exemplos notáveis são: a transição de um material normal a supercondutor e a transição do Hélio líquido para fase superflúida. Além disso, as transições de fase assumem papéis vitais em cosmologia, física de partículas, biologia e sociologia [1].

O estudo de transições de fase, também denominado fenômenos cooperativos [2], é realizado por meio da mecânica estatística, uma das teorias de maior sucesso da física. Devido à complexidade matemática de estudar fenômenos cooperativos, devem-se introduzir modelos em que os cálculos são reduzidos e simplificados, mas que se preserve a essência do fenômeno estudado. Por exemplo, no estudo de sistemas magnéticos levamos em conta apenas as interações entre os primeiros spins vizinhos numa rede e, ainda assim, conseguimos estudar satisfatoriamente os fenômenos críticos em tais sistemas. Enquanto as interações diminuírem rapidamente como função da separação, o comportamento crítico será o mesmo que a de um sistema com interações apenas entre primeiros vizinhos [3]. Apesar do uso de modelos reduzir a complexidade, não significa que os problemas passem a ser triviais, ao contrário, existem muitos modelos que não apresentam solução exata.

Um dos modelos de maior sucesso no estudo de sistemas magnéticos é o modelo de Heisenberg para spins interagentes. Tal modelo é empregado no estudo tanto de sistemas puros [4, 5, 6, 7] quanto diluídos [8, 9]. Embora tenha sido estudado e empregado

tanto classicamente [7, 10] quanto quanticamente [6, 5], esse modelo só apresenta solução analítica exata em sua versão quântica unidimensional tratada por Bethe para spin $-1/2$ [11] e em sua versão clássica unidimensional tratada por Fisher [12]. Com efeito, modelos tipo Heisenberg tem se mostrado bastante difíceis de serem resolvidos e, então, um número de modelos variantes mais simples tem sido propostos na literatura [13]. Pode-se citar os modelos XY e o Rotor Planar, no primeiro, apenas duas componentes do spin aparecem na expressão do hamiltoniano, enquanto no último, a terceira componente do spin é descartada. Este truncamento modifica profundamente a simetria do problema e, conseqüentemente, a natureza do fenômeno crítico. Entretanto, apenas o modelo XY em sua versão quântica unidimensional para spin $-1/2$ foi resolvida exatamente por Lieb, Schultz e Mattis [14], o que também evidencia a dificuldade de se tratar, analiticamente, modelos de spin interagentes.

Neste trabalho, estudaremos os modelos de Heisenberg e XY , ambos, anisotrópicos, tridimensionais, ferromagnéticos, clássicos (spins contínuos) e na presença de um campo cristalino. A fim de se tornar a exposição mais clara, vamos escrever o hamiltoniano que descreve o modelo de Heisenberg mais geral

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle \vec{r}, \vec{r}' \rangle} J_{\vec{r}, \vec{r}'} \{ S_{\vec{r}}^x S_{\vec{r}'}^x + S_{\vec{r}}^y S_{\vec{r}'}^y + \lambda S_{\vec{r}}^z S_{\vec{r}'}^z \} + D \sum_{\vec{r}} (S_{\vec{r}}^z)^2, \quad (1.1)$$

onde se soma sobre todos os primeiros vizinhos da rede, $J_{\vec{r}, \vec{r}'}$ é a interação de troca, λ é a anisotropia de spin e D é o campo cristalino. O spin clássico de módulo unitário $\|\vec{S}_{\vec{r}}\| = 1$ possui componentes $S_{\vec{r}}^\alpha$, onde $\alpha = x, y, z$. Ao modificarmos os valores de λ , D e $J_{\vec{r}, \vec{r}'}$, obtemos em alguns casos limites, modelos bidimensionais e tridimensionais conhecidos, por exemplo, modelos XY e Rotor Planar. Vamos tomar $D = 0$ e $0 \leq \lambda < 1$ em (1.1), assim o Hamiltoniano (1.1) reproduz um dos modelos abaixo

$$\left\{ \begin{array}{ll} i) & \lambda = 0 \quad \text{modelo } XY; \\ ii) & 0 < \lambda < 1 \quad \text{modelo de plano-fácil (Tipo } XY); \\ iii) & \lambda = 1 \quad \text{modelo de Heisenberg isotrópico.} \end{array} \right\} \quad (1.2)$$

A nomenclatura XY se refere a tendência dos spins se orientarem no plano XY em seu estado fundamental ($T = 0$) minimizando a energia. Logo, em $i)$ e $ii)$ os spins tendem a se orientar no plano XY no estado fundamental, isto é, o eixo- z é energeticamente difícil. Em $iii)$ temos o modelo de Heisenberg isotrópico e, portanto, as direções x, y e z são energeticamente equivalentes, ou seja, não há uma direção mais favorável.

Por outro lado, se tomarmos o limite em que $D \rightarrow \infty$ em (1.1), independentemente do valor da anisotropia λ , conseguimos o modelo Rotor Planar. Note que um campo cristalino infinito suprime a componente $S_{\vec{r}}^z$, forçando os spins a permanecerem no plano.

Todos modelos descritos acima apresentam transição de fase em temperatura finita, exceto o modelo de Heisenberg isotrópico bidimensional. De acordo com o Teorema de Mermin - Wagner [15], não é esperada ordem de longo alcance em modelos bidimensionais, em qualquer temperatura finita, para sistemas magnéticos que são isotrópicos no espaço de spin e estão sujeitos a interações de curto alcance. Além disso, apesar dos modelos XY e Rotor Planar, ambos bidimensionais, não apresentarem ordem de longo alcance em temperatura finita, ou seja, magnetização nula, tais modelos exibem uma transição de fase topológica, não convencional, conhecida como transição de Kosterlitz-Thouless [16]. Kosterlitz e Thouless [17, 18] propuseram um tipo diferente de transição de fases, na qual foi definida uma ordem de longo alcance topológica para certos sistemas bidimensionais, que é responsável por uma transição de fases topológica caracterizada por uma súbita mudança na resposta do sistema a perturbações externas. Acredita-se que tal transição topológica ocorra devido ao desligamento de pares vórtice-antivórtice quando ultrapassamos a temperatura crítica T_{KT} (temperatura de Kosterlitz-Thouless). Um vórtice (antivórtice) é uma excitação topológica na qual os spins em um caminho fechado ao redor do centro da excitação gira por 2π (-2π) no mesmo sentido. Diversos sistemas físicos apresentam essa transição, a saber: filmes de Hélio líquido, filmes de supercondutores e cristais líquidos de uma única camada. [16].

Com efeito, notamos que as anisotropias λ e D no hamiltoniano (1.1) assumem um papel importantíssimo no tipo de transição que é observada. A razão disso é que ao variarmos essas anisotropias, nós alteramos profundamente a simetria exibida pelo modelo e, por conseguinte, a sua classe de universalidade.

Sabe-se que na vizinhança de um ponto crítico diversas grandezas termodinâmicas, tais como: calor específico, compressibilidade e susceptibilidade magnética, apresentam comportamento singular, com divergências caracterizadas por expoentes críticos. Tais expoentes determinam a natureza qualitativa do comportamento crítico apresentado por um dado sistema. Então, pode-se indagar sobre o que influi na determinação de expoentes críticos de um dado sistema e, por conseguinte, quais características são importantes em determinar a natureza da transição de fase. Como é sabido, são poucos os fatores que interferem na determinação dos expoentes críticos, a saber: dimensionalidade da rede, dimensionalidade do espaço de spin e alcance das interações. Além disso, Jasnow et al [10] propuseram a seguinte hipótese no estudo dos expoentes críticos do modelo de Heisenberg clássico anisotrópico tridimensional: “os expoentes críticos estão relacionados um a um com o grupo de simetria do parâmetro de ordem no estado fundamental ($T = 0$, campo nulo).” Por exemplo, no hamiltoniano (1.1), fixando $\lambda = 1$ e $J_{\vec{r},\vec{r}'} = J$, ou seja, conside-

rando a interação de troca constante, podemos analisar a influência do campo cristalino D na determinação da classe de universalidade por meio das operações de simetria no estado fundamental, a saber:

$$i) D = 0 \longrightarrow O(3)$$

$$ii) D < 0 \Rightarrow S_{\vec{r}}^z \longrightarrow -S_{\vec{r}}^z$$

$$iii) D > 0 \longrightarrow O(2)$$

De *i*) vemos que o hamiltoniano (1.1) é invariante sob a ação do grupo de rotações no espaço de spin tridimensional, logo o vetor magnetização $\vec{m} = 1/N \sum_{\vec{r}} \vec{S}_{\vec{r}}$ pode estar em qualquer lugar na superfície de uma esfera tridimensional, refletindo a simetria tridimensional do parâmetro de ordem. Nesse limite recuperamos o modelo de Heisenberg isotrópico. Já para $D < 0$, em *ii*), o estado fundamental é aquele em que todos os spins estão alinhados ao longo do eixo z , minimizando a energia. A única transformação que deixa a energia do estado fundamental invariante é a operação de inversão $S_{\vec{r}}^z \longrightarrow -S_{\vec{r}}^z$. Portanto, devido a hipótese de Jasnow et al, tal sistema passa a pertencer a mesma classe de universalidade do modelo de Ising. Por outro lado, para $D > 0$ em *iii*), o estado fundamental é aquele em que os spins estão no plano xy , minimizando a energia. Então, rotações dos spins no plano xy devem deixar a energia do estado fundamental invariante. Logo, tal sistema pertence a mesma classe de universalidade do modelo XY .

Devido a esse pequeno número de fatores que influenciam os expoentes críticos, sistemas muito diferentes do ponto de vista microscópico podem apresentar o mesmo conjunto de expoentes críticos. Quando isso ocorre, é dito que tais sistemas pertencem à mesma classe de universalidade. Portanto, entender os estados críticos, num sistema pertencente a determinada classe de universalidade, leva-nos à compreensão de todos os demais sistemas dessa classe. Com efeito, o princípio de universalidade significa que devemos selecionar os modelos matemáticos mais simples possíveis, que consigam abranger uma classe universal de fenômenos [19]. Por exemplo, em [20] utilizou-se modelo de spin clássico planar para estudar superfluidade em filmes de Hélio líquido.

Estudaremos ao longo dos capítulos, analiticamente, por meio do Princípio Variacional de Bogoliubov (PVB), os modelos de Heisenberg puro e XY diluído em suas ligações, ambos, clássicos (spins contínuos), ferromagnéticos, anisotrópicos, tridimensionais e na presença de um campo cristalino. Além disso, mostraremos a equivalência entre o PVB e a Aproximação Harmônica Auto-consistente (AHAC) para um determinado tipo de hamiltoniano.

1.1 Organização do Trabalho

No capítulo 2, apresentamos o Princípio Variacional de Bogoliubov (PVB) e demonstramos a desigualdade de Bogoliubov, para o caso clássico, que será empregada ao longo de todo o trabalho.

No capítulo 3, mostramos a equivalência entre o PVB e a AHAC para o caso particular de um hamiltoniano tentativa harmônico.

No capítulo 4, estudamos, analiticamente, o modelo de Heisenberg clássico anisotrópico tridimensional na presença de um campo cristalino.

No capítulo 5, estudamos, analiticamente, o modelo XY diluído clássico anisotrópico tridimensional na presença de um campo cristalino.

No capítulo 6, realizamos um estudo numérico do modelo estudado analiticamente no capítulo 4.

Por fim, no capítulo 7, apresentamos as conclusões obtidas e perspectivas futuras.

Capítulo 2

Princípio Variacional de Bogoliubov (PVB)

O princípio variacional de Bogoliubov, também conhecido como desigualdade de Gibbs - Bogoliubov, é um método aproximativo empregado usualmente no contexto da mecânica estatística, tanto clássica [21] quanto quântica [6]. Contudo, essa desigualdade pode ser mostrada de maneira mais simples no caso clássico que iremos tratar agora. Aqui, seguimos o caminho traçado no artigo do Falk [22]. Sejam \mathcal{H} o hamiltoniano original cuja solução exata é desconhecida e $\mathcal{H}_0(\gamma)$ o hamiltoniano tentativa parametrizado por γ cuja solução exata é conhecida. A escolha desse hamiltoniano tentativa é arbitrária, porém, importantíssima para acurácia dos resultados obtidos. O método será tão eficaz quanto mais próximo do hamiltoniano original for o hamiltoniano tentativa escolhido. A partir do hamiltoniano tentativa, podemos determinar a função de partição exata para \mathcal{H}_0 , a saber:

$$Z_0 = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta\mathcal{H}_0}, \quad (2.1)$$

onde $\{\sigma\}$ rotula todos os microestados acessíveis ao sistema estudado e $\beta = \frac{1}{k_B T}$. Como a média térmica no ensemble canônico, de uma determinada variável τ , pode ser escrita como segue

$$\langle \tau \rangle_0 = \frac{1}{Z_0} \sum_{\{\sigma\}} \tau e^{-\beta\mathcal{H}_0}, \quad (2.2)$$

então

$$\langle e^{-\beta V} \rangle_0 = \frac{1}{Z_0} \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta(\mathcal{H}-\mathcal{H}_0)} \times e^{-\beta\mathcal{H}_0} = \frac{1}{Z_0} \overbrace{\sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta\mathcal{H}}}^Z = \frac{Z}{Z_0}, \quad (2.3)$$

onde definimos $V = \mathcal{H} - \mathcal{H}_0$. Obtemos assim,

$$Z = Z_0 \langle e^{-\beta V} \rangle_0. \quad (2.4)$$

Devido a convexidade da função e^x , podemos escrever a desigualdade abaixo:

$$e^x \geq 1 + x, \quad (2.5)$$

A partir da desigualdade acima, obtemos a seguinte expressão:

$$e^{-\beta V + \beta \langle V \rangle_0} \geq 1 - \beta V + \beta \langle V \rangle_0. \quad (2.6)$$

Realizando a média térmica com relação ao hamiltoniano tentativa \mathcal{H}_0 , em ambos os lados da Eq.(2.6), chegamos a inequação

$$e^{\beta \langle V \rangle_0} \langle e^{-\beta V} \rangle_0 \geq 1,$$

ou seja,

$$\langle e^{-\beta V} \rangle_0 \geq e^{-\beta \langle V \rangle_0}. \quad (2.7)$$

Fazendo o produto de Z_0 com ambos os membros da Eq.(2.7), obtemos

$$Z_0 \langle e^{-\beta V} \rangle_0 \geq Z_0 e^{-\beta \langle V \rangle_0}.$$

Usando a relação entre Z e Z_0 , Eq.(2.4), chegamos a

$$Z \geq Z_0 e^{-\beta \langle V \rangle_0}. \quad (2.8)$$

Tomando o logaritmo em ambos os membros da expressão anterior, Eq.(2.8), temos

$$\ln Z \geq \ln Z_0 - \beta \langle V \rangle_0, \quad (2.9)$$

e multiplicando ambos os lados por $-k_B T$

$$-k_B T \ln Z \leq \langle V \rangle_0 - k_B T \ln Z_0. \quad (2.10)$$

Como sabemos, a conexão com a termodinâmica no ensemble canônico é realizada por meio da energia livre de Helmholtz cuja definição operacional é

$$F = -k_B T \ln Z.$$

Assim, finalmente, conseguimos

$$F \leq F_0 - \langle \mathcal{H}_0 \rangle_0 + \langle \mathcal{H} \rangle_0 \equiv \Phi(\gamma), \quad (2.11)$$

conhecida como desigualdade de Bogoliubov. Essa inequação é também válida no caso quântico [22]. A implementação do método consiste, basicamente, em minimizar $\Phi(\gamma)$ com relação ao parâmetro γ e, a partir dele, obter as grandezas termodinâmicas de interesse. Esse processo será realizado nos próximos capítulos, quando aplicaremos tal método aos modelos de Heisenberg e XY tridimensionais.

Capítulo 3

Equivalência entre o Princípio Variacional de Bogoliubov (PVB) e a Aproximação Harmônica Auto-Consistente (AHAC)

Neste capítulo estamos interessados em mostrar a equivalência entre o PVB e a AHAC para o caso particular de um hamiltoniano tentativa harmônico aplicado ao modelo XY tridimensional anisotrópico na presença de um campo cristalino. A motivação para este estudo se deve a importância dos dois métodos aproximativos na resolução de modelos estatísticos de sistemas magnéticos e a sua vasta aplicação na literatura [23, 7, 24, 21, 6]. Em [25] o modelo XY tridimensional isotrópico na presença de um campo cristalino foi atacado com ambos os métodos, AHAC e PVB, por meio de um hamiltoniano tentativa harmônico. Contudo, apesar dos autores tratá-los como métodos distintos, podemos mostrar que, na verdade, os métodos são equivalentes nesse caso particular. Pois, o uso de uma hipótese simplificadora não razoável fisicamente (a ser discutida no fim do capítulo), no tratamento via PVB, disfarçou a equivalência supracitada. Mas, como será mostrado a seguir, podemos obter os parâmetros variacionais para o modelo sem o uso de tal hipótese e, assim, evidenciar essa equivalência.

3.1 Tratamento Via PVB

Para tanto, inicialmente, vamos escrever o hamiltoniano que descreve o modelo estudado:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle \vec{r}, \vec{r}' \rangle} \{S_{\vec{r}}^x S_{\vec{r}'}^x + S_{\vec{r}}^y S_{\vec{r}'}^y\} - J_z \sum_{\langle \vec{r}, \vec{r}' \rangle} \{S_{\vec{r}}^x S_{\vec{r}'}^x + S_{\vec{r}}^y S_{\vec{r}'}^y\} + D \sum_{\vec{r}} (S_{\vec{r}}^z)^2, \quad (3.1)$$

onde J é a interação de troca entre spins em camadas paralelas ao plano xy e J_z é a interação de troca entre spins em diferentes camadas adjacentes. D é o campo cristalino

e $S_{\vec{r}}^i$ são as componentes $i = x, y, z$ de um spin clássico de módulo unitário $\|\vec{S}_{\vec{r}}\| = 1$. A primeira soma é realizada sobre os spins vizinhos mais próximos nas camadas e a segunda soma é sobre os spins vizinhos mais próximos entre as camadas. A última soma é realizada sobre todos os spins. Por questão de conveniência, vamos escrever o hamiltoniano (3.1) numa representação polar para os spins [7]:

$$\begin{aligned}\vec{S}_{\vec{r}} &= (S_{\vec{r}}^x, S_{\vec{r}}^y, S_{\vec{r}}^z) = (\sin \theta_{\vec{r}} \cos \phi_{\vec{r}}, \sin \theta_{\vec{r}} \sin \phi_{\vec{r}}, S_{\vec{r}}^z), \\ S_{\vec{r}}^z &= \cos \theta_{\vec{r}}, \\ \vec{S}_{\vec{r}} &= (\sqrt{1 - (S_{\vec{r}}^z)^2} \cos \phi_{\vec{r}}, \sqrt{1 - (S_{\vec{r}}^z)^2} \sin \phi_{\vec{r}}, S_{\vec{r}}^z),\end{aligned}\quad (3.2)$$

onde $\theta_{\vec{r}}$ e $\phi_{\vec{r}}$ são os ângulos esféricos do spin no sítio \vec{r} . Nesta representação o hamiltoniano (3.1) toma a seguinte forma:

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= -\frac{J}{2} \sum_{\vec{r}, \vec{a}} \sqrt{1 - (S_{\vec{r}}^z)^2} \sqrt{1 - (S_{\vec{r}+\vec{a}}^z)^2} \cos(\phi_{\vec{r}+\vec{a}} - \phi_{\vec{r}}) \\ &\quad - \frac{J_z}{2} \sum_{\vec{r}, \vec{c}} \sqrt{1 - (S_{\vec{r}}^z)^2} \sqrt{1 - (S_{\vec{r}+\vec{c}}^z)^2} \cos(\phi_{\vec{r}+\vec{c}} - \phi_{\vec{r}}) \\ &\quad + D \sum_{\vec{r}} (S_{\vec{r}}^z)^2,\end{aligned}\quad (3.3)$$

onde \vec{a} rotula os quatro primeiros vizinhos do sítio \vec{r} no plano xy e \vec{c} os dois primeiros vizinhos mais próximos do sítio \vec{r} ao longo da direção z . Com o intuito de aplicarmos o PVB, devemos escolher, inicialmente, um hamiltoniano tentativa \mathcal{H}_0 cuja solução exata é conhecida. Optamos por um hamiltoniano que é composto por uma parte planar \mathcal{H}_0^ϕ e uma outra axial \mathcal{H}_0^z , a saber

$$\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_0^\phi + \mathcal{H}_0^z, \quad (3.4)$$

onde \mathcal{H}_0^ϕ é dado por

$$\mathcal{H}_0^\phi = \frac{\gamma}{4} \sum_{\vec{r}, \vec{a}} (\phi_{\vec{r}+\vec{a}} - \phi_{\vec{r}})^2 + \frac{\gamma_z}{4} \sum_{\vec{r}, \vec{c}} (\phi_{\vec{r}+\vec{c}} - \phi_{\vec{r}})^2 \quad (3.5)$$

e \mathcal{H}_0^z por

$$\mathcal{H}_0^z = (D + 2J + J_z) \sum_{\vec{r}} (S_{\vec{r}}^z)^2, \quad (3.6)$$

onde γ e γ_z representam os parâmetros variacionais. A escolha de \mathcal{H}_0 é motivada pelo fato de que em baixas temperaturas as diferenças angulares $|\phi_{\vec{r}+\vec{a}} - \phi_{\vec{r}}| \ll 1$ e $|\phi_{\vec{r}+\vec{c}} - \phi_{\vec{r}}| \ll 1$, então os cossenos em Eq.(3.3) podem ser expandidos em série de Taylor até termos quadráticos para fornecer $(\phi_{\vec{r}+\vec{a}} - \phi_{\vec{r}})^2$ e $(\phi_{\vec{r}+\vec{c}} - \phi_{\vec{r}})^2$ em \mathcal{H}_0^ϕ , já que o termo constante

oriundo da expansão não contribui para as médias térmicas e, por isso, será desprezado. Com essa hipótese de baixas temperaturas, podemos assumir $S_{\vec{r}}^z \approx S_{\vec{r}+\vec{a}}^z$ e $S_{\vec{r}}^z \approx S_{\vec{r}+\vec{c}}^z$, assim as raízes quadradas em (3.3) são eliminadas e obtemos $D + 2J + J_z$ no termo axial \mathcal{H}_0^z . Portanto, numa visão semi-clássica, espera-se que esse hamiltoniano tentativa forneça resultados acurados no domínio de baixas temperaturas.

A fim de aplicarmos o princípio variacional, obteremos os termos que surgem na desigualdade de Bogoliubov (ver capítulo 2). Para tanto, necessitaremos tratar previamente o Hamiltoniano. O primeiro passo é diagonalizar o hamiltoniano \mathcal{H}_0^ϕ por meio do uso da transformada de Fourier discreta, ou seja, vamos sair da rede de Bravais para a rede recíproca onde o problema é solúvel. A expressão para transformada de Fourier de $\phi_{\vec{r}}$ é dada por

$$\phi_{\vec{r}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \phi_{\vec{q}}, \quad (3.7)$$

com a transformada inversa $\phi_{\vec{q}}$ dada por

$$\phi_{\vec{q}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{r}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \phi_{\vec{r}}. \quad (3.8)$$

Aplicando a transformada (3.7) em (3.5) conseguimos

$$\mathcal{H}_0^\phi = \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}} \left\{ \gamma \sum_{\vec{a}} (1 - e^{-i\vec{q}\cdot\vec{a}}) \phi_{\vec{q}} \phi_{-\vec{q}} + \gamma_z \sum_{\vec{c}} (1 - e^{-i\vec{q}\cdot\vec{c}}) \phi_{\vec{q}} \phi_{-\vec{q}} \right\}. \quad (3.9)$$

Os cálculos realizados na obtenção da expressão acima estão disponíveis no Apêndice A.2. Voltando à expressão anterior, somando sobre \vec{a} no plano xy e sobre \vec{c} ao longo do eixo z , obtemos a forma diagonal para o hamiltoniano tentativa planar

$$\mathcal{H}_0^\phi = \sum_{\vec{q}} (\gamma_q + \gamma_{qz}) |\phi_{\vec{q}}|^2, \quad (3.10)$$

onde $\gamma_q = \gamma(2 - \cos q_x a - \cos q_y a)$, $\gamma_{qz} = \gamma_z(1 - \cos q_z c)$, $a = |\vec{a}|$, $c = |\vec{c}|$ e $|\phi_{\vec{q}}|^2 = \phi_{\vec{q}} \phi_{-\vec{q}}$.

Apesar da parte axial do hamiltoniano (3.6) já estar diagonalizada, vamos escrevê-la também em termos de \vec{q} , por meio do uso da transformada de Fourier da componente de spin $S_{\vec{r}}^z$

$$S_{\vec{r}}^z = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} S_{\vec{q}}^z, \quad (3.11)$$

cuja transformada inversa é dada por

$$S_{\vec{q}}^z = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{r}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} S_{\vec{r}}^z. \quad (3.12)$$

Aplicando (3.11) em (3.6), chegamos a

$$\mathcal{H}_o^z = (D + 2J + J_z) \sum_{\vec{q}} |S_{\vec{q}}^z|^2, \quad (3.13)$$

na qual $|S_{\vec{q}}^z|^2 = S_{\vec{q}}^z S_{-\vec{q}}^z$.

Com o hamiltoniano \mathcal{H}_0 diagonalizado, podemos calcular a função de partição \mathcal{Z}_0 . Notando que \mathcal{H}_0^ϕ e \mathcal{H}_0^z são independentes, logo

$$\mathcal{Z}_0 = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta\mathcal{H}_0} = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta(\mathcal{H}_0^\phi + \mathcal{H}_0^z)} = \mathcal{Z}_0^\phi \mathcal{Z}_0^z. \quad (3.14)$$

O cálculo da função de partição \mathcal{Z}_0 resulta numa integração sobre $d\phi_{\vec{q}}$, já que ϕ é uma variável contínua. A restrição sobre ϕ , ou seja, $-\pi \leq \phi \leq \pi$, é inconveniente na realização dos cálculos. Por isso, vamos relaxar essa condição e permitir que ϕ varie entre $-\infty$ a ∞ . A justificativa para esse procedimento é que na região de baixas temperaturas aqui considerada, \mathcal{Z}_0^ϕ só terá valor apreciável entre $-\pi$ e π , pois além desses limites a exponencial cai suficientemente rápido. Portanto, podemos considerar o intervalo de integração como sendo de $-\infty$ a ∞ . Logo, a integração pode ser realizada em forma fechada para obtermos

$$\mathcal{Z}_0^\phi = \prod_{\vec{q}} \left[\frac{\pi}{\beta(\gamma_q + \gamma_{qz})} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.15)$$

e

$$\mathcal{Z}_0^z = \prod_{\vec{q}} \left[\frac{\pi}{\beta\Omega} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (3.16)$$

onde $\Omega = D + 2J + J_z$. A partir da definição da energia livre de Helmholtz estatística (2.10), utilizando (3.15) e (3.16), conseguimos

$$F_0 = -\frac{k_B T}{2} \sum_{\vec{q}} \ln \frac{\pi}{\beta(\gamma_q + \gamma_{qz})} - \frac{k_B T}{2} N \ln \frac{\pi}{\beta\Omega} \quad (3.17)$$

que é a energia livre F_0 associada ao hamiltoniano tentativa, cujo valor médio $\langle \mathcal{H}_0 \rangle_0$ pode ser obtido por meio do uso do teorema de equipartição da energia. Este teorema, a grosso modo, nos diz que cada termo quadrático na expressão do hamiltoniano contribui com $\frac{k_B T}{2}$ para energia interna [27]. Aplicando o teorema de equipartição em (3.10) e (3.13) chegamos a

$$\langle \mathcal{H}_0 \rangle_0 = \frac{Nk_B T}{2} + \frac{Nk_B T}{2} = Nk_B T. \quad (3.18)$$

Para podermos aplicar o PVB, resta calcularmos $\langle \mathcal{H} \rangle_0$, ou seja, a média térmica do hamiltoniano original com relação ao hamiltoniano tentativa. Entretanto, esse termo não

pode ser avaliado tão diretamente quanto $\langle \mathcal{H}_0 \rangle_0$, portanto, se faz necessário um pouco mais de manipulações algébricas, como ficará evidente a partir da expressão abaixo

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{H} \rangle_0 &= -\frac{J}{2} \sum_{\vec{r}, \vec{a}} \langle \sqrt{1 - (S_{\vec{r}}^z)^2} \sqrt{1 - (S_{\vec{r}+\vec{a}}^z)^2} \rangle_0 \langle \cos(\phi_{\vec{r}+\vec{a}} - \phi_{\vec{r}}) \rangle_0 \\ &\quad - \frac{J_z}{2} \sum_{\vec{r}, \vec{c}} \langle \sqrt{1 - (S_{\vec{r}}^z)^2} \sqrt{1 - (S_{\vec{r}+\vec{c}}^z)^2} \rangle_0 \langle \cos(\phi_{\vec{r}+\vec{c}} - \phi_{\vec{r}}) \rangle_0 \\ &\quad + D \sum_{\vec{r}} \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0. \end{aligned} \quad (3.19)$$

O próximo passo é avaliar os termos $\langle \dots \rangle_0$ que aparecem na expressão acima. O primeiro a ser avaliado será a flutuação de spin fora do plano $\langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0$, que pode ser, facilmente, calculado aplicando o teorema de equipartição da energia na expressão (3.6), resultando em

$$\langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0 = \frac{k_B T}{2(D + 2J + J_z)}. \quad (3.20)$$

Com o uso da seguinte identidade

$$\langle \cos(\phi_{\vec{r}+\vec{a}} - \phi_{\vec{r}}) \rangle_0 = e^{-\frac{1}{2} \langle (\phi_{\vec{r}+\vec{a}} - \phi_{\vec{r}})^2 \rangle_0}, \quad (3.21)$$

válida para variáveis gaussianas (ver Apêndice A.1), notamos que o cálculo do valor médio de uma função trigonométrica é reduzido a avaliar a média de polinômios, diminuindo a transcendência do problema. O valor médio que surge na exponencial é calculado em termos de vetores de onda \vec{q} por meio da transformada de Fourier, analogamente ao que foi feito no processo de diagonalização de \mathcal{H}_0 , obtendo

$$\langle (\phi_{\vec{r}+\vec{a}} - \phi_{\vec{r}})^2 \rangle_0 = \frac{2}{N} \sum_{\vec{q}} (1 - \lambda_{\vec{q}}) \langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_0, \quad (3.22)$$

onde $\lambda_{\vec{q}} = \frac{1}{2}(\cos q_x a + \cos q_y a)$ e

$$\langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_0 = \frac{k_B T}{2(\gamma_q + \gamma_{qz})}. \quad (3.23)$$

