

**Estudo analítico do diagrama de fases da liga  
Fe-Al através da técnica do operador diferencial**

Daniele Alves Dias

Março de 2009

DANIELE ALVES DIAS

**Estudo analítico do diagrama de fases da liga  
Fe-Al através da técnica do operador diferencial**

Dissertação apresentada à UNIVERSIDADE FEDERAL DE  
MINAS GERAIS, como requisito parcial para a obtenção do  
título de mestre em ciências.

Orientador: Prof. Dr. João Antônio Plascak (UFMG)

Co-Orientador: Prof. Dr. José Ricardo Sousa (UFAM)

Departamento de Física - ICEX - UFMG

Março de 2009

# Agradecimentos

Ao Prof. Plascak, pela orientação.

Ao Prof. José Ricardo pois, mesmo tendo vindo de tão longe, dispôs seu tempo a mim.

À minha família, em especial aos meus pais pelas oportunidades de estudo.

Ao Ricardo pelo apoio e incentivo.

À Ana, Carlos, Douglas, Léo, Breno, Fábio e Bárbara. Pessoas que fizeram da minha graduação muito mais interessante.

Aos piauienses e baianos, por momentos um pouco mais descontraídos durante o mestrado.

Aos membros da banca.

Aos professores e funcionários do DF.

À CAPES pela bolsa.

# Resumo

Neste trabalho estudamos o modelo de Ising ferromagnético, puro e diluído, em várias redes hipercúbicas, utilizando a teoria de campo efetivo (EFT) baseada na técnica do operador diferencial. Consideramos interações entre primeiros e segundos vizinhos em sistemas diluídos por sítios enquanto que para sistemas diluídos por ligações somente consideramos interações entre primeiros vizinhos. Foram utilizados aglomerados de um e dois spins e obtidos os comportamentos da magnetização em função da temperatura reduzida, bem como o comportamento da temperatura crítica reduzida em função da concentração. Esses resultados foram comparados com os exatos, quando disponíveis, e com os obtidos através da aproximação tipo campo médio usando a desigualdade de Bogoliubov. Aplicamos esse modelo na descrição das propriedades termodinâmicas de ligas Fe-Al. O diagrama de fases experimental foi ajustado com os parâmetros teóricos. Ajustes razoáveis foram obtidos, entretanto não muito diferentes dos obtidos anteriormente através de outras técnicas aproximadas.

# Abstract

In this work we study the ferromagnetic Ising model, in its pure and diluted versions, on several hypercubic lattices. We use the effective field theory (EFT) based on the differential operator technique. We consider exchange and superexchange interactions on the site diluted systems, while we only consider exchange interaction on the bond diluted systems. We used one and two site cluster approximations and we obtained the magnetization behavior as a function of the reduced temperature as well critical reduced temperature behavior as a function of the dilution concentration. The results were compared with the exact ones, when available, and with the results obtained from the Bogoliubov inequality. We applied this model in the description of the thermodynamics properties of Fe-Al alloys. The experimental phase diagram were adjusted with the theoretical parameters. Reasonable fittings have been obtained, however not so different from those previously obtained from other approximate techniques.

# Índice

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Fenômenos Críticos</b>	<b>4</b>
2.1	Fluidos simples . . . . .	4
2.2	Sistemas Magnéticos . . . . .	8
2.3	Modelagem teórica do magnetismo . . . . .	10
2.4	Expoentes críticos . . . . .	13
2.4.1	Relações de escala . . . . .	17
2.5	Métodos aproximativos aplicado ao modelo de Ising . . . . .	20
2.5.1	Teoria de campo médio . . . . .	20
2.5.2	Desigualdade de Bogoliubov . . . . .	22
2.5.3	Grupo de renormalização (GR) . . . . .	23
2.6	Sistemas magnéticos diluídos . . . . .	26
2.6.1	Desordem nos modelos . . . . .	27
<b>3</b>	<b>Teoria de campo efetivo</b>	<b>29</b>
3.1	Identidade de Callen-Suzuki . . . . .	29
3.2	Operador diferencial . . . . .	32
<b>4</b>	<b>Modelo de Ising descrito pela técnica do operador diferencial</b>	<b>34</b>
4.1	Aglomerado de um spin . . . . .	37
4.2	Aglomerado de dois spins . . . . .	45

<b>5</b>	<b>Aplicação da técnica do operador diferencial a liga Fe-Al</b>	<b>53</b>
5.1	Ligas Fe-Al . . . . .	53
5.2	Modelo . . . . .	56
<b>6</b>	<b>Conclusão</b>	<b>61</b>
<b>A</b>	<b>Coefficientes obtidos com aglomerado de 1 spin</b>	<b>63</b>
A.1	Sistema diluído por ligação . . . . .	63
A.2	Sistema diluído por sítio . . . . .	64
<b>B</b>	<b>Coefficientes obtidos com aglomerado de 2 spin</b>	<b>66</b>
B.1	Sistema diluído por ligação . . . . .	66
B.2	Sistema diluído por sítio . . . . .	68
	<b>Referências</b>	<b>70</b>

# Capítulo 1

## Introdução

Materiais magnéticos em geral sempre despertaram um grande interesse, tanto sob o ponto de vista experimental quanto sob o ponto de vista teórico [1, 2]. Esse interesse se deve não somente as transições de fases que eles apresentam, que podem ser de primeira ordem, de segunda ordem e a existência de pontos multicríticos, como também pela sua enorme aplicabilidade tecnológica.

Em 1857 foi observado por Lord Kelvin que a resistência elétrica de materiais condutores se altera na presença de um campo magnético externo. Esse efeito é chamado de magneto-resistência (MR) e é observado em metais não-magnéticos comuns, tais como Au e Cu. Essa variação da resistência é entretanto muito pequena nesses casos. Em 1988, porém, foi observado pelo grupo do Professor Albert Fert na França [3] e pelo grupo do Professor Peter Grünberg na Alemanha [4], separadamente, que este efeito aparece de forma muito mais intensa em estruturas de filmes finos compostos por camadas alternadas de metal ferromagnético e não magnético. Este efeito recebeu o nome de magneto-resistência gigante, sendo atualmente aplicado em memórias de computadores o que proporcionou, a ambos, o prêmio nobel de física de 2007.

Dentre os materiais magnéticos, as ligas compostas por Fe são muito estudadas pois podem apresentar diversos comportamentos críticos depen-

dendo dos elementos que constituem o composto. Em particular, as ligas Fe-Al apresentam o comportamento onde os átomos de Al agem como diluidores por não possuírem momento magnético, reduzindo assim os efeitos ferromagnéticos do composto. Esse é um caso típico onde impurezas devem ser relevantes na descrição das propriedades físicas de materiais magnéticos, uma vez que a pureza completa dos elementos constituintes do cristal nem sempre é a desejada.

Aliado aos resultados obtidos experimentalmente [5, 6] para essas ligas existem propostas de modelos teóricos simples onde se tenta descrever as propriedades termodinâmicas desses materiais [7, 8]. Os sistemas teóricos propostos são baseados, principalmente, em modelos de spins discretos, como o de Ising, e modelos de spins contínuos, como o de Heisenberg, tanto clássico como quântico. Na maioria dos casos, soluções aproximadas são obtidas e assim os resultados analíticos são ajustados através de seus parâmetros teóricos com os dados experimentais. Embora uma descrição geral satisfatória qualitativa seja obtida desses modelos, alguns comportamentos experimentais não são reproduzidos como, por exemplo, a curva da temperatura crítica em função da concentração de átomos de Al para pequenas concentrações [9]. Portanto, além do limite de aplicabilidade do modelo em si, deve-se também analisar se essas discrepâncias podem estar ligadas ao método de aproximação empregado.

O propósito desta dissertação é estudar o comportamento crítico de sistemas magnéticos que possuam desordem através de uma técnica simples, a saber, o método do Operador Diferencial, desenvolvido no início da década de 80 por Honmura e Kaneyoshi [10]. Utilizaremos como protótipo o modelo de Ising de spin-1/2, como feito em trabalhos anteriores usando métodos aproximativos baseados na desigualdade de Bogoliubov [9] e o Grupo de Renormalização Fenomenológico de Campo Médio [11]. Uma comparação das propriedades termodinâmicas obtidas com o emprego do Operador Diferencial e da desigualdade de Bogoliubov será feita. O mesmo modelo será então empregado, através do uso do Operador Diferencial, para descrever os resul-

tados experimentais do diagrama de fases da liga Fe-Al e comparado com a desigualdade de Bogoliubov. Teremos então uma visão mais clara se as discrepâncias obtidas se devem ao modelo em si ou ao método aproximativo empregado.

Inicialmente faremos então uma breve discussão qualitativa do que acontece próximo a um ponto crítico, bem como suas implicações numa transição de fases contínua. Isso será abordado no Capítulo 2 dentro do tratamento geral de fluidos e magnetos. No Capítulo 3 descrevemos de forma sucinta a técnica do Operador Diferencial. Uma comparação entre essa técnica e o método variacional de Bogoliubov será feita no Capítulo 4 para o caso particular do modelo de Ising em uma, duas e três dimensões. Ajustes do diagrama de fases experimental com as duas técnicas acima citadas serão apresentados no Capítulo 5. Finalmente, no Capítulo 6 formularemos algumas conclusões, e perspectiva futura.

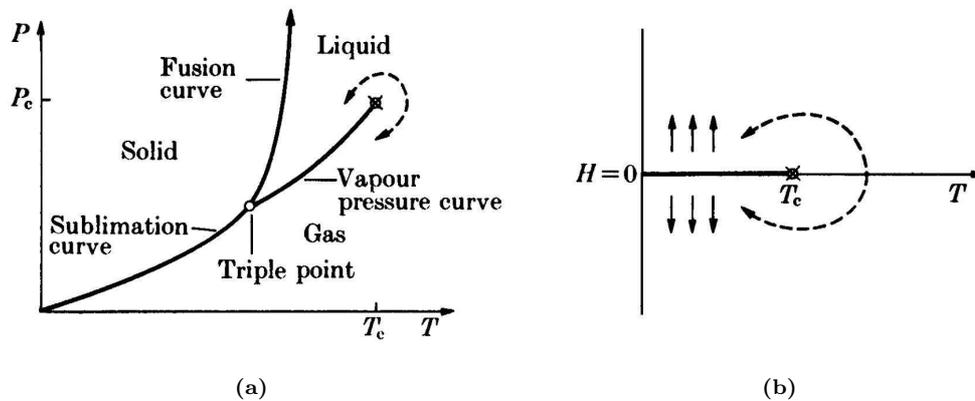
# Capítulo 2

## Fenômenos Críticos

Transições de fases são fenômenos comuns na natureza e vêm despertando o interesse de cientistas há vários séculos. Diversos exemplos podem ser observados em nosso cotidiano, como a fervura da água em um fogão, o seu congelamento num congelador, etc. Apesar de muitos sistemas físicos apresentarem os chamados fenômenos críticos, como fluidos, materiais magnéticos, cristais líquidos, supercondutores e superfluidos, ferroelétricos, entre outros, iremos discutir, primeiramente, um fluido e, posteriormente, sistemas magnéticos descritos por spins discretos na rede através de Hamiltonianos simples, o que é de interesse para este trabalho (ver, por exemplo, referências [12, 13]). Alguns aspectos de desordem em sistemas cristalinos serão tratados na última seção.

### 2.1 Fluidos simples

Para estudar sistemas fluidos iremos focar nossa atenção na equação de estado, um funcional na forma  $f(p, \rho, T) = 0$ , que relaciona a pressão ( $p$ ), densidade ( $\rho$ ) e temperatura ( $T$ ). Este funcional determina uma superfície tridimensional no espaço relacionado as coordenadas  $p$ ,  $\rho$  e  $T$ , sendo que cada ponto na mesma corresponde a um estado de equilíbrio. Vamos estudar as projeções desta superfície, chamada  $p\rho T$ , nos planos  $pT$ ,  $p\rho$  e  $\rho T$ .



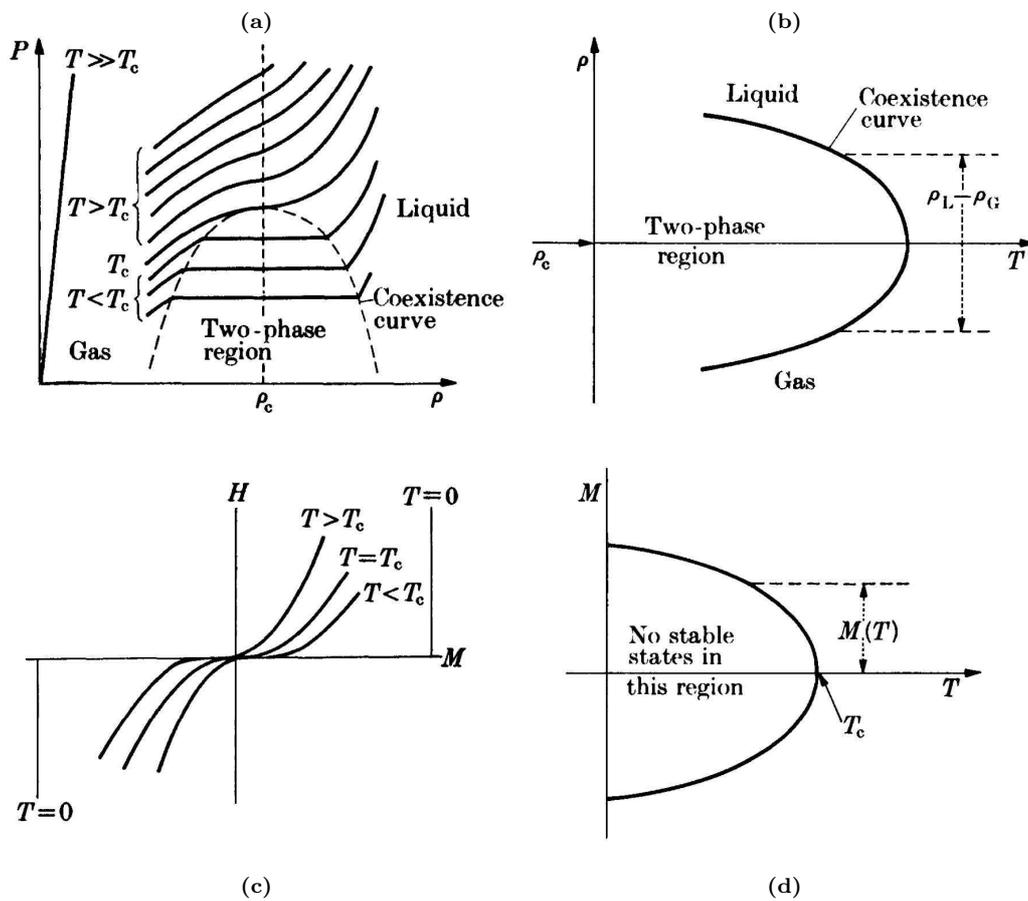
**Figura 2.1:** *Projeção da superfície  $p\rho T$  no plano (a)  $pT$ . Projeção da superfície  $HMT$  no plano (b)  $HT$ . Figura retirada de [12].*

A projeção do funcional em  $pT$ , que pode ser visto na Fig. 2.1(a), produz as regiões das três fases da matéria (sólido, líquido e gasoso). Cada ponto na superfície (nesse caso curvas) representa duas ou mais fases coexistindo no equilíbrio. O ponto triplo, no encontro de três curvas de coexistência, é aquele em que as três fases coexistem.

A curva de coexistência entre a fase líquida e gasosa não se estende infinitamente, parando em um ponto. Este é chamado de ponto crítico, que possui coordenadas bem definidas dadas por  $(p_c, \rho_c, T_c)$ . A partir deste ponto a fase líquida pode ser convertida em gasosa continuamente, não existindo diferença fundamental entre elas. Acredita-se que não exista um segundo ponto crítico, entre a fase sólida e líquida.

Quando consideramos a projeção da superfície  $p\rho T$  nos planos  $p\rho$  e  $\rho T$ , Fig. 2.2 (a) e (b), podemos observar que existe uma grande diferença entre a densidade da fase líquida e da gasosa,  $\rho_L$  e  $\rho_G$ , para  $T < T_c$ , sendo que esta descontinuidade vai a zero a medida que  $T$  tende a  $T_c$ . A diferença  $\rho_L - \rho_G$  é o chamado parâmetro de ordem para o líquido-gás. Devido a essa descontinuidade na densidade, que é a derivada primeira do potencial termodinâmico, essa transição de fase é chamada de primeira ordem.

Outra característica interessante é que as isotermas, que podem ser vista na Fig. 2.2(a), se aproximam de retas a temperaturas muito altas obedecendo



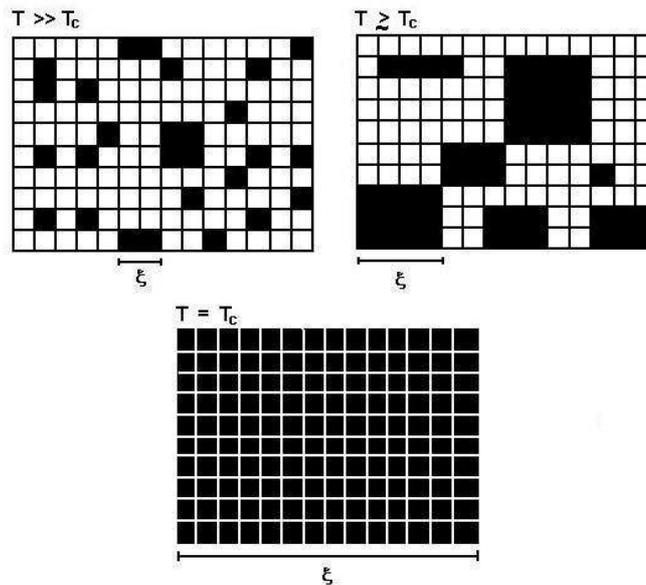
**Figura 2.2:** *Projeção da superfície  $p\rho T$  nos planos (a)  $p\rho$  e (b)  $\rho T$ , onde o comportamento de gás ideal é observado para  $T \gg T_c$ . Projeção da superfície  $HMT$  nos planos (c)  $HM$  e (d)  $MT$ . Figura retirada de [12].*

a equação de gás ideal. Desta forma podemos concluir que a deformação da curva, a medida que  $T$  diminui, é consequência da interação entre as moléculas.

Para entender melhor o que acontece a medida que se aproxima do ponto crítico faremos uma analogia com sistemas ferromagnéticos. Este tipo de analogia é conhecida como gás de rede. Neste modelo considera-se que o volume macroscópico,  $V$ , contendo o fluido é dividido em células de volume  $v$ , que possuem, rigorosamente, o tamanho das moléculas do fluido. A analogia com sistemas magnéticos aparece quando consideramos que cada célula é um

sítio possuindo um momento magnético, que pode apontar em duas direções. O momento magnético apontando para cima corresponde a uma célula ocupada por uma molécula, caso contrário o momento aponta para baixo. A temperaturas muito maiores do que a crítica o movimento das moléculas no sistema fluido é análogo a alteração aleatória da orientação dos momentos magnéticos (para cima e para baixo). Porém, a medida que a temperatura é abaixada em direção à crítica, pequenos aglomerados de moléculas correlacionadas aparecem, e, quanto mais próximo de  $T_c$ , maiores vão ficando os aglomerados, ou seja, a medida que  $T \rightarrow T_c^+$ , o comprimento de correlação  $\xi$  aumenta. A Fig. 2.3 mostra um esquema do gás de rede em diferentes temperaturas em duas dimensões.

Apesar da impressão que se tem de que o sistema fica completamente



**Figura 2.3:** Modelo de gás de rede para um sistema fluido, a medida que a temperatura se aproxima da temperatura crítica. Figura retirada de [12].

ordenado em  $T = T_c$  quando se olha a Fig. 2.3, não é isso que acontece. O sistema só fica completamente ordenado em  $T = 0$ . Então esta Figura deve ser interpretada como uma pequena porção de um grande sistema, onde o

comprimento desta pequena porção,  $L$ , é da ordem do comprimento de correlação,  $L \approx \xi$ , portanto se tem a impressão que todos os spins (ou sítios do gás de rede) estão na mesma direção (estão ocupados ou desocupados).

O comprimento de correlação  $\xi$  deve ser pensado como a distância em que flutuações de uma região do sistema afeta outra região, portanto se dois pontos do sistema estão separados a uma distância maior que  $\xi$  dizemos que estes dois pontos estão descorrelacionados. Como para  $T \gg T_c$  temos  $\xi \approx 0$  é fácil entender porque os parâmetros de ordem são nulos, pois, no caso da magnetização, os spins se orientam aleatoriamente para cima e para baixo, de forma descorrelacionada, fazendo com que a magnetização média seja nula.

Andrews, em 1869, publicou seus estudos sobre o dióxido de carbono [14], onde pela primeira vez ficou evidenciado esta característica peculiar do ponto crítico, produzindo um fenômeno chamado opalescência crítica. O mesmo ocorre quando a formação de aglomerados no fluido possuem dimensões comparáveis ao comprimento de onda da luz, que acontece a temperaturas próximas a  $T_c$ . Desta forma, quando incidimos luz monocromática no fluido um forte espalhamento é observado. Nesta transição,  $T = T_c$ , o volume e a entropia são contínuos, porém observa-se que a compressibilidade e, em alguns casos, o calor específico são divergentes. Como estas quantidades que divergem são derivadas segundas do correspondente potencial termodinâmico, essa transição é chamada de transição de segunda ordem, ou contínua.

## 2.2 Sistemas Magnéticos

Desde a antiguidade é conhecido que alguns materiais possuem propriedades magnéticas. Porém, somente a partir do início do século XX que o magnetismo foi interpretado, por Pierre Weiss [15], do ponto de vista qualitativo. Em 1907 Weiss desenvolveu uma teoria fenomenológica capaz de explicar qualitativamente materiais ferromagnéticos. Estes materiais possuem uma magnetização espontânea abaixo da temperatura de Curie (temperatura

crítica -  $T_c$ ), sendo que a mesma se anula para  $T \geq T_c$ , tornando-se assim um material paramagnético.