Similarmente, podemos escrever

$$\langle \cos(\phi_{\vec{r}+\vec{c}} - \phi_{\vec{r}}) \rangle_0 = e^{-\frac{1}{2} \langle (\phi_{\vec{r}+\vec{c}} - \phi_{\vec{r}})^2 \rangle_0},$$

resultando em

$$\langle (\phi_{\vec{r}+\vec{c}} - \phi_{\vec{r}})^2 \rangle_0 = \frac{2}{N} \sum_{\vec{q}} (1 - \lambda_{\vec{q}}^z) \langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_0, \quad (3.24)$$

onde $\lambda_{\vec{q}}^z = \cos q_z c$. Deste modo, (3.50) toma o seguinte aspecto

$$\langle \mathcal{H} \rangle_0 = -\frac{J}{2} \sum_{\vec{r}, \vec{a}} (1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0) e^{-\frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} (1 - \lambda_{\vec{q}}) \langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_0}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{J_z}{2} \sum_{\vec{r}, \vec{c}} (1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0) e^{-\frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} (1 - \lambda_{\vec{q}}^z) \langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_0} \\
& + \sum_{\vec{r}} D \langle |S_{\vec{r}}^z|^2 \rangle_0,
\end{aligned} \tag{3.25}$$

onde voltamos a utilizar as hipóteses $S_{\vec{r}}^z \approx S_{\vec{r}+\vec{a}}^z$ e $S_{\vec{r}}^z \approx S_{\vec{r}+\vec{c}}^z$. Podemos, ainda, somar sobre \vec{a} , \vec{c} e \vec{r} , pois o termo de flutuação de spin (3.20) independe dessas variáveis, de forma que resta apenas uma soma sobre \vec{q} , como podemos ver na expressão abaixo:

$$\begin{aligned}
\langle \mathcal{H} \rangle_0 & = -2JN(1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0) e^{-\frac{1}{2N} \sum_{\vec{q}} (2 - (\cos q_x a + \cos q_y a)) \langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_0} \\
& - J_z N(1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0) e^{-\frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} (1 - \cos q_z c) \langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_0} \\
& + \frac{D N k_B T}{\Omega} \frac{1}{2}.
\end{aligned} \tag{3.26}$$

Reunindo os valores médios avaliados e substituindo-os na expressão Φ (2.11), obtemos

$$\begin{aligned}
\Phi(\gamma, \gamma_z) & = -\frac{k_B T}{2} \sum_{\vec{q}} \ln \frac{\pi}{\beta(\gamma_q + \gamma_{qz})} - \frac{k_B T}{2} \sum_{\vec{q}} \ln \frac{\pi}{\beta \Omega} \\
& - 2JN(1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0) e^{-\frac{1}{2N} \sum_{\vec{q}} (2 - (\cos q_x a + \cos q_y a)) \langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_0} \\
& - J_z N(1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0) e^{-\frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} (1 - \cos q_z c) \langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_0} \\
& - \left(2 - \frac{D}{\Omega}\right) \frac{N k_B T}{2}.
\end{aligned} \tag{3.27}$$

Agora, finalmente, podemos aplicar o PVB. Vamos, então, minimizar $\Phi(\gamma, \gamma_z)$ com relação aos parâmetros variacionais γ e γ_z a partir das condições

$$\frac{\partial \Phi(\gamma, \gamma_z)}{\partial \gamma} = 0, \quad (a) \quad \text{e} \quad \frac{\partial \Phi(\gamma, \gamma_z)}{\partial \gamma_z} = 0. \quad (b) \tag{3.28}$$

Antes de avaliarmos (3.28), vamos definir η_{xy} e η_z como

$$\eta_{xy} = \frac{1}{2N} \sum_{\vec{q}} [2 - (\cos q_x a + \cos q_y a)] \langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_0, \tag{3.29}$$

$$\eta_z = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} (1 - \cos q_z c) \langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_0. \tag{3.30}$$

Com o intuito de tornar mais claro o cálculo envolvido na minimização de $\Phi(\gamma, \gamma_z)$ com relação aos parâmetros variacionais γ e γ_z , vamos quebrar a equação (3.27) numa soma de três termos dependentes de γ e γ_z , a saber: Φ_1 , Φ_2 e Φ_3 , mais um termo independente deles que não vamos rotular, já que será irrelevante no processo de minimização. Seja, então

$$\Phi_1 = \frac{k_B T}{2} \sum_{\vec{q}} \ln(\gamma_q + \gamma_{qz}), \tag{3.31}$$

$$\Phi_2 = -2JN(1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0) e^{-\eta_{xy}}, \tag{3.32}$$

$$\Phi_3 = -J_z N(1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0) e^{-\eta_z}. \tag{3.33}$$

Da condição (a) de (3.28), temos que

$$\frac{\partial\Phi(\gamma, \gamma_z)}{\partial\gamma} = \frac{\partial\Phi_1(\gamma, \gamma_z)}{\partial\gamma} + \frac{\partial\Phi_2(\gamma, \gamma_z)}{\partial\gamma} + \frac{\partial\Phi_3(\gamma, \gamma_z)}{\partial\gamma} \quad (3.34)$$

Avaliando as derivadas que surgem na igualdade acima, obtemos

$$\frac{\partial\Phi_1(\gamma, \gamma_z)}{\partial\gamma} = \frac{k_B T}{2} \sum_{\vec{q}} \frac{(2 - \cos q_x a - \cos q_y a)}{\gamma_q + \gamma_{qz}} \equiv \frac{k_B T}{2} \sum_{\vec{q}} \frac{\gamma_q}{\gamma(\gamma_q + \gamma_{qz})}, \quad (3.35)$$

onde utilizamos as definições de γ_q e γ_{qz} .

$$\frac{\partial\Phi_2(\gamma, \gamma_z)}{\partial\gamma} = 2JN(1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0) e^{-\eta_{xy}} \frac{\partial\eta_{xy}}{\partial\gamma} \quad (3.36)$$

$$\frac{\partial\Phi_3(\gamma, \gamma_z)}{\partial\gamma} = J_z N(1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0) e^{-\eta_z} \frac{\partial\eta_z}{\partial\gamma}. \quad (3.37)$$

A partir das definições (3.29), (3.30) e da Eq.(3.23) podemos avaliar $\frac{\partial\eta_{xy}}{\partial\gamma}$ e $\frac{\partial\eta_z}{\partial\gamma}$, como mostrado abaixo

$$\begin{aligned} \frac{\partial\eta_{xy}}{\partial\gamma} &= -\frac{k_B T}{4N} \sum_{\vec{q}} \frac{(2 - \cos q_x a - \cos q_y a)^2}{(\gamma_q + \gamma_{qz})^2} \\ &\equiv -\frac{k_B T}{4N} \sum_{\vec{q}} \left(\frac{\gamma_q}{\gamma(\gamma_q + \gamma_{qz})} \right)^2. \end{aligned} \quad (3.38)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial\eta_z}{\partial\gamma} &= -\frac{k_B T}{2N} \sum_{\vec{q}} \frac{(2 - \cos q_x a - \cos q_y a)(1 - \cos q_z c)}{(\gamma_q + \gamma_{qz})^2} \\ &\equiv -\frac{k_B T}{2N} \sum_{\vec{q}} \frac{\gamma_q \gamma_{qz}}{(\gamma_z \gamma)(\gamma_q + \gamma_{qz})^2}. \end{aligned} \quad (3.39)$$

Reunindo as derivadas parciais obtidas acima e substituindo-as em (3.34), chegamos a

$$\frac{k_B T}{2\gamma} \sum_{\vec{q}} \frac{\gamma_q}{\gamma_q + \gamma_{qz}} \left[1 - (1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0) \left(\frac{\gamma_q}{\gamma(\gamma_q + \gamma_{qz})} J e^{-\eta_{xy}} + \frac{\gamma_{qz}}{\gamma_z(\gamma_q + \gamma_{qz})} J_z e^{-\eta_z} \right) \right] = 0 \quad (3.40)$$

A equação acima pode ser satisfeita fazendo cada termo na soma sobre \vec{q} nulo. Feito isso, podemos somar sobre \vec{q} na expressão entre colchetes e fazer uso das definições (3.29), (3.30) e da Eq.(3.22) para obter

$$(1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0) (2J\eta_{xy} e^{-\eta_{xy}} + J_z \eta_z e^{-\eta_z}) = \frac{k_B T}{2}. \quad (3.41)$$

A aplicação da condição (b) de (3.28) nos leva a mesma equação acima. Assim, surge um problema: temos duas variáveis a serem determinadas, γ e γ_z , mas apenas uma equação.

É nesse ponto, que os autores [25] assumem uma hipótese simplificadora para contornar essa aparente dificuldade. Apesar do uso de tal hipótese, a saber: $\frac{\eta_z}{\eta_{xy}} = \frac{J_z}{J}$, reduzir drasticamente os cálculos, ela não é razoável fisicamente, pois espera-se que quanto mais fraca for a ligação interplanar J_z maior será a flutuação quadrática média η_z , condição que não é satisfeita por essa hipótese. Mas, investigando as equações (3.21) a (3.24), podemos encontrar uma outra equação envolvendo γ e γ_z . Escrevendo (3.23) em termos de $\lambda_{\vec{q}}$ e $\lambda_{\vec{q}}^z$ encontramos

$$\langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_0 = \frac{k_B T}{2[2\gamma(1 - \lambda_{\vec{q}}) + \gamma_z(1 - \lambda_{\vec{q}}^z)]},$$

substituindo a expressão acima em (3.29) chegamos a

$$\eta_{xy} = \frac{k_B T}{2N} \sum_{\vec{q}} \frac{(1 - \lambda_{\vec{q}})}{2\gamma(1 - \lambda_{\vec{q}}) + \gamma_z(1 - \lambda_{\vec{q}}^z)}. \quad (3.42)$$

Procedimento análogo nos leva à expressão abaixo para η_z

$$\eta_z = \frac{k_B T}{2N} \sum_{\vec{q}} \frac{(1 - \lambda_{\vec{q}}^z)}{2\gamma(1 - \lambda_{\vec{q}}) + \gamma_z(1 - \lambda_{\vec{q}}^z)}. \quad (3.43)$$

Se multiplicarmos (3.42) por 2γ e (3.43) por γ_z , e depois somarmos, obteremos

$$2\gamma\eta_{xy} + \gamma_z\eta_z = \frac{k_B T}{2}, \quad (3.44)$$

dessa forma, conseguimos duas equações que poderão, em princípio, ser resolvidas para nos dar os parâmetros variacionais γ e γ_z como função das variáveis presentes no hamiltoniano que define o modelo. Comparando as equações (3.41) e (3.44), podemos identificar

$$\gamma = J [1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0] e^{-\eta_{xy}}, \quad (3.45)$$

$$\gamma_z = J_z [1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0] e^{-\eta_z}. \quad (3.46)$$

Contudo, a solução das equações acopladas acima é uma tarefa difícil. Mas, como o nosso objetivo aqui é simplesmente mostrar a equivalência entre o PVB e a AHAC para esse modelo em particular, as equações (3.45) e (3.46) já serão suficientes, como ficará evidente.

3.2 Tratamento Via AHAC

A AHAC é um método aproximativo que se baseia na substituição do hamiltoniano original não solúvel exatamente \mathcal{H} , por um hamiltoniano tentativa harmônico \mathcal{H}_0 com

parâmetros dependentes da temperatura e que podem ser determinados auto-consistentemente. Então para o modelo aqui estudado, o hamiltoniano harmônico é dado por:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_o &= \frac{K}{4} \sum_{\vec{r}, \vec{a}} (\phi_{\vec{r}+\vec{a}} - \phi_{\vec{r}})^2 + \frac{K_z}{4} \sum_{\vec{r}, \vec{c}} (\phi_{\vec{r}+\vec{c}} - \phi_{\vec{r}})^2 \\ &+ (D + 2J + J_z) \sum_r (S_r^z)^2, \end{aligned} \quad (3.47)$$

onde as variáveis angulares vem da expansão dos cossenos e o fator em frente à última soma vem das hipóteses $S_{\vec{r}}^z \approx S_{\vec{r}+\vec{a}}^z$ e $S_{\vec{r}}^z \approx S_{\vec{r}+\vec{c}}^z$, válida em baixas temperaturas. K e K_z são as constantes de acoplamentos (stiffness) que levam em conta as não-linearidades das interações e são dados por [28]

$$K = J \langle \sqrt{1 - (S_{\vec{r}}^z)^2} \sqrt{1 - (S_{\vec{r}+\vec{a}}^z)^2} \cos(\phi_{\vec{r}+\vec{a}} - \phi_{\vec{r}}) \rangle, \quad (3.48)$$

$$K_z = J_z \langle \sqrt{1 - (S_{\vec{r}}^z)^2} \sqrt{1 - (S_{\vec{r}+\vec{c}}^z)^2} \cos(\phi_{\vec{r}+\vec{c}} - \phi_{\vec{r}}) \rangle. \quad (3.49)$$

A fim de obtermos K e K_z , as médias acima $\langle \dots \rangle$ são trocadas por $\langle \dots \rangle_0$, o que dá

$$K \approx J (1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0) \langle \cos(\phi_{\vec{r}+\vec{a}} - \phi_{\vec{r}}) \rangle_0, \quad (3.50)$$

$$K_z \approx J_z (1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0) \langle \cos(\phi_{\vec{r}+\vec{c}} - \phi_{\vec{r}}) \rangle_0. \quad (3.51)$$

Entretanto, as médias térmicas com relação ao hamiltoniano harmônico (3.47), que surgem nas equações acima, são idênticas àquelas obtidas com relação ao hamiltoniano tentativa (3.4) utilizado no PVB, bastando substituir K por J e K_z por J_z . Então, como $\langle \cos(\phi_{\vec{r}+\vec{a}} - \phi_{\vec{r}}) \rangle_0$ e $\langle \cos(\phi_{\vec{r}+\vec{c}} - \phi_{\vec{r}}) \rangle_0$ já foram avaliados (vide equações 3.21 a 3.23) e, além disso, utilizando as definições (3.29) e (3.30) chegamos às seguintes expressões para K e K_z :

$$K = J [1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0] e^{-\eta_{xy}}, \quad (3.52)$$

$$K_z = J_z [1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0] e^{-\eta_z}. \quad (3.53)$$

Comparando as equações acima para K e K_z com as equações (3.45) e (3.46) para γ e γ_z , vemos que elas são idênticas. Com efeito, ambos os métodos, a saber: o PVB e a AHAC, devem fornecer resultados idênticos na análise termodinâmica do modelo, evidenciando, assim, a equivalência entre os mesmos.

Capítulo 4

Estudo Analítico do Modelo de Heisenberg Clássico Anisotrópico Tridimensional na Presença de um Campo Cristalino

O hamiltoniano de Heisenberg é de grande importância no estudo de cristais magneticamente ordenados, pois consegue dar conta de explicar esse ordenamento, mesmo em temperaturas razoavelmente altas. Esse modelo de spins interagentes serve de protótipo para o estudo de diversos sistemas físicos, tais como: filme de Hélio líquido, supercondutores e cristais líquidos [16]. Por isso, o referido modelo tem sido extensivamente estudado tanto quanticamente [6, 5] quanto classicamente [7, 10]. Entretanto, como se sabe, o modelo de Heisenberg só apresenta solução exata em uma dimensão em sua versão quântica unidimensional tratada por Bethe para spin $-1/2$ [11] e em sua versão clássica unidimensional tratada por Fisher [12], o que torna fundamental o uso de técnicas analíticas aproximativas. Além disso, problemas com apenas uma dimensão espacial não são realísticos, logo o estudo de modelos tridimensionais são de grande importância experimental. Neste capítulo, estudaremos o modelo de Heisenberg clássico anisotrópico tridimensional na presença de um campo cristalino por meio do princípio variacional de Bogoliubov (PVB).

4.1 O Modelo

O hamiltoniano que descreve o modelo de Heisenberg clássico anisotrópico tridimensional na presença de um campo cristalino é dado por:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -J \sum_{\langle \vec{r}, \vec{r}' \rangle} \{ S_{\vec{r}}^x S_{\vec{r}'}^x + S_{\vec{r}}^y S_{\vec{r}'}^y + \lambda S_{\vec{r}}^z S_{\vec{r}'}^z \} - J_z \sum_{\langle \vec{r}, \vec{r}' \rangle} \{ S_{\vec{r}}^x S_{\vec{r}'}^x + S_{\vec{r}}^y S_{\vec{r}'}^y + \eta S_{\vec{r}}^z S_{\vec{r}'}^z \} \\ & + D \sum_{\vec{r}} (S_{\vec{r}}^z)^2, \end{aligned} \quad (4.1)$$

onde a soma atua sobre os primeiros vizinhos da rede, $J > 0$ é a constante de troca intraplano, $J_z > 0$ é a constante de troca entre interplano, λ e η são as anisotropias de troca ou anisotropias no espaço de spin, e comportam-se como anisotropias de plano-fácil no intervalo ($0 \leq \lambda < 1$ e $0 \leq \eta < 1$) aqui considerado, já que o comportamento planar dos spins é favorecido porque minimiza a energia do estado fundamental. O terceiro termo, corresponde a anisotropia de plano fácil para valores positivos do campo cristalino D , pois o campo D tende a alinhar os spins no plano xy no estado ordenado. Por outro lado, para valores negativos do campo cristalino, um comportamento tipo Ising é favorecido, já que o eixo- z passa a ser energeticamente mais fácil. Com efeito, espera-se que a natureza da transição de fase seja afetada, em alguns casos limites, quando nós variarmos os parâmetros D , λ e η . Por exemplo, se fizermos $D \rightarrow \infty$ a componente de spin $S_{\vec{r}}^z$ será suprimida e obteremos o modelo rotor planar, no qual os spins tendem a se alinhar no plano xy em seu estado fundamental e apresenta uma transição de fase topológica, não usual, conhecida como transição de Kosterlitz-Thouless, caracterizada por efeitos de vórtices. Ao longo deste capítulo, retornaremos a discutir tal transição e a sua relação com sistemas físicos.

Com o objetivo de aplicarmos o PVB vamos proceder de maneira análoga ao capítulo 3. Primeiramente, vamos escrever (4.1) numa representação polar [7], normalizar o vetor de spin clássico $\|\vec{S}_{\vec{r}}\| = 1$ e somar sobre os vetores \vec{a} e \vec{c} que localizam os primeiros vizinhos de \vec{r} no plano xy e na direção z , respectivamente. Desse modo chegamos a

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -\frac{J}{2} \sum_{\vec{r}, \vec{a}} \{ \sqrt{1 - (S_{\vec{r}}^z)^2} \sqrt{1 - (S_{\vec{r}+\vec{a}}^z)^2} \cos(\phi_{\vec{r}+\vec{a}} - \phi_{\vec{r}}) + \lambda S_{\vec{r}+\vec{a}}^z S_{\vec{r}}^z \} \\ & - \frac{J_z}{2} \sum_{\vec{r}, \vec{c}} \{ \sqrt{1 - (S_{\vec{r}}^z)^2} \sqrt{1 - (S_{\vec{r}+\vec{c}}^z)^2} \cos(\phi_{\vec{r}+\vec{c}} - \phi_{\vec{r}}) + \eta S_{\vec{r}+\vec{c}}^z S_{\vec{r}}^z \} \\ & + D \sum_{\vec{r}} (S_{\vec{r}}^z)^2. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Agora, propomos um hamiltoniano tentativa harmônico solúvel exatamente, a saber:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_o = & \frac{\gamma}{4} \sum_{\vec{r}, \vec{a}} (\phi_{\vec{r}+\vec{a}} - \phi_{\vec{r}})^2 + \frac{\gamma_z}{4} \sum_{\vec{r}, \vec{c}} (\phi_{\vec{r}+\vec{c}} - \phi_{\vec{r}})^2 - \frac{J\lambda}{2} \sum_{\vec{r}, \vec{a}} S_{\vec{r}+\vec{a}}^z S_{\vec{r}}^z \\ & - \frac{J_z \eta}{2} \sum_{\vec{r}, \vec{c}} S_{\vec{r}+\vec{c}}^z S_{\vec{r}}^z + (D + 2J + J_z) \sum_{\vec{r}} (S_{\vec{r}}^z)^2, \end{aligned} \quad (4.3)$$

onde os parâmetros γ e γ_z serão determinados variacionalmente por meio da minimização da energia livre, resultando em equações auto-consistentes. Notando que a parte planar de (4.3) é idêntica ao do modelo XY tratado no capítulo 3, a sua diagonalização no espaço dos vetores de onda \vec{q} (os cálculos explícitos estão disponíveis no Apêndice A.2) nos leva

à mesma expressão obtida anteriormente para \mathcal{H}_0^ϕ , ou seja,

$$\mathcal{H}_0^\phi = \sum_{\vec{q}} (\gamma_q + \gamma_{qz}) |\phi_{\vec{q}}|^2, \quad (4.4)$$

cuja função de partição é dada por

$$\mathcal{Z}_0^\phi = \prod_{\vec{q}} \left[\frac{\pi}{\beta(\gamma_q + \gamma_{qz})} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (4.5)$$

onde $\gamma_q = \gamma(2 - \cos q_x a - \cos q_y a)$, $\gamma_{qz} = \gamma_z(1 - \cos q_z c)$ e $|\phi_{\vec{q}}|^2 = \phi_{\vec{q}} \phi_{-\vec{q}}$. Colocando a parte axial do Hamiltoniano (4.3) na forma diagonal obtemos (ver Apêndice)

$$\mathcal{H}_0^z = \sum_{\vec{q}} \left\{ \frac{1}{2} (2D + 4J + 2J_z) - 2J\lambda\gamma_{\vec{q}} - \eta J_z \gamma_{\vec{q}}^z \right\} |S_{\vec{q}}^z|^2, \quad (4.6)$$

onde $|S_{\vec{q}}^z|^2 = S_{\vec{q}}^z S_{-\vec{q}}^z$, $\gamma_{\vec{q}} = \frac{1}{2}(\cos q_x a + \cos q_y a)$ e $\gamma_{\vec{q}}^z = \cos q_z c$. A flutuação fora do plano pode ser avaliada tomando o limite contínuo no regime de longos comprimentos de onda ($\vec{q} \approx 0$) (ver Apêndice A.3), fornecendo

$$\begin{aligned} \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_o &= \frac{2k_B T}{\pi^3 (J_z \eta)^{\frac{1}{2}} J \lambda} \left[\sqrt{\delta' + J \lambda \pi^2} \arctan \left(\frac{\pi (J_z \eta)^{\frac{1}{2}}}{\sqrt{\delta' + J \lambda \pi^2}} \right) \right. \\ &\quad \left. - \sqrt{\delta'} \arctan \left(\frac{\pi (J_z \eta)^{\frac{1}{2}}}{\sqrt{\delta'}} \right) + \frac{\pi (J_z \eta)^{\frac{1}{2}}}{2} \ln \left(1 + \frac{J \lambda \pi^2}{\delta' + \pi^2 J_z \eta} \right) \right], \end{aligned} \quad (4.7)$$

onde $\delta' = 2D + 4J(1 - \lambda) + 2J_z(1 - \eta)$. Observe que é na parte axial do hamiltoniano que reside a diferença entre o modelo XY tratado no capítulo 3 e o de Heisenberg aqui avaliado, resultando, portanto, numa expressão diferente para $\langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_o$ e, assim, em características distintas com relação a transição de fase. Como tanto o termo planar quanto o axial são harmônicos e diagonais, temos pelo teorema da equipartição da energia que o valor médio do Hamiltoniano é

$$\langle \mathcal{H}_0 \rangle_o = \frac{N k_B T}{2} + \frac{N k_B T}{2} = N k_B T. \quad (4.8)$$

O valor médio do Hamiltoniano original com relação ao harmônico pode ser escrito como segue

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{H} \rangle_o &= - \frac{J}{2} \sum_{\vec{r}, \vec{a}} \langle \sqrt{1 - (S_{\vec{r}}^z)^2} \sqrt{1 - (S_{\vec{r}+\vec{a}}^z)^2} \rangle_o \langle \cos(\phi_{\vec{r}+\vec{a}} - \phi_{\vec{r}}) \rangle_o \\ &\quad - \frac{J_z}{2} \sum_{\vec{r}, \vec{c}} \langle \sqrt{1 - (S_{\vec{r}}^z)^2} \sqrt{1 - (S_{\vec{r}+\vec{c}}^z)^2} \rangle_o \langle \cos(\phi_{\vec{r}+\vec{c}} - \phi_{\vec{r}}) \rangle_o \\ &\quad + D \sum_{\vec{r}} \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_o - \frac{J \lambda}{2} \sum_{\vec{r}, \vec{a}} \langle S_{\vec{r}+\vec{a}}^z S_{\vec{r}}^z \rangle_o - \frac{J_z \eta}{2} \sum_{\vec{r}, \vec{c}} \langle S_{\vec{r}+\vec{c}}^z S_{\vec{r}}^z \rangle_o, \end{aligned} \quad (4.9)$$

sendo $\langle \dots \rangle_o$ a média com relação ao Hamiltoniano tentativa. As variáveis $(\phi_{\vec{r}+\vec{a}} - \phi_{\vec{r}})$ e $(\phi_{\vec{r}+\vec{c}} - \phi_{\vec{r}})$ são gaussianas e, portanto, podemos escrever (vide Apêndice A.1)

$$\langle \cos(\phi_{\vec{r}+\vec{a}} - \phi_{\vec{r}}) \rangle_o = e^{-\frac{1}{2} \langle (\phi_{\vec{r}+\vec{a}} - \phi_{\vec{r}})^2 \rangle_o}$$

e

$$\langle \cos(\phi_{\vec{r}+\vec{c}} - \phi_{\vec{r}}) \rangle_0 = e^{-\frac{1}{2} \langle (\phi_{\vec{r}+\vec{c}} - \phi_{\vec{r}})^2 \rangle_0}.$$

Escrevendo a expressão (4.9) em termos dos vetores de ondas \vec{q} num processo análogo ao realizado na obtenção de (3.22) e (3.24), e lançando mão das hipóteses $S_{\vec{r}}^z \approx S_{\vec{r}+\vec{a}}^z$ e $S_{\vec{r}}^z \approx S_{\vec{r}+\vec{c}}^z$, nos termos sob raízes quadradas, chegamos a:

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{H} \rangle_0 &= - \frac{J}{2} \sum_{\vec{r}, \vec{a}} (1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0) e^{-\frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} (1 - \gamma_{\vec{q}}) \langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_0} + \sum_{\vec{q}} \Omega_{\vec{q}} \langle |S_{\vec{q}}^z|^2 \rangle_0, \\ &- \frac{J_z}{2} \sum_{\vec{r}, \vec{c}} (1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0) e^{-\frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} (1 - \gamma_{\vec{q}}^z) \langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_0} \end{aligned} \quad (4.10)$$

onde $\Omega_{\vec{q}} = \frac{1}{2}(2D + 4J + 2J_z) - 2J\lambda\gamma_{\vec{q}} - J_z\eta\gamma_{\vec{q}}^z$, $\gamma_{\vec{q}} = \frac{1}{2}(\cos q_x a + \cos q_y a)$ e $\gamma_{\vec{q}}^z = \cos q_z c$. Como os termos de $\langle \mathcal{H} \rangle_0$ não dependem de \vec{r} , \vec{a} e \vec{c} no somatório, podemos escrever (4.10) como segue

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{H} \rangle_0 &= - 2JN(1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0) e^{-\frac{1}{2N} \sum_{\vec{q}} (2 - (\cos q_x a + \cos q_y a)) \langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_0} \\ &- J_z N(1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0) e^{-\frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} (1 - \cos q_z c) \langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_0} + \underbrace{\frac{Nk_B T}{2}}_{\langle \mathcal{H}_0^z \rangle_0 = \frac{Nk_B T}{2}}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

A partir das expressões obtidas, podemos aplicar o PVB e, conseqüentemente, obter os parâmetros variacionais γ e γ_z . Substituindo os valores médios avaliados, na desigualdade de Bogoliubov (2.11), obtemos

$$\begin{aligned} \Phi(\gamma, \gamma_z) &= -\frac{k_B T}{2} \sum_{\vec{q}} \ln \frac{\pi}{\beta(\gamma_{\vec{q}} + \gamma_{qz})} - \frac{k_B T}{2} \sum_{\vec{q}} \ln \frac{\pi}{\beta \Omega_{\vec{q}}} - \frac{Nk_B T}{2} \\ &- 2JN(1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0) e^{-\frac{1}{2N} \sum_{\vec{q}} (2 - (\cos q_x a + \cos q_y a)) \langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_0} \\ &- J_z N(1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0) e^{-\frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} (1 - \cos q_z c) \langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_0}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Comparando a expressão acima com (3.27), obtida no capítulo 3, notamos que as duas expressões apenas diferem quanto aos termos $\Omega_{\vec{q}}$ e $\langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0$, que independem de γ e γ_z . Logo, aplicando as condições de minimização (3.28a e 3.28b) à equação acima, obteremos a mesma expressão (3.41) obtida no capítulo 3, entretanto, com valor distinto para a flutuação de spin fora do plano $\langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0$. Esta, que por sua vez tem grande influência para a transição de fase exibida pelo modelo. Além disso, a relação (3.44) permanece válida e, portanto, chegamos as mesmas expressões obtidas, anteriormente, para γ e γ_z . Apesar disso, os modelos exibem transições de fase distintas, como ficará evidente na seção em que analisaremos os resultados numéricos. Com efeito, temos as seguintes equações acopladas para γ e γ_z :

$$\gamma = J [1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0] e^{-\eta x y}, \quad (4.13)$$

$$\gamma_z = J_z [1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0] e^{-\eta_z}, \quad (4.14)$$

com $\langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0$ dado pela fórmula (4.7), η_{xy} e η_z dados por (3.29) e (3.30), respectivamente.

Contudo, desacoplar essas duas equações não é uma tarefa fácil. Apesar disso, as flutuações quadráticas η_{xy} e η_z podem ser avaliadas tomando o limite contínuo no regime de longos comprimentos de onda (ver Apêndice A.3), fornecendo:

$$\eta_{xy} = \frac{k_B T}{2\gamma} F(g) \quad \text{e} \quad \eta_z = \frac{k_B T}{2\gamma} \left[\frac{1 - 2F(g)}{g} \right], \quad (4.15)$$

onde definimos $g = \frac{\gamma_z}{\gamma}$ e $F(g)$ é dado por

$$F(g) = \frac{1}{3} \left[\frac{\arctan(g^{\frac{1}{2}})}{g^{\frac{1}{2}}} + \frac{1}{2} - \frac{1}{2}g \ln \left(1 + \frac{1}{g}\right) \right]. \quad (4.16)$$

Substituindo (4.16) e (4.15) em (4.13) e (4.14), chegamos nas expressões abaixo para γ e γ_z :

$$\gamma = J(1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0) e^{-\frac{k_B T}{2\gamma} F(g)}, \quad (4.17)$$

$$\gamma_z = J_z(1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0) e^{-\frac{k_B T}{2\gamma} \left[\frac{1 - 2F(g)}{g} \right]}. \quad (4.18)$$

O próximo passo em busca de elucidar a termodinâmica do modelo é encontrar os parâmetros variacionais γ e γ_z , a partir desse sistema de equações não lineares acima. Entretanto, como mencionado anteriormente, desacoplar essas equações é um trabalho muito difícil. Então, se faz necessário o emprego de métodos numéricos iterativos para que a partir de um dado valor de $t = k_B T/J$, D/J e J_z/J consiga-se obter γ/J e γ_z/J , e assim, a desejada termodinâmica do modelo. No capítulo 6, utilizaremos esse procedimento iterativo para obtermos as grandezas termodinâmicas e analisar o seu comportamento em termos das anisotropias γ e η , para diversos valores de J_z/J , D/J e $k_B T/J$. Apesar disso, na próxima seção, veremos como o uso de uma aproximação para $F(g)$ possibilita o estudo analítico em alguns casos limites de interesse, além de prover um meio de se obter a termodinâmica do modelo sem procedimentos iterativos pesados em casos gerais.