Quando atingimos a temperatura crítica dos materiais (por exemplo  $T_c(Fe) = 770^\circ C$ ,  $T_c(Ni) = 358^\circ C$ ) dizemos que o sistema sofre uma transição de fases magnética. Assim como para sistemas fluidos, em  $T < T_c$  temos uma fase ordenada com menos simetria (ferromagnética) e com  $T > T_c$  temos uma fase desordenada com mais simetria (paramagnética) - dizemos então que o sistema sofre uma quebra espontânea de simetria.

Existem, porém, outros materiais, como, por exemplo a hematita ( $Fe_2O_3$ ) e os óxidos  $CoO$  e  $Cr_2O_3$ , que na ausência de campo externo apresentam magnetização total zero e não são propriamente paramagnéticos. Estes materiais são denominados antiferromagnéticos (AF) abaixo de uma dada temperatura, conhecida como temperatura de Néel ( $T_N$ ). No estado AF os dipolos na rede cristalina interagem de tal forma a se orientarem antiparalelamente. Para temperaturas maiores que  $T_N$  os dipolos magnéticos se orientam de forma aleatória quebrando assim a ordem AF e se tornam paramagnéticos. A estrutura cristalina desses materiais é constituída por uma rede magnética que se divide, em sua forma mais simples, em duas sub-redes equivalentes (A e B). E, na ausência de campos externos temos  $m_A = -m_B$  ( $m_A$  e  $m_B$  são as magnetizações das sub-redes A-*para cima* e B-*para baixo*, respectivamente). Porém, existem outros antiferromagnéticos que possuem estruturas mais complexas.

A analogia entre transições de fase magnéticas e fluidos é fácil de ser observada. Se aplicarmos uma pressão  $p$  num fluido a densidade do sistema aumenta, assim como a magnetização aumenta quando um campo  $H$  é aplicado num sistema ferromagnético. Desta forma, o par  $(H, M)$  é o análogo magnético ao par  $(p, \rho)$  para um fluido simples. A projeção da superfície  $HMT$  nos planos  $HT$ ,  $HM$ , e  $MT$  possuem regiões em que a análise discutida para os fluidos é totalmente aplicável. Basta olhar para as Figs. 2.1(b), 2.2(c) e (d) e perceber a semelhança entre os diagramas para os fluidos e para os magnetos. Neste caso, o parâmetro de ordem é a magnetização, ou

seja, a partir do ponto crítico a magnetização se torna nula (o parâmetro de ordem é definido de tal forma que ele é zero acima da temperatura crítica e diferente de zero abaixo da temperatura crítica).

## 2.3 Modelagem teórica do magnetismo

Apesar da teoria de Weiss ser capaz de descrever qualitativamente algumas propriedades de sistemas magnéticos, a mesma apresenta inconsistências do ponto de vista quantitativo. Por exemplo, em sua teoria Weiss considera que o que gera a ordem nesses sistemas, do ponto de vista microscópico, seria a energia de interação dipolo-dipolo entre os átomos. Suponhamos que o ordenamento dos momentos magnéticos fossem causados por essa energia de interação, que é da ordem  $\Delta E_d \simeq \mu^2/a^3$  ( $\mu$  é o momento magnético do íon e  $a$  é o parâmetro de rede), e a mesma seja maior que a energia térmica  $k_B T$  ( $k_B$  é a constante de Boltzmann), isto é,  $\Delta E_d \gg k_B T$ . Portanto, a medida que a temperatura aumenta, a magnetização espontânea deve diminuir, e quando atingimos  $T_c$  a ordem deve ser destruída por causa, fundamentalmente, da energia térmica ser da mesma magnitude de  $\Delta E_d$ . Para tanto, sendo  $\mu \simeq \mu_B$  (magnéton de Bohr),  $a \simeq 1\text{Å}$  e  $k_B = 1.380658(12) \times 10^{-23} JK^{-1}$  teríamos  $T_c \simeq 10^{-1} K$  muito inferior aos resultados experimentais  $T_c \simeq 10^3 K$ ! Concluímos assim que o acoplamento entre os íons nos materiais magnéticos não deve-se a interação magnética entre eles.

Para explicar o forte magnetismo do ponto de vista microscópico, Heisenberg propôs que o alinhamento dos spins decorria de seus vizinhos mais próximos [16]. Consideremos, por exemplo, um sistema com dois elétrons não interagentes. O princípio de exclusão de Pauli exige que as autofunções de onda totais sejam anti-simétricas. Considerando então que um elétron de um átomo esteja no estado fundamental e o outro no estado excitado ( $nml$ ), a parte espacial da auto-função será

$$\phi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{100}(\vec{x}_1)\psi_{nml}(\vec{x}_2) \pm \psi_{100}(\vec{x}_2)\psi_{nml}(\vec{x}_1)] ,$$

onde  $\psi_{nml}(\vec{x})$  é a auto-função espacial do elétron e o sinal positivo (negativo) é para a função de onda simétrica (anti-simétrica). Introduzindo a correspondente autofunção de estado de spin e usando a teoria de perturbação ( $E = E_{100} + E_{nlm} + \Delta E$ ), obtem-se as auto-energias, que escrevemos como (para maiores detalhes veja as referências [17, 18])

$$\Delta E = \left\langle \frac{e^2}{r_{12}} \right\rangle = I \pm J, \quad (2.1)$$

com  $r_{12} = |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|$ , note que se a auto-função espacial é simétrica (anti-simétrica) a auto-função de spin deverá ser anti-simétrica (simétrica).  $I$  e  $J$  são conhecidos, respectivamente, como integral direta e integral (ou energia) de troca, e são dadas por

$$I = \int d^3x_1 d^3x_2 |\psi_{100}(\vec{x}_1)|^2 |\psi_{nlm}(\vec{x}_2)|^2 \frac{e^2}{r_{12}} \quad (2.2)$$

$$J = \int d^3x_1 d^3x_2 \psi_{100}^*(\vec{x}_1) \psi_{nlm}^*(\vec{x}_2) \frac{e^2}{r_{12}} \psi_{100}(\vec{x}_1) \psi_{nlm}(\vec{x}_2). \quad (2.3)$$

No estado de singlete (spins antiparalelos) a função de onda espacial é simétrica e os elétrons tem a tendência de se aproximarem mais uns dos outros. Desta forma, os efeitos de repulsão eletrostática são mais intensos resultando em maiores energias. Já no estado de tripleto (spins paralelos) a função de onda espacial é anti-simétrica e os elétrons tendem a se afastar mais. Note que, como a energia de interação resulta de um produto das funções de onda de cada elétron,  $J$  dependerá do entrelaçamento (*overlap*) das funções de onda decrescendo exponencialmente, no caso de elétrons ligados em núcleos diferentes, o que faz com que o mesmo seja uma energia de curto alcance. O que difere da energia eletrostática, que é de longo alcance.

Usando relações dos operadores de spin  $\vec{S}^2$  e  $\vec{S}_i^2$  ( $i = 1, 2$ ), onde  $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$ , e com base nas auto-funções correspondentes às auto-energias dadas pela eq. (2.1), Dirac [19] propôs o seguinte Hamiltoniano efetivo de spins

$$\mathcal{H}_{12} = I - \frac{J_{12}}{2} \left( 1 + 4\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \right), \quad (2.4)$$

pois teremos

$$\mathcal{H}_{12}|\phi_{\pm}\rangle = E_{\pm}|\phi_{\pm}\rangle,$$

com  $E_{\pm} = E_{100} + E_{nlm} \pm \Delta E$  e  $|\phi_{\pm}\rangle$  sendo os estados de spin. Generalizando para uma rede cristalina de  $N$  spins localizados, o Hamiltoniano efetivo entre spin-spin é descrito, de forma geral, por

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (2.5)$$

onde a soma é realizada sobre todos os pares de primeiros vizinhos  $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ . A eq. (2.5) é conhecida na literatura como modelo de Dirac-Heisenberg. Para  $J_{ij} > 0$  ( $J_{ij} < 0$ ) dizemos ser o Hamiltoniano de Heisenberg ferromagnético (antiferromagnético).

Nesse modelo, os momentos magnéticos são capazes de se orientar nas três direções possíveis sendo relacionados ao operador spin da mecânica quântica. A interação de troca é de natureza isotrópica pois o Hamiltoniano (2.5) possui as três componentes do spin com mesma energia de interação,  $J_{ij}$ . Quando consideramos a presença da interação spin-órbita nos íons de um cristal uma direção privilegiada no espaço é induzida, tornando o Hamiltoniano anisotrópico. Utilizando teoria perturbativa de segunda ordem para a interação spin-órbita é possível mostrar um Hamiltoniano efetivo dado por

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \sum_i \sum_{\alpha,\beta} \Lambda_i^{\alpha\beta} S_i^\alpha S_i^\beta, \quad (2.6)$$

onde  $\Lambda_i^{\alpha\beta}$  é o parâmetro de anisotropia de íon-único, característico de cada material, e  $\alpha, \beta = x, y, z$ . Portanto, podemos, de forma efetiva, reescrever o Hamiltoniano (2.6) como

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} (J_{ij}^x S_i^x S_j^x + J_{ij}^y S_i^y S_j^y + J_{ij}^z S_i^z S_j^z), \quad (2.7)$$

onde  $J_{ij}^\mu$  é a componente  $\mu$  da interação efetiva entre os pares de spins vizinhos. Este é dito, então, como o Hamiltoniano de Heisenberg anisotrópico.

A eq. (2.7) possui dois limites particulares:

i. quando  $J_{ij}^z \ll J_{ij}^{x,y}$ , a equação resulta em

$$\mathcal{H}_{xy} = - \sum_{\langle i,j \rangle} (J_{ij}^x S_i^x S_j^x + J_{ij}^y S_i^y S_j^y), \quad (2.8)$$

e é conhecida como modelo  $xy$  (ou planar), e

ii. quando  $J_{ij}^z \gg J_{ij}^{x,y}$  teremos

$$\mathcal{H}_I = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij}^z S_i^z S_j^z, \quad (2.9)$$

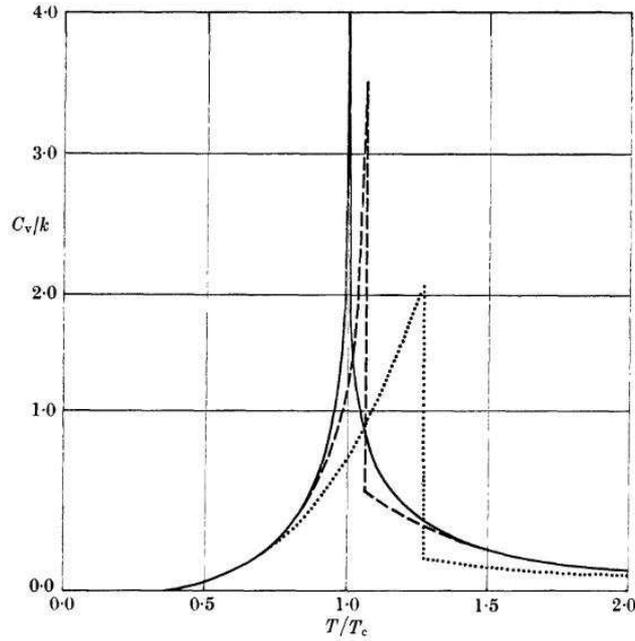
e é conhecida como modelo de Ising.