4.2 Hipótese Simplificadora

Vamos definir $Q = e^{-\eta_{xy}}$, $\alpha = \frac{\eta_z}{\eta_{xy}}$, $t = \frac{k_B T}{J}$ e $\xi = \frac{J_z}{J}$, com o intuito de reescrever a equação (3.44), em termos desses parâmetros. A partir dessas definições, encontramos $\eta_{xy} = -\ln Q$ e $\eta_z = -\alpha \ln Q$, que quando substituídas nas expressões (4.13) para γ e (4.14) para γ_z resultam em

$$\gamma = J [1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0] Q \quad \text{e} \quad \gamma_z = J_z [1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0] Q^\alpha,$$

substituindo as equações acima em (3.44), encontramos

$$Q \ln Q [2 + \xi \alpha Q^{\alpha-1}] = \frac{-t}{2[1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0]}. \quad (4.19)$$

Até aqui, não fizemos nenhuma aproximação adicional, apenas reescrevemos a equação (3.44). De agora em diante, vamos fazer uma aproximação para $F(g)$ com a intenção de estudar, analiticamente, alguns casos limites de interesse. Lançaremos mão da seguinte aproximação para $F(g)$, a saber

$$F_{approx}(g) \approx \frac{1}{2+g}. \quad (4.20)$$

Essa equação implica que $\alpha \approx 1$ e, portanto, $\eta_z \approx \eta_{xy}$, significando que as flutuações quadráticas médias não são muito diferentes no plano e entre os planos. Note, que essa hipótese é diferente daquela proposta por Darcy et al [25] e discutida no capítulo 3, a saber: $\frac{\eta_z}{\eta_{xy}} = \frac{J_z}{J}$. Aqui, nós apenas consideramos $\alpha \approx 1$ e não fazemos nenhuma restrição sobre ξ . Neste ponto, cabe uma pergunta: a aproximação (4.20) é satisfatória? Qual o erro envolvido?

Com o objetivo de responder esses questionamentos, vamos plotar um gráfico de $F(g)$ e $F_{approx}(g)$ para $0 \leq g \leq 1$, e verificar a acurácia de nossa aproximação. A partir da análise do gráfico abaixo, nota-se que o erro cometido nessa aproximação é menor do que 10%. Apesar desse erro, veremos que os resultados encontrados estão em bom acordo com aqueles obtidos por outros métodos analíticos. Além disso, observa-se da figura 4.1 que para $\gamma_z = 0$, ou seja, $g = 0$, $F(g)$ coincide com $F_{approx}(g)$. Da expressão (4.14), vemos que uma das maneiras de se conseguir $\gamma_z = 0$ é fazer $J_z = 0$, isto é, tomar o limite bidimensional. Portanto, espera-se que para modelos bidimensionais o uso de $F(g)$ ou $F_{approx}(g)$ conduzam ao mesmo resultado. Com efeito, substituindo $\alpha = 1$ em (4.19), chegamos a

$$Q \ln Q [2 + \xi] = \frac{-t}{2[1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0]}, \quad (4.21)$$

que é uma fórmula muito mais simples de se tratar.

Analisaremos, a seguir, os resultados fornecidos pela equação acima, em alguns casos limites de interesse e os compararemos com os obtidos por meio de outros métodos, a fim de testarmos a validade da aproximação utilizada. Tomando os limites $\lambda = 0$, $\eta = 0$, $J_z = 0$ e $D = 0$, no hamiltoniano (4.1), obtemos o modelo XY bidimensional, para o qual a equação acima se reduz a

$$Q \ln Q = \frac{-t}{4[1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0]}, \quad (4.22)$$

onde $\langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0 = t/4$, resultado obtido de (4.7) por meio de expansão em série de Taylor até primeira ordem dos termos envolvendo o logaritmo e o arcotangente, a fim de se eliminar

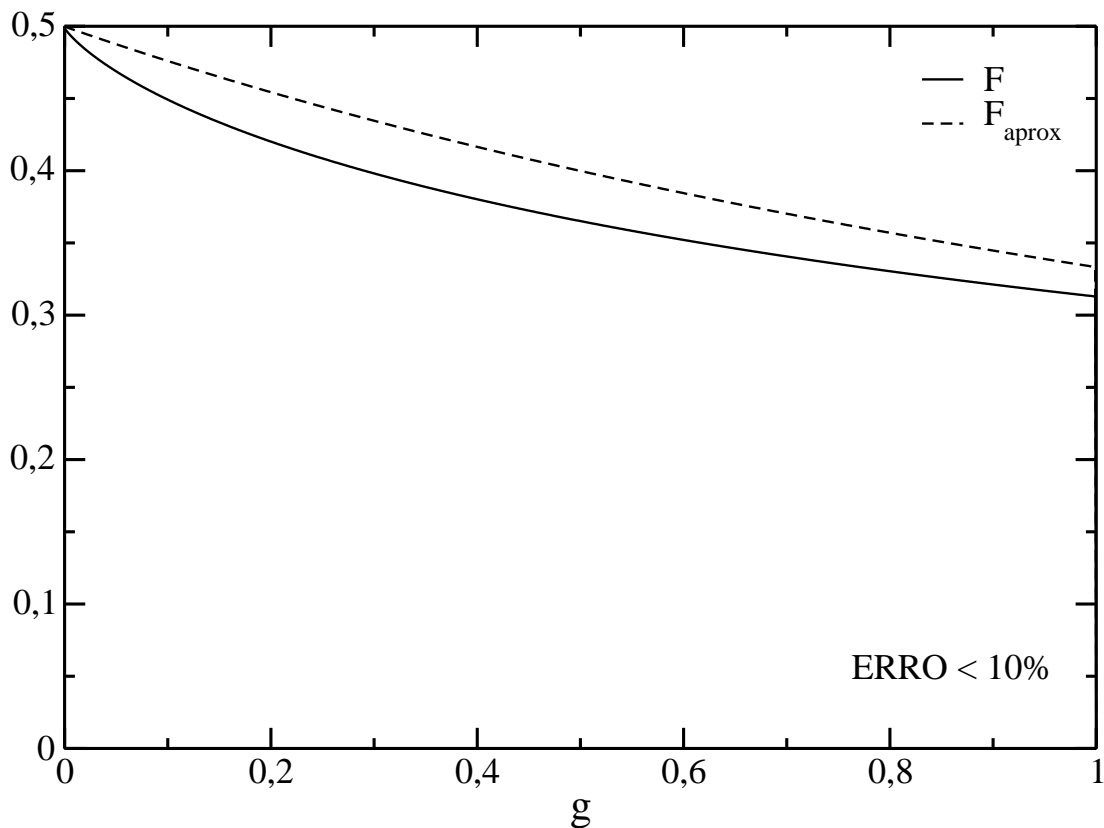


Figura 4.1: Curva de $F(g)$ e $F_{aprox}(g)$ para $0 \leq g \leq 1$.

indeterminações. A temperatura crítica é encontrada usando o fato de $\langle (S_T^z)^2 \rangle_0 \propto t$ e sabendo que na temperatura de transição, a variável Q salta para zero [23], ou seja, temos a condição abaixo

$$\frac{dQ}{dt}|_{t_c} \rightarrow -\infty \quad \text{ou} \quad \frac{dt}{dQ}|_{t_c} \rightarrow 0. \quad (4.23)$$

Com o intuito de ilustrar graficamente o motivo pelo qual utilizamos tal condição para obter a temperatura crítica, vamos plotar o gráfico de Q em função de t para a equação (4.22).

Note da figura 4.2, que há um trecho da curva que foi tracejada, pois tal região corresponde a consideramos o calor específico negativo, mas como sabemos do estudo de estabilidade térmica, o calor específico é não negativo, portanto, a região tracejada não é fisicamente aceitável. Assim, fazemos a variável Q saltar a zero, evitando a região sem realidade física. O valor de t para o qual Q pula para zero é, então, a temperatura

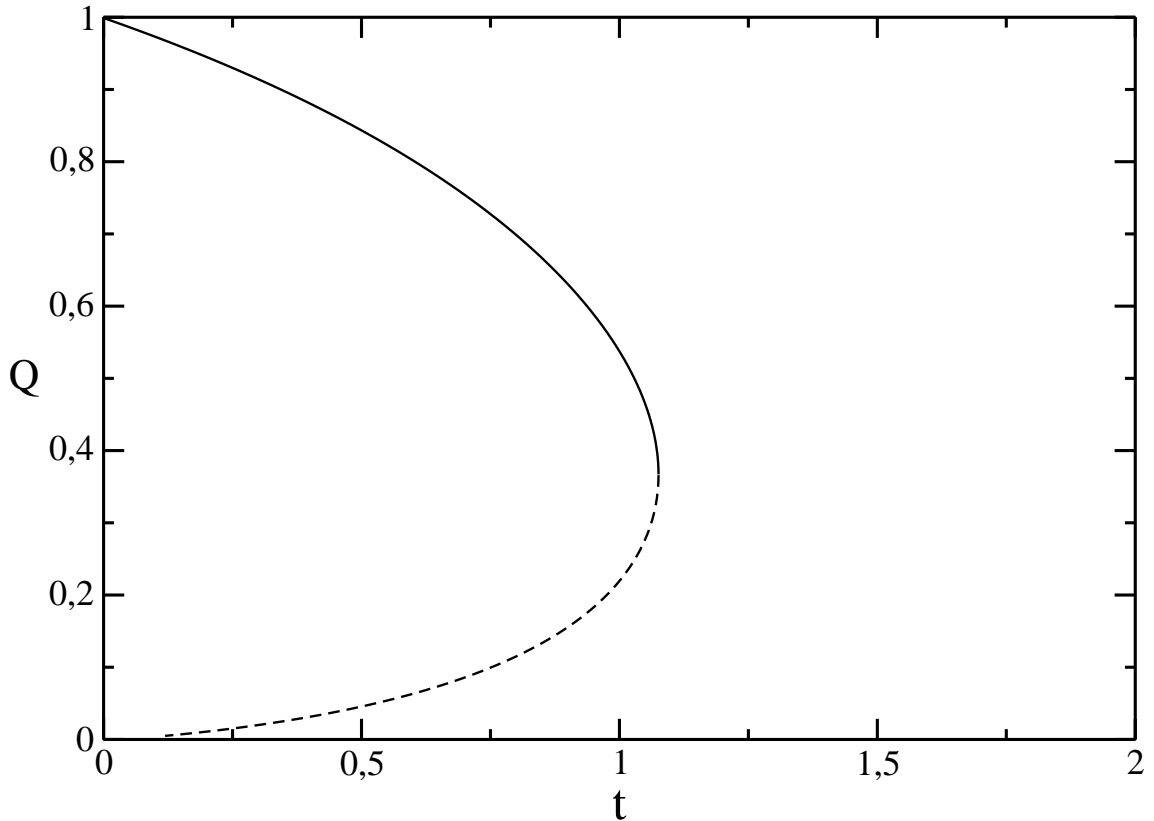


Figura 4.2: Curva de Q em função da temperatura reduzida t para o modelo XY bidimensional. A curva tracejada refere-se a uma região sem realidade física, pois equivale a considerar o calor específico negativo.

de transição. Além disso, da figura 4.2, vemos que a temperatura crítica t_c pode ser obtida tomando a condição $\frac{dQ}{dt}|_{t_c} \rightarrow -\infty$. Com efeito, o calor específico apresenta uma descontinuidade em t_c , ao invés da divergência esperada. Essa é uma característica do método aqui empregado.

Aplicando essa condição em (4.22), obtemos $Q = e^{-1}$ e, substituindo-o, outra vez em (4.22), chegamos a uma expressão simples para a temperatura crítica reduzida:

$$t_c = \frac{4}{e + 1}, \quad (4.24)$$

cujos resultados são $t_c = 1,076$, valor que também foi obtido por [28] para tal modelo. Note da figura 4.2, que essa temperatura é, realmente, aquela em que $\frac{dQ}{dt}|_{t_c} \rightarrow -\infty$. Agora, se fizermos $\lambda = 0$, $\eta = 0$, $J_z = 0$ e $D \rightarrow \infty$, no hamiltoniano (4.1), conseguimos $\langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0 \rightarrow 0$ e $t_c = 1,472$, valor idêntico para t_c foi obtido para o modelo rotor planar via AHAC

[23]. Entretanto, esse valor está bem acima do resultado obtido por simulações de Monte Carlo [29], a saber: $t_c = 0,898$. Como discutiremos ainda neste capítulo, em modelos bidimensionais, devemos levar em consideração correções de vórtices, pois nesses modelos não é esperada uma transição de fase usual, mas sim uma transição de fase topológica conhecida como transição de Kosterlitz-Thouless.

Outro caso limite de interesse é o modelo de Heisenberg isotrópico bidimensional, cuja temperatura crítica é nula, pois não se espera que ocorra transição de fase à temperatura não nula. Vejamos, então, se conseguimos recuperar tal resultado. A partir de (4.1) façamos $J_z = 0$, $D = 0$ e $\lambda \rightarrow 1$, substituindo esses valores na expressão (4.7) para $\langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0$, obtemos

$$\langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0 = \frac{t}{\pi^2} \ln \left(1 + \frac{J}{J_z \eta} \right), \quad (4.25)$$

note que não tomamos o limite $J_z \rightarrow 0$ ainda, por conveniência. Procedendo de maneira análoga aos casos analisados anteriormente, obtemos $Q = e^{-1}$, substituindo esse valor em (4.21), chegamos a seguinte expressão para t_c

$$t_c = \frac{4}{e + 2 \frac{\ln(1 + \frac{J}{J_z \eta})}{\pi^2}}, \quad (4.26)$$

tomando o limite $J_z \rightarrow 0$ na fórmula acima, $t_c \rightarrow 0$ e, portanto, recuperamos o resultado esperado para tal modelo.

Até aqui, consideramos limites bidimensionais e, portanto, conforme discussão anterior, $F(g)$ e $F_{approx}(g)$ devem nos levar a resultados idênticos. Mas, agora, passaremos a analisar alguns casos limites tridimensionais. O primeiro deles será o rotor planar tridimensional isotrópico, que pode ser obtido de (4.1) tomando $J_z = J$ e $D \rightarrow \infty$. Com isso obtemos $\langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0 = 0$ e $Q = e^{-1}$, substituindo-os em (4.21), encontramos a temperatura de transição $t_c = 6e^{-1} \equiv 2,207$, em bom acordo com simulação de Monte carlo [30], a saber: $t_c = 2,17$. A AHAC [25] nos fornece para esse limite, $t_c = 2,190$, valor bem próximo ao obtido aqui.

Podemos obter também a temperatura de transição para o modelo de Heisenberg tridimensional isotrópico, fazendo $J_z = J$, $D = 0$, $\lambda = 1$ e $\eta = 1$ no hamiltoniano (4.1). Procedimento análogo nos leva a $t_c = 1,465$, em bom acordo com simulação de Monte Carlo [31] ($t_c = 1,443$) e com a AHAC [25] ($t_c = 1,458$).

Outra grandeza termodinâmica importante no estudo de transições de fase de segunda ordem (também conhecida como transição contínua) em sistemas magnéticos é a magnetização. Segundo a fenomenologia de Landau proposta na década de 30, a magnetização é o parâmetro de ordem de tais sistemas e, por isso, deve se anular na fase desordenada (mais simétrica) e ser diferente de zero na fase ordenada (menos simétrica). A componente

x da magnetização pode ser obtida, aproximadamente, por meio de uma média térmica com relação ao hamiltoniano tentativa \mathcal{H}_0 , a saber:

$$m = \langle (S_{\vec{r}}^x) \rangle_0 = \langle \sqrt{1 - (S_{\vec{r}}^z)^2} \cos \phi_{\vec{r}} \rangle_0 \equiv \left[1 - \frac{1}{2} \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0 \right] e^{-\frac{1}{2} \langle \phi_{\vec{r}}^2 \rangle_0}, \quad (4.27)$$

onde o termo sob a raiz quadrada foi aproximado sob a condição $S_{\vec{r}}^z \ll 1$ e utilizamos a relação (3.21) para variável gaussiana $\phi_{\vec{r}}$. O valor médio $\langle \phi_{\vec{r}}^2 \rangle_0$ pode ser escrito em termos do vetor de onda \vec{q} , como

$$\langle \phi_{\vec{r}}^2 \rangle_0 = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \langle \phi_{\vec{q}} \phi_{-\vec{q}} \rangle_0 = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_0, \quad (4.28)$$

onde utilizamos a expressão (3.7) para transformada de Fourier de $\phi_{\vec{r}}$. Aplicando o teorema da equipartição de energia na expressão (4.4) obtemos a seguinte fórmula para $\langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_0$

$$\langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_0 = \frac{k_B T}{2(\gamma_q + \gamma_{qz})}, \quad (4.29)$$

onde $\gamma_q = \gamma(2 - \cos q_x a - \cos q_y a)$ e $\gamma_{qz} = \gamma_z(1 - \cos q_z c)$. Inserindo a expressão acima na Eq.(4.28) e tomando o limite contínuo em coordenadas cilíndricas $\frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \rightarrow$

$\frac{a^2 c}{2\pi^4} \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\frac{\pi}{a}} q dq \int_{-\frac{\pi}{c}}^{\frac{\pi}{c}} dq_z$ no regime de longos comprimentos de onda $\vec{q} \approx 0$ (a integral está calculada no Apêndice A.3) chegamos, finalmente, na expressão abaixo

$$m = \left(1 - \frac{1}{2} \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0 \right) \exp \left\{ -\frac{k_B T}{2\pi^2 \gamma} \left[\frac{\arctan(g^{\frac{1}{2}})}{g^{\frac{1}{2}}} + \frac{1}{2} \ln \left(1 + \frac{1}{g} \right) \right] \right\}, \quad (4.30)$$

onde $g = \frac{\gamma_z}{\gamma}$ conforme definido anteriormente. Podemos reescrever tal expressão em termos dos parâmetros Q e ξ definidos previamente. Primeiramente, escrevemos η_{xy} na Eq.(4.15) usando a aproximação (4.20) para $F(g)$, resultando em

$$\eta_{xy} = \frac{k_B T}{2\gamma(2 + g)},$$

e como $\alpha \approx 1$ dentro da aproximação aqui utilizada, então a razão entre as Eqs.(4.13) e (4.14) fornecem a seguinte identidade: $g = \xi$. Com efeito, podemos escrever m como segue abaixo

$$m = \left(1 - \frac{1}{2} \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0 \right) Q^\nu \quad \text{com} \quad \nu = \frac{2 + \xi}{\pi^2} \left[\frac{\arctan(g^{\frac{1}{2}})}{g^{\frac{1}{2}}} + \frac{1}{2} \ln \left(1 + \frac{1}{g} \right) \right]. \quad (4.31)$$

Vamos, a partir de agora, obter valores para a magnetização em alguns casos limites, em que $\langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0$ pode ser facilmente obtido, e postergar até o capítulo 6, a análise numérica nos casos mais gerais. O primeiro caso que será analisado é o modelo XY bidimensional,

que pode ser obtido do hamiltoniano (4.1) se fizermos $\lambda = 0$, $J_z = 0$, $\eta = 0$ e $D = 0$, com isso $\nu \rightarrow \infty$ e, portanto, $m \rightarrow 0$. Esse é um resultado previsto pelo teorema de Mermin-Wagner [15], pois de acordo com este, simetrias globais contínuas não podem ser quebradas espontaneamente em sistemas com interações de curto alcance para dimensões espaciais $d \leq 2$. A ausência de ordem de longo alcance prevista por esse teorema não implica, contudo, numa ausência de transição de fase. Discutiremos, a seguir, o caso particular do modelo XY bidimensional como exemplo de aplicação de tal teorema e suas implicações.

O hamiltoniano que descreve o modelo XY clássico é dado por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle \vec{r}, \vec{r}' \rangle} \{ S_{\vec{r}}^x S_{\vec{r}'}^x + S_{\vec{r}}^y S_{\vec{r}'}^y \}, \quad (4.32)$$

note que o estado fundamental ($T = 0$) é aquele em que todos os spins estão alinhados numa direção, resultando numa máxima magnetização, mas não podemos afirmar em qual direção no plano xy ele estará alinhado, pois o hamiltoniano é invariante sob rotações no espaço de spin e, portanto, apresenta uma forma de simetria global contínua. À medida que aumentamos a temperatura, os spins começam a se desalinhar devido à agitação térmica e esperamos que para um certo valor de temperatura, a magnetização se anule, ocorrendo assim uma transição de fase ordem-desordem usual. Contudo, essa característica não é verificada quando calculamos a magnetização, pois encontramos $m = 0$ para qualquer temperatura não nula, em bom acordo com o teorema de Mermin-Wagner. Apesar disso, chegamos a um valor finito para a temperatura crítica desse modelo em (4.22). Então, que tipo de transição está ocorrendo? Tal transição é conhecida na literatura como transição de Kosterlitz-Thouless [16]. Kosterlitz e Thouless [17, 18] propuseram um tipo diferente de transição de fases, na qual foi definida uma ordem de longo alcance topológica para certos sistemas bidimensionais, que é responsável por uma transição de fases topológica caracterizada por uma súbita mudança na resposta do sistema a perturbações externas. Acredita-se que tal transição topológica ocorra devido ao desligamento de pares vórtice-antivórtice quando ultrapassamos a temperatura crítica T_{KT} (temperatura de Kosterlitz-Thouless). Um vórtice (antivórtice) é uma excitação topológica na qual os spins em um caminho fechado ao redor do centro da excitação gira por 2π (-2π) no mesmo sentido. Diversos sistemas físicos apresentam essa transição, a saber: filmes de Hélio líquido, filmes de supercondutores e cristais líquidos de uma única camada. [16].

Encerramos este capítulo com a obtenção do gráfico da magnetização m como função da temperatura t para o modelo rotor planar tridimensional isotrópico. Para tal fim,

vamos tomar os limites em que $D \rightarrow \infty$ e $J_z = J$ no hamiltoniano (4.1) e, então, calcular $\langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0$ nesses limites. Como esperado, $\langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0 = 0$, pois o campo cristalino muito intenso faz com que a componente $S_{\vec{r}}^z$ seja suprimida do espaço de spin. Então, de (4.31) obtemos

$$m = Q^\nu \quad \text{com} \quad \nu = \frac{3}{\pi^2} \left(\frac{\pi}{4} + \frac{1}{2} \ln 2 \right) \approx 0.344078, \quad (4.33)$$

mas de (4.21) com $\xi = 1$, temos $t = -6Q \ln Q$. Invertendo a equação acima para obtermos $Q = m^{\frac{1}{\nu}}$ e, portanto, $\ln Q = \frac{1}{\nu} \ln m$, chegamos a seguinte expressão para t como função de m

$$t = -\frac{6}{\nu} m^{\frac{1}{\nu}} \ln m. \quad (4.34)$$

Apesar de esperarmos uma transição de fase de segunda ordem e, portanto, sem descontinuidade no parâmetro de ordem, notamos, entretanto, que a magnetização se aproxima de modo descontínuo do valor nulo à medida que aumentamos a temperatura. Tal descontinuidade é um artifício do método aqui empregado. Outra informação importante que podemos obter da figura 4.3 é a temperatura crítica t_c , que corresponde àquela na qual a magnetização cai bruscamente. Note que a temperatura $t_c = 2,207$ em destaque nessa figura é justamente aquela que obtemos analiticamente, como não poderia deixar de ser.

O uso da aproximação para $F(g)$ possibilitou a obtenção da temperatura crítica e a magnetização para alguns modelos, com certa facilidade, além da comparação com outros métodos analíticos e simulacionais. Entretanto, a principal utilidade de tal aproximação é de caráter numérico, pois evita o uso de métodos iterativos pesados para desacoplar as equações (4.13) e (4.14). Nesses casos limites, verificamos que essa aproximação nos forneceu valores para t_c próximos àqueles obtidos pela AHAC e por simulação de Monte Carlo. Contudo, em casos gerais, em que η , λ , J_z/J e D/J podem apresentar outras variações, não sabemos a priori se tal aproximação ainda nos levará a bons resultados, por isso no capítulo 6 compararemos os resultados obtidos com essa aproximação e aqueles conseguidos resolvendo numericamente o sistema de equações acopladas para γ e γ_z .

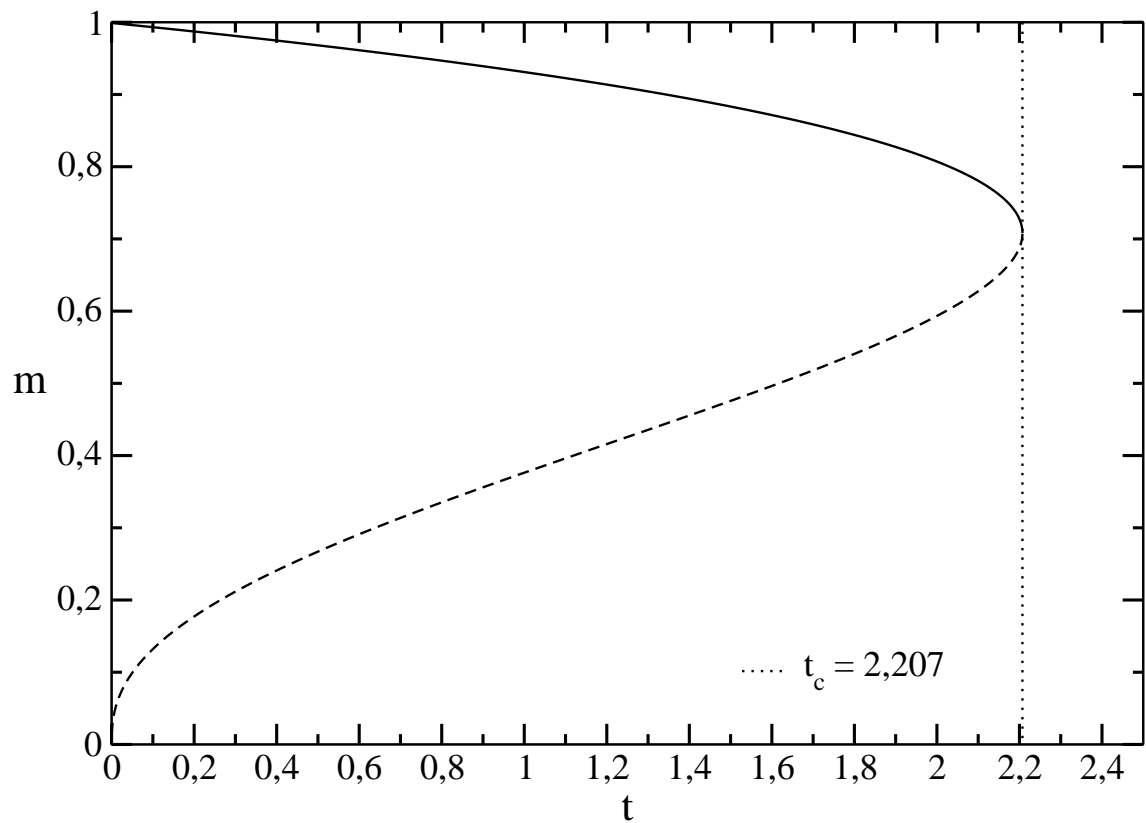


Figura 4.3: Curva da magnetização m em função da temperatura reduzida t para o modelo rotor planar tridimensional isotrópico. O trecho tracejado da curva equivale a uma região não física, correspondendo a calor específico negativo. A reta pontilhada indica o valor da temperatura crítica t_c , obtida quando m vai a zero de modo descontínuo.

Capítulo 5

Modelo XY Clássico Tridimensional Diluído Anisotrópico na Presença de um Campo Cristalino

Neste capítulo, estudaremos o modelo XY tridimensional anisotrópico diluído em suas ligações na presença de um campo cristalino usando o princípio variacional de Bogoliubov (PVB). O modelo XY é largamente estudado devido à riqueza de seu diagrama de fase e o caráter de sua transição [1, 23, 32, 38, 33]. Em particular, o modelo XY em duas dimensões tem atraído a atenção dos pesquisadores devido a sua transição de fase topológica não usual, conforme discussão anterior. Recentemente, o estudo de modelos XY tem sido motivados não apenas devido a sua aplicabilidade em descrever materiais magnéticos reais, por exemplo: o diagrama de fases do composto $RbFe(MoO_4)_2$ está em bom acordo com as previsões teóricas para o modelo XY clássico bidimensional [38], mas também em sistemas da matéria condensada, tais como: cristais líquidos [14] e supercondutores [32, 38].

A versão unidimensional do modelo XY quântico de spin-1/2 foi resolvido exatamente por Lieb, Shultz e Mattis [14]. Apesar da natureza quântica dos magnetos reais não poder ser esquecida, o estudo de modelo clássicos continuam sendo um importante objeto de pesquisa. Existem vários compostos físicos, tais como: Rb_2MnF [39], K_2MnF_4 e $Mn(HCOO)_2 \cdot 2H_2O$ [40] que apresentam átomos de Manganês com spin $s = 5/2$ em sua constiuição, permitindo um tratamento clássico, isto é, tratar os spins como vetores. Em dimensões superiores a um, esse modelo tem sido estudado por técnicas analíticas aproximadas [32, 23, 1] e simulações de Monte Carlo [41].

O estudo de modelos de sistemas magnéticos diluídos tem uma longa história[9]. Vários sistemas magnéticos foram estudados, podendo-se destacar: as ligas ternárias e os filmes finos [9]. Além disso, do ponto de vista experimental, material magnético sem impurezas, ou seja, totalmente puro, é de difícil acesso. Então, considerar algum tipo de diluição

tornaria o modelo mais realístico. Na literatura, o modelo rotor planar diluído em suas ligações foi estudado por meio da aproximação harmônica auto-consistente (AHAC) [24], onde nesse artigo os autores obtiveram o diagrama de fases e a concentração crítica para o modelo. Aqui, também vamos obter a concentração crítica e, posteriormente, comparar com os resultados simulacionais e analíticos disponíveis na literatura.

5.1 Percolação

Antes de estudar analiticamente o modelo XY diluído, vamos realizar uma breve discussão sobre percolação. Historicamente, o conceito de percolação surge do estudo do fenômeno de transporte de um fluido através de um meio poroso. Por exemplo, o petróleo através de uma rocha, ou a água em um filtro de areia [37]. Além disso, uma das motivações para pesquisa em percolação vem da descrição de fenômenos críticos [34], como por exemplo, sistemas ferromagnéticos diluídos [37]. Existem também aplicações de modelos de percolação em diversas situações físicas, tais como: o transporte de corrente elétrica através de uma rede composta por um grande número de resistores, incêndio em florestas, prospecção de petróleo e difusão em meios desordenados [36].

O estudo de modelos de percolação se dá, primeiramente, escolhendo a estrutura de rede que será utilizada, por exemplo: rede quadrada, triangular ou cúbica. Após essa escolha, definimos a ordem de alcance de percolação: longo alcance ou curto alcance (modelo de primeiros vizinhos). Aqui, vamos considerar apenas modelos de percolação de curto alcance. Além disso, podemos classificar a percolação em dois tipos: percolação por sítio e percolação por ligação.

Na percolação por sítio, cada sítio de uma rede é aleatoriamente ocupado com uma probabilidade p e desocupado com probabilidade $(1 - p)$, sendo que os grupos de sítios vizinhos ocupados são chamados de aglomerados. Dizemos que ocorreu percolação se acima de uma certa concentração crítica p_c há formação de um aglomerado infinito, ou seja, obtemos um aglomerado se estendendo de um lado a outro de uma rede infinita.