O modelo de Ising é análogo ao gás de rede, em que os momentos magnéticos são tratados como clássicos e capazes de apenas duas orientações e neste trabalho iremos usá-lo.

A solução unidimensional do mesmo, que foi encontrada por Ising [20], e pode ser vista, por exemplo, em [13, 2], não possui transição de fases, ou seja, não existe magnetização espontânea para temperaturas diferentes de zero. A solução analítica exata encontrada por Onsager [2] para o Modelo de Ising na rede quadrada na ausência de campo externo,  $H = 0$ , possui uma transição de fases de segunda ordem, porém o conjunto de expoentes críticos obtidos discordavam dos que são obtidos através do modelo de Van der Waals e a teoria de Campo Médio de Weiss [15].

## 2.4 Expoentes críticos

O estudo de fenômenos críticos tem sido focados, cada vez mais, em um conjunto de índices conhecidos como expoentes críticos [12, 21]. Estes expoentes servem para descrever o comportamento singular que certas grandezas termodinâmicas possuem ao redor do ponto crítico, ver, por exemplo, Fig. 2.4 que mostra o comportamento crítico para o calor específico a volume constante. Outros exemplos disso são a compressibilidade e a capacidade térmica molar, que crescem sem limites e divergem no ponto crítico. Essas singularidades são bem representadas quando escritas como função dos correspondentes desvios do ponto crítico como, por exemplo,  $(T - T_c)$  e  $(p - p_c)$ . Desta forma, os parâmetros de ordem mencionados nas duas primeiras seções



**Figura 2.4:** A curva sólida mostra o calor específico do modelo de Ising bi-dimensional, obtido pela solução exata de Onsager, a curva pontilhada obtido pela aproximação de Bethe e a curva tracejada obtido pela aproximação de Krammers-Wannier e Kikuchi. Figura retirada de [12].

deste capítulo podem ser escritos como

$$\rho_L - \rho_G \sim (-\varepsilon)^\beta \quad \text{e} \quad M \sim (-\varepsilon)^\beta, \quad (2.10)$$

onde  $\varepsilon = (T - T_c)/T_c$  e  $\beta$  é o correspondente expoente crítico do parâmetro de ordem, note que o sinal de menos se deve ao fato de  $\rho_L - \rho_G$  e  $M$  serem diferentes de zero somente para  $T < T_c$ .

A notação  $a(x) \sim b(x)$  é utilizada para caracterizar o comportamento crítico, em que ambos  $a$  e  $b$  divergem ou ambos anulam quando  $x \rightarrow 0$ .

Se o comportamento crítico é, de fato, descrito por uma lei de potência, então o expoente crítico será definido pela própria lei de potência. É interessante, porém, definir o expoente crítico de forma mais geral, afim de descrever grandezas que não sejam leis de potências estritas. Portanto, definimos

o expoente crítico associado a grandeza  $f(\varepsilon)$  por

$$\lambda = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\ln f(\varepsilon)}{\ln(\varepsilon)}. \quad (2.11)$$

Vemos que não é necessário uma estrita proporcionalidade entre o parâmetro de ordem e  $\varepsilon$  para sermos capazes de definir o expoente crítico. De fato, a simples relação  $M = \mathcal{B}(\varepsilon)^\beta$ , onde  $\mathcal{B}$  é uma constante, é válida, mas na prática existem, frequentemente, termos de correção, de forma que pode-se ter uma expressão mais geral

$$\rho_L(T) - \rho_G(T)/2\rho_c = \mathcal{B}(1 - T/T_c)^\beta [1 + B(-\varepsilon)^x + \dots] \rightarrow \Delta\rho \sim (-\varepsilon)^\beta$$

e

$$M(T)/M_0(0) = \mathcal{B}(1 - T/T_c)^\beta [1 + B(-\varepsilon)^x + \dots] \rightarrow M \sim (-\varepsilon)^\beta,$$

com  $x > 0$ . Note que os termos de correção vão a zero quando o limite é tirado. As constantes de normalização  $\rho_c$  e  $M_0(0)$  são incluídas de forma que o coeficiente  $\mathcal{B}$  varie muito pouco de um sistema para outro (geralmente  $\mathcal{B}$  é da ordem de uma unidade).

Outra grandeza importante na caracterização da criticalidade em fluidos é a compressibilidade isotérmica ( $K_T = \rho^{-1}(\partial\rho/\partial p)_T$ ) e em magnetos a susceptibilidade isotérmica ( $\chi_T = (\partial M/\partial H)_T$ ) sendo que ambas divergem no ponto crítico, ou seja, uma pequena variação na pressão (campo externo) gera uma variação infinita na densidade (magnetização). Admitimos que ao longo da isocórica ( $\rho = \rho_c$ ) e para  $T > T_c$  elas se comportem com

$$K_T/K_T^0 = \begin{cases} \mathcal{C}'(-\varepsilon)^{-\gamma'}(1 + \dots) & [T < T_c, \rho = \rho_L(T) \quad \text{ou} \quad \rho = \rho_G(T)] \\ \mathcal{C}\varepsilon^{-\gamma}(1 + \dots) & [T > T_c, \rho = \rho_c(T)] \end{cases}$$

para fluidos e

$$\chi_T/\chi_T^0 = \begin{cases} \mathcal{C}'(-\varepsilon)^{-\gamma'}(1 + \dots) & [T < T_c, H = 0] \\ \mathcal{C}\varepsilon^{-\gamma}(1 + \dots) & [T > T_c, H = 0], \end{cases}$$

para magnetos e que  $\gamma'$  e  $\gamma$  não são necessariamente iguais. Aqui  $K_T^0 = m/kT_c\rho_c$  é a compressibilidade de um gás ideal no ponto crítico e, similarmente,  $\chi_T^0$  é a susceptibilidade de um sistema de momentos magnéticos não

interagentes desenvolvido no ponto crítico.

Os expoentes para o calor específico,  $\alpha'$  e  $\alpha$ , são definidos pela relação

$$C_V = \begin{cases} \mathcal{A}'(-\varepsilon)^{-\alpha'}(1 + \dots) & [T < T_c, \rho = \rho_L(T) \quad \text{ou} \quad \rho = \rho_G(T)] \\ \mathcal{A}\varepsilon^{-\alpha}(1 + \dots) & [T > T_c, \rho = \rho_c(T)] \end{cases}$$

para fluidos e

$$C_H = \begin{cases} \mathcal{A}'(-\varepsilon)^{-\alpha'}(1 + \dots) & [T < T_c, H = 0] \\ \mathcal{A}\varepsilon^{-\alpha}(1 + \dots) & [T > T_c, H = 0], \end{cases}$$

para magnetos e, assim como anteriormente,  $\alpha'$  e  $\alpha$  não são necessariamente iguais.

Existem ainda os expoentes críticos do comprimento de correlação e da função correlação, a saber,

$$\xi = \begin{cases} \xi'_0(-\varepsilon)^{-\nu'}(1 + \dots) & [T < T_c, H = 0] \\ \xi_0\varepsilon^{-\nu}(1 + \dots) & [T > T_c, H = 0] \end{cases}, \quad (2.12)$$

e

$$C(r) = \frac{D}{r^{-d+2-\eta}}, \quad T = T_c, \quad (2.13)$$

onde  $\xi$  é o chamado comprimento de correlação e  $C(r)$  é a função de correlação de dois pontos distantes  $r$  (por exemplo, no caso magnético pode ser o valor médio do produto de dois spins estando separados pela distância  $r$  ou, no caso de fluidos, o valor médio do produto das densidades em dois locais diferentes separados por  $r$ ).  $d$  é a dimensão da rede e  $\nu$  e  $\eta$  são os correspondentes expoentes críticos.

Um outro expoente  $\delta$  relaciona a variação de  $p - p_c = \Delta p$  (e  $H$ , para magnetos) com  $\rho - \rho_c$  ( $M$ ) ao longo da isoterma crítica, ou seja,  $\Delta p \sim |\rho/\rho_c - 1|^\delta$  ( $H \sim M^\delta$ ), com  $T = T_c$ .

Houve uma época em que muitos pesquisadores acreditavam que todos os materiais possuiriam o mesmo conjunto de expoentes, mas, assim como as temperaturas críticas variam de material para material, o mesmo ocorre com os expoentes. As teorias de van der Waals, campo molecular e Landau, em sua forma original, nos dam os mesmos valores para cada expoente crítico

e são conhecidas como teorias clássicas. Estas teorias falharam na predição dos expoentes.

Podemos notar que nem todos os expoentes críticos são independentes. Existem desigualdades que relacionam certos expoentes. Uma destas desigualdades pode ser obtida analisando o calor específico para sistemas magnéticos.

Os calores específicos a campo magnético constante,  $C_H$ , e magnetização constante,  $C_M$ , são dados por

$$C_H = T \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_H \quad \text{e} \quad C_M = T \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_M ,$$

sendo que podem se relacionar como se segue

$$C_H - C_M = T \frac{\alpha_H^2}{\chi_T} = T \left\{ \left( \frac{\partial M}{\partial T} \right)_H \right\}^2 / \chi_T .$$

Como  $C_M$  deve ser sempre positivo a equação acima se torna uma desigualdade

$$C_H \geq T \left\{ \left( \frac{\partial M}{\partial T} \right)_H \right\}^2 / \chi_T \quad \longrightarrow \quad \alpha' + 2\beta + \gamma' \geq 2 , \quad (2.14)$$

onde a última relação foi obtida considerando  $C_H \sim (-\varepsilon)^{-\alpha'}$ ,  $\chi_T \sim (-\varepsilon)^{-\gamma'}$  e  $(\partial M/\partial T)_H \sim (-\varepsilon)^{\beta-1}$ . Esta é conhecida como a desigualdade de Rushbrooke.

### 2.4.1 Relações de escala

Em muitos trabalhos, teóricos e experimentais, estas desigualdades são satisfeitas como igualdades. Não existem provas rigorosas que qualquer uma dessas desigualdades sejam igualdades, mas existe uma técnica bem sucedida neste sentido, que introduziremos agora, chamada teoria de escala. Essa teoria, que foi escrita de forma mais geral por Widom [22], consiste em fazer uma simples consideração dos potenciais termodinâmicos, para isso introduziremos funções homogêneas.