Na percolação por ligação, todos os sítios da rede estão ocupados e as linhas ligando sítios vizinhos podem existir ou não. Então, definimos p como a probabilidade de existir essa linha ligando sítios vizinhos e $(1 - p)$ como a probabilidade de não existir tal linha, e os grupos de sítios vizinhos conectados são chamados de aglomerados. Então, dizemos que ocorreu percolação se há formação de um aglomerado infinito acima da concentração crítica p_c .

Vale ressaltar que a concentração crítica ou limiar de percolação p_c assume valor diferente, caso levemos em conta a percolação por sítio ou por ligação. Por exemplo,

numa rede quadrada, $p_c = 0,5$ para percolação por ligação e $p_c = 0,592$ para percolação por sítio [35].

5.2 O Modelo

O modelo XY tridimensional diluído em suas ligações na presença de um campo cristalino é definido pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle \vec{r}, \vec{r}' \rangle} J_{\vec{r}, \vec{r}'} \{ S_{\vec{r}}^x S_{\vec{r}'}^x + S_{\vec{r}}^y S_{\vec{r}'}^y \} - \sum_{\langle \vec{r}, \vec{r}' \rangle} J_{\vec{r}, \vec{r}'}^z \{ S_{\vec{r}}^x S_{\vec{r}'}^x + S_{\vec{r}}^y S_{\vec{r}'}^y \} + D \sum_{\vec{r}} (S_{\vec{r}}^z)^2, \quad (5.1)$$

onde $J_{\vec{r}, \vec{r}'}$ é a interação de troca entre spins em camadas paralelas ao plano xy e $J_{\vec{r}, \vec{r}'}^z$ é a interação de troca entre spins em diferentes camadas adjacentes. D é o campo cristalino e $S_{\vec{r}}^i$ são as componentes $i = x, y, z$ de um spin clássico de módulo unitário $\|\vec{S}_{\vec{r}}\| = 1$. A primeira soma é realizada sobre os spins vizinhos mais próximos nas camadas, a segunda soma é sobre os spins vizinhos mais próximos entre as camadas e a última soma é realizada sobre todos os spins. Além disso, consideraremos uma distribuição de probabilidades aleatória binomial para as ligações $J_{\vec{r}, \vec{r}'}$ e $J_{\vec{r}, \vec{r}'}^z$, dadas por

$$P(J_{\vec{r}, \vec{r}'}) = p\delta(J_{\vec{r}, \vec{r}'} - J) + q\delta(J_{\vec{r}, \vec{r}'} - 0) \quad e \quad (5.2)$$

$$P(J_{\vec{r}, \vec{r}'}^z) = p_z\delta(J_{\vec{r}, \vec{r}'}^z - J_z) + q_z\delta(J_{\vec{r}, \vec{r}'}^z - 0), \quad (5.3)$$

onde p (p_z) é a probabilidade da ligação intraplano (interplano) com $J_{\vec{r}, \vec{r}'} = J$ ($J_{\vec{r}, \vec{r}'}^z = J_z$) e $q = 1 - p$ ($q_z = 1 - p_z$) é a probabilidade da ligação intraplano (interplano) com $J_{\vec{r}, \vec{r}'} = 0$ ($J_{\vec{r}, \vec{r}'}^z = 0$). Analogamente aos capítulos anteriores, vamos escrever o hamiltoniano acima numa representação polar para os spins[7]:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= -\frac{1}{2} \sum_{\vec{r}, \vec{a}} J(\vec{a}) \sqrt{1 - (S_{\vec{r}}^z)^2} \sqrt{1 - (S_{\vec{r}+\vec{a}}^z)^2} \cos(\phi_{\vec{r}+\vec{a}} - \phi_{\vec{r}}) \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{\vec{r}, \vec{c}} J^z(\vec{c}) \sqrt{1 - (S_{\vec{r}}^z)^2} \sqrt{1 - (S_{\vec{r}+\vec{c}}^z)^2} \cos(\phi_{\vec{r}+\vec{c}} - \phi_{\vec{r}}) \\ &\quad + D \sum_{\vec{r}} (S_{\vec{r}}^z)^2, \end{aligned} \quad (5.4)$$

onde \vec{a} rotula os quatro primeiros vizinhos do sítio \vec{r} no plano $x-y$ e \vec{c} os dois primeiros vizinhos mais próximos do sítio \vec{r} ao longo da direção z . Utilizou-se também o fato de que as interações de troca intraplano e interplano só dependem da distância entre os primeiros spins vizinhos, isto é,

$$J_{\vec{r}, \vec{r}'} = J(|\vec{r} - \vec{r}'|), \quad \text{mas} \quad \vec{r}' = \vec{r} + \vec{a} \quad \therefore \quad J_{\vec{r}, \vec{r}'} = J(|\vec{a}|),$$

da mesmo modo, temos que $J_{\vec{r},\vec{r}'}^z = J^z(|\vec{c}|)$.

A fim de aplicarmos o PVB devemos propor um hamiltoniano tentativa $\mathcal{H}_0(\gamma, \gamma_z)$ cuja solução exata é conhecida. Seguindo os mesmos passos do capítulo 3, vamos propor um hamiltoniano composto por uma parte planar \mathcal{H}_o^ϕ e uma outra axial \mathcal{H}_o^z , a saber:

$$\mathcal{H}_o = \mathcal{H}_o^\phi + \mathcal{H}_o^z, \quad (5.5)$$

onde \mathcal{H}_o^ϕ é dado por

$$\mathcal{H}_o^\phi = \frac{\gamma}{4} \sum_{\vec{r},\vec{a}} J(a)(\phi_{\vec{r}+\vec{a}} - \phi_{\vec{r}})^2 + \frac{\gamma_z}{4} \sum_{\vec{r},\vec{c}} J^z(c)(\phi_{\vec{r}+\vec{c}} - \phi_{\vec{r}})^2 \quad (5.6)$$

e \mathcal{H}_o^z por

$$\mathcal{H}_o^z = \frac{1}{2} \sum_{\vec{r},\vec{a}} J(a)(S_{\vec{r}}^z)^2 + \frac{1}{2} \sum_{\vec{r},\vec{c}} J^z(c)(S_{\vec{r}}^z)^2 + D \sum_{\vec{r}} (S_{\vec{r}}^z)^2, \quad (5.7)$$

Com a intenção de diagonalizar \mathcal{H}_0^ϕ , vamos tomar a transformada de Fourier de (5.6) para nos fornecer

$$\mathcal{H}_o^\phi = \frac{\gamma}{2} \sum_{\vec{q}} \left\{ \sum_{\vec{a}} J(a)(1 - e^{-i\vec{q}\vec{a}})\phi_{\vec{q}}\phi_{-\vec{q}} + \frac{\gamma_z}{2} \sum_{\vec{c}} J^z(c)(1 - e^{-i\vec{q}\vec{c}})\phi_{\vec{q}}\phi_{-\vec{q}} \right\}, \quad (5.8)$$

escrevendo, também, \mathcal{H}_0^z em termos de \vec{q} , fica

$$\mathcal{H}_o^z = \frac{1}{2} \sum_{\vec{q},\vec{a}} J(a)|S_{\vec{q}}^z|^2 + \frac{1}{2} \sum_{\vec{q},\vec{c}} J^z(c)|S_{\vec{q}}^z|^2 + D \sum_{\vec{q}} |S_{\vec{q}}^z|^2. \quad (5.9)$$

Diferentemente dos sistemas puros tratados nos capítulos anteriores, em sistemas diluídos, temos uma distribuição de probabilidades para as ligações. Isso implica que devemos tomar, além de uma média térmica, uma média sobre as ligações [...] dadas pela distribuição de probabilidades (5.2) e (5.3). Ao tomarmos a média nas configurações chegamos a

$$[\mathcal{H}_0^\phi] = \sum_{\vec{q}} \gamma p J (2 - (\cos q_x a + \cos q_y a)) |\phi_{\vec{q}}|^2 + \sum_{\vec{q}} \gamma_z J_z p_z (1 - \cos q_z c). \quad (5.10)$$

Reescrevendo a equação acima de modo mais compacto, temos

$$[\mathcal{H}_o^\phi] = \sum_{\vec{q}} (\gamma_q + \gamma_{qz}) |\phi_{\vec{q}}|^2, \quad (5.11)$$

onde $\gamma_q = \gamma p J (2 - \cos q_x a - \cos q_y a)$, $\gamma_{qz} = \gamma_z p_z J_z (1 - \cos q_z c)$, $a = |\vec{a}|$, $c = |\vec{c}|$ e $|\phi_{\vec{q}}|^2 = \phi_{\vec{q}}\phi_{-\vec{q}}$. Analogamente, podemos escrever a média nas ligações para a parte axial, fornecendo

$$[\mathcal{H}_0^z] = (2pJ + p_z J_z + D) \sum_{\vec{q}} |S_{\vec{q}}^z|^2 \quad (5.12)$$

e para \mathcal{H} , resultando em

$$\begin{aligned}
[\mathcal{H}] &= -\frac{1}{2} \sum_{\vec{r}, \vec{a}} Jp \sqrt{1 - (S_{\vec{r}}^z)^2} \sqrt{1 - (S_{\vec{r}+\vec{a}}^z)^2} \cos(\phi_{\vec{r}+\vec{a}} - \phi_{\vec{r}}) \\
&\quad - \frac{1}{2} \sum_{\vec{r}, \vec{c}} J_z p_z \sqrt{1 - (S_{\vec{r}}^z)^2} \sqrt{1 - (S_{\vec{r}+\vec{c}}^z)^2} \cos(\phi_{\vec{r}+\vec{c}} - \phi_{\vec{r}}) \\
&\quad + D \sum_{\vec{r}} (S_{\vec{r}}^z)^2.
\end{aligned} \tag{5.13}$$

Após realizar as médias nas ligações, vamos tomar as médias térmicas. O primeiro termo a ser avaliado é $\langle [\mathcal{H}_0] \rangle_0$, cujo resultado é facilmente obtido do teorema da equipartição da energia, dando

$$\langle [\mathcal{H}_0] \rangle_0 = \frac{Nk_B T}{2} + \frac{Nk_B T}{2} = Nk_B T. \tag{5.14}$$

Com o objetivo de obtermos a energia livre de Helmholtz F_0 , vamos calcular a função de partição \mathcal{Z}_0 . Entretanto, observando as equações (3.10) e (3.13) para a parte planar e axial do hamiltoniano tentativa do capítulo 3, respectivamente, vê-se que essas apresentam a mesma forma funcional. Logo, a função de partição planar é dada por

$$\mathcal{Z}_0^\phi = \prod_{\vec{q}} \left[\frac{\pi}{\beta(\gamma_q + \gamma_{qz})} \right]^{\frac{1}{2}} \tag{5.15}$$

e a axial por

$$\mathcal{Z}_0^z = \prod_{\vec{q}} \left[\frac{\pi}{\beta\Omega} \right]^{\frac{1}{2}}, \tag{5.16}$$

onde $\Omega = D + 2pJ + p_z J_z$ e $\mathcal{Z}_0 = \mathcal{Z}_0^\phi \mathcal{Z}_0^z$. A partir da definição da energia livre de Helmholtz estatística (2.10), utilizando (5.15) e (5.16), conseguimos

$$F_0 = -\frac{k_B T}{2} \sum_{\vec{q}} \ln \frac{\pi}{\beta(\gamma_q + \gamma_{qz})} - \frac{k_B T}{2} N \ln \frac{\pi}{\beta\Omega} \tag{5.17}$$

Para podermos aplicar o PVB, resta calcularmos $\langle [\mathcal{H}] \rangle_0$, ou seja, a média térmica do hamiltoniano original com relação ao hamiltoniano tentativa. Contudo, esse termo não pode ser avaliado tão diretamente quanto $\langle [\mathcal{H}_0] \rangle_0$, portanto, se faz necessário um pouco mais de manipulações algébricas, como ficará evidente a partir da expressão abaixo

$$\begin{aligned}
\langle [\mathcal{H}] \rangle_0 &= -\frac{Jp}{2} \sum_{\vec{r}, \vec{a}} \langle \sqrt{1 - (S_{\vec{r}}^z)^2} \sqrt{1 - (S_{\vec{r}+\vec{a}}^z)^2} \rangle_0 \langle \cos(\phi_{\vec{r}+\vec{a}} - \phi_{\vec{r}}) \rangle_0 \\
&\quad - \frac{J_z p_z}{2} \sum_{\vec{r}, \vec{c}} \langle \sqrt{1 - (S_{\vec{r}}^z)^2} \sqrt{1 - (S_{\vec{r}+\vec{c}}^z)^2} \rangle_0 \langle \cos(\phi_{\vec{r}+\vec{c}} - \phi_{\vec{r}}) \rangle_0 \\
&\quad + D \sum_{\vec{r}} \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0.
\end{aligned} \tag{5.18}$$

O próximo passo é avaliar os termos $\langle \dots \rangle_0$ que aparecem na expressão acima. O primeiro a ser avaliado será a flutuação de spin $\langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0$, que pode ser, facilmente, calculado aplicando o teorema de equipartição da energia na expressão (5.12), resultando em

$$\langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0 = \frac{k_B T}{2(D + 2pJ + p_z J_z)}. \quad (5.19)$$

Com o uso da seguinte identidade

$$\langle \cos(\phi_{\vec{r}+\vec{a}} - \phi_{\vec{r}}) \rangle_0 = e^{-\frac{1}{2} \langle (\phi_{\vec{r}+\vec{a}} - \phi_{\vec{r}})^2 \rangle_0}, \quad (5.20)$$

válida para variáveis gaussianas (ver Apêndice A.1). O valor médio que surge na exponencial é calculado em termos de vetores de onda \vec{q} por meio da transformada de Fourier, obtendo

$$\langle (\phi_{\vec{r}+\vec{a}} - \phi_{\vec{r}})^2 \rangle_0 = \frac{2}{N} \sum_{\vec{q}} (1 - \lambda_{\vec{q}}) \langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_0, \quad (5.21)$$

onde $\lambda_{\vec{q}} = \frac{1}{2}(\cos q_x a + \cos q_y a)$ e

$$\langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_0 = \frac{k_B T}{2(\gamma_q + \gamma_{qz})}. \quad (5.22)$$

Similarmente, podemos escrever

$$\langle \cos(\phi_{\vec{r}+\vec{c}} - \phi_{\vec{r}}) \rangle_0 = e^{-\frac{1}{2} \langle (\phi_{\vec{r}+\vec{c}} - \phi_{\vec{r}})^2 \rangle_0},$$

resultando em

$$\langle (\phi_{\vec{r}+\vec{c}} - \phi_{\vec{r}})^2 \rangle_0 = \frac{2}{N} \sum_{\vec{q}} (1 - \lambda_{\vec{q}}^z) \langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_0, \quad (5.23)$$

onde $\lambda_{\vec{q}}^z = \cos q_z c$. Deste modo, (5.18) toma o seguinte aspecto

$$\begin{aligned} \langle [\mathcal{H}] \rangle_0 &= -\frac{Jp}{2} \sum_{\vec{r}, \vec{a}} (1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0) e^{-\frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} (1 - \lambda_{\vec{q}}) \langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_0} \\ &\quad - \frac{p_z J_z}{2} \sum_{\vec{r}, \vec{c}} (1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0) e^{-\frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} (1 - \lambda_{\vec{q}}^z) \langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_0} \\ &\quad + \sum_{\vec{r}} D \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0 \end{aligned} \quad (5.24)$$

onde voltamos a usar as hipóteses $S_{\vec{r}}^z \approx S_{\vec{r}+\vec{a}}^z$ e $S_{\vec{r}}^z \approx S_{\vec{r}+\vec{c}}^z$. Podemos, ainda, somar sobre \vec{a} , \vec{c} e \vec{r} , pois o termo de flutuação de spin (5.19) independe deles, restando, somente, uma soma sobre \vec{q} , como podemos ver na expressão abaixo

$$\begin{aligned} \langle [\mathcal{H}] \rangle_0 &= -2JpN(1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0) e^{-\frac{1}{2N} \sum_{\vec{q}} (2 - (\cos q_x a + \cos q_y a)) \langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_0} \\ &\quad - p_z J_z N(1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0) e^{-\frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} (1 - \cos q_z c) \langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_0} \\ &\quad + \frac{D N k_B T}{\Omega \frac{2}{2}}. \end{aligned} \quad (5.25)$$

Reunindo os valores médios avaliados e substituindo-os na desigualdade de Bogoliubov (2.11), obtemos

$$\begin{aligned}
\Phi(\gamma, \gamma_z) &= -\frac{k_B T}{2} \sum_{\vec{q}} \ln \frac{\pi}{\beta(\gamma_q + \gamma_{qz})} - \frac{k_B T}{2} \sum_{\vec{q}} \ln \frac{\pi}{\beta \Omega} \\
&- 2JpN(1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0) e^{-\frac{1}{2N} \sum_{\vec{q}} (2 - (\cos q_x a + \cos q_y a)) \langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_0} \\
&- p_z J_z N(1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0) e^{-\frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} (1 - \cos q_z c) \langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_0} \\
&- \left(2 - \frac{D}{\Omega}\right) \frac{N k_B T}{2}. \tag{5.26}
\end{aligned}$$

Agora, finalmente, podemos aplicar o PVB. Vamos, então, minimizar $\Phi(\gamma, \gamma_z)$ com relação aos parâmetros variacionais γ e γ_z a partir das condições

$$\frac{\partial \Phi(\gamma, \gamma_z)}{\partial \gamma} = 0, \text{ (a)} \quad \text{e} \quad \frac{\partial \Phi(\gamma, \gamma_z)}{\partial \gamma_z} = 0. \text{ (b)} \tag{5.27}$$

Antes de avaliarmos (5.27), vamos definir η_{xy} e η_z como

$$\eta_{xy} = \frac{1}{2N} \sum_{\vec{q}} [2 - (\cos q_x a + \cos q_y a)] \langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_0, \tag{5.28}$$

$$\eta_z = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} (1 - \cos q_z c) \langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_0. \tag{5.29}$$

Com o intuito de tornar mais claro o cálculo envolvido na minimização de $\Phi(\gamma, \gamma_z)$ com relação aos parâmetros variacionais γ e γ_z , vamos quebrar a equação (5.26) numa soma de três termos dependentes de γ e γ_z , a saber: Φ_1 , Φ_2 e Φ_3 , mais um termo independente deles que não vamos rotular, já que será irrelevante no processo de minimização. Seja, então

$$\Phi_1 = \frac{k_B T}{2} \sum_{\vec{q}} \ln(\gamma_q + \gamma_{qz}), \tag{5.30}$$

$$\Phi_2 = -2JpN(1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0) e^{-\eta_{xy}}, \tag{5.31}$$

$$\Phi_3 = -J_z p_z N(1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0) e^{-\eta_z}. \tag{5.32}$$

Da condição (a) de (5.27), temos que

$$\frac{\partial \Phi(\gamma, \gamma_z)}{\partial \gamma} = \frac{\partial \Phi_1(\gamma, \gamma_z)}{\partial \gamma} + \frac{\partial \Phi_2(\gamma, \gamma_z)}{\partial \gamma} + \frac{\partial \Phi_3(\gamma, \gamma_z)}{\partial \gamma} \tag{5.33}$$

Avaliando as derivadas que surgem na igualdade acima, obtemos

$$\frac{\partial \Phi_1(\gamma, \gamma_z)}{\partial \gamma} = \frac{k_B T}{2} \sum_{\vec{q}} \frac{pJ(2 - \cos q_x a - \cos q_y a)}{\gamma_q + \gamma_{qz}} \equiv \frac{k_B T}{2} \sum_{\vec{q}} \frac{\gamma_q}{\gamma(\gamma_q + \gamma_{qz})}, \tag{5.34}$$

onde utilizamos as definições de γ_q e γ_{qz} .

$$\frac{\partial \Phi_2(\gamma, \gamma_z)}{\partial \gamma} = 2pJN(1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0) e^{-\eta_{xy}} \frac{\partial \eta_{xy}}{\partial \gamma} \tag{5.35}$$

$$\frac{\partial \Phi_3(\gamma, \gamma_z)}{\partial \gamma} = p_z J_z N (1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0) e^{-\eta_z} \frac{\partial \eta_z}{\partial \gamma}. \quad (5.36)$$

A partir das definições (5.28), (5.29) e da Eq.(5.22) podemos avaliar $\frac{\partial \eta_{xy}}{\partial \gamma}$ e $\frac{\partial \eta_z}{\partial \gamma}$, como mostrado abaixo

$$\begin{aligned} \frac{\partial \eta_{xy}}{\partial \gamma} &= -\frac{k_B T}{4N} \sum_{\vec{q}} \frac{pJ(2 - \cos q_x a - \cos q_y a)^2}{(\gamma_q + \gamma_{qz})^2} \\ &\equiv -\frac{k_B T}{4N p J} \sum_{\vec{q}} \left(\frac{\gamma_q}{\gamma(\gamma_q + \gamma_{qz})} \right)^2. \end{aligned} \quad (5.37)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \eta_z}{\partial \gamma} &= -\frac{k_B T}{2N} \sum_{\vec{q}} \frac{pJ(2 - \cos q_x a - \cos q_y a)(1 - \cos q_z c)}{(\gamma_q + \gamma_{qz})^2} \\ &\equiv -\frac{k_B T}{2N p_z J_z} \sum_{\vec{q}} \frac{\gamma_q \gamma_{qz}}{(\gamma_z \gamma)(\gamma_q + \gamma_{qz})^2}, \end{aligned} \quad (5.38)$$

Reunindo as derivadas parciais obtidas acima e substituindo-as em (5.33), chegamos a

$$\frac{k_B T}{2\gamma} \sum_{\vec{q}} \frac{\gamma_q}{\gamma_q + \gamma_{qz}} \left[1 - (1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0) \left(\frac{\gamma_q}{\gamma(\gamma_q + \gamma_{qz})} e^{-\eta_{xy}} + \frac{\gamma_{qz}}{\gamma_z(\gamma_q + \gamma_{qz})} e^{-\eta_z} \right) \right] = 0 \quad (5.39)$$

A equação acima pode ser satisfeita fazendo cada termo na soma sobre \vec{q} nulo. Feito isso, podemos somar sobre \vec{q} na expressão entre colchetes e fazer uso das definições (5.28), (5.29) e da Eq.(5.21) para obtermos

$$(1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0) (2Jp\eta_{xy} e^{-\eta_{xy}} + J_z p_z \eta_z e^{-\eta_z}) = \frac{k_B T}{2}. \quad (5.40)$$

A aplicação da condição (b) de (3.28) nos leva a mesma equação acima. Portanto, temos duas incógnitas e uma equação. Entretanto, investigando as equações (5.20) a (5.23), podemos encontrar uma outra equação envolvendo γ e γ_z . Escrevendo (5.22) em termos de $\lambda_{\vec{q}}$ e $\lambda_{\vec{q}}^z$ encontramos

$$\langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_0 = \frac{k_B T}{2[2\gamma p J(1 - \lambda_{\vec{q}}) + \gamma_z p_z J_z(1 - \lambda_{\vec{q}}^z)]},$$

substituindo a expressão acima em (5.28) chegamos a

$$\eta_{xy} = \frac{k_B T}{2N} \sum_{\vec{q}} \frac{(1 - \lambda_{\vec{q}})}{2\gamma p J(1 - \lambda_{\vec{q}}) + \gamma_z p_z J_z(1 - \lambda_{\vec{q}}^z)}. \quad (5.41)$$

Procedimento análogo nos leva à expressão abaixo para η_z

$$\eta_z = \frac{k_B T}{2N} \sum_{\vec{q}} \frac{(1 - \lambda_{\vec{q}}^z)}{2\gamma p J(1 - \lambda_{\vec{q}}) + \gamma_z p_z J_z(1 - \lambda_{\vec{q}}^z)}. \quad (5.42)$$

Se multiplicarmos (5.41) por $2\gamma pJ$ e (5.42) por $\gamma_z p_z J_z$, e depois somarmos, obteremos

$$2\gamma pJ\eta_{xy} + \gamma_z \eta_z J_z p_z = \frac{k_B T}{2}, \quad (5.43)$$

dessa forma, conseguimos duas equações que poderão, em princípio, serem resolvidas para nos dar os parâmetros variacionais γ e γ_z como função das variáveis presentes no hamiltoniano que define o modelo. Comparando as equações (5.40) e (5.43), podemos identificar

$$\gamma = [1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0] e^{-\eta_{xy}}, \quad (5.44)$$

$$\gamma_z = [1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0] e^{-\eta_z}. \quad (5.45)$$

Entretanto, desacoplar as equações acima é uma tarefa difícil e, por isso, vamos proceder de modo análogo ao capítulo 4.

Iniciamos calculando as flutuações quadráticas η_{xy} e η_z no regime de longos comprimentos de onda. Após realizarmos a integração obtemos as expressões abaixo:

$$\eta_{xy} = \frac{k_B T}{2\gamma pJ} F(g, h, \xi) \quad \text{e} \quad \eta_z = \frac{k_B T}{2\gamma pJ} \left[\frac{1 - 2F(g, h, \xi)}{gh\xi} \right], \quad (5.46)$$

onde definimos $g = \frac{\gamma_z}{\gamma}$, $h = \frac{p_z}{p}$ e $\xi = \frac{J_z}{J}$. $F(g, h, \xi)$ é dado por

$$F(g, h, \xi) = \frac{1}{3} \left[\frac{\arctan(gh\xi)^{\frac{1}{2}}}{(gh\xi)^{\frac{1}{2}}} + \frac{1}{2} - \frac{1}{2} gh\xi \ln \left(1 + \frac{1}{gh\xi} \right) \right]. \quad (5.47)$$

Vamos definir $Q = e^{-\eta_{xy}}$, $\alpha = \frac{\eta_z}{\eta_{xy}}$ e $t = \frac{k_B T}{J}$, com o intuito de reescrever a equação (5.43) em função desses parâmetros. A partir dessas definições, encontramos $\eta_{xy} = -\ln Q$ e $\eta_z = -\alpha \ln Q$, que quando substituídas nas expressões (5.44) para γ e (5.45) para γ_z resultam em

$$\gamma = [1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0] Q \quad \text{e} \quad \gamma_z = [1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0] Q^\alpha,$$

substituindo as equações acima em (5.43), encontramos

$$Q \ln Q [2 + h\xi \alpha Q^{\alpha-1}] = \frac{-t}{2p [1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0]}. \quad (5.48)$$

A expressão acima se assemelha àquela obtida no capítulo 4, a saber Eq.(4.19). Aqui, como no capítulo anterior, nos deparamos com uma fórmula para Q de difícil manipulação analítica, como se pode ver das equações (5.46) e (5.47) para η_{xy} . Procedendo de modo análogo ao capítulo 4, lançaremos mão de uma aproximação para $F(g, h, \xi)$, a saber:

$$F_{aprox}(g, h, \xi) \approx \frac{1}{2 + gh\xi}. \quad (5.49)$$

Essa equação implica que $\alpha \approx 1$ e, portanto, $\eta_z \approx \eta_{xy}$, significando que as flutuações quadráticas médias não são muito diferentes nas interações intraplanar e interplanar. A validade de nossa aproximação já foi estudada no capítulo anterior, quando tínhamos $F_{approx}(g)$, ou seja, uma função de uma única variável, mas agora temos uma função de três variáveis g, h e ξ . Apesar disso, se fixarmos duas variáveis e analisarmos o comportamento de $F(g, h, \xi)$ em função de uma única variável, então o estudo realizado, anteriormente, garante que o erro envolvido nessa aproximação é menor que 10%. Além disso, casos limites de fácil acesso analítico serão obtidos e comparados com aqueles obtidos por outros métodos analíticos disponíveis na literatura, o que poderá ratificar a validade de nossa aproximação.

Com efeito, substituindo $\alpha = 1$ em (5.48), chegamos a

$$Q \ln Q [2 + h\xi] = \frac{-t}{2p[1 - \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0]}, \quad (5.50)$$

que é uma fórmula muito mais simples de se tratar. Analisaremos, a seguir, os resultados fornecidos pela equação acima, em alguns casos limites de interesse.

Tomando os limites $J_z = 0$ e $D \rightarrow \infty$, no hamiltoniano (5.1), obtemos o modelo rotor planar diluído, para o qual $\langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0 \rightarrow 0$, ou seja, não há dinâmica de spin fora do plano, e a equação (5.50) se reduz a

$$Q \ln Q = \frac{-t}{4p}. \quad (5.51)$$

A temperatura crítica é encontrada usando o fato de $\langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0 \propto t$, e sabendo que na temperatura de transição, a variável Q salta para zero, ou seja, temos a condição abaixo

$$\left. \frac{dQ}{dt} \right|_{t_c} \rightarrow -\infty \quad \text{ou} \quad \left. \frac{dt}{dQ} \right|_{t_c} \rightarrow 0. \quad (5.52)$$

Aplicando essa condição em (5.51), obtemos $Q = e^{-1}$ e, substituindo-o, outra vez em (5.51), chegamos numa expressão simples para a temperatura crítica reduzida:

$$t_c = 4pe^{-1}. \quad (5.53)$$

Note que a temperatura de transição t_c é função da concentração de ligação p e, quando tomamos o limite $p \rightarrow 1$, recuperamos o valor de t_c obtido no capítulo anterior para o modelo rotor planar puro. A temperatura t_c aqui encontrada para o modelo rotor planar diluído, via PVB, é idêntica àquela obtida via AHAC [24], o que já era de se esperar haja vista a discussão realizada no capítulo 3 a respeito da equivalência entre os dois métodos quando utilizamos um hamiltoniano tentativa harmônico no PVB. Além disso, a aproximação de campo médio (ACM) [42] nos dá $t_c = 2pJ$, resultado bem diferente daquele obtido aqui.

Contudo, tanto o PVB quanto a ACM, fornece $t_c \rightarrow 0$ quando $p \rightarrow 0$, em contraste com a existência esperada de um valor finito para a concentração crítica (espera-se para uma rede quadrada $p_c = \frac{1}{2}$ [34]). Essa discrepância entre o valor aqui encontrado e aquele esperado para concentração crítica, pode ser justificado pelo fato de que em modelos bidimensionais, efeitos de vórtices são importantes, conforme discussão no capítulo anterior. Em [24], os autores utilizaram correção de vórtices no cálculo da concentração crítica do rotor planar diluído, obtendo um valor não-nulo para p_c , a saber: $p_c = 0,3927$. Resultado bem melhor que os obtidos via ACM e PVB, sendo comparável ao resultado exato.

Vamos, agora, obter a concentração crítica p_c para o modelo XY tridimensional anisotrópico diluído descrito por (5.1). Primeiro, aplicamos a condição (5.52) em (5.50), com $\langle (S_r^z)^2 \rangle_0$ dado por (5.19), conseguindo $Q = e^{-1}$. Feito isso, voltamos à expressão (5.50) e substituímos o valor encontrado para Q , resultando na expressão abaixo para t_c

$$t_c = \frac{\kappa}{\frac{\kappa}{2\rho} + 1}, \quad (5.54)$$

onde $\kappa = 2pe^{-1}(2 + h\xi)$ e $\rho = (D/J + 2p + p_z\xi)$. Observando a expressão acima, notamos que $t_c \rightarrow 0$ quando $p \rightarrow 0$, isto é, não observamos um valor finito para a concentração crítica. Essa é uma dificuldade imposta pelo método aqui utilizado. Segundo [9], aproximações de campo médio aplicada a sistemas com interações magnéticas de curto alcance e forte diluição não fornecem resultados precisos, visto a sua incapacidade em prever uma concentração crítica não nula.

Capítulo 6

Análise Numérica do Modelo de Heisenberg Clássico Anisotrópico Tridimensional na Presença de um Campo Cristalino

No capítulo 4, estudamos o modelo de Heisenberg clássico anisotrópico tridimensional na presença de um campo cristalino por meio do PVB. Obtivemos expressões para as temperaturas de transição em alguns casos limites de fácil acesso analítico, tais como: o modelo rotor planar, o modelo XY bidimensional e o modelo de Heisenberg isotrópico bidimensional. Além disso, encontramos uma expressão para a magnetização e calculamos o valor da magnetização nos casos limites supracitados. Contudo, como enfatizado no capítulo em questão, o estudo analítico considerando variações arbitrárias nos parâmetros definidos no hamiltoniano (4.1), ou seja, $0 \leq \lambda < 1$, $0 \leq \eta < 1$, $-\infty < D/J < \infty$ e $0 \leq J_z/J < \infty$ são complicadas de serem analisadas de um ponto de vista totalmente analítico. Portanto, um estudo numérico é necessário para que regiões intermediárias sejam analisadas e a física da transição de fase seja elucidada de modo mais geral.

Neste capítulo, daremos continuidade ao estudo do modelo de Heisenberg iniciado no capítulo 4, mas numa abordagem numérica. Vamos construir e analisar vários gráficos de grandezas termodinâmicas de interesse, tais como: magnetização, temperatura de transição e a flutuação de spin fora do plano, além de esclarecer as influências das anisotropias λ e η nas transições de fase.

6.1 A Anisotropia λ

Nesta seção, estudaremos o comportamento da magnetização, da temperatura de transição e da flutuação de spin fora do plano em função do parâmetro λ . Trataremos da anisotropia na região de plano fácil, ou seja, $0 \leq \lambda < 1$, na qual os spins tendem a se

alinhar no plano no estado fundamental, isto é, estado de mais baixa energia. Em toda a análise desta seção, fixaremos $\eta = 0$ nas equações obtidas no capítulo 4 e, dessa forma, poderemos estudar, unicamente, o efeito do parâmetro λ .

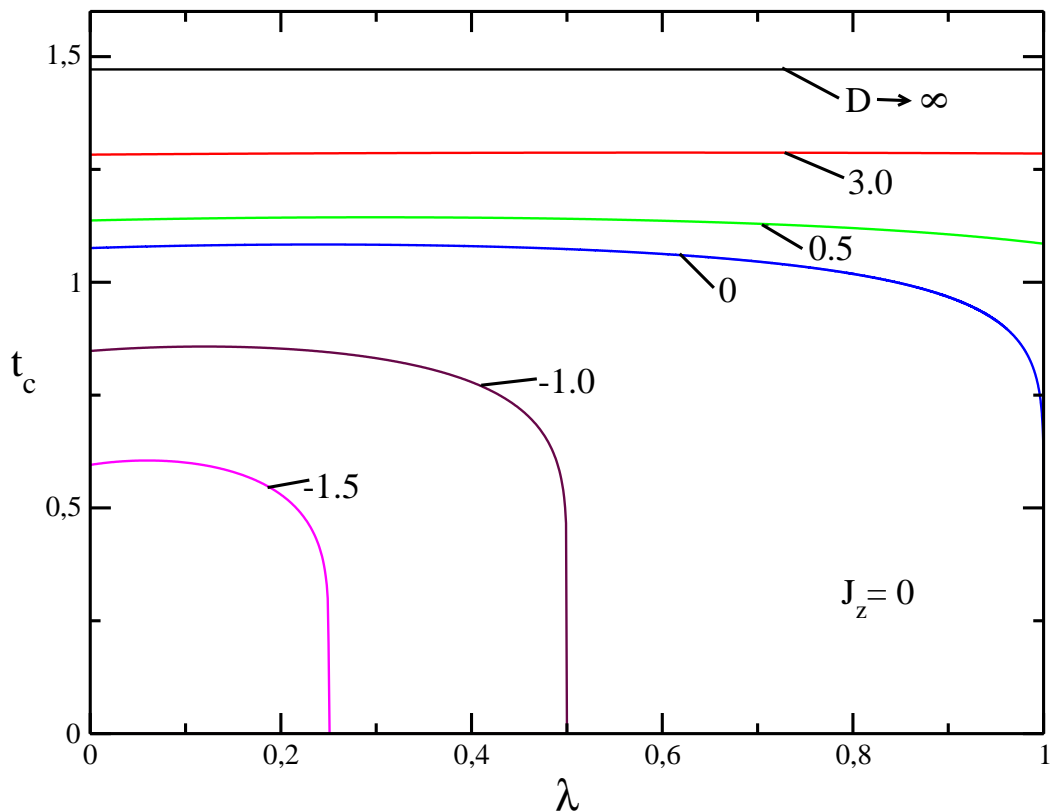


Figura 6.1: Temperatura de transição reduzida $t_c = \frac{k_B T_c}{J}$ em função do parâmetro λ para $J_z = 0$. Os números em cada curva se referem aos valores da anisotropia reduzida D/J .

Iniciamos esta seção, estudando o modelo bidimensional tomando $J_z = 0$ no hamiltoniano (4.1). Nesse limite, estudamos o comportamento da temperatura de transição t_c como função da anisotropia de spin λ para alguns valores de anisotropia cristalina reduzida D/J . Na figura 6.1, notamos que quando $\lambda = 0$ e $D/J = 0$, encontramos $t_c = 1,076$, valor obtido para o modelo XY bidimensional, de maneira puramente analítica, no capítulo 4. Quando deixamos λ assumir valor não nulo, notamos que a temperatura de transição varia suavemente como função da anisotropia de spin, exceto quando $\lambda \rightarrow 1$. Nesse limite, a temperatura de transição cai abruptamente para zero, o que concorda com o resul-

tado previsto na literatura [15], já que em duas dimensões, não é esperado a ocorrência de transição de fases para o modelo de Heisenberg isotrópico à temperatura diferente de zero. Contudo, a presença de uma pequena anisotropia cristalina ($D/J = 0.5$), já é suficiente para que uma transição de fase seja observada em temperatura não nula (vide figura 6.1), pois a presença dessa anisotropia cristalina finita, quebra a simetria da fase ordenada e,

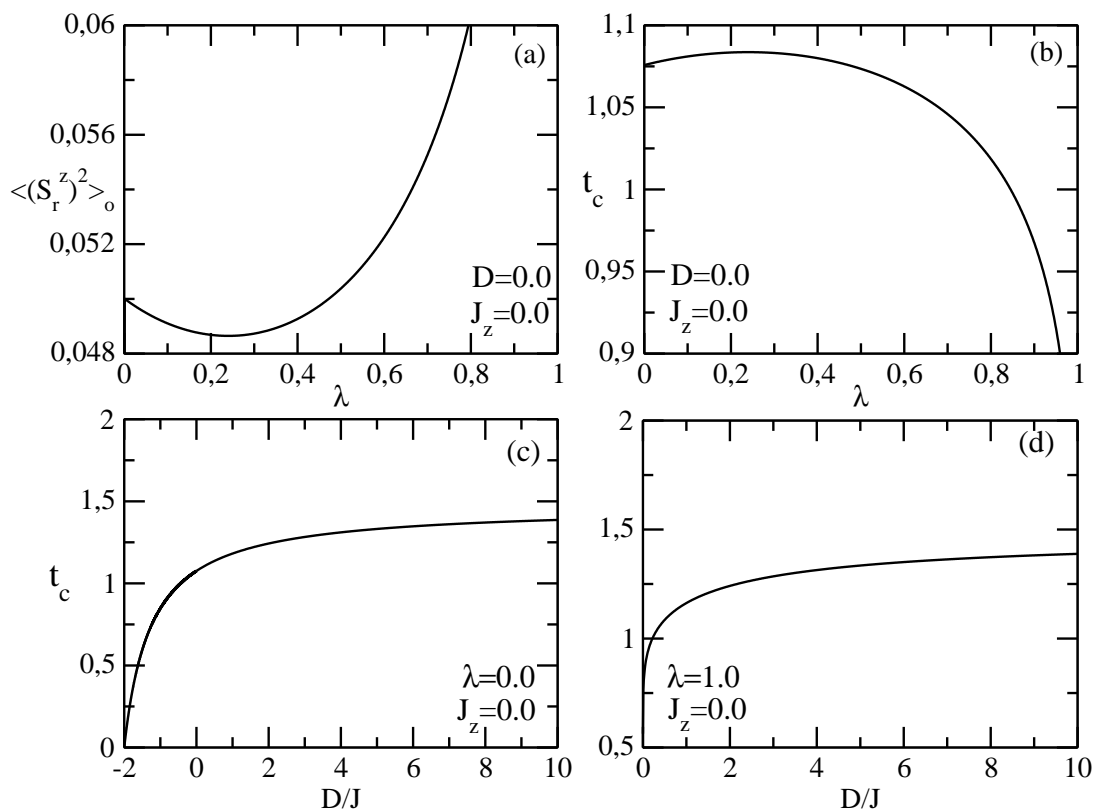


Figura 6.2: (a) Flutuação de spin fora do plano $\langle (S_r^z)^2 \rangle_0$ para $k_B T/J = 0.2$ e (b) a temperatura de transição reduzida t_c para $D = 0$ e $J_z = 0$. A temperatura crítica é mostrada em (c) para $\lambda = 0$ e em (d) para $\lambda = 1.0$.

assim, é esperada a existência de ordem de longo alcance numa temperatura finita. Para valores maiores de $D > 0$, a temperatura de transição cresce com D (vide figura 6.1), o que é perfeitamente justificável, visto que o papel da anisotropia cristalina D é tentar manter os spins no plano xy e, portanto, será necessário maior agitação térmica para desordenar o sistema, a fim de que se verifique a transição. No limite em que $D \rightarrow \infty$, isto é, forte anisotropia cristalina, a temperatura crítica t_c independe do parâmetro λ , já

que obtemos uma reta, como se percebe na figura 6.1. Essa característica é justificável, já que essa intensa anisotropia suprime a componente $S_{\vec{r}}^z$ o espaço de spin, e como na expressão do hamiltoniano (4.1), os parâmetros η e λ aparecem sempre acompanhados de $S_{\vec{r}}^z$, logo esses termos serão anulados independentemente de η e λ . Nesse limite, obtemos o rotor planar bidimensional, cujo valor da temperatura crítica está bem acima daquele obtido via simulação de Monte Carlo (vide tabela 6.1). Como discutido em capítulos an-

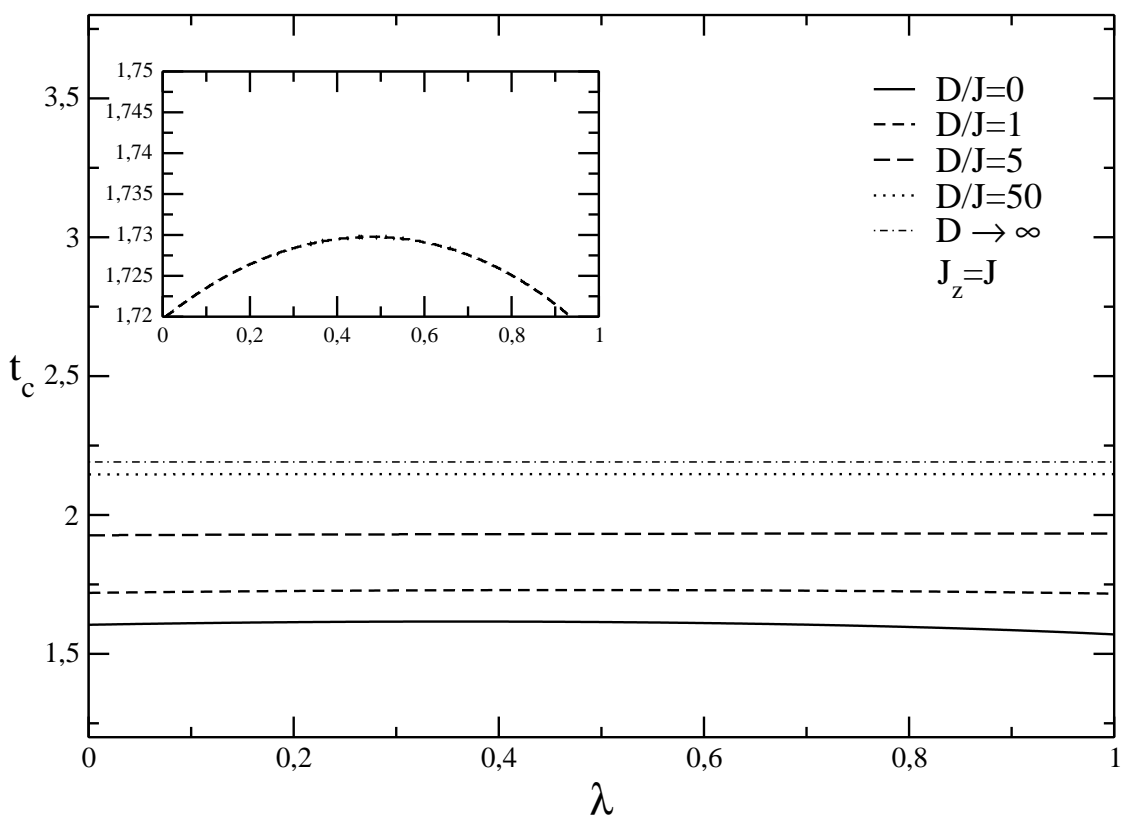


Figura 6.3: Temperatura crítica reduzida $k_B T_c / J = t_c$ em função da anisotropia λ para diferentes valores do campo cristalino reduzido D/J , no limite isotrópico $J_z = J$. O gráfico inserido representa a curva para $D/J = 1.0$ numa escala mais fina.

teriores, em modelos bidimensionais, efeitos de vórtices são os responsáveis por promover a transição, e como a aproximação aqui utilizada não leva em conta tais efeitos, então é compreensível essa discrepância entre o valor aqui obtido e aquele fornecido por Monte Carlo. Por outro lado, considerando $D < 0$, ao aumentarmos a intensidade do campo cristalino, a temperatura de transição t_c diminui, pois a componente z do spin é cada vez

Tabela 6.1: *Temperaturas críticas $\frac{k_B T_c}{J}$ para o modelo de Heisenberg anisotrópico com campo cristalino em alguns limites em comparação com resultados obtidos por outros métodos. Os símbolos 2-D e 3-D significam, respectivamente, bidimensional e tridimensional.*

Limites isotrópicos	MC ou séries	PVB
$D \rightarrow \infty, J_z = 0$ Rotor Planar 2-D	0, 90 ^a	1,472
$D \rightarrow \infty, J_z = J$ Rotor Planar 3-D	2, 17 ^b	2,190
$D = 0, J_z = 0, \lambda = 0$ Modelo XY 2-D	0, 78(2) ^c	1,076
$D = 0, J_z = J, \lambda = \eta = 0$ Modelo XY 3-D	1, 54(1) ^d , 1, 55 ^e	1,605
$D = 0, J_z = J, \lambda = \eta = 1$ Heisenberg isotrópico 3-D	1, 443 ^f	1,458

^aMonte Carlo Ref.[43]

^bMonte Carlo Ref.[30]

^cMonte Carlo Ref.[44]

^dMonte Carlo Ref.[45]

^eséries Ref. [46]

^fMonte Carlo Ref.[47]

mais realçada e, conseqüentemente, a magnetização no plano é diminuída. Com efeito, a temperatura crítica decresce. Finalmente, para $D/J < -2.0$ não há mais ordenamento no plano xy .

Nas figuras 6.2 (a) e (b), exibimos o comportamento da flutuação de spin fora do plano $\langle\langle S_{\vec{r}}^z \rangle\rangle_0$ e da temperatura de transição t_c , respectivamente, em função da anisotropia λ para $J_z = 0$ e $D = 0$. Observe que o gráfico (a) exibe um mínimo e o gráfico (b) um máximo para o mesmo valor de λ , tal característica se deve ao fato de que as flutuações de spin fora do plano são responsáveis por desordenar o sistema. Portanto, se $\langle\langle S_{\vec{r}}^z \rangle\rangle_0$ apresenta um mínimo para um determinado valor da anisotropia λ , então será necessário maior agitação térmica para desordenar o sistema, logo t_c exibe um máximo neste valor de λ . Apesar do gráfico (a) ter sido plotado para um valor específico de temperatura reduzida, a saber: $k_B T/J = 0,2$, o valor de λ para o qual $\langle\langle S_{\vec{r}}^z \rangle\rangle_0$ exibe um mínimo, não se altera se mudarmos a temperatura, já que pela expressão da flutuação de spin fora do plano em (4.7), vemos que $\langle\langle S_{\vec{r}}^z \rangle\rangle_0$ é linear com T . Além disso, veremos adiante que essa característica é observada para outros valores da anisotropia cristalina reduzida D/J e da razão entre as interações de troca J_z/J . Nas figuras 6.2 (c) e (d), mostramos o comportamento da temperatura crítica t_c em função da anisotropia cristalina reduzida D/J para $J_z = 0, \lambda = 0$ e $\lambda = 1$, respectivamente. Para $\lambda = 0$ em (c), note que não há mais transição se $D/J < -2$, e para $D/J = 10$, a temperatura crítica se aproxima do valor esperado para o modelo rotor planar bidimensional ($D \rightarrow \infty$), via PVB (vide tabela 6.1), portanto, esse valor de anisotropia cristalina já é considerado muito intenso.

Considerando $\lambda = 1$ em (d), observamos que só há transição para valores positivos do campo cristalino ($D > 0$).

Consideraremos, a partir de agora, o caso isotrópico tridimensional $J_z = J$. Como dito no início dessa seção, estamos fixando $\eta = 0$ e, portanto, $J_z = J$ não implica no modelo de Heisenberg isotrópico tridimensional, já que a interação interplanar se dá como no modelo XY . Na figura 6.3, apresentamos o comportamento da temperatura de transição t_c como função do parâmetro λ para alguns valores da anisotropia cristalina reduzida D/J . Para $D \rightarrow \infty$, notamos que a temperatura de transição não varia com λ , ou seja, é uma constante, a saber: $t_c = 2,190$. Essa temperatura crítica corresponde a do modelo rotor planar tridimensional, pois ao tomarmos o limite em que $D \rightarrow \infty$ suprimimos a componente S_r^z do espaço de spin, independentemente do valor do parâmetro λ , culminando com o valor nulo para a flutuação de spin fora do plano. Esse fato explica a não variação da temperatura crítica com a anisotropia λ . O valor aqui encontrado para t_c está em bom acordo com os resultados obtidos via simulação de Monte Carlo e AHAC (vide tabela 6.1). Quando fixamos $D/J = 50$ (linha pontilhada), que é um alto valor de anisotropia cristalina, mas um valor finito, observamos que a temperatura crítica varia muito lentamente com λ , pois não temos a flutuação de spin identicamente nulo, como no caso de anisotropia cristalina infinita. Para $\lambda = 0$ e $D = 0$ obtemos o modelo XY isotrópico tridimensional, cujo valor da temperatura de transição é $t_c = 1,603$, em bom acordo com a simulação de Monte Carlo (vide tabela 6.1). Da figura 6.3, notamos também, que a temperatura crítica cresce à medida que D/J cresce, pois quando aumentamos D , a flutuação de spin fora do plano diminui, isto é, há maior tendência para que as componentes de spin fiquem no plano. Logo, um aumento do campo cristalino D implica numa maior agitação térmica necessária para desordenar o sistema e, assim, verificar a transição de fase. O gráfico inserido na figura 6.3, tem o intuito de evidenciar a variação da temperatura de transição com λ , quando plotamos o gráfico numa escala adequada. Observamos que para $D/J = 1$, por exemplo, a temperatura apresenta um máximo para um determinado valor de λ . Esse ponto de máximo, pode ser melhor compreendido por meio da análise da flutuação de spin fora do plano $\langle (S_r^z)^2 \rangle_0$. Ao plotarmos o gráfico de $\langle (S_r^z)^2 \rangle_0$ em função de λ (ver figura 6.4 (c) e (d)), vemos que a flutuação de spin apresenta um mínimo, exatamente, no mesmo valor de λ para o qual a temperatura crítica apresenta um máximo (ver figura 6.4 (a) e (b)). Essa relação entre flutuação de spin fora do plano e temperatura de transição, se deve ao fato de que a transição de fase está associada com a dinâmica de spin fora do plano, pois em $T = 0$ os spins estão alinhados no plano xy e quando a temperatura é aumentada, as flutuações térmicas atuam desalinhando os spins

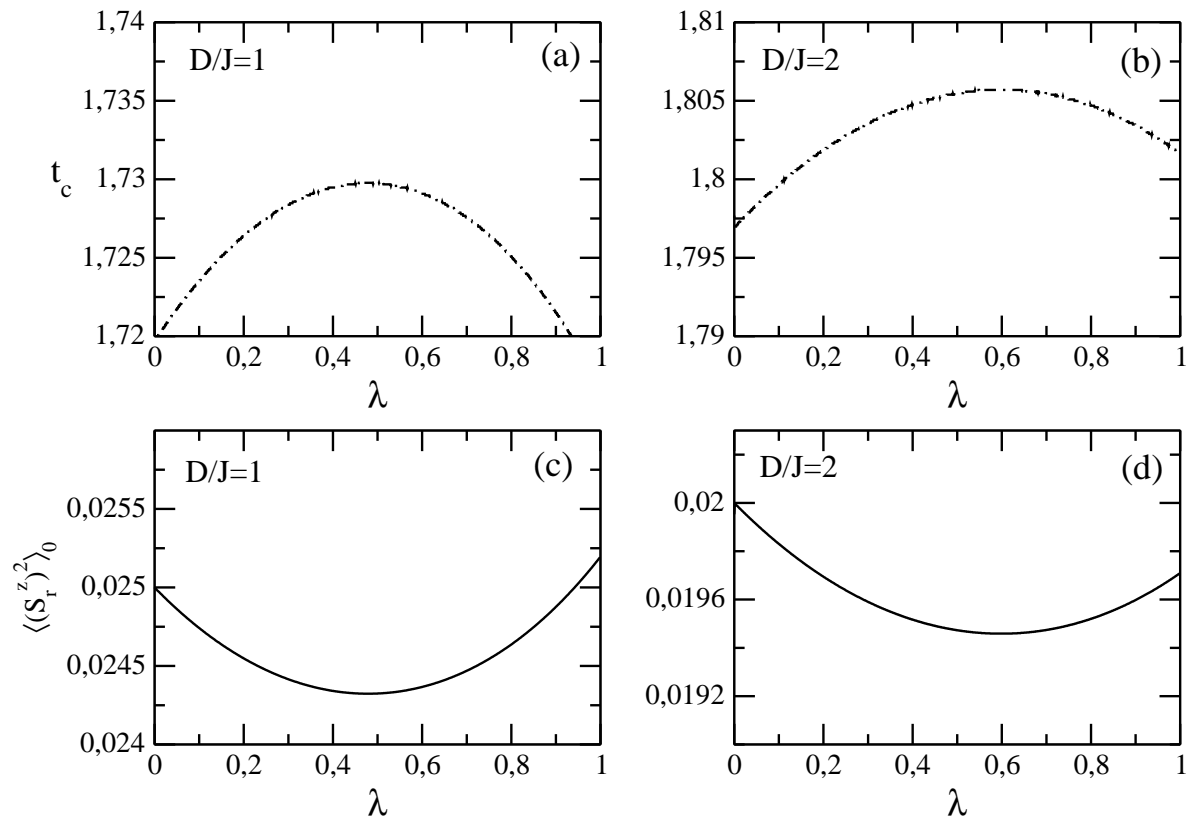


Figura 6.4: (a) e (b) temperatura crítica reduzida t_c em função da anisotropia λ para $D/J = 1,0$ e $D/J = 2,0$, respectivamente. (c) e (d) flutuação de spin fora do plano $\langle (S_r^z)^2 \rangle_0$ em função de λ para $D/J = 1,0$ e $D/J = 2,0$, respectivamente. Todas as curvas foram plotadas no limite isotrópico $J_z = J$. As curvas para $\langle (S_r^z)^2 \rangle_0$ foram traçadas para $t = 0, 2$.

e desviando-os do comportamento planar. Portanto, quanto maior a flutuação de spin menor a temperatura de transição, e quando a temperatura crítica exibir um máximo a flutuação de spin exibirá um mínimo. Nas figuras 6.4 e 6.5, as flutuações de spin foram traçadas para $\frac{k_B T}{J} = 0, 2$. Entretanto, essa escolha não implica perda de generalidade, como já discutido anteriormente.

A partir das figuras 6.4 e 6.5, podemos analisar o comportamento da flutuação de spin fora do plano $\langle (S_r^z)^2 \rangle_0$ em função da anisotropia λ , quando aumentamos o valor do campo cristalino D . A primeira observação se refere ao deslocamento para direita do seu ponto de mínimo, ou seja, o valor de λ para o qual a flutuação é mínima, se aproxima cada vez mais da unidade quando aumentamos D . Além disso, para D crescente e λ fixo, $\langle (S_r^z)^2 \rangle_0$

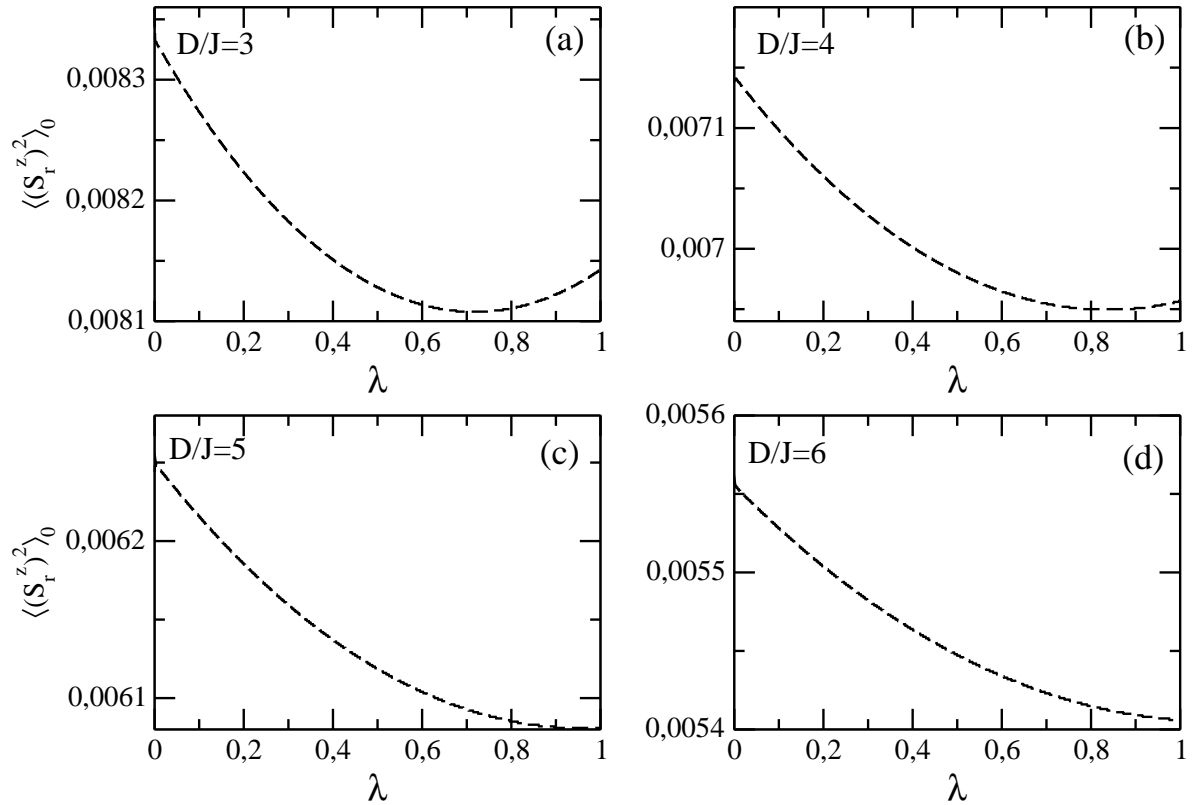


Figura 6.5: As curvas (a), (b), (c) e (d) mostram a flutuação de spin fora do plano $\langle (S_r^z)^2 \rangle_0$ em função do parâmetro λ para $D/J = 3$, $D/J = 4$, $D/J = 5$ e $D/J = 6$, respectivamente. Os gráficos foram traçados no limite isotrópico $J_z = J$ para $t = 0, 1$.

decrece, e no limite em que $D \rightarrow \infty$, $\langle (S_r^z)^2 \rangle_0 \rightarrow 0$, independentemente do parâmetro λ . Portanto, nesse limite, obtemos o modelo rotor planar tridimensional. Da nossa discussão acima, também podemos inferir que à medida que aumentamos D , o ponto de máximo da temperatura de transição se desloca para direita. Com efeito, vemos assim, como as anisotropias D e λ interferem na flutuação de spin fora do plano e, por conseguinte, na temperatura de transição.