Uma função  $f(x)$  é dita homogênea quando

$$f(\lambda x) = g(\lambda) f(x) , \quad (2.15)$$

para todos os valores  $\lambda$ , onde  $g(\lambda)$  é uma função indefinida, mas não arbitrária. A eq. (2.15) implica em

$$f\{\lambda(\mu x)\} = g(\lambda)f(\mu x) = g(\lambda)g(\mu)f(x) \quad \text{e} \quad f\{(\lambda\mu)x\} = g(\lambda\mu)f(x),$$

portanto  $g(\lambda)g(\mu) = g(\lambda\mu)$ . Derivando com relação a  $\mu$  temos

$$\frac{\partial}{\partial \mu}g(\lambda\mu) = \lambda g'(\lambda\mu) = g(\lambda)g'(\mu),$$

fazendo agora  $\mu = 1$  e considerando  $g'(\mu = 1) = p$  obteremos

$$\frac{g'(\lambda)}{g(\lambda)} = \frac{p}{\lambda} \quad \rightarrow \quad g(\lambda) = c\lambda^p,$$

mas como  $g'(1) = p$ , substituindo na eq. acima, teremos  $c = 1$ , logo funções homogêneas são do tipo

$$f(\lambda x) = \lambda^p f(x),$$

onde  $p$  é o grau de homogeneidade. Generalizando para funções de mais de uma variável teremos

$$f(\lambda^a x, \lambda^b y) = \lambda f(x, y), \quad (2.16)$$

onde  $a$  e  $b$  são constantes arbitrárias e  $f(x, y)$  é uma função homogênea generalizada.

Considerando, *ad hoc*, que o potencial de Gibbs é uma função homogênea generalizada, assim como os outros potenciais termodinâmicos, podemos reescrevê-lo como  $G(T, H) \rightarrow G(\varepsilon, H)$ , onde  $\varepsilon = (T - T_c)/T_c$ , e teremos

$$G(\lambda^{a_\varepsilon} \varepsilon, \lambda^{a_H} H) = \lambda G(\varepsilon, H). \quad (2.17)$$

Veremos agora como os expoentes críticos podem ser escritos em função de  $a_\varepsilon$  e  $a_H$ . Note que a teoria de escala não irá determinar os valores de  $a_\varepsilon$  e  $a_H$ , mas o fato de todos os expoentes críticos poderem ser escritos em função desses parâmetros significa que se determinarmos dois expoentes todos os outros ficam definidos.

Sendo  $M = -(\partial G/\partial H)_T$ , temos

$$\lambda^{a_H} \frac{\partial G\{\lambda^{a_\varepsilon} \varepsilon, \lambda^{a_H} H\}}{\partial(\lambda^{a_H} H)} = \lambda \frac{\partial}{\partial H} G(\varepsilon, H) \quad \rightarrow \quad \lambda^{a_H} M(\lambda^{a_\varepsilon} \varepsilon, \lambda^{a_H} H) = \lambda M(\varepsilon, H).$$

Existem dois expoentes críticos associados ao comportamento da magnetização perto da criticalidade, mas estamos interessados somente em  $\beta$ , portanto, fazendo  $H = 0$  e  $\varepsilon \rightarrow 0$ , teremos

$$M(\varepsilon, 0) = \lambda^{a_H - 1} M(\lambda^{a_\varepsilon} \varepsilon, 0) ,$$

como esta equação é válida para qualquer  $\lambda$  podemos escolher  $\lambda = (-1/\varepsilon)^{1/a_\varepsilon}$

$$M(\varepsilon, 0) = (-\varepsilon)^{(1-a_H)/a_\varepsilon} M(-1, 0) \sim (-\varepsilon)^\beta ,$$

resultando em

$$\beta = \frac{1 - a_H}{a_\varepsilon} . \quad (2.18)$$

Sendo  $\chi_T = (\partial M / \partial H)_T$

$$\lambda^{2a_H} \chi_T(\lambda^{a_\varepsilon} \varepsilon, \lambda^{a_H} H) = \lambda \chi_T(\varepsilon, H) .$$

de forma análoga ao que foi feito para a magnetização,  $H = 0$  e  $\lambda = (-1/\varepsilon)^{1/a_\varepsilon}$ , teremos

$$\chi_T(\varepsilon, 0) = (-\varepsilon)^{(1-2a_H)/a_\varepsilon} \sim (-\varepsilon)^{-\gamma'} ,$$

logo

$$\gamma' = \frac{2a_H - 1}{a_\varepsilon} = -2\beta + \frac{1}{a_\varepsilon} . \quad (2.19)$$

Se diferenciarmos o potencial de Gibbs com relação a temperatura, mantendo  $H$  constante, teremos o calor específico, pois  $C_H = (\partial E / \partial T)_H = -T(\partial^2 G / \partial T^2)_H$ , logo

$$\lambda^{2a_\varepsilon} C_H(\lambda^{a_\varepsilon} \varepsilon, \lambda^{a_H} H) = \lambda C_H(\varepsilon, H) ,$$

denovo, fazendo  $H = 0$  e  $\lambda = (-1/\varepsilon)^{1/a_\varepsilon}$ , e lembrando que  $C_H \sim (-\varepsilon)^{\alpha'}$ , teremos

$$\alpha' = 2 - \frac{1}{a_\varepsilon} . \quad (2.20)$$

Utilizando a equação acima juntamente com as eqs. (2.18) e (2.19) obteremos

$$\alpha' + 2\beta + \gamma' = 2 , \quad (2.21)$$

que idêntica a eq. (2.14), mas nesse caso temos uma igualdade.

## 2.5 Métodos aproximativos aplicado ao modelo de Ising

Em geral, o estudo teórico do comportamento crítico de sistemas requer algumas aproximações, até mesmo para resolver modelos mais simples, como o de Ising. Nesta seção iremos discutir alguns métodos aplicados a este modelo, pois é o modelo de interesse neste trabalho.

### 2.5.1 Teoria de campo médio

A idéia deste modelo é focar a atenção a um único spin da rede e supor que a interação entre este spin e seus vizinhos seja dada através de um campo molecular proporcional a magnetização média [23]. Note que como este método só considera as flutuações deste único spin, pois esta consideração negligencia as flutuações dos vizinhos, o sistema que, a princípio, era de muitos corpos passa a ser de um só. Note também que, como desprezamos essas flutuações e, conseqüentemente, a correlação entre spins, este método não produz resultados exatos, ainda mais perto da criticalidade que possui efeitos de correlação mais intensos.

O Hamiltoniano de Ising para uma rede de  $N$  spins, como já discutido anteriormente, pode ser escrito como

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^N \sigma_i, \quad (2.22)$$

onde a primeira soma é feita entre primeiros vizinhos. Olhando agora somente para o spin  $i$  teremos

$$\mathcal{H}_i = (-J \sum_{j=1}^z \sigma_j - H) \sigma_i = -H_i \sigma_i, \quad (2.23)$$

onde a soma é feita em todos os  $z$  vizinhos do spin em questão e podemos, então, pensar em  $H_i = H + J \sum_{j=1}^z \sigma_j$  como o campo resultante que atua no spin  $i$ . Como todos os spins flutuam em torno de seu valor médio, o mesmo

ocorrerá com  $H_i$

$$\begin{aligned}\langle H_i \rangle &= H + J \sum_{j=1}^z \sigma_j \\ &= H + Jz \langle \sigma_i \rangle ,\end{aligned}\tag{2.24}$$

pois estamos considerando que  $\langle \sigma_i \rangle = \langle \sigma_j \rangle = m$  para todo  $i$  e  $j$ . A aproximação consiste em dizer que  $H_i \simeq \langle H_i \rangle = H + \Delta H$ , onde  $\Delta H = Jzm$ . se pensarmos em  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_i$ , a função de partição definir por

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta \mathcal{H}} ,\tag{2.25}$$

onde  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ , sendo  $k_B$  a constante de Boltzmann,  $\{\sigma\}$  representa os estados microscópicos possíveis do sistema e a soma se estende sobre todos esses estados. Sendo assim teremos

$$\begin{aligned}Z &\simeq \sum_{\{\sigma\}} e^{\beta \sum_i \langle H_i \rangle \sigma_i} = \prod_{i=1}^N \sum_{\{\sigma_i\}} e^{\beta \langle H_i \rangle \sigma_i} \\ &= 2 \cosh[\beta(H + \Delta H)] .\end{aligned}$$

Logo, como  $\langle \sigma_i \rangle = \frac{\sum_{\{\sigma\}} \sigma_i e^{-\beta \mathcal{H}}}{Z}$ , teremos

$$m \simeq \tanh[\beta(H + \Delta H)] = \tanh[\beta(H + Jzm)] ,\tag{2.26}$$

que é uma equação transcendental. Os valores de  $m$  para os diversos valores de  $\beta Jz$  podem ser dados graficamente pela interseção das duas curvas da equação acima, mas como estamos interessados em transições de fase, que só ocorrem com  $H = 0$ , podemos escrever

$$\beta = \frac{1}{2Jzm} \ln \left( \frac{1+m}{1-m} \right) .$$

Lembrando que  $m \simeq 0$  quando  $T \rightarrow T_c$  e que  $\tanh x \simeq x$  quando  $x \ll 1$ , podemos reescrever a eq. (2.26), com  $H = 0$ , como  $m \simeq \beta_c Jzm$  que resulta em

$$\beta_c Jz = 1 \quad \longrightarrow \quad T_c = \frac{Jz}{k_B} .$$

Note que este modelo prediz uma temperatura de transição para sistemas unidimensionais, mas a solução exata do modelo de Ising unidimensional resulta em  $T_c = 0$ , portanto, esta teoria é infinitamente errada em uma dimensão.

Soluções mais sofisticadas podem ser obtidas considerando, ao invés de um único spin, mais spins. Mas os resultados sempre serão incorretos, pois as flutuações são negligenciadas.

## 2.5.2 Desigualdade de Bogoliubov

O grande problema dos modelos estatísticos é obter a função partição, sendo o termo de cooperatividade do Hamiltoniano o que dificulta, no caso do modelo de Ising este termo é dado por  $-J\sigma_i\sigma_j$ . Nesta seção desenvolveremos um método baseado em um princípio variacional para a energia livre.

Seja  $\mathcal{H}$  o Hamiltoniano de um sistema para o qual não conhecemos solução. Definiremos  $V = \mathcal{H} - \mathcal{H}_0$  e escolheremos  $\mathcal{H}_0$ , o Hamiltoniano tentativa solúvel analiticamente, semelhante ao original,  $\mathcal{H}$ , e em função de um parâmetro variacional, ou seja,  $\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_0(\gamma)$ .

A função de partição de  $\mathcal{H}_0$  será dada pela eq. (2.25),  $Z_0 = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta\mathcal{H}_0}$ , e a média de uma grandeza  $A$  qualquer com relação a  $\mathcal{H}_0$  será

$$\langle A \rangle_0 = \frac{1}{Z_0} \sum_{\{\sigma\}} A e^{-\beta\mathcal{H}_0} .$$

Sendo assim, podemos escrever

$$\langle e^{-\beta V} \rangle_0 = \frac{1}{Z_0} \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta V} e^{-\beta\mathcal{H}_0} = \frac{1}{Z_0} \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta\mathcal{H}} ,$$

ou

$$Z = Z_0 \langle e^{-\beta V} \rangle_0. \tag{2.27}$$

A equação acima é exata. Se, entretanto, expandirmos a função  $e^x$  em série de Taylor, temos

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2} + \dots ,$$

o que nos permite escrever  $e^x \geq 1 + x$ . Utilizando a expansão acima, temos

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

Se calcularmos a média térmica com relação a  $\mathcal{H}_0$ , em ambos os lados, encontramos

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

ou

$$\langle e^{-\beta V} \rangle_0 \geq e^{-\beta \langle V \rangle_0} . \quad (2.28)$$

Substituindo a eq.(2.28) na eq.(2.27) obtemos

$$Z \geq Z_0 e^{-\beta \langle V \rangle_0} . \quad (2.29)$$

Tomando agora o logaritmo dos dois lados da eq.(2.29) obteremos

$$\ln Z \geq \ln Z_0 - \frac{\langle V \rangle_0}{k_B T} .$$

Sendo a energia livre de Helmholtz dada por  $F = -k_B T \ln Z$ , chegamos finalmente à seguinte desigualdade

$$F \leq F_0 + \langle V \rangle_0 = F_0 + \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 \equiv \Phi(\gamma) . \quad (2.30)$$

Portanto a energia livre de Helmholtz obedece a desigualdade acima, denominada desigualdade de Bogoliubov. Quando parametrizada por  $\gamma$ , pode-se minimizar  $\Phi(\gamma)$  com relação a esse parâmetro variacional e assim a eq.(2.30) poderá ser aproximada como  $F \equiv \min \Phi(\gamma)$ . Este procedimento tem sido aplicado a vários sistemas Hamiltonianos e, no geral, bons resultados são obtidos quanto à descrição qualitativa crítica dos mesmos.