Até agora, estudamos os limites bidimensional e tridimensional do hamiltoniano (4.1). O próximo objetivo é estudar o modelo no limite quase-bidimensional em que $J_z/J = 0,01$, ou seja, um fraco acoplamento interplanar. Nas figuras 6.6 e 6.7, exibimos o gráfico da flutuação de spin como função da temperatura reduzida $t = \frac{k_B T}{J}$ para alguns valores de λ , fixando $D = 0$. No limite em que $\lambda \rightarrow 0$ e $\eta \rightarrow 0$, chegamos ao modelo XY quase-

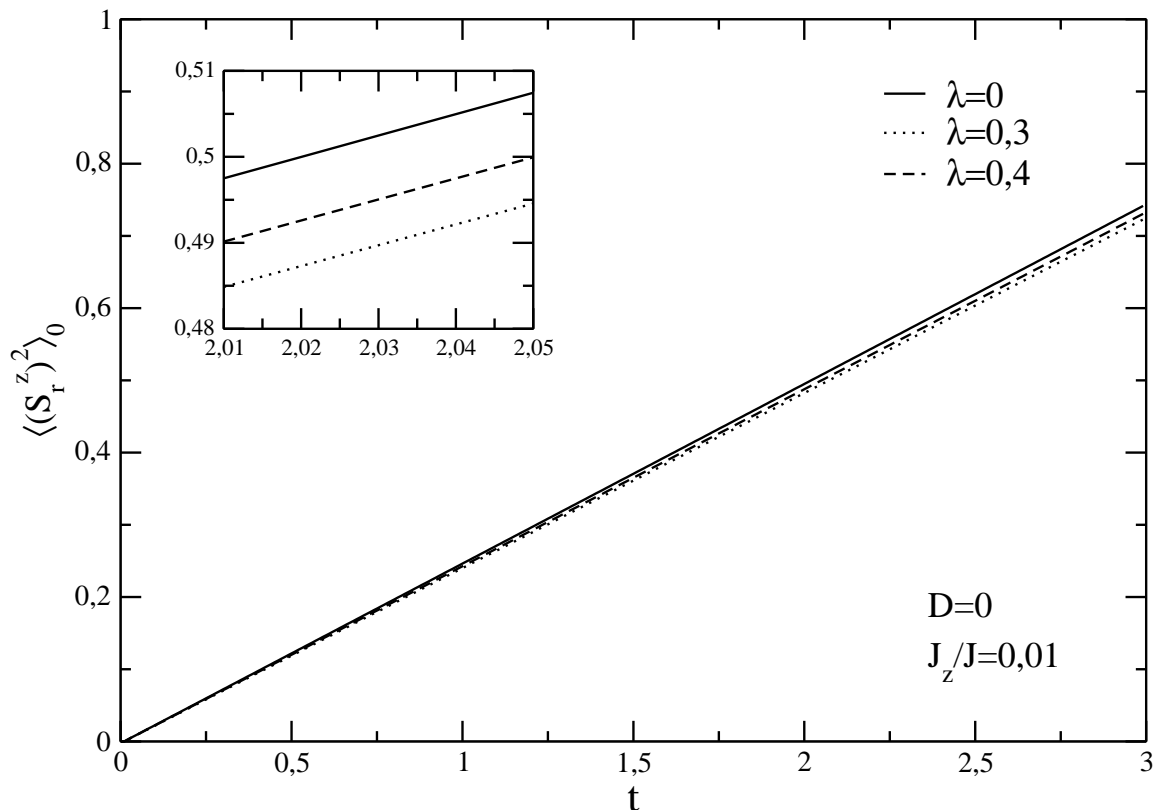


Figura 6.6: Flutuação de spin fora do plano $\langle (S_r^z)^2 \rangle_0$ em função da temperatura reduzida t para alguns valores da anisotropia λ . Ao plotarmos as curvas consideramos $D = 0$ e tomamos o limite quase-bidimensional $J_z/J = 0,01$. O gráfico inserido numa escala adequada, tem o intuito de evidenciar as diferenças entre as curvas.

bidimensional (linha contínua na figura 6.6). Nesse limite, a temperatura de transição do modelo de Heisenberg de plano fácil corresponde a do modelo XY . Ao aumentarmos o valor de λ de zero para 0,3 (linha pontilhada na figura 6.6), notamos que a flutuação de spin fora do plano diminui, o que implica num maior valor para temperatura de transição, conforme discussão realizada nos parágrafos anteriores. Entretanto, à medida que aumentamos o valor de λ de 0,3 para 0,4 (linha tracejada na figura 6.6), a flutuação de spin volta a crescer, aproximando-se do seu valor no limite XY . Para valores de λ maiores ainda (ver figura 6.7), a flutuação de spin cresce, ultrapassando o seu valor no limite XY . Da figura 6.7, vemos que para algum valor de λ entre 0,4 e 0,5, devemos encontrar uma reta na qual a flutuação de spin fora do plano seja idêntica a do modelo no limite XY . A

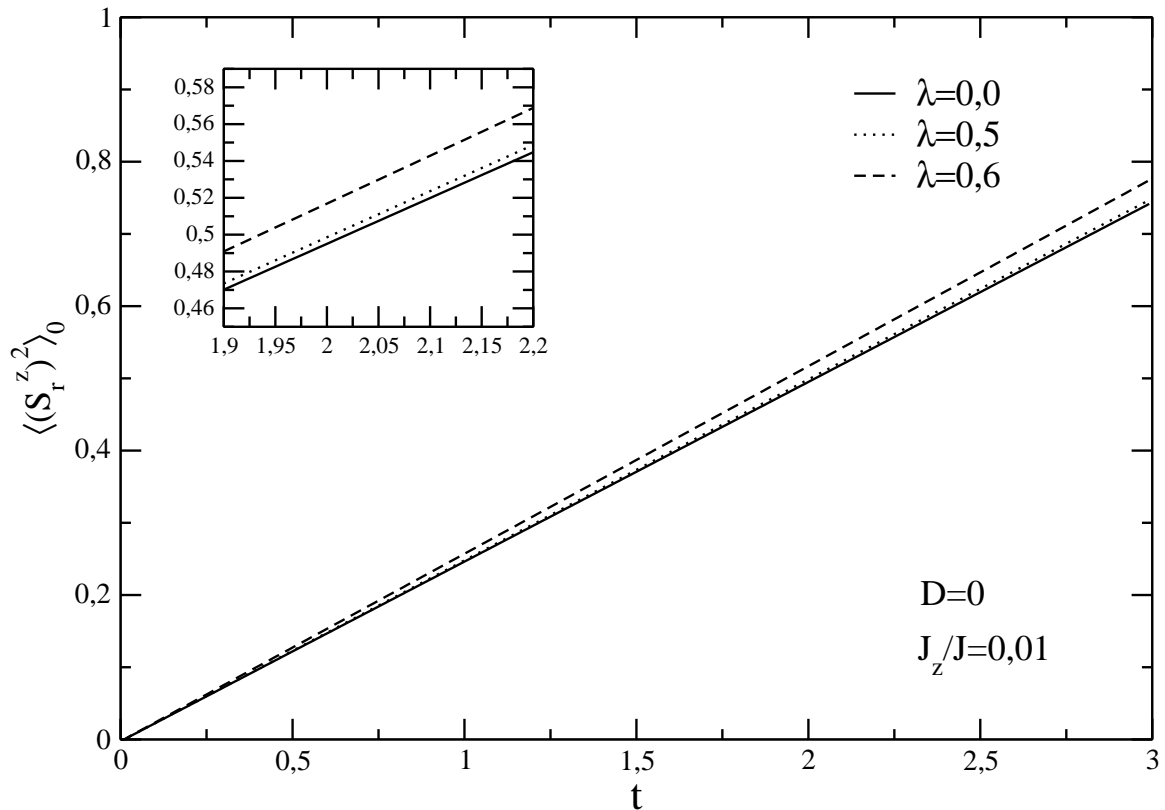


Figura 6.7: Flutuação de spin fora do plano $\langle (S_r^z)^2 \rangle_0$ em função da temperatura reduzida t para alguns valores da anisotropia λ . Ao plotarmos as curvas consideramos $D = 0$ e tomamos o limite quase-bidimensional $J_z/J = 0,01$. O gráfico inserido numa escala adequada, tem o intuito de evidenciar as diferenças entre as curvas.

partir da figura 6.8, notamos que o referido valor é $\lambda = 0,47326$. Para esse valor, o modelo de Heisenberg anisotrópico e o modelo XY apresentam a mesma flutuação de spin fora do plano e, portanto, a mesma temperatura de transição. Apesar de toda essa análise ter sido feita para os limites em que $\eta = 0$ e $D/J = 0$, observamos da figura 6.9 que mesmo para $D/J \neq 0$ existem valores de λ e η para os quais a flutuação de spin fora do plano do modelo de Heisenberg coincide com a do modelo XY . Além disso, ao aumentarmos D/J de zero (linha tracejada) para 0,1 (linha reta) os valores de λ em que os modelos XY e de Heisenberg apresentam a mesma temperatura crítica, crescem. Agora, se variarmos J_z/J de zero (linha reta) para 0,01 (linha pontilhada), fixando $D/J = 0$, notamos da figura 6.10 que ainda assim, obtemos valores para (η, λ) em que a flutuação de spin fora do plano

corresponde àquela do limite XY . Por outro lado, observamos da figura 6.11 que para

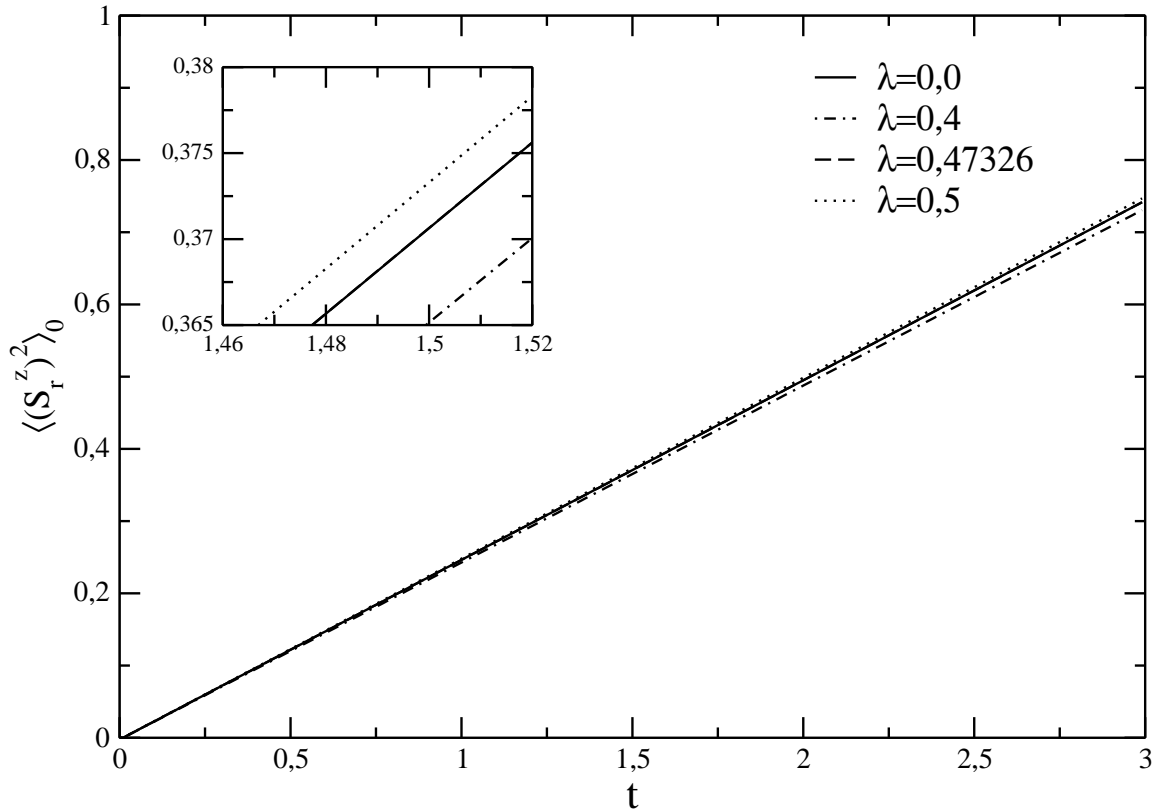


Figura 6.8: Flutuação de spin fora do plano $\langle (S_r^z)^2 \rangle_0$ em função da temperatura reduzida t para alguns valores da anisotropia λ . Ao plotarmos as curvas consideramos $D = 0$ e tomamos o limite quase-bidimensional $J_z/J = 0,01$. O gráfico inserido numa escala adequada, tem o intuito de evidenciar as diferenças entre as curvas.

$J_z/J = 0,9$ e $J_z/J = 1,0$ encontramos apenas valores negativos para λ e, portanto, sem correspondência com o modelo de Heisenberg, já que estamos nos restringindo a região de plano fácil, ou seja, $0 \leq \lambda < 1$. É bom lembrar que se fizermos $\lambda \rightarrow 0$ e $\eta \rightarrow 0$, mantendo $D = 0$, recuperamos o modelo XY , independentemente dos valores de J_z/J . O fato de que para certos valores de λ e η , os modelos XY e de Heisenberg apresentam a mesma flutuação de spin fora do plano e, logo, a mesma temperatura de transição, não implica que um modelo passou a ser o outro. Apenas poderíamos afirmar que o modelo de Heisenberg passou a ser o XY se comparássemos os expoentes críticos para os dois modelos, pois assim poderíamos analisar o comportamento de outras grandezas termodinâmicas

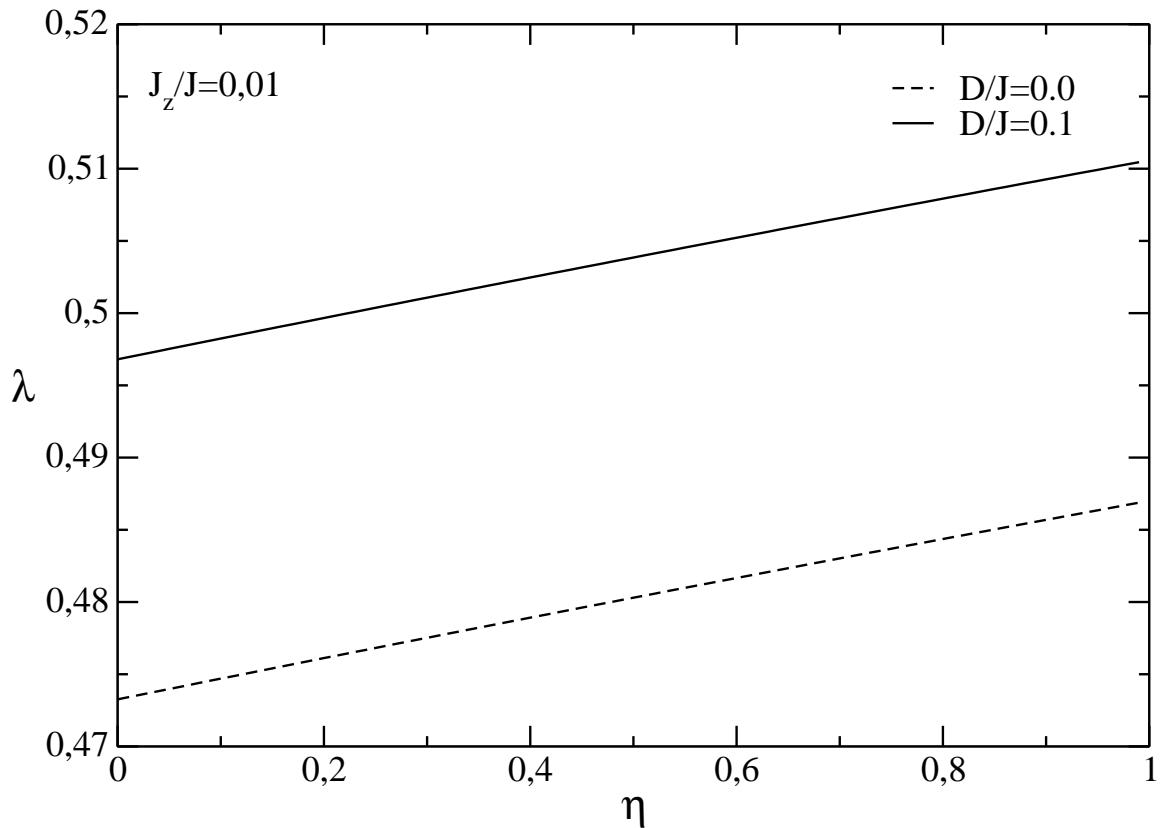


Figura 6.9: Valores das anisotropias λ e η para os quais a flutuação de spin fora do plano $\langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0$ do modelo de Heisenberg de plano fácil coincide com a do modelo XY . Nas curvas, consideramos o limite quase bidimensional $J_z/J = 0,01$ para as anisotropias cristalinas reduzidas $D/J = 0$ e $D/J = 0,1$.

na vizinhança da criticalidade. Entretanto, o método aqui utilizado, ou seja, o PVB, não é eficiente para determinarmos tais expoentes. Com efeito, a correspondência aqui referida entre ambos os modelos se restringe ao valor da temperatura de transição.

De agora em diante, passaremos a analisar o comportamento da componente x da magnetização m em função da temperatura reduzida $t = \frac{k_B T}{2}$ para alguns valores da anisotropia λ , fixando $J_z/J = 0,1$ e $D/J = 0$. Na figura 6.12, notamos que os valores da magnetização para $\lambda = 0,1$ e $\lambda = 0,2$ são muito parecidos, e para distingui-los é necessário o uso de uma escala apropriada. Com esse intuito, inserimos um gráfico que nos permite notar que para $\lambda = 0,2$ (linha tracejada) a curva de magnetização está acima daquela para $\lambda = 0,1$ (linha contínua), indicando que para este valor de λ a temperatura

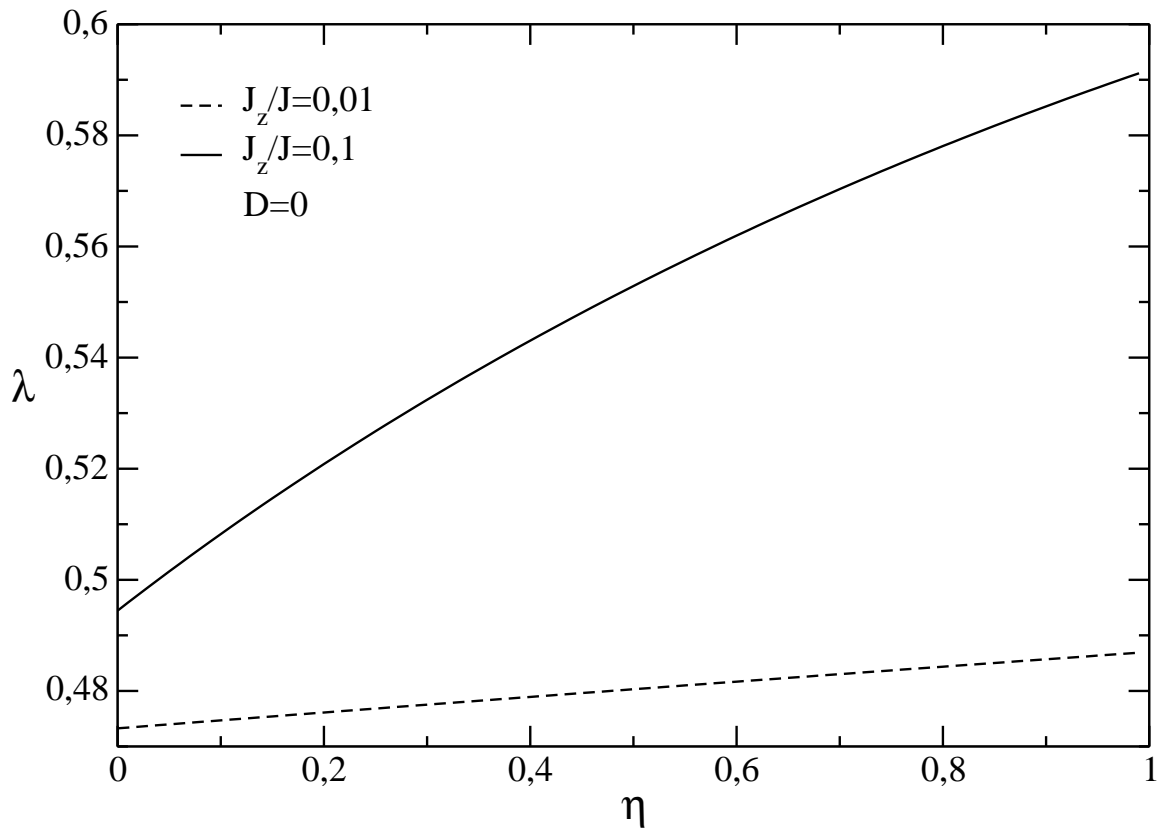


Figura 6.10: Valores das anisotropias λ e η para os quais a flutuação de spin fora do plano $\langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0$ do modelo de Heisenberg de plano fácil coincide com a do modelo XY . Nas curvas, consideramos o campo cristalino $D = 0$ nos limites quase-bidimensionais $J_z/J = 0,01$ e $J_z/J = 0,1$.

de transição é menor do que para aquele, já que a temperatura crítica é obtida quando a magnetização cai bruscamente. Nós observamos também que a magnetização não vai continuamente a zero, ao contrário, se aproxima descontinuamente do valor nulo. Com efeito, apesar de esperarmos uma transição de segunda ordem, isto é, a magnetização indo a zero continuamente quando atingimos a temperatura crítica, o método aqui utilizado nos fornece uma transição de primeira ordem. Conforme discussão do capítulo 4, essa é uma característica do método empregado. Por outro lado, a figura 6.13 mostra que para λ variando de 0,3 a 0,6, a temperatura na qual a magnetização cai abruptamente decresce com λ , isto é, a temperatura de transição diminui com λ , ao contrário da figura 6.12, na qual a temperatura de transição cresce com λ . Essa característica é esperada, pois da

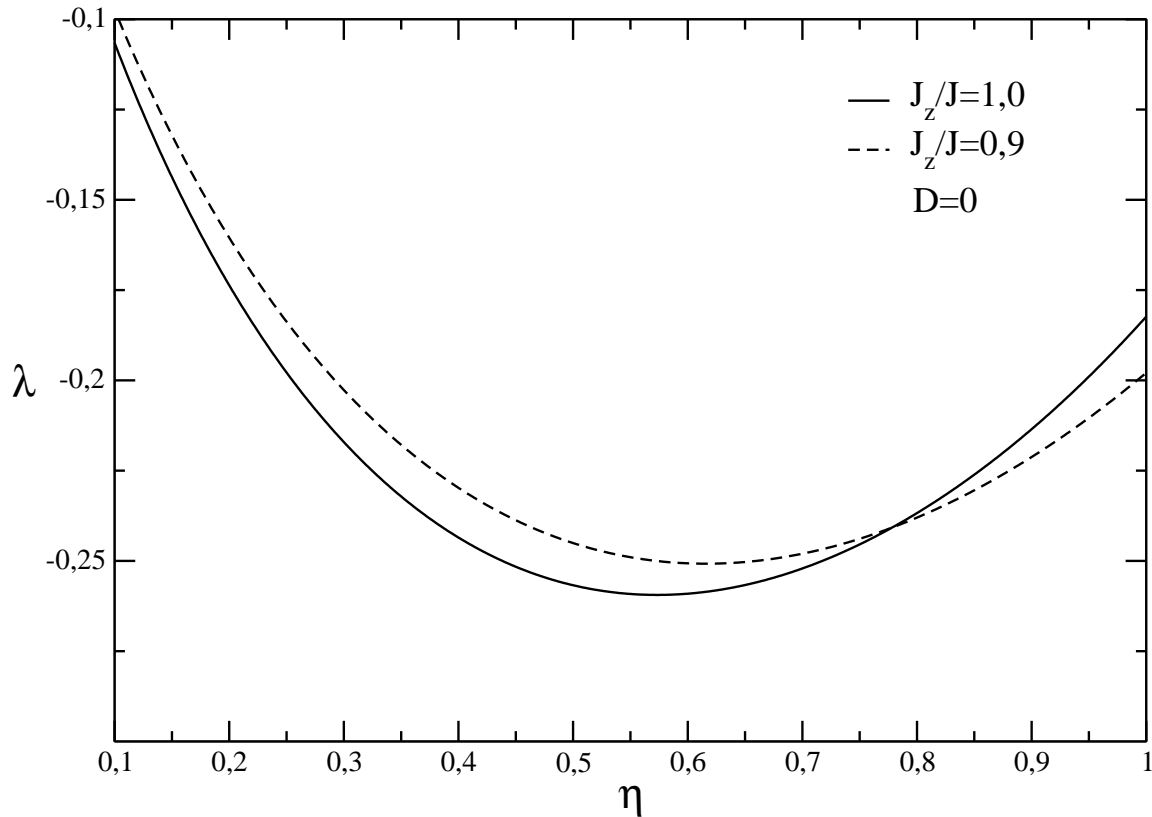


Figura 6.11: Valores das anisotropias λ e η para os quais a flutuação de spin fora do plano $\langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0$ do modelo de Heisenberg de plano fácil coincide com a do modelo XY . Nas curvas, consideramos o campo cristalino $D = 0$ nos limites isotrópico $J_z/J = 1,0$ e quase-isotrópico $J_z/J = 0,9$.

figura 6.4 notamos que a temperatura de transição exibe um máximo para um determinado λ . Além disso, da figura 6.14, observamos que de $\lambda = 0,7$ a $\lambda = 1,0$, não só a temperatura de transição diminui, mas também o espaçamento entre duas curvas adjacentes aumenta, sinalizando o fato de que a temperatura crítica passa a diminuir mais rapidamente.

6.2 O Parâmetro η

Nesta seção, estudaremos o comportamento da magnetização, da temperatura de transição e da flutuação de spin fora do plano, fixando o parâmetro λ e variando o parâmetro η . Para fim de análise, consideraremos $\lambda = 1$ e $0 \leq \eta < 1$ ao longo de toda seção. Primeiramente, vamos estudar o comportamento da temperatura de transição t_c

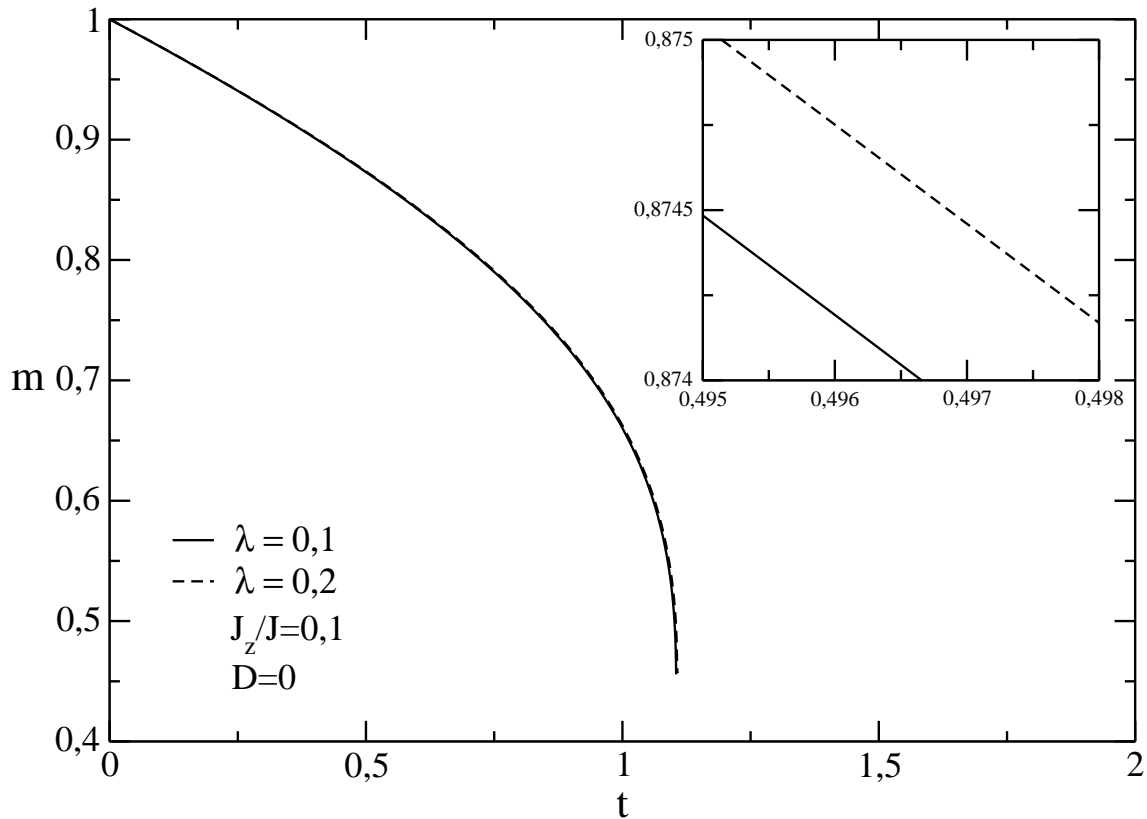


Figura 6.12: Magnetização m em função da temperatura reduzida t para $\lambda = 0,1$ e $\lambda = 0,2$, nos limites em que $J_z/J = 0,1$ e $D = 0$. O gráfico inserido, numa escala conveniente, mostra o comportamento distinto da magnetização para diferentes valores da anisotropia λ .

e da flutuação de spin fora do plano $\langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0$ como função da anisotropia η . Na figura 6.15, plotamos os gráficos de t_c e $\langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0$ contra η , no limite isotrópico $J_z = J$ para $D/J = 0$ e $D/J = 3$. Os pares de curvas (a) e (c), (b) e (d), ilustram o fato de que o valor de η para o qual a flutuação de spin é mínima, é o mesmo que corresponde ao máximo da temperatura crítica. Portanto, a mesma característica encontrada na seção anterior, quando variamos a anisotropia λ e mantivemos η fixo, está presente quando fixamos o parâmetro λ e deixamos o η variar. Além disso, as figuras 6.15 (b) e (d) traçadas para $D/J = 3$, em comparação com as curvas (a) e (c), plotadas para $D/J = 0$, mostram que à medida que aumentamos o campo cristalino D , o valor de η para o qual a flutuação de spin fora do plano $\langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_0$ é mínima e, por conseguinte, a temperatura de transição é

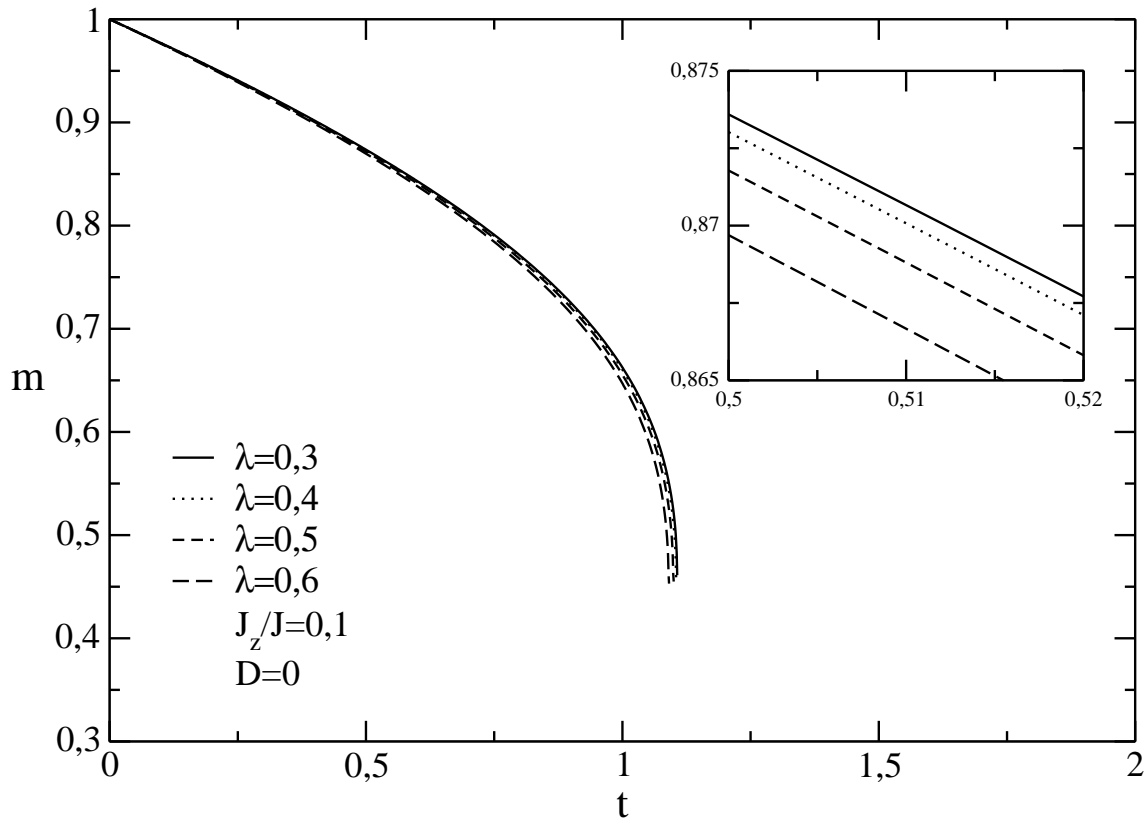


Figura 6.13: Magnetização m em função da temperatura reduzida t para alguns valores da anisotropia λ , nos limites em que $J_z/J = 0,1$ e $D = 0$. O gráfico inserido, numa escala conveniente, mostra o comportamento distinto da magnetização para diferentes valores de λ .

máxima, desloca-se para direita. Além disso, a partir da figura 6.15 (a) podemos obter o valor da temperatura de transição para o modelo de Heisenberg tridimensional, a saber: $t_c = 1,458$, em bom acordo com simulações de Monte Carlo (vide tabela 6.1).

Passaremos, agora, a estudar o comportamento da magnetização como função da temperatura para diversos valores de η , no limite isotrópico $J_z = J$, para $D/J = 0$ e $D/J \rightarrow \infty$. As figuras 6.16 (a) e (b), nos mostra que a temperatura crítica, ou seja, a temperatura na qual a magnetização cai bruscamente, varia muito lentamente com a anisotropia η . Essa variação é tão suave, que é necessário o uso de uma escala apropriada para distinguir o comportamento da magnetização como função de η . O gráfico inserido em 6.16 (a), nos mostra que à medida que aumentamos o valor de η de 0.1 até 0.3, o valor para o qual a magnetização cai bruscamente aumenta e, portanto, a temperatura crítica

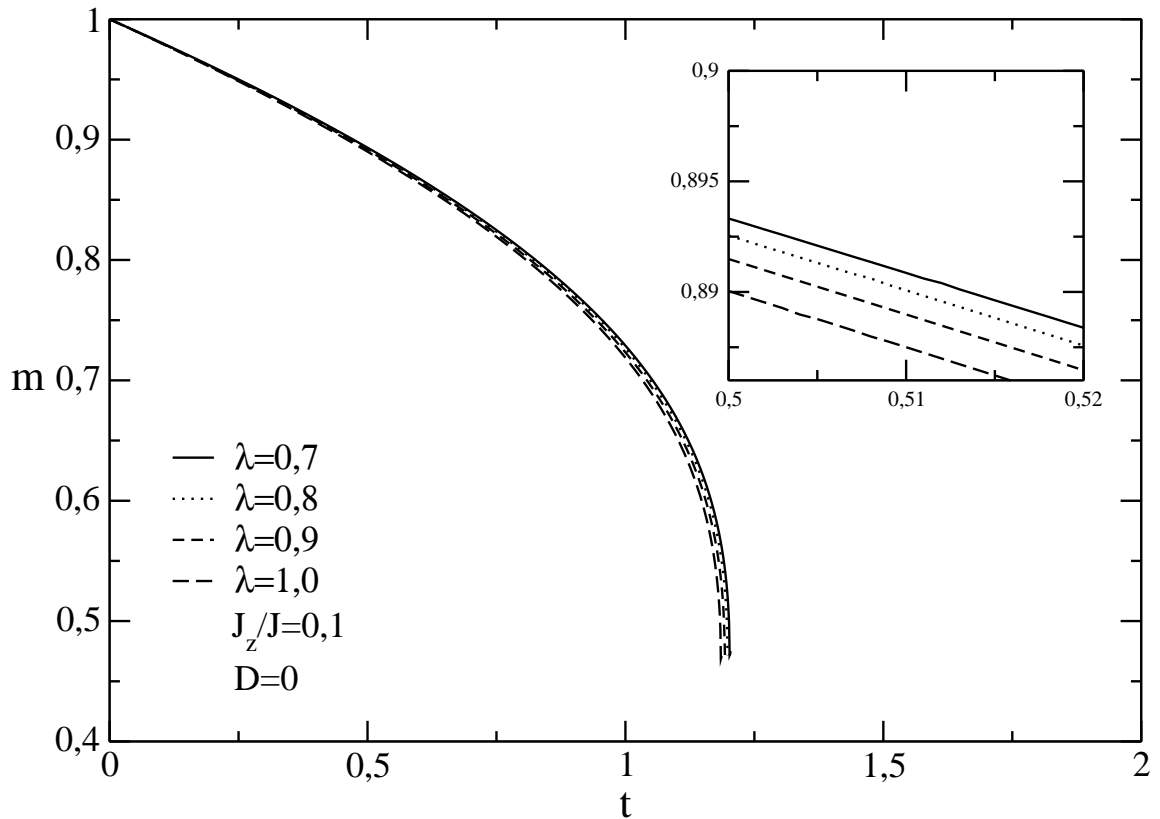


Figura 6.14: Magnetização m em função da temperatura reduzida t para alguns valores da anisotropia λ , nos limites em que $J_z/J = 0,1$ e $D = 0$. O gráfico inserido, numa escala conveniente, mostra o comportamento distinto da magnetização para diferentes valores de λ .

crece com η nesse intervalo. Essa mesma característica é observada quando variamos o parâmetro η de 0,5 a 0,6, na figura 6.16 (b). Por outro lado, a figura 6.16 (c) nos revela um comportamento diferente da temperatura crítica com relação ao parâmetro η . Para η variando de 0,8 a 1,0, a temperatura na qual a magnetização cai bruscamente diminui, ao contrário, do que ocorre nas figuras 6.16 (a) e (b). Portanto, nesse intervalo, a temperatura de transição diminui com η . Esse comportamento da temperatura crítica como função de η é esperado, pois como já discutido previamente, a flutuação de spin fora do plano $\langle\langle S_{\vec{r}}^z \rangle\rangle_0$ apresenta um mínimo para um determinado valor de η , então, a temperatura crítica exibe um máximo para esse mesmo valor de η .

Além disso, estudamos, na figura 6.16 (d), o comportamento da magnetização m em função da temperatura reduzida t , no limite em que $D \rightarrow \infty$, ou seja, o sistema está

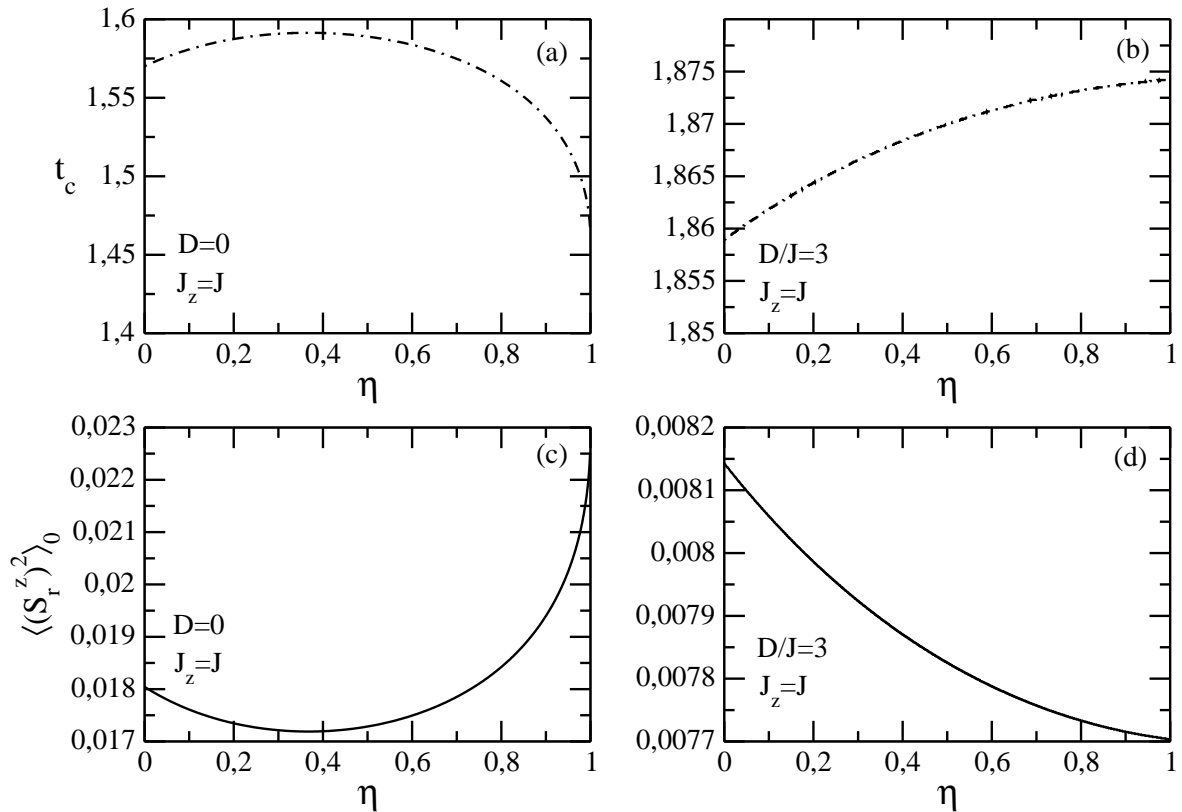


Figura 6.15: (a) e (b) temperatura crítica reduzida t_c em função da anisotropia η para $D/J = 0$ e $D/J = 3, 0$, respectivamente. (c) e (d) flutuação de spin fora do plano $\langle (S_r^z)^2 \rangle_0$ em função de η para $D/J = 0$ e $D/J = 3, 0$, respectivamente. Todas as curvas foram plotadas no limite isotrópico $J_z = J$. As curvas para $\langle (S_r^z)^2 \rangle_0$ foram traçadas para $t = 0, 1$.

sob ação de forte anisotropia cristalina. Com efeito, a componente S_r^z é suprimida e obtemos o modelo rotor planar tridimensional. Apesar do gráfico ter sido traçado para $\eta = 1$ e $\lambda = 1$, obteríamos a mesma curva independentemente dessa escolha. Pois, como a componente z do spin é anulada, haja vista o intenso campo cristalino, e como na expressão do hamiltoniano (4.1), os parâmetros η e λ aparecem sempre acompanhados de S_r^z , logo esses termos serão anulados independentemente de η e λ . A partir dessa figura, obtemos o valor da temperatura de transição para o rotor planar tridimensional, a saber: $t_c = 2,190$, valor comparável ao obtido via simulação de Monte Carlo (vide tabela 6.1).

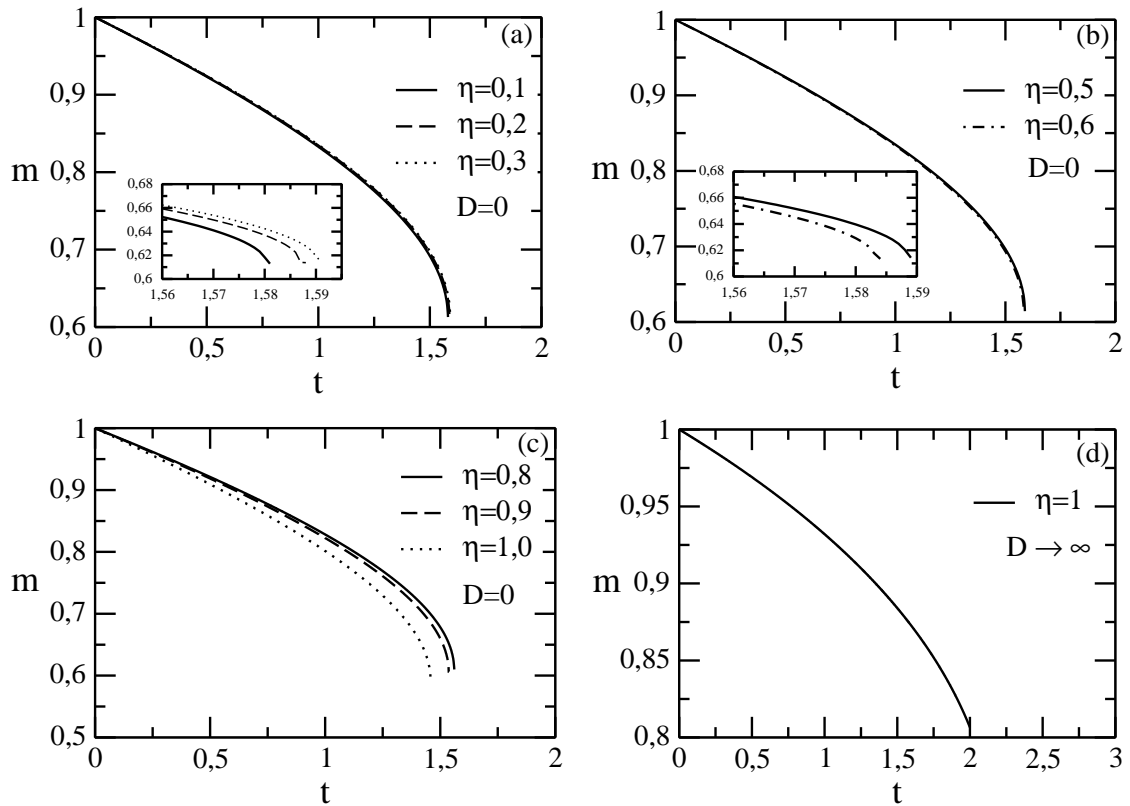


Figura 6.16: Magnetização m em função da temperatura t para diferentes valores de η no limite isotrópico $J_z = J$. Em (a), (b) e (c) as curvas foram traçadas para $D = 0$, e em (d) para $D \rightarrow \infty$. Os gráficos inseridos numa escala mais fina tem o objetivo de mostrar as diferenças entre as curvas.

6.3 Hipótese Simplificadora *vs* Solução Numérica

Na seção 4.2, fizemos uso de uma hipótese simplificadora no cálculo da temperatura crítica, da magnetização e retificamos a acurácia dessa aproximação em alguns casos limites de interesse. Além disso, mostramos que para modelos bidimensionais, isto é, modelos no limite em que $J_z \rightarrow 0$, a nossa aproximação nos levaria aos mesmos resultados obtidos desacoplando o sistema de equações não lineares (4.13) e (4.14). Como enfatizado naquela seção, o uso de tal hipótese evita procedimentos iterativos pesados, portanto, seria interessante compararmos os dois procedimentos em casos gerais, para variações arbitrárias dos parâmetros, ou seja, $0 \leq \eta < 1$, $0 \leq \lambda < 1$ e $-\infty < D/J < \infty$. Com essas motivações faremos um estudo comparativo entre os resultados obtidos via hipótese

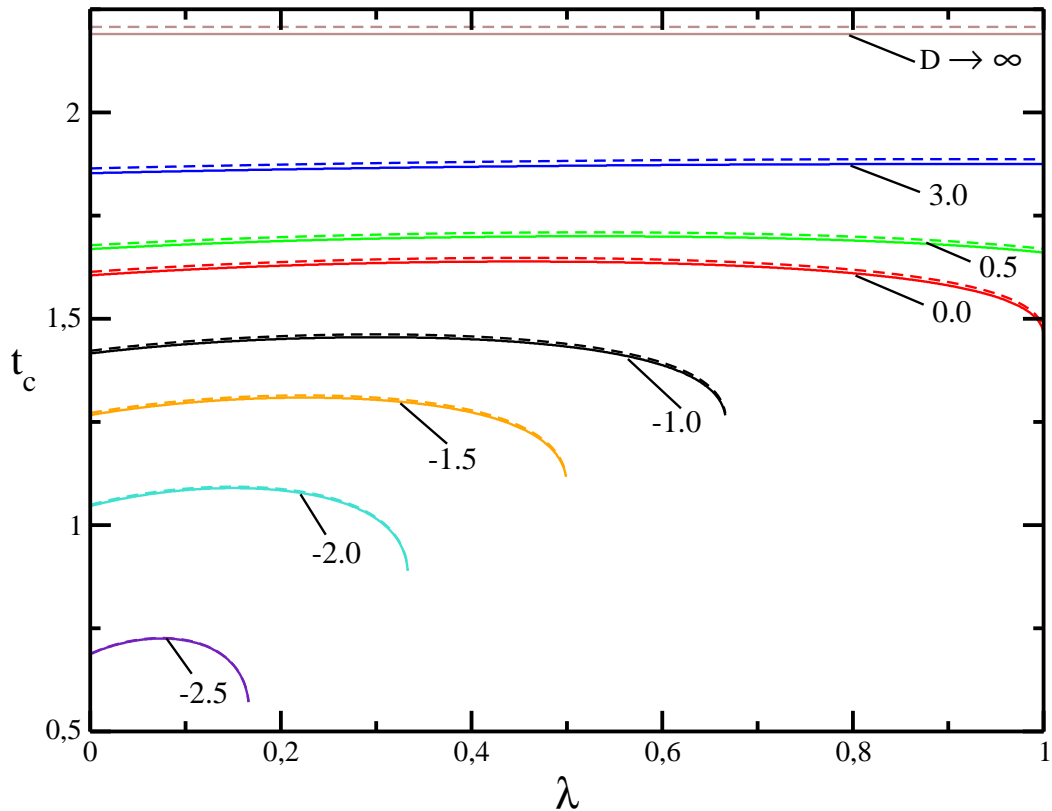


Figura 6.17: Temperatura crítica reduzida t_c em função da anisotropia λ no limite isotrópico $J_z = J$ para $\lambda = \eta$. Os números em cada linha se referem aos valores assumidos pelo campo cristalino reduzido D/J . As linhas contínuas vem da solução completa resolvendo o sistema de equações numericamente e as linhas tracejadas vem do uso da hipótese simplificadora.

simplificadora e aqueles conseguidos resolvendo numericamente o sistema de equações (4.13) e (4.14).

A figura 6.17 apresenta o comportamento da temperatura crítica reduzida t_c em função da anisotropia λ para vários valores do campo cristalino reduzido D/J , no limite em que $J_z = J$ e $\eta = \lambda$. As curvas tracejadas vem do uso da hipótese simplificadora e as curvas contínuas vem da solução completa resolvendo o sistema de equações acopladas (4.13) e (4.14). Nota-se que o diagrama de fases são comparáveis um ao outro, sendo que os resultados obtidos via hipótese simplificadora majoram os valores de t_c para os diferentes valores de D/J .

Por exemplo, para $D = 0$, saímos do modelo XY tridimensional isotrópico ($\lambda = \eta = 0$)

Tabela 6.2: Temperaturas críticas $\frac{k_B T_C}{J}$ para o modelo de Heisenberg anisotrópico na presença de uma campo cristalino em alguns casos limites. As siglas HS e SN se referem, respectivamente, ao uso da hipótese simplificadora e à solução numérica do sistema de equações acopladas. Os símbolos 2-D e 3-D significam, respectivamente, bidimensional e tridimensional.

Limites isotrópicos	SN	HS
$D \rightarrow \infty, J_z = 0$ Rotor Planar 2-D	1,472	1,472
$D \rightarrow \infty, J_z = J$ Rotor Planar 3-D	2,190	2,207
$D = 0, J_z = 0, \lambda = 0$ Modelo XY 2-D	1,076	1,076
$D = 0, J_z = J, \lambda = \eta = 0$ Modelo XY 3-D	1,605	1,613
$D = 0, J_z = J, \lambda = \eta = 1$ Heisenberg isotrópico 3-D	1,458	1,465

para o modelo de Heisenberg tridimensional isotrópico ($\lambda = \eta = 1, 0$) e notamos que o uso da hipótese simplificadora (curva tracejada) superestima o valor da temperatura crítica. Por outro lado, quando $\lambda \rightarrow 1$ ambas as curvas se aproximam, mas continuam fornecendo valores distintos para t_c . Na tabela 6.2 comparamos as temperaturas de transição obtidas resolvendo o sistema de equações acopladas com aquelas obtidas utilizando a hipótese simplificadora. Desta tabela, vemos que os resultados obtidos para as temperaturas críticas são idênticos no limite bidimensional $J_z = 0$ e muito próximos no limite tridimensional isotrópico $J_z = J$. Além disso, da figura 6.17 notamos que não há mais transição para $D/J < -3$, em temperatura finita.

Na figura 6.18 mostramos a magnetização m em função da temperatura reduzida $t = \frac{k_B T}{J}$ para diferentes parâmetros do hamiltoniano. Na figura (a) nós temos o modelo rotor planar tridimensional isotrópico ($J_z = J$) e quase-bidimensional ($J_z/J = 0, 1$). Observamos que no limite isotrópico, o procedimento utilizando a hipótese simplificadora (linha tracejada) e aquele resolvendo o sistema de equações (linha contínua), nos fornecem curvas praticamente idênticas. Por outro lado, no limite quase-bidimensional, as curvas são bem diferentes. Apesar disso, as correspondentes temperaturas de transição são bem próximas. Nas figuras (b) e (c) comparamos as curvas de magnetização em função da temperatura para $D/J = 0, D/J = 1$ e $\eta = 0$ no limite quase-bidimensional $J_z/J = 0, 1$. Em (b) fizemos $\lambda = 1$, interação no plano tipo Heisenberg, já em (c) tomamos $\lambda = 0$, interação tipo XY no plano. Novamente, neste caso, as temperaturas críticas são comparáveis. Na figura (d) ambos os métodos são praticamente idênticos no limite do modelo de Heisenberg tridimensional.

Com efeito, a partir dessa análise, podemos inferir que o uso de tal hipótese simplificadora nos conduz, em casos gerais, a resultados diferentes para a temperatura de transição. Contudo, esses valores são bem próximos em várias situações, por exemplo,

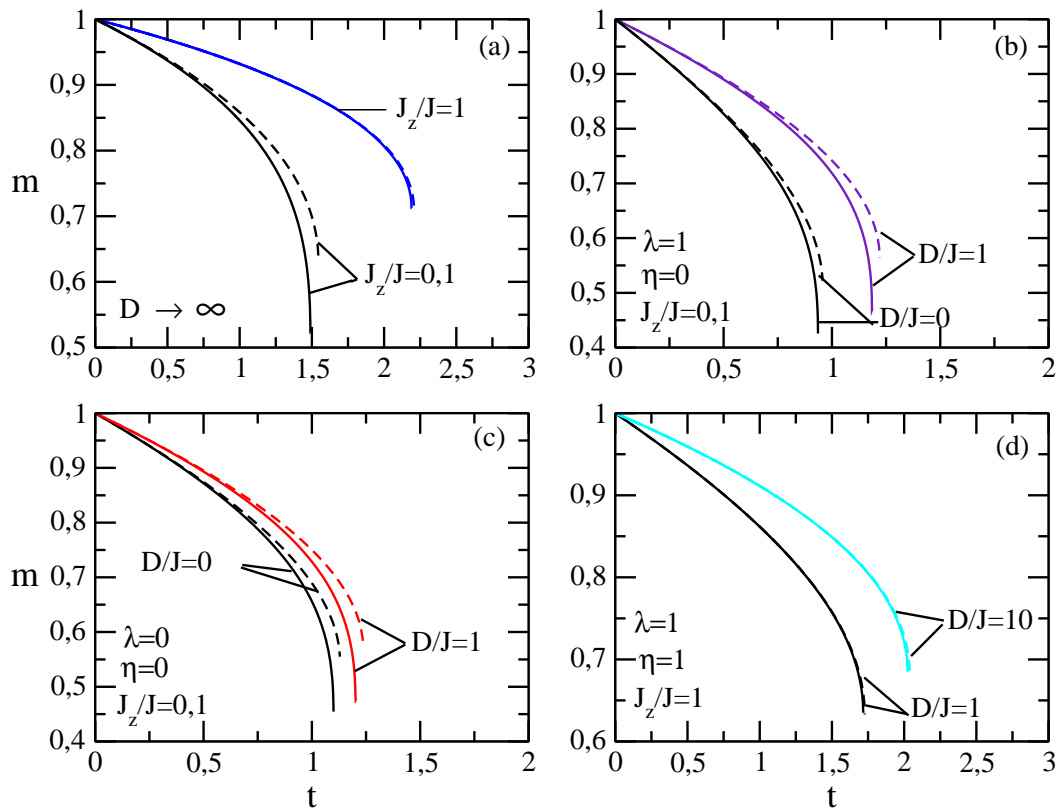


Figura 6.18: Magnetização m em função da temperatura reduzida t para diversos valores de λ , η , D/J e J_z/J . As linhas contínuas vem da solução completa resolvendo o sistema de equações numericamente e as linhas tracejadas vem do uso da hipótese simplificadora.

os modelos XY ($\lambda = 0$) e o de Heisenberg ($\lambda = 1$) tridimensional isotrópico na figura 6.17 para $D = 0$. Além disso, conforme discussão anterior, no limite bidimensional, ou seja, fazer $J_z = 0$, o uso da hipótese simplificadora conduz aos mesmos resultados que a solução numérica desacoplando o sistema de equações, reduzindo o custo computacional e sem prejuízos quanto aos resultados obtidos.

Capítulo 7

Conclusão

Estudamos os modelos de Heisenberg puro e XY diluídos, ambos, ferromagnéticos, clássicos, anisotrópicos, tridimensionais e na presença de um campo cristalino, por meio do PVB. Além disso, mostramos a equivalência entre o PVB e AHAC para o caso particular de um hamiltoniano tentativa harmônico. No modelo de Heisenberg, obtivemos uma representação satisfatória do comportamento termodinâmico do modelo como função dos parâmetros do hamiltoniano. Por outro lado, no estudo do modelo XY diluído, a aproximação utilizada não se mostrou tão eficiente, pois não conseguiu dar conta de fornecer uma concentração crítica não nula para as ligações.

No capítulo 3, nós mostramos a equivalência entre dois métodos aproximativos largamente empregados na literatura [23, 7, 24, 21, 6], a saber: o princípio variacional de Bogoliubov (PVB) e a aproximação harmônica auto-consistente (AHAC), para o caso particular de um hamiltoniano tentativa harmônico aplicado ao modelo XY clássico tridimensional anisotrópico na presença de um campo cristalino. Obtivemos as expressões para os parâmetros variacionais γ e γ_z , e verificamos que elas eram idênticas às constantes de acoplamento (stiffness) K e K_z .

No capítulo 4, estudamos o modelo de Heisenberg clássico anisotrópico tridimensional na presença de um campo cristalino por meio do PVB. Encontramos, no limite de longos comprimentos de onda ($\vec{q} \approx 0$) e baixas temperaturas, expressões fechadas para magnetização e para flutuação de spin fora do plano. Obtivemos a temperatura de transição, analiticamente, em diversos casos limites de interesse, tais como: modelo rotor planar bidimensional e tridimensional, modelo de Heisenberg isotrópico tridimensional e modelo XY bidimensional, e comparamos os valores obtidos com os disponíveis na literatura. Além do mais, o método empregado conseguiu prever a não existência de transição de fase para o modelo de Heisenberg bidimensional em temperatura finita. Notamos que nos modelos XY e planar bidimensionais, o método aproximativo empregado conduzia a valores bem diferentes, para as temperaturas críticas, daqueles fornecidos por simulação

de Monte Carlo, pois como é sabido, em tais modelos os efeitos de vórtices são os responsáveis pela transição, e a aproximação aqui utilizada não leva em conta tais efeitos. Além disso, propomos uma hipótese simplificadora que reduzia os cálculos, pois evitava o desacoplamento do sistema de equações para os parâmetros variacionais γ e γ_z . Mostramos que em casos bidimensionais ($J_z = 0$), o uso da hipótese simplificadora conduzia aos mesmos resultados que resolvendo o sistema de equações acopladas, reduzindo o custo computacional. Vimos que uma característica do método aqui empregado é a presença de uma transição de primeira ordem, ao invés da esperada transição de segunda ordem, pois a magnetização não vai a zero continuamente, ao contrário, na vizinhança da temperatura crítica a magnetização cai bruscamente.

No capítulo 5, estudamos o modelo XY tridimensional clássico anisotrópico diluído em suas ligações na presença de um campo cristalino por meio do PVB. Utilizamos uma distribuição aleatória para as ligações e observamos que o método empregado nos conduzia a uma concentração crítica nula assim como a aproximação de campo médio (ACM), ao contrário da concentração crítica finita esperada.

No capítulo 6, fizemos um estudo numérico do modelo de Heisenberg de plano fácil estudado, analiticamente, no capítulo 4. Analisamos vários gráficos para variações arbitrárias dos anisotropias λ , η e D/J presentes no hamiltoniano que descreve o modelo, ou seja, $0 \leq \lambda < 1$, $0 \leq \eta < 1$ e $-\infty < D/J < \infty$. Mostramos como essas anisotropias influenciam a temperatura de transição, bem como a flutuação de spin fora do plano $\langle (S_r^z)^2 \rangle_0$. Notamos que quando a flutuação de spin apresenta um mínimo para um determinado valor da anisotropia λ (η), a temperatura de transição apresenta um máximo para o mesmo valor de λ (η). Além disso, vimos que para valores positivos do campo cristalino $D > 0$, a temperatura crítica cresce quando aumentamos D , pois o campo cristalino atua tentando manter os spin no plano, e no limite de uma anisotropia infinita, obtemos o modelo rotor planar. Por outro lado, para $D < 0$ a temperatura de transição diminui quando a intensidade de D cresce, já que nesse limite é favorecido um comportamento tipo Ising. Vimos também que há um valor limite para $D < 0$, a partir do qual não há mais transição numa temperatura finita. Ainda, estudamos a curva da magnetização em função da temperatura e verificamos a presença de uma transição de primeira ordem, artifício o método empregado. Além disso, comparamos os resultados obtidos via hipótese simplificadora com aqueles resolvendo o sistema de equações acopladas, e verificamos que as temperaturas de transição são comparáveis para diversas variações de J_z/J , D/J e $\lambda = \eta$.

7.1 Perspectivas

Em todo nosso estudo utilizamos um hamiltoniano tentativa harmônico e a partir dele conseguimos aplicar o PVB, obtendo resultados comparáveis com simulação de Monte Carlo. Contudo, essa não é a única escolha, sabemos que a única maneira de se aprimorar os resultados obtidos via PVB é escolher um hamiltoniano tentativa mais completo. Entretanto, tal escolha deve levar em conta a necessidade do hamiltoniano tentativa ser solúvel, o que reduz drasticamente as possibilidades de escolha. Além disso, poderíamos lançar mão de um método perturbativo ao invés do procedimento variacional aqui empregado. Por outro lado, poderíamos fazer um tratamento inteiramente quântico, ao invés do tratamento semi-clássico empregado aqui, já que a desigualdade de Bogoliubov permanece válida no domínio quântico. Essas investigações ficam como perspectivas de trabalhos futuros.

Referências Bibliográficas

- [1] R. Kenna, *The XY Model and the Berezinskii-Kosterlitz-Thouless Phase Transition*, Condensed Matter (2005).
- [2] R. K. Pathria, *Statistical Mechanics* 2nd ed. (1996) p.305-306.
- [3] In M. Plischke and B. Bergersen, *Equilibrium statistical physics* 2nd ed. (1994) p.205.
- [4] J.R. de Sousa and I.G. Araujo, Solid State Communications **115**, 265-268 (2000).
- [5] E. Bublitz and J. Ricardo de Sousa, Journal of Magnetism and Magnetic Materials **269**, 266–270 (2004).
- [6] J. Streka, J. Dely, and L. Canová, Chinese Journal of physics vol.46, No. 3 (2008).
- [7] A.S.T. Pires Solid State Communications, vol. 100, No. 11, p.791-794 (1996).
- [8] M. D'Onorio De Meo, J. D. Reger and K. Binder, Physica A **220** p.628-647 (1995).
- [9] T. Balcerzak and K. Szałowski, Phys. Rev. B **80**, 144404 (2009).
- [10] D. Jasnow and M. Wortis, Phys. Rev. Lett, vol. 176, No. 2 (1968).
- [11] H. Bethe, Z. Physik A, **71**, 205 (1931)
- [12] M. E. Fisher, Am. J. Phys. **32**, 343 (1964).
- [13] D C. Mattis, *The Theory of Magnetism Made Simple* p.56-57 (2005).
- [14] E. Lieb, T. Schultz and D. Mattis, Ann. Phys. (N. Y) **16**, 407 (1961).
- [15] N. D. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).
- [16] M. Plischke and B. Bergersen, *Equilibrium statistical physics* 2nd ed. (1994) p.204-206.
- [17] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, J. of Phys. C **6** 1181, (1973).