### 2.5.3 Grupo de renormalização (GR)

Kenneth Wilson desenvolveu a teoria do grupo de renormalização (GR) em 1971 e por isso, em 1982, recebeu o prêmio nobel de Física. Esta teoria é um método capaz de descrever flutuações de longa distância, é bem geral

e tem grande aplicabilidade em transições de fases. Podemos vê-la como uma extensão e implementação de uma idéia fenomenológica desenvolvida na década de 60 por Kadanoff.

Apesar de o modelo de Ising unidimensional não exibir transição de fases a temperaturas não nulas usaremos o mesmo para demonstrar a teoria GR. Neste caso, a função de partição será dada por

$$Z(K, N) = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{K(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3 + \sigma_3\sigma_4 + \sigma_4\sigma_5 + \dots)},$$

onde  $K = \frac{J}{k_B T}$  é a constante de acoplamento. Na teoria de campo médio ignoramos as flutuações, porém aqui a ideia é remover graus de liberdade em escalas finitas somando sobre uma fração de spins. Para isto reescreveremos a função partição, como se segue,

$$Z(K, N) = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{K(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3)} e^{K(\sigma_3\sigma_4 + \sigma_4\sigma_5)} \dots,$$

e somaremos sobre todos os spins pares, resultanto em

$$Z(K, N) = \sum_{\{\sigma_1, \sigma_3, \sigma_5, \dots\}} \{e^{-K(\sigma_1 + \sigma_3)} + e^{K(\sigma_1 + \sigma_3)}\} \{e^{-K(\sigma_3 + \sigma_5)} + e^{K(\sigma_3 + \sigma_5)}\} \dots$$

Note, porém, que a forma da função partição mudou, portanto, faremos agora com que ela volte a sua forma inicial com uma constante  $K'$  diferente

$$e^{-K(\sigma + \sigma')} + e^{K(\sigma + \sigma')} = f(K) e^{K' \sigma \sigma'}.$$

Quando essa mudança de escala é possível a função partição resultante será

$$\begin{aligned} Z(K, N) &= \sum_{\{\sigma_1, \sigma_3, \sigma_5, \dots\}} f(K) e^{K' \sigma_1 \sigma_3} f(K) e^{K' \sigma_3 \sigma_5} \dots \\ &= [f(K)]^{N/2} Z(K', N/2), \end{aligned} \quad (2.31)$$

que é uma relação recursiva. Este tipo de transformações são conhecidas como *transformações de Kadanoff*.

Para o modelo de Ising temos  $\sigma = \pm 1$ , então

$$\begin{cases} e^{-2K} + e^{2K} = f(K) e^{K'} & \text{para } \sigma = \sigma' \\ 2 = f(K) e^{-K'} & \text{para } \sigma \neq \sigma', \end{cases}$$

resultando em

$$\begin{cases} K' = \frac{1}{2} \ln \cosh(2K) & \text{(a)} \\ f(K) = 2 \cosh^{1/2}(2K) & \text{(b)} . \end{cases} \quad (2.32)$$

A menos de uma constante temos que  $\ln Z = Ng(K)$  é a energia livre de Gibbs, sendo assim  $g(K)$  deve ser intensivo. Juntando as eqs. (2.31) e (2.32) teremos

$$\begin{aligned} Ng(K) &= \frac{N}{2} \ln[2\sqrt{\cosh(2K)}] + \frac{N}{2}g(K') , \\ g(K') &= 2g(K) - \ln[2\sqrt{\cosh(2K)}] . \end{aligned} \quad (2.33)$$

As eqs. (2.32)(a) e (2.33) são conhecidas como equações do grupo de renormalização. Se a função partição é conhecida para um valor qualquer de  $K'$  podemos obter  $\ln Z = Ng(K)$  para outros valores através deste processo recursivo. Perceba que os valores de  $K'$  obtidos por esta equação serão, necessariamente, menores que os valores iniciais de  $K$ .

Uma outra forma para estas equações seria

$$\begin{cases} K = \frac{1}{2} \cosh^{-1}(e^{2K'}) & \text{(a)} \\ g(K) = \frac{1}{2}g(K') + \frac{1}{2} \ln 2 + \frac{K'}{2} & \text{(b)} , \end{cases} \quad (2.34)$$

sendo que para obter esta outra forma das eqs. GR basta lembrar que  $f(K) = 2e^{K'}$ . Neste caso, os valores obtidos para  $K$  serão maiores que os valores iniciais de  $K'$ .

Para exemplificar como as eqs. (2.34) funcionam iremos considerar um valor inicial pequeno para a constante de acoplamento,  $K' = 0,01$ . Como consequência, podemos considerar desprezíveis as interações entre spins e teremos

$$Z(0,01, N) \simeq Z(0, N) = 2^N$$

e, portanto

$$g(0,01) \simeq \ln 2 ,$$

substituindo nas eqs. (2.34)(a) e (b) obteremos

$$K = 0,100334 ,$$

$$g(K) = 0,698147 .$$

Repetindo o processo recursivo veremos que  $K$  tenderá a infinito. Se, ao invés de usarmos estas equações, usarmos (2.32) e (2.33)  $K$  tenderá a zero, portanto  $K = 0$  e  $K = \infty$  serão os pontos fixos do sistema, ou seja, o processo recursivo não mudará o valor de  $K$ .

As sucessivas aplicações das eqs. GR podem ser representadas por um diagrama de fluxo. O fato do fluxo do sistema ser ininterrupto entre  $K = 0$  e  $K = \infty$  indica que não existe a possibilidade de transição de fases em um sistema unidimensional a temperaturas finitas. Em sistemas que exibem transição de fases, como o modelo de Ising bidimensional, encontraremos pontos fixos não triviais [23], que ocorrem para  $K$  finito.

## 2.6 Sistemas magnéticos diluídos

Para estudarmos a liga Fe-Al é necessário entendermos o conceito de desordem. Os sólidos encontrados na natureza, ou até mesmo produzidos em laboratório, não possuem uma rede cristalina perfeita por apresentarem algum grau de impureza. Estas imperfeições recebem o nome de desordem, sendo que três tipos podem ser caracterizadas [1], porém neste trabalho estamos preocupados apenas com a desordem substitucional.

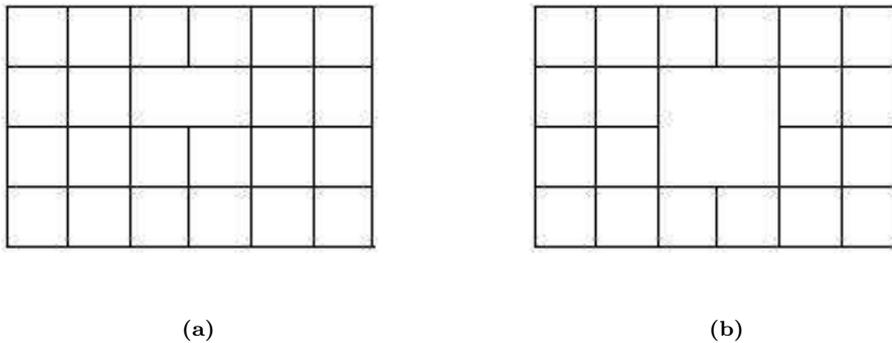
### Desordem substitucional

Neste tipo de desordem, os átomos do elemento tipo  $A$  num cristal perfeito são substituídos por outros do tipo  $B$ , na hipótese de não haver nenhum distúrbio na rede cristalina, formando uma liga do tipo  $A_p B_{1-p}$  (onde  $p$  é a concentração de átomo  $A$ ). Este fenômeno é de grande importância em alguns campos da ciência dos materiais. A mais simples suposição que se pode fazer quanto a distribuição dos átomos do tipo  $B$  é que ela seja aleatória nos sítios da rede cristalina. No entanto, tal suposição não é realística, pois a energia livre do sistema depende da distribuição dos átomos do tipo  $B$  em relação aos

átomos do tipo  $A$  e vice-versa. A impureza substitucional pode também ser um ponto de defeito da rede, tal como uma vacância. Embora fisicamente não é possível colocar uma alta concentração de vacâncias ao acaso num sólido cristalino, tem-se usado isto como um modelo rudimentar de uma fase fluida.

### 2.6.1 Desordem nos modelos

Neste trabalho concentraremos nossa atenção a sistemas magnéticos diluídos, com desordem substitucional do  $A_pB_{1-p}$ , de tal forma que elementos do tipo  $B$ , não magnéticos, são substituídos na rede formada por elementos tipo  $A$ , magnéticos. Dependendo da concentração de  $B$ , dada por  $1 - p$ , a liga



**Figura 2.5:** Desordem com remoção de ligação (a), sítio (b).

pode atingir um limite em que a desordem prevalece de forma que a ordem magnética do sistema é destruída.

A distribuição atômica na rede pode ser dada de duas formas, temperada (do inglês *quenched*), na qual os átomos magnéticos e não magnéticos se orientam de forma aleatória, ou seja, a distribuição de probabilidade de se encontrar um átomo magnético em um sítio, independe da do outro, e recozida (*annealed*), na qual a distribuição em sítio é governada pela mecânica estatística e depende da temperatura. Além disto existem dois tipos de desordem, por ligação (**bond**), onde se quebra algumas ligações magnéticas que conectam sítios vizinhos de algum átomo diamagnético que neutraliza o *overlap* das autofunções, e desordem por sítio (**site**), onde um átomo magnético

é substituído por outro não magnético. Os dois tipos de desordem podem ser visualizados na Fig. 2.5. Claramente notamos que os dois tipos de desordem produzem efeitos diferentes: enquanto que ao retirar uma ligação somente uma interação entre pares é quebrada, ao se retirar um sítio magnético quatro ligações são quebradas.

Nessa dissertação estudaremos o modelo de Ising em  $d$ -dimensões (para  $d = 1, 2, 3$ ) utilizando a técnica do operador diferencial baseado na identidade de Callen, que será discutido no capítulo 3. Utilizaremos os aglomerados finitos mais simples, a saber de um e dois spins, e as temperaturas críticas e magnetizações assim obtidas serão comparadas entre si e com resultados exatos, quando disponíveis, bem como com resultados obtidos por outros métodos aproximativos. Esta técnica será usada para descrever sistemas magnéticos diluídos, onde será considerada que a desordem é do tipo temperada e levaremos em conta interação entre segundos vizinhos. Obteremos a temperatura crítica em função da concentração de desordem, no nosso caso o elemento Al. A curva obtida para a temperatura crítica será também utilizada para uma comparação com resultados experimentais obtidos para a liga binária Fe-Al.

# Capítulo 3

## Teoria de campo efetivo

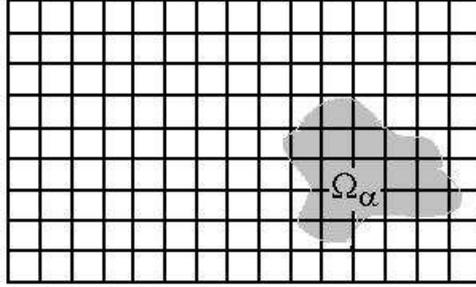
Neste capítulo descreveremos, de uma maneira sucinta, a técnica do operador diferencial. Embora essa técnica possa ser empregada em qualquer sistema Hamiltoniano, descreveremos sua utilização geral no caso de modelos de spins discretos, como o modelo de Ising que será descrito no próximo capítulo (veja, por exemplo, Referência [24]). Sua generalização para outros tipos de modelos é imediata.

### 3.1 Identidade de Callen-Suzuki

Primeiramente obteremos uma identidade que será muito útil para se desenvolver os cálculos aproximados, a chamada identidade de Callen-Suzuki [25, 26]. Considere inicialmente que o Hamiltoniano  $\mathcal{H}$  do sistema possa ser dividido em duas partes,  $\mathcal{H}_\alpha$  e  $\mathcal{H}'$  como ilustrado na Fig. 3.1. Temos então uma parte que inclui todas as contribuições dos spins dos sítios de uma região  $\Omega_\alpha$  ( $\mathcal{H}_\alpha$ ) e outra parte  $\mathcal{H}'$  que não depende dos spins dos sítios da região  $\Omega_\alpha$ , mas dependem dos spins de sua fronteira, de modo que

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_\alpha + \mathcal{H}' .$$

Por exemplo, para o modelo de Ising, cujo Hamiltoniano será apresentado e discutido no capítulo seguinte, a região mais simples é dada por um único



**Figura 3.1:** Esquema bidimensional do sistema total, com  $N$  sítios, com a região  $\Omega_\alpha$  em cinza. Todos os spins internos a essa região são levados em conta no Hamiltoniano  $\mathcal{H}_\alpha$ . Note que no limite termodinâmico  $N \rightarrow \infty$ .

spin, e podemos escrever

$$\mathcal{H}_\alpha = -J\sigma_i \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{i+\vec{\delta}} - H\sigma_i = -\sigma_i E_i, \quad (3.1)$$

onde a soma é feita sobre os vizinhos do sítio  $i$  e  $E_i$  pode ser pensado como o campo local no sítio  $i$ . Como  $E_i$  e  $\mathcal{H}'$  não dependem de  $\sigma_i$  e sabendo que  $[\sigma_i, \sigma_j] = 0$ , teremos

$$[\mathcal{H}_\alpha, \mathcal{H}'] = [\mathcal{H}_\alpha, \mathcal{H}] - [\mathcal{H}_\alpha, \mathcal{H}_\alpha] = 0$$

$$[\mathcal{H}_\alpha, \mathcal{H}] = 0.$$

Se, ao invés de considerarmos o modelo de Ising, considerássemos o de Heisenberg, por exemplo, teríamos  $[\mathcal{H}_\alpha, \mathcal{H}'] \neq 0$ , pois neste último modelo os spins são tratados como variáveis quânticas e  $[\vec{S}_i, \vec{S}_i] \neq 0$ , portanto  $[\mathcal{H}_\alpha, \mathcal{H}_\alpha] \neq 0$ .

Em geral, um operador  $A$  que dependa apenas dos spins da região  $\Omega_\alpha$  terá sua média térmica dada por

$$\langle A(\Omega_\alpha) \rangle = \frac{\text{Tr}(Ae^{-\beta\mathcal{H}})}{Z}, \quad (3.2)$$

onde  $Z = \text{Tr}(e^{-\beta\mathcal{H}})$  e  $\beta = \frac{1}{k_B T}$  sendo  $k_B$  a constante de Boltzmann.

Definindo  $\text{tr}_{(k)} = \sum_{\{\sigma_k\}}$ , a soma de todos os estados possíveis do spin  $k$ ,

teremos

$$Tr = \prod_{k=1}^N tr_{(k)} = \left[ \prod_{k \notin \Omega_\alpha} tr_{(k)} \right] \left[ \prod_{i \in \Omega_\alpha} tr_{(i)} \right] = Tr' tr_{(\alpha)} .$$

Com isso, a média térmica do operador  $A$  dada pela eq. (3.2) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \langle A(\Omega_\alpha) \rangle &= \frac{Tr(Ae^{-\beta(\mathcal{H}_\alpha + \mathcal{H}')} )}{Z} = \frac{Tr'e^{-\beta\mathcal{H}'} tr_{(\alpha)}(Ae^{-\beta\mathcal{H}_\alpha})}{Z} \\ &= \frac{1}{Z} \left[ Tr'e^{-\beta\mathcal{H}'} \frac{tr_{(\alpha)}e^{-\beta\mathcal{H}_\alpha}}{tr_{(\alpha)}e^{-\beta\mathcal{H}_\alpha}} tr_{(\alpha)}(Ae^{-\beta\mathcal{H}_\alpha}) \right] \\ &= \frac{1}{Z} \left[ Tr'e^{-\beta\mathcal{H}} \frac{tr_{(\alpha)}(Ae^{-\beta\mathcal{H}_\alpha})}{tr_{(\alpha)}e^{-\beta\mathcal{H}_\alpha}} \right] \end{aligned}$$

de modo que temos

$$\langle A(\Omega_\alpha) \rangle = \left\langle \frac{tr_{(\alpha)}Ae^{-\beta\mathcal{H}_\alpha}}{tr_{(\alpha)}e^{-\beta\mathcal{H}_\alpha}} \right\rangle .$$

Se for considerado um aglomerado de um spin ( $\Omega_\alpha = \{\sigma_i\}$ ), com o Hamiltoniano descrito pela eq. (3.1), e generalizarmos o operador  $A$  de forma que  $A = \{g\}\sigma_i$  não dependa apenas dos spins do aglomerado, ou seja,  $\{g\}$  não seja dependente dos spins do aglomerado,

$$\langle A(\Omega_\alpha) \rangle = \left\langle \frac{tr_{(\alpha)}\{g\}\sigma_i e^{-\beta\mathcal{H}_\alpha}}{tr_{(\alpha)}e^{-\beta\mathcal{H}_\alpha}} \right\rangle = \langle \{g\} \tanh(\beta E_i) \rangle . \quad (3.3)$$

A equação acima é conhecida como a identidade de Callen-Suzuki. Ela diz que a média de um operador  $A$ , produto de um operador dependente somente dos spins fora da região  $\Omega_\alpha$  vezes a variável dinâmica do spin dentro da região, com relação ao ensemble definido pelo Hamiltoniano  $\mathcal{H}$ , é idêntica à média em relação a  $\mathcal{H}$  do valor médio de  $A$  tomado em relação ao sub-ensemble descrito por  $\mathcal{H}_\alpha$ . Note que a eq. (3.3) é exata e é a partir dela que aproximações serão feitas para se obter propriedades termodinâmicas do sistema.

## 3.2 Operador diferencial

Quando o valor médio do operador  $A$  é tomado através do traço parcial com relação ao ensemble definido pelo Hamiltoniano  $\mathcal{H}_\alpha$  na eq. (3.3), isto é

$$f(\mathbf{K}, \sigma_k) = \frac{\text{tr}_{(\alpha)} A e^{-\beta \mathcal{H}_\alpha}}{\text{tr}_{(\alpha)} e^{-\beta \mathcal{H}_\alpha}}, \quad (3.4)$$

obtem-se uma função  $f(\mathbf{K}, \sigma_k)$  que, além de conter os parâmetros do Hamiltoniano  $\mathbf{K}$ , contém ainda os spins  $\sigma_k$  pertencentes aos sítios de  $\mathcal{H}'$  que se encontram na fronteira da região  $\Omega_\alpha$ . Temos então

$$\langle A(\Omega_\alpha) \rangle = \langle f(\mathbf{K}, \sigma_k) \rangle. \quad (3.5)$$

Uma forma mais conveniente de se tomar o valor médio de  $f(\mathbf{K}, \sigma_k)$  na equação acima pode ser obtida através da introdução do chamado operador diferencial [24].

Considere o operador diferencial dado por

$$D = \frac{\partial}{\partial x}, \quad (3.6)$$

onde estamos mantendo a notação de derivadas parciais pois o método pode ser facilmente generalizado para funções em duas ou mais varáveis. Desta forma o operador  $e^{\alpha D}$  poderá ser escrito em série de potências como

$$e^{\alpha D} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial x^n}.$$

Por outro lado, se expandirmos uma função  $g(x + \alpha)$  em torno de  $\alpha = 0$ , teremos

$$g(x + \alpha) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} g^{(n)}(x) = e^{\alpha D} g(x),$$

onde  $g^{(n)}$  significa a  $n$ -ésima derivada de  $g$  com relação a  $x$ . Teremos, portanto

$$g(\alpha) = e^{\alpha D} g(x) \Big|_{x=0}. \quad (3.7)$$

Assim, a eq. (3.5) pode ser escrita na seguinte forma

$$\langle f(\mathbf{K}, \gamma_k \sigma_k) \rangle = \left\langle \prod_{k \in \text{fronteira } \Omega_\alpha} e^{\gamma_k \sigma_k D_k} f(\mathbf{K}, x_k) \Big|_{x_k=0} \right\rangle,$$

onde  $D_k = \partial/\partial x_k$ ,  $k$  designa todos os sítios que estão na fronteira externa de  $\Omega_\alpha$  e  $\gamma_k$  é um parâmetro que pode aparecer devido ao Hamiltoniano. Como  $f(\mathbf{K}, x_k)$  não depende de nenhum estado de spin, o mesmo pode ser tirado da média resultando em

$$\langle f(\mathbf{K}, \gamma_k \sigma_k) \rangle = \left\langle \prod_{k \in \text{fronteira } \Omega_\alpha} e^{\gamma_k \sigma_k D_k} \right\rangle f(\mathbf{K}, x_k) \Big|_{x_k=0}. \quad (3.8)$$

Utilizando o fato de que, para spin-1/2, os operadores de spin possuem a propriedade  $\sigma_i^2 = \sigma_i^4 = \dots = \sigma_i^{2n} = 1$  e  $\sigma_i = \sigma_i^3 = \dots = \sigma_i^{2n+1} = \sigma_i$ , teremos, para qualquer  $\lambda$

$$\begin{aligned} e^{\lambda \sigma_i} &= 1 + \lambda \sigma_i + \frac{\lambda^2}{2!} \sigma_i^2 + \frac{\lambda^3}{3!} \sigma_i^3 + \frac{\lambda^4}{4!} \sigma_i^4 + \dots \\ &= \left(1 + \frac{\lambda^2}{2!} + \frac{\lambda^4}{4!} + \dots\right) + \sigma_i \left(\lambda + \frac{\lambda^3}{3!} + \frac{\lambda^5}{5!} + \dots\right), \end{aligned}$$

ou

$$e^{\lambda \sigma_i} = \cosh \lambda + \sigma_i \sinh \lambda, \quad (3.9)$$

que é a chamada identidade de Waerden, ver [27]. Note que nesse procedimento são levados em conta exatamente as auto-funções de correlação  $\langle \sigma_i^2 \rangle = 1$ .