- [18] J. M. Kosterlitz, J. Phys. C **7**, 1046 (1974).
- [19] I. Gleria, R. Matsushita e S. da Silva, *Revista Brasileira de Ensino de Física*, vol.26, No.2, p.99-108 (2004).
- [20] R. G. Bowers and G. S. Joyce, Phys. Rev. Lett. **19**, 11 (1967)
- [21] L. M. Castro, A. S. T. Pires, and J. A. Plascak Phys. Rev.B **75**, 024410 (2007).
- [22] H. Falk, Am. J. Phys. **38**, 858 (1970).
- [23] C. Tsallis, Il Nuovo Cimento **34B**, 411 (1976).
- [24] L. M. Castro, A. S. T. Pires and J. A. Plascak, Journal of Magnetism and Magnetic Materials **248**, 62 (2002).
- [25] L. M. Castro, *Estudo dos modelos tipo XY e Heisenberg anisotrópico com campo cristalino.*, tese apresentada no Departamento de Física da UFMG, novembro (2003).
- [26] D. C. Mattis, *The Theory of Magnetism Made Simple* p.429 (2005).
- [27] S. R. Salinas, *Introdução à Física estatística*, EDUSP, São Paulo, (1997).
- [28] S. L. Menezes, M. E. Gouvea and A. S. T. Pires, Phys. Lett. A **166**, 330 (1992).
- [29] J. Tobochnik and G. V. Chester, Phys. Rev.B **20**, 3761 (1979)
- [30] G. Kohring, R. E. Shrock and P. Wills, Phys. Rev. Lett. **57**, 1358 (1986).
- [31] D. P. Landau and K. Binder, Phys. Rev. B **24**, 1391 (1981).
- [32] E. W. Carlson, S. A. Kivelson, V. J. Emery, and E. Manousakis, Phys. Rev. Lett. **83**, 3 (1999).
- [33] B. J. Kim, P. Minnhagen and P. Olsson, Phys. Rev. B **59**, 17 (1999).
- [34] D. Stauffer and A. Aharony, *Introduction to Percolation Theory*, 2nd edition - Taylor& Francis, p.137, (2003).
- [35] D. Stauffer and A. Aharony, *Introduction to Percolation Theory*, 2nd edition - Taylor& Francis, p.17, (2003).
- [36] D. Stauffer and A. Aharony, *Introduction to Percolation Theory*, 2nd edition - Taylor& Francis, p.5-13 (2003).

- [37] M. M. Oliveira e G. A. Braga, *Revista Brasileira de Ensino de Física*, vol.24, No.4, (2002).
- [38] M. Franz and A. P. Iyengar, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 047007 (2006).
- [39] R. A. Cowley, A. Aharony, R. J. Birgeneau, R. A. Pelcovits, G. Shirane, T. R. Thurston, *Z. Phys. B* **93**, 5 (1993).
- [40] L. J. De Jongh, L. P. Regnault, J. Rossat-Mignod and J.Y. Henry, *J. Appl. Phys.* **53**, 7963 (1982).
- [41] D. P. Landau and K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge (2000).
- [42] D. M. Wood and D. Stroud, *Phys. Rev. B* **25**, 1600 (1982).
- [43] S. Chakravarty, G. L. Ingold, S. Kivelson and A. Luther, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 2303 (1986).
- [44] C. Kawabata and A. R. Bishop, *Solid State Communications*, **60**, 169 (1986).
- [45] B. V. Costa, A. R. Pereira and A. S. T. Pires, *Phys. Rev. B* **54**, 3019 (1996).
- [46] M. Ferer, M. Moore and M. Wortis, *Phys. Rev. B* **8**, 5205 (1973).
- [47] D. P. Landau, *Phys. A*, **205**, 41 (1994).
- [48] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik; Alan Jeffrey, editor, *Table of integrals, series, and products* 5th ed. Academic Press (1994).

Apêndice A

A.1 Valor médio da função cosseno com relação ao Hamiltoniano Harmônico

Ao longo dos capítulos nos deparamos com o cálculo de valores médios da função cosseno com relação ao hamiltoniano harmônico, a saber: $\langle \cos(\phi_{\bar{r}+\bar{a}} - \phi_{\bar{r}}) \rangle_0$ e $\langle \cos(\phi_{\bar{r}+\bar{c}} - \phi_{\bar{r}}) \rangle_0$. Como o nosso hamiltoniano é harmônico e, portanto, quadrático, então avaliar tais expressões resulta em tomar valores médios com relação à distribuição gaussiana. Aqui, vamos mostrar algumas propriedades que decorrem de leis de distribuição gaussiana.

Para tal distribuição, $\langle \sin(\phi_{\bar{r}+\bar{a}} - \phi_{\bar{r}}) \rangle_0$ e $\langle \sin(\phi_{\bar{r}+\bar{c}} - \phi_{\bar{r}}) \rangle_0$ são nulos, pois a integral de uma função ímpar num intervalo simétrico é nula. Com efeito, podemos escever

$$\langle \cos(\phi_{\bar{r}+\bar{a}} - \phi_{\bar{r}}) \rangle_0 = \langle e^{i(\phi_{\bar{r}+\bar{a}} - \phi_{\bar{r}})} \rangle_0,$$

o mesmo se aplica a $\langle \cos(\phi_{\bar{r}+\bar{c}} - \phi_{\bar{r}}) \rangle_0$.

Para uma função de distribuição gaussiana do tipo: $P_G \propto e^{-\beta x^2}$, podemos avaliar $\langle e^{ix} \rangle_0$ da maneira abaixo:

$$\langle e^{ix} \rangle_0 = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{(-\beta x^2 + ix)}}{\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\beta x^2}} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-(\sqrt{\beta}x - \frac{i}{2\sqrt{\beta}})^2 - \frac{1}{4\beta}}}{\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\beta x^2}}.$$

Fazendo a mudança de variável $z = \sqrt{\beta}x - \frac{i}{2\sqrt{\beta}}$, chegamos a

$$\langle e^{ix} \rangle_0 = \frac{e^{-\frac{1}{4\beta}} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-z^2}}{\sqrt{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\beta x^2}} = \frac{e^{-\frac{1}{4\beta}} \sqrt{\pi}}{\sqrt{\beta} \sqrt{\frac{\pi}{\beta}}} = e^{-\frac{1}{4\beta}}. \quad (\text{A.1})$$

Calculando $\langle x^2 \rangle_0$, obtemos

$$\langle x^2 \rangle_0 = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 e^{-\beta x^2}}{\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\beta x^2}} = 2 \frac{\int_0^{\infty} dx x^2 e^{-\beta x^2}}{\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\beta x^2}} = \frac{\beta^{-3/2} \Gamma(3/2)}{(\pi/\beta)^{1/2}} = 1/2 \frac{\beta^{-3/2} \pi^{1/2}}{\pi^{1/2} \beta^{-1/2}} = \frac{1}{2\beta}, \quad (\text{A.2})$$

onde utilizamos a definição de função gama e a suas propriedades. Substituindo a expressão acima em (A.1), encontramos

$$\langle e^{ix} \rangle_0 = e^{-\frac{1}{2} \langle x^2 \rangle_0}.$$

Por conseguinte,

$$\langle \cos(\phi_{\vec{r}+\vec{a}} - \phi_{\vec{r}}) \rangle_0 = e^{-\frac{1}{2} \langle (\phi_{\vec{r}+\vec{a}} - \phi_{\vec{r}})^2 \rangle_0}, \quad (\text{A.3})$$

e

$$\langle \cos(\phi_{\vec{r}+\vec{c}} - \phi_{\vec{r}}) \rangle_0 = e^{-\frac{1}{2} \langle (\phi_{\vec{r}+\vec{c}} - \phi_{\vec{r}})^2 \rangle_0}. \quad (\text{A.4})$$

A.2 Diagonalização do Hamiltoniano Harmônico

A diagonalização do hamiltoniano harmônico é fundamental para que se consiga aplicar a desigualdade de Bogoliubov e, portanto, implementar o princípio variacional. A fim de diagonalizar \mathcal{H}_0 devemos tomar uma transformada de Fourier saindo do espaço real (rede de Bravais) e passando ao espaço dos vetores de onda \vec{q} (rede recíproca), mais precisamente na primeira zona de Brillouin. A transformada de Fourier discreta de $\phi_{\vec{r}}$ e $\phi_{\vec{r}+\vec{a}}$ é dada por

$$\phi_{\vec{r}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \phi_{\vec{q}} \quad \text{e} \quad \phi_{\vec{r}+\vec{a}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}} e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{r}+\vec{a})} \phi_{\vec{q}}, \quad (\text{A.5})$$

cuja transformada inversa é dada por

$$\phi_{\vec{q}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{r}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \phi_{\vec{r}}. \quad (\text{A.6})$$

Vamos, inicialmente, diagonalizar a parte planar do hamiltoniano tentativa \mathcal{H}_0^ϕ , cuja expressão é

$$\mathcal{H}_0^\phi = \frac{\gamma}{4} \sum_{\vec{r}, \vec{a}} (\phi_{\vec{r}+\vec{a}} - \phi_{\vec{r}})^2 + \frac{\gamma_z}{4} \sum_{\vec{r}, \vec{c}} (\phi_{\vec{r}+\vec{c}} - \phi_{\vec{r}})^2 \quad (\text{A.7})$$

O cálculo de $\langle (\phi_{\vec{r}+\vec{a}} - \phi_{\vec{r}})^2 \rangle_0$ se dá a partir da invariância translacional (propriedade da rede de Bravais) dessa expressão, podendo ser escrita como segue

$$\begin{aligned} \langle (\phi_{\vec{r}+\vec{a}} - \phi_{\vec{r}})^2 \rangle_0 &= \frac{1}{Nz} \sum_{\vec{r}, \vec{a}} \langle (\phi_{\vec{r}+\vec{a}}^2 - 2\phi_{\vec{r}+\vec{a}}\phi_{\vec{r}} + \phi_{\vec{r}}^2) \rangle_0 = \\ &= \frac{2}{Nz} \sum_{\vec{r}, \vec{a}} \langle (\phi_{\vec{r}+\vec{a}}^2 - \phi_{\vec{r}+\vec{a}}\phi_{\vec{r}}) \rangle_0, \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

onde \vec{a} rotula os primeiros vizinhos do spin \vec{r} no plano xy e z é o número de vizinhos do spin de posição \vec{r} , ou seja, o número de coordenação no plano. Agora, tomando a transformada de Fourier (A.5), passando ao espaço dos vetores de onda \vec{q} na primeira zona de Brillouin, podemos reescrever (A.8):

$$\begin{aligned} \frac{2}{Nz} \sum_{\vec{r}, \vec{a}} \langle (\phi_{\vec{r}+\vec{a}}^2 - \phi_{\vec{r}+\vec{a}}\phi_{\vec{r}}) \rangle_0 &= \frac{2}{Nz} \sum_{\vec{r}, \vec{a}} \sum_{\vec{q}, \vec{q}'} \frac{1}{N} \langle (e^{-i(\vec{q}+\vec{q}')\cdot(\vec{r}+\vec{a})} - e^{-i\vec{q}'\cdot\vec{r}} e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{r}+\vec{a})}) \phi_{\vec{q}} \phi_{\vec{q}'} \rangle_0 \\ &= \frac{2}{Nz} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{a}} (1 - e^{-i\vec{q}\cdot\vec{a}}) \langle \phi_{\vec{q}} \phi_{-\vec{q}} \rangle_0. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Somando sobre \vec{a} e fazendo $z = 4$, obtemos

$$\langle (\phi_{\vec{r}+\vec{a}} - \phi_{\vec{r}})^2 \rangle_o = \frac{2}{N} \sum_{\vec{q}} (1 - \gamma_{\vec{q}}) \langle \phi_{\vec{q}} \phi_{-\vec{q}} \rangle_o, \quad (\text{A.10})$$

onde $\gamma_{\vec{q}} = \frac{1}{2}(\cos q_x a + \cos q_y a)$ e a é o parâmetro de rede no plano xy . Procedimento análogo para $\langle (\phi_{\vec{r}+\vec{c}} - \phi_{\vec{r}})^2 \rangle_o$ nos leva à expressão abaixo:

$$\langle (\phi_{\vec{r}+\vec{c}} - \phi_{\vec{r}})^2 \rangle_o = \frac{2}{N} \sum_{\vec{q}} (1 - \gamma_{\vec{q}}^z) \langle \phi_{\vec{q}} \phi_{-\vec{q}} \rangle_o, \quad (\text{A.11})$$

onde $\gamma_{\vec{q}}^z = \cos q_z c$ e c é o parâmetro de rede na direção z . Substituindo (A.10) e (A.11) em (A.7), e somando sobre \vec{r} , \vec{a} e \vec{c} chegamos a:

$$\langle \mathcal{H}_o^\phi \rangle_o = \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}} [4\gamma(1 - \gamma_{\vec{q}}) + 2\gamma_z(1 - \gamma_{\vec{q}}^z)] \langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_o, \quad (\text{A.12})$$

onde utilizamos a identidade $\phi_{\vec{q}} \phi_{-\vec{q}} = |\phi_{\vec{q}}|^2$. Chegamos, portanto, numa forma diagonal para \mathcal{H}_o^ϕ . Aplicando o teorema da equipartição da energia em (A.12), podemos obter $\langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_o$.

Passaremos a diagonalizar a parte axial do Hamiltoniano tentativa, cuja expressão é dada por:

$$\mathcal{H}_o^z = \frac{1}{4} \sum_{\vec{r}} \{2(2D + 4J + 2J_z)(S_{\vec{r}}^z)^2 - 2\lambda J \sum_{\vec{a}} S_{\vec{r}+\vec{a}}^z S_{\vec{r}}^z - 2\eta J_z \sum_{\vec{c}} S_{\vec{r}+\vec{c}}^z S_{\vec{r}}^z\}. \quad (\text{A.13})$$

A diagonalização do termo axial do Hamiltoniano (A.13) é obtida por meio das transformadas de Fourier abaixo:

$$S_{\vec{r}}^z = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} S_{\vec{q}}^z \quad e \quad S_{\vec{r}+\vec{a}}^z = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}} e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{r}+\vec{a})} S_{\vec{q}}^z, \quad (\text{A.14})$$

sendo que a transformada inversa de $S_{\vec{r}}^z$ é dada por

$$S_{\vec{q}}^z = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{r}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} S_{\vec{r}}^z. \quad (\text{A.15})$$

Com o intuito de tornar o cálculo mais claro, vamos quebrar a equação (A.13) numa soma de três termos, a saber: \mathcal{H}_o^{z1} , \mathcal{H}_o^{z2} e \mathcal{H}_o^{z3} . Aplicando a transformada de Fourier ao primeiro termo do Hamiltoniano axial \mathcal{H}_o^{z1} de (A.13), obtemos:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_o^{z1} &= \frac{1}{2} \sum_{\vec{r}} (2D + 4J + 2J_z)(S_{\vec{r}}^z)^2 = \frac{1}{2}(2D + 4J + 2J_z) \sum_{\vec{r}} S_{\vec{r}}^z S_{\vec{r}}^z \\ &= \frac{1}{2}(2D + 4J + 2J_z) \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}, \vec{q}'} \underbrace{\sum_{\vec{r}} e^{-i(\vec{q}+\vec{q}')\cdot\vec{r}}}_{N\delta_{\vec{q}, -\vec{q}'}} S_{\vec{q}}^z S_{\vec{q}'}^z \\ &= \frac{1}{2}(2D + 4J + 2J_z) \sum_{\vec{q}} S_{\vec{q}}^z S_{-\vec{q}}^z, \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Procedendo de maneira análoga com o segundo termo \mathcal{H}_o^{z2} , chegamos a

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_o^{z2} &= \frac{-J\lambda}{2} \sum_{\vec{r}, \vec{a}} S_{\vec{r}}^z S_{\vec{r}+\vec{a}}^z = \frac{-J\lambda}{2N} \sum_{\vec{a}} \sum_{\vec{q}, \vec{q}'} \underbrace{\sum_{\vec{r}} e^{-i(\vec{q}+\vec{q}')\vec{r}} e^{-i\vec{q}\vec{a}} S_{\vec{q}}^z S_{\vec{q}'}^z}_{N\delta_{\vec{q}, -\vec{q}'}} \\ &= \frac{-J\lambda}{2} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{a}} e^{i\vec{q}\vec{a}} S_{\vec{q}}^z S_{-\vec{q}}^z = -2J\lambda \sum_{\vec{q}} \gamma_{\vec{q}} S_{\vec{q}}^z S_{-\vec{q}}^z,\end{aligned}\quad (\text{A.17})$$

onde $\gamma_{\vec{q}} = \frac{1}{2}(\cos q_x a + \cos q_y a)$. Finalmente, para o terceiro termo \mathcal{H}_o^{z3} , conseguimos

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_o^{z3} &= \frac{-J_z\eta}{2} \sum_{\vec{r}, \vec{c}} S_{\vec{r}}^z S_{\vec{r}+\vec{c}}^z = \frac{-J_z\eta}{2N} \sum_{\vec{c}} \sum_{\vec{q}, \vec{q}'} \underbrace{\sum_{\vec{r}} e^{-i(\vec{q}+\vec{q}')\vec{r}} e^{-i\vec{q}'\vec{c}} S_{\vec{q}}^z S_{\vec{q}'}^z}_{N\delta_{\vec{q}, -\vec{q}'}} \\ &= \frac{-J_z\eta}{2} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{c}} e^{i\vec{q}'\vec{c}} S_{\vec{q}}^z S_{-\vec{q}}^z = -J_z\eta \sum_{\vec{q}} \gamma_{\vec{q}}^z S_{\vec{q}}^z S_{-\vec{q}}^z,\end{aligned}\quad (\text{A.18})$$

onde $\gamma_{\vec{q}}^z = \cos q_z c$ e c . Somando todos os termos: (A.16), (A.17) e (A.18), podemos escrever (A.13) na forma diagonal

$$\mathcal{H}_o^z = \sum_{\vec{q}} \left\{ \frac{1}{2}(2D + 4J + 2J_z) - 2J\lambda\gamma_{\vec{q}} - \eta J_z\gamma_{\vec{q}}^z \right\} S_{\vec{q}}^z S_{-\vec{q}}^z. \quad (\text{A.19})$$

A.3 Cálculo de integrais

Ao avaliarmos $\langle \cos(\phi_{\vec{r}+\vec{a}} - \phi_{\vec{r}}) \rangle_0$, primeiramente, utilizamos a igualdade (A.3) e a expressão (A.10), chegando a

$$\langle \cos(\phi_{\vec{r}+\vec{a}} - \phi_{\vec{r}}) \rangle_0 = e^{\frac{-1}{N} \sum_{\vec{q}} (1-\gamma_{\vec{q}}) \langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_0}, \quad (\text{A.20})$$

onde $\gamma_{\vec{q}} = \frac{1}{2}(\cos q_x a + \cos q_y a)$. A partir de (A.12) podemos obter $\langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_0$, e passando ao limite contínuo, no regime de longos comprimentos de onda ($\vec{q} \approx 0$), região de baixas temperaturas, chegamos na seguinte integral para o expoente de (A.20):

$$\frac{a^2 c}{8\pi^3} \int \frac{d^3 \vec{q}}{4\gamma} \frac{k_B T \left[1 - \frac{1}{2}(\cos q_x a + \cos q_y a) \right]}{\left[1 - \frac{1}{2}(\cos q_x a + \cos q_y a) \right] + 2\gamma_z [1 - \cos q_z c]}, \quad (\text{A.21})$$

onde a e c rotulam os parâmetros de rede no plano xy e na direção axial, respectivamente. A integral acima é realizada na primeira zona de Brillouin. Devido às condições periódicas de contorno, e supondo que N seja par, o vetor de onda \vec{q} pode assumir N valores discretos

$$\begin{aligned}q_x &= 0, \pm \frac{2\pi}{Na}, \pm \frac{4\pi}{Na}, \dots, \pm \frac{\pi}{a}, & a &= |\vec{a}| \text{ pequeno, } N \rightarrow \infty \\ q_y &= 0, \pm \frac{2\pi}{Na}, \pm \frac{4\pi}{Na}, \dots, \pm \frac{\pi}{a}, & a &= |\vec{a}| \text{ pequeno, } N \rightarrow \infty \\ q_z &= 0, \pm \frac{2\pi}{Nc}, \pm \frac{4\pi}{Nc}, \dots, \pm \frac{\pi}{c}, & c &= |\vec{c}| \text{ pequeno, } N \rightarrow \infty.\end{aligned}$$

No limite aqui considerado, ou seja, ($\vec{q} \approx 0$), podemos lançar mão da aproximação abaixo:

$$\cos q_x a \approx 1 - \frac{q_x a^2}{2}, \quad \cos q_y a \approx 1 - \frac{q_y a^2}{2}, \quad e \quad \cos q_z c \approx 1 - \frac{q_z c^2}{2},$$

chegando na seguinte integral:

$$\frac{a^2 c}{8\pi^3} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \int_{-\frac{\pi}{c}}^{\frac{\pi}{c}} \frac{k_B T dq_x dq_y dq_z}{4\gamma \left(1 + g \frac{c^2}{a^2} \frac{q_z^2}{q_x^2 + q_y^2}\right)}, \quad (\text{A.22})$$

onde $g = \frac{\gamma z}{\gamma}$. Utilizando o sistema de coordenadas cilíndricas, devemos realizar a seguinte mudança: $\frac{a^2 c}{8\pi^3} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \int_{-\frac{\pi}{c}}^{\frac{\pi}{c}} dq_x dq_y dq_z \rightarrow \frac{a^2 c}{2\pi^4} \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\frac{\pi}{a}} q dq \int_{-\frac{\pi}{c}}^{\frac{\pi}{c}} dq_z$, sendo $q^2 = q_x^2 + q_y^2$. Primeiramente, por conveniência, vamos resolver a integral em $d\theta$, obtendo

$$\frac{a^2 c k_B T}{4\pi^3 \gamma} \int_0^{\frac{\pi}{a}} q dq \frac{1}{\mu} \int_{-\frac{\pi}{c}}^{\frac{\pi}{c}} \frac{dq_z}{p^2 + q_z^2}, \quad (\text{A.23})$$

sendo $\mu = \frac{g c^2}{a^2 q^2}$ e $p = \frac{1}{\sqrt{\mu}}$. Como

$$\int \frac{dx}{a^2 + x^2} = \frac{1}{a} \arctan \frac{x}{a},$$

temos para integral (A.23)

$$\frac{a^2 c k_B T}{4\pi^3 \gamma} \int_0^{\frac{\pi}{a}} q dq \frac{1}{\mu p} \arctan \frac{q_z}{p} \Big|_{-\frac{\pi}{c}}^{+\frac{\pi}{c}}. \quad (\text{A.24})$$

Como $\arctan(-x) = -\arctan(x)$ e $\frac{1}{\mu p} = \frac{aq}{cg^{\frac{1}{2}}}$, encontramos

$$\frac{a^3 k_B T}{2\pi^3 \gamma g^{\frac{1}{2}}} \int_0^{\frac{\pi}{a}} q^2 \arctan \left[\left(\frac{g^{\frac{1}{2}} \pi}{a} \right) \frac{1}{q} \right] dq. \quad (\text{A.25})$$

Fazendo $x = \frac{1}{q}$, $dx = -\frac{1}{q^2} dq$ e $\frac{1}{b} = \frac{g^{\frac{1}{2}} \pi}{a}$, a integral (A.25) toma a seguinte forma

$$\int q^2 \arctan \left[\left(\frac{g^{\frac{1}{2}} \pi}{a} \right) \frac{1}{q} \right] dq = - \int \frac{dx \arctan \left(\frac{x}{b} \right)}{x^4}. \quad (\text{A.26})$$

De [48], temos que $\int x^m \arctan \left(\frac{x}{b} \right) dx = \frac{x^{m+1}}{m+1} \arctan \left(\frac{x}{b} \right) - \frac{b}{m+1} \int \frac{x^{m+1} dx}{x^2 + b^2}$ e para o nosso caso, $m = -4$, obtemos $\int \frac{dx}{x^3(x^2 + b^2)} = -\frac{1}{2b^2 x^2} - \frac{1}{2b^4} \ln \left(\frac{x^2}{x^2 + b^2} \right)$. Após manipulações algébricas, chegamos ao seguinte resultado para a integral (A.25)

$$\frac{a^3 k_B T}{2\pi^3 \gamma g^{\frac{1}{2}}} \int_0^{\frac{\pi}{a}} q^2 \arctan \left[\left(\frac{g^{\frac{1}{2}} \pi}{a} \right) \frac{1}{q} \right] dq = \frac{k_B T}{2\gamma} \left[\frac{\arctan g^{\frac{1}{2}}}{3g^{\frac{1}{2}}} + \frac{1}{6} - \frac{g}{6} \ln \left(1 + \frac{1}{g} \right) \right]. \quad (\text{A.27})$$

Analogamente, podemos calcular $\langle \cos(\phi_{\vec{r}+\vec{c}} - \phi_{\vec{r}}) \rangle_0$. De (A.4) e (A.11) encontramos a expressão abaixo:

$$\langle \cos(\phi_{\vec{r}+\vec{c}} - \phi_{\vec{r}}) \rangle_0 = e^{\frac{-1}{N} \sum_{\vec{q}} (1 - \gamma_{\vec{q}}^z) \langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_0}, \quad (\text{A.28})$$

onde $\gamma_{\vec{q}}^z = \cos q_z c$. Tomando o limite contínuo na região de longos comprimentos de onda ($\vec{q} \approx 0$), chegamos na integral abaixo para o expoente da soma em (A.28).

$$\frac{a^2 c}{8\pi^3} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \int_{-\frac{\pi}{c}}^{\frac{\pi}{c}} \frac{dq_x dq_y dq_z k_B T [1 - \cos q_z c]}{4\gamma [1 - \frac{1}{2}(\cos q_x a + \cos q_y a)] + 2\gamma_z [1 - \cos q_z c]}. \quad (\text{A.29})$$

Reescrevendo a integral (A.29) em coordenadas cilíndricas e utilizando a aproximação harmônica para os cossenos, obtemos:

$$\frac{c^3 k_B T}{2\pi^3 \gamma} \int_0^{\frac{\pi}{a}} \frac{dq}{q} \frac{1}{\mu} \int_{-\frac{\pi}{c}}^{\frac{\pi}{c}} \frac{q_z^2 dq_z}{p^2 + q_z^2}, \quad (\text{A.30})$$

onde $g = \frac{\gamma_z}{\gamma}$, $\mu = \frac{gc^2}{a^2 q^2}$ e $p = \frac{1}{\sqrt{\mu}}$. Como $\int \frac{x^2 dx}{x^2 + a^2} = x - a \arctan\left(\frac{x}{a}\right)$ [48], podemos escrever a integral (A.30) da seguinte maneira

$$\frac{k_B T}{\pi^3 \gamma} \left\{ \frac{\pi^3}{2g} - \frac{a^3}{g^{\frac{3}{2}}} \int_0^{\frac{\pi}{a}} q^2 \arctan\left(\frac{g^{\frac{1}{2}} \pi}{aq}\right) dq \right\}. \quad (\text{A.31})$$

A integral acima já foi calculada previamente em (A.26), fornecendo

$$\int_0^{\frac{\pi}{a}} q^2 \arctan\left(\frac{g^{\frac{1}{2}} \pi}{aq}\right) dq = \frac{\pi^3}{6a^3} \left[2 \arctan(g^{\frac{1}{2}}) + g^{\frac{1}{2}} - g^{\frac{3}{2}} \ln\left(1 + \frac{1}{g}\right) \right].$$

Após um pouco de álgebra conseguimos o resultado abaixo:

$$\frac{c^3 k_B T}{2\pi^3 \gamma} \int_0^{\frac{\pi}{a}} \frac{dq}{q} \frac{1}{\mu} \int_{-\frac{\pi}{c}}^{\frac{\pi}{c}} \frac{q_z^2 dq_z}{p^2 + q_z^2} = \frac{k_B T}{2\gamma} \left\{ \frac{1}{g} - \frac{1}{3g^{\frac{3}{2}}} \left[2 \arctan g^{\frac{1}{2}} + g^{\frac{1}{2}} - g^{\frac{3}{2}} \ln\left(1 + \frac{1}{g}\right) \right] \right\}. \quad (\text{A.32})$$

O cálculo da flutuação fora do plano $\langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_o$ para o modelo de Heisenberg anisotrópico na presença de um campo cristalino pode ser realizado mediante a aplicação do princípio de equipartição da energia à expressão (A.19) e passando ao limite contínuo na região de longos comprimentos de onda ($\vec{q} \approx 0$). Com efeito, conseguimos a integral abaixo escrita em coordenadas cilíndricas

$$\langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_o = \frac{k_B T a^2 c}{\pi^3} \int_0^{\frac{\pi}{a}} q dq \int_{-\frac{\pi}{c}}^{\frac{\pi}{c}} \frac{dq_z}{\delta - 2J\lambda(\cos q_x a + \cos q_y a) - \eta J_z \cos q_z c}, \quad (\text{A.33})$$

onde $\delta = 2D + 4J + 2J_z$. Lançando mão da aproximação harmônica para os cossenos e após manipulações algébricas, chegamos a

$$\langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_o = \frac{k_B T a^2 c}{\pi^3} \int_0^{\frac{\pi}{a}} q dq \int_{-\frac{\pi}{c}}^{\frac{\pi}{c}} \frac{dq_z}{\delta' + J\lambda a^2 q^2 + J_z \eta c^2 q_z^2}, \quad (\text{A.34})$$

onde $\delta' = 2D + 4J(1 - \lambda) + 2J_z(1 - \eta)$. Reescrevendo a integral em dq_z

$$\frac{1}{\epsilon^2} \int_{-\frac{\pi}{c}}^{\frac{\pi}{c}} \frac{dq_z}{\Omega^2 + q_z^2}, \quad (\text{A.35})$$

sendo $\epsilon^2 = \frac{c^2 J_z \eta}{a^2 q^2}$ e $\Omega^2 = \frac{\delta'}{c^2 J_z \eta} + \frac{a^2 q^2 J \lambda}{c^2 J_z \eta}$. Resolvendo a integral elementar (A.35) obtemos

$$\langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_o = \frac{2k_B T a^2}{\pi^3 (J_z \eta)^{\frac{1}{2}}} \int_0^{\frac{\pi}{a}} \frac{q dq}{\sqrt{\delta' + J \lambda a^2 q^2}} \arctan \left(\frac{(J_z \eta)^{\frac{1}{2}} \pi}{\sqrt{\delta' + J \lambda a^2 q^2}} \right). \quad (\text{A.36})$$

Fazendo a mudança de variável $u = \sqrt{\delta' + J \lambda a^2 q^2}$, $du = \frac{J \lambda a^2 q}{\sqrt{\delta' + J \lambda a^2 q^2}} dq$, a integral (A.36) toma a forma de uma integral cuja solução é conhecida [48]

$$\int \arctan \left(\frac{a}{u} \right) du = u \arctan \left(\frac{a}{u} \right) + a \ln \left(\sqrt{\frac{a^2}{u^2} + 1} \right).$$

Reunindo os termos avaliados, obtemos a expressão final para flutuação de spin fora do plano $\langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_o$

$$\begin{aligned} \langle (S_{\vec{r}}^z)^2 \rangle_o &= \frac{2k_B T}{\pi^3 (J_z \eta)^{\frac{1}{2}} J \lambda} \left[\sqrt{\delta' + J \lambda \pi^2} \arctan \left(\frac{\pi (J_z \eta)^{\frac{1}{2}}}{\sqrt{\delta' + J \lambda \pi^2}} \right) \right. \\ &\quad \left. - \sqrt{\delta'} \arctan \left(\frac{\pi (J_z \eta)^{\frac{1}{2}}}{\sqrt{\delta'}} \right) + \frac{\pi (J_z \eta)^{\frac{1}{2}}}{2} \ln \left(1 + \frac{J \lambda \pi^2}{\delta' + \pi^2 J_z \eta} \right) \right]. \quad (\text{A.37}) \end{aligned}$$