Temos então, de forma geral

$$\langle f(\mathbf{K}, \sigma_k) \rangle = \left\langle \prod_{k \in \text{fronteira } \Omega_\alpha} [\cosh(\gamma_k D_k) + \sigma_k \sinh(\gamma_k D_k)] \right\rangle f(\mathbf{K}, x_k) \Big|_{x_k=0}. \quad (3.10)$$

A equação acima continua exata, onde a função  $f(\mathbf{K}, x_k)$  depende da região  $\Omega_\alpha$  escolhida e deve possuir infinitas derivadas com relação a  $x_k$  para que a eq. (3.7) exista. As maiores dificuldades em seu cálculo decorrem do fato de não ser possível tratar de maneira adequada as correlações de spins que aparecem devido ao produtório dentro da média térmica. Como será visto no capítulo seguinte para o modelo de Ising, aproximações são então implementadas no tratamento das multi-correlações de spins. Espera-se também que os resultados sejam tanto melhores quanto maiores forem os tamanhos das regiões  $\Omega_\alpha$ .

## Capítulo 4

# Modelo de Ising descrito pela técnica do operador diferencial

Neste capítulo descreveremos a técnica do operador diferencial aplicado ao modelo de Ising diluído. Para uma aplicação didática no caso puro unidimensional veja referência [24].

No caso puro o Hamiltoniano de Ising pode ser escrito como [28]

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^N \sigma_i ,$$

onde  $J$  é a interação entre spins vizinhos mais próximos,  $H$  é o campo externo e  $\sigma_i$  é a variável de spin do sítio  $i$  de uma rede cristalina. A primeira soma se estende sobre todos pares de sítios de primeiros vizinhos em uma rede de  $N$  spins. A inclusão de spins mais afastados pode ser facilmente implementada através de somas extras no Hamiltoniano acima. No caso de spin-1/2 a variável  $\sigma_i = \pm 1$ , onde o sinal positivo (negativo) pode corresponder a direção para cima (baixo). A campo nulo, quando todos os spins, ou a sua maioria, estão para cima, ou para baixo, dizemos que o sistema se encontra no estado ordenado ou de menor simetria. Se um campo não nulo é aplicado há uma quebra de simetria, pois o mesmo favorece o alinhamento dos spins em uma certa direção.

A magnetização, identificada como parâmetro de ordem de longo alcance

para sistemas magnéticos, é dada por  $m = \langle \sigma_i \rangle$ , onde  $\langle \dots \rangle$  significa uma média térmica do spin  $\sigma_i$  no sítio  $i$  num sistema com simetria translacional (no caso de sistemas diluídos, como os estudados nesse trabalho, uma média adicional na desordem deve ser feita para se obter o parâmetro de ordem  $m$ ). Na fase ordenada temos  $m \neq 0$ , enquanto que na fase desordenada  $m = 0$ .

A diluição no modelo, tanto por ligação como por sítio, pode ser introduzida da seguinte forma (estamos interessados somente no comportamento do sistema a campo nulo)

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j , \quad (4.1)$$

onde a variável aleatória  $J_{ij}$  depende do tipo de diluição do sistema.

No caso em que o sistema é puro teremos  $J_{ij} = J$ . Para sistemas diluídos com remoção de ligação podemos ter  $J_{ij} = J$ , com probabilidade  $p$ , ou  $J_{ij} = 0$ , com probabilidade  $q = 1 - p$ . Esta variável obedece a distribuição de probabilidade a seguir

$$P(J_{ij}) = p\delta(J_{ij} - J) + q\delta(J_{ij}) , \quad (4.2)$$

onde  $p$  é a concentração de ligações magnéticas e  $q$  é a concentração de ligações quebradas. Note que esta distribuição de probabilidade é a mesma para todos os sítios da rede e suas ligações, ou seja, a distribuição de toda a rede será dada pelo produto  $P(\{J_{ij}\}) = \prod_{\langle ij \rangle} \{p\delta(J_{ij} - J) + q\delta(J_{ij})\}$ .

Para sistemas diluídos com remoção de sítio teremos  $J_{ij} = \varepsilon_j \varepsilon_i J$ , onde  $\varepsilon_i = 1$ , com probabilidade  $p$ , ou  $\varepsilon_i = 0$ , com probabilidade  $q$ . Com a distribuição de probabilidade

$$P(\varepsilon_i) = p\delta(\varepsilon_i - 1) + q\delta(\varepsilon_i) , \quad (4.3)$$

onde  $p$  é a concentração de sítios ocupados e  $q$  é a concentração de sítios vazios.

O modelo descrito por (4.1) possui alguns poucos resultados exatos. Em uma dimensão não há transição de fases para qualquer que seja a diluição [13, 24].

Em duas dimensões, o sistema puro tem uma transição na temperatura reduzida  $t_c = k_B T_c / J = \frac{2}{1+\sqrt{2}} = 2.269\dots$  [13] e essa temperatura decresce à medida que a concentração  $q$  de impurezas aumenta [13, 1]. No caso de diluição por ligações, a derivada da temperatura de transição em função da concentração de elemento magnético quando  $p \rightarrow 1$ , ou seja, no limite de sistema puro, é dada por  $\frac{1}{T_c} \frac{dT_c}{dp} \Big|_{p=1} = 1,329$  e existe uma concentração crítica  $q_c = p_c = 1/2$  a partir da qual não se observa mais a criticalidade [1]. Nesse caso, a temperatura de transição vai a zero em  $q_c$ . Para diluição por sítios em duas dimensões não se conhece ainda o valor exato de  $p_c$ , sendo o resultado de simulações numéricas o mais preciso até o momento, a saber  $p_c = 0,59274621(13)$ , onde o erro está nos dois últimos algarismos [29]. A declividade para  $p \rightarrow 1$  nesse caso é  $\frac{1}{T_c} \frac{dT_c}{dp} \Big|_{p=1} = 1,565$ . Em três dimensões ainda não se tem resultados exatos em nenhum limite do modelo.

A não disponibilidade de soluções exatas em três dimensões leva ao desenvolvimento de métodos aproximativos. Assim, a técnica do operador diferencial discutido no capítulo anterior mostra-se adequado no estudo desse modelo, principalmente no que se refere a uma possível aplicação em ajustes de dados experimentais. A primeira dificuldade de se utilizar este método está na região que se escolhe para  $\Omega_\alpha$  e o tipo de interação que os spins na mesma obedecem. Embora quanto maior a quantidade de spins interagentes na região escolhida melhores são os resultados, maior também será a dificuldade algébrica. Portanto, consideraremos, neste capítulo, aglomerado de um ( $\Omega_\alpha = \{\sigma_i\}$ ) e dois spins ( $\Omega_\alpha = \{\sigma_i, \sigma_j\}$ ), com interação entre primeiros vizinhos. No próximo capítulo consideraremos aglomerados de somente um spin,  $\Omega_\alpha = \{\sigma_i\}$ , com interação entre segundos vizinhos, pois veremos que não há uma melhora significativa quando se aumenta o aglomerado de um spin para dois, e aplicaremos esta técnica a liga Fe-Al.

## 4.1 Aglomerado de um spin

De forma geral, a magnetização para o modelo descrito pela eq. (4.1) é dada por

$$m = \langle \langle \sigma_i \rangle \rangle_c ,$$

onde  $\langle \dots \rangle$  denota a média térmica canônica e  $\langle \dots \rangle_c$  a média configuracional sobre a distribuição aleatória de impurezas. Se usarmos um aglomerado contendo apenas um spin (digamos  $\sigma_i$ ) o Hamiltoniano que dependa apenas do mesmo e possua interação somente entre primeiros vizinhos poderá ser descrito por

$$\mathcal{H}_i = - \sum_{\vec{\delta}=1}^z J_{i,i+\vec{\delta}} \sigma_i \sigma_{i+\vec{\delta}} ,$$

onde a soma é feita sobre todos os vizinhos do spin  $\sigma_i$ . Fica claro que o número de vizinhos depende do tipo e da dimensão da rede. Por exemplo, para uma rede hipercúbica teremos  $z = 2d$  vizinhos mais próximos, sendo  $d$  a dimensão da rede. A média térmica canônica dessa variável de spin será então

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i \rangle &= \left\langle \frac{\sum_{\sigma_i=-1}^1 \sigma_i e^{\beta \sigma_i \sum_{\vec{\delta}=1}^z J_{i,i+\vec{\delta}} \sigma_{i+\vec{\delta}}} }{\sum_{\sigma_i=-1}^1 e^{\beta \sigma_i \sum_{\vec{\delta}=1}^z J_{i,i+\vec{\delta}} \sigma_{i+\vec{\delta}}} } \right\rangle \\ &= \langle \tanh(\beta \sum_{\vec{\delta}=1}^z J_{i,i+\vec{\delta}} \sigma_{i+\vec{\delta}}) \rangle = \langle e^{\beta \sum_{\vec{\delta}=1}^z J_{i,i+\vec{\delta}} \sigma_{i+\vec{\delta}}} \tanh(x) \Big|_{x=0} \rangle \\ &= \langle \prod_{\vec{\delta}=1}^z e^{\beta J_{i,i+\vec{\delta}} \sigma_{i+\vec{\delta}}} \tanh(x) \Big|_{x=0} \rangle , \end{aligned} \quad (4.4)$$

onde  $\tanh(x)$  pode ser tirado da média pois não possui nenhuma dependência do operador spin. Lançando mão da eq. (3.9)

$$e^{\lambda \sigma_i} = \cosh \lambda + \sigma_i \sinh \lambda ,$$

e usando a aproximação que os spins são descorrelacionados,  $\langle \sigma_i \sigma_j \dots \sigma_n \rangle = \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \dots \langle \sigma_n \rangle$ , teremos

$$\langle \sigma_i \rangle \approx \prod_{\vec{\delta}=1}^z \left[ \cosh(\beta J_{i,i+\vec{\delta}} D) + \langle \sigma_{i+\vec{\delta}} \rangle \sinh(\beta J_{i,i+\vec{\delta}} D) \right] \tanh(x) \Big|_{x=0} .$$

É exatamente na relação acima que se encontra a aproximação introduzida no método, quando se troca a média do produto pelo produto das médias. Ressaltamos, entretanto, que para a autocorrelação de spin  $\langle \sigma_i \sigma_i \rangle = 1$  o seu valor exato foi levado em conta no operador diferencial. Portanto, a magnetização, incluindo a média configuracional,  $m = \langle \langle \sigma_i \rangle \rangle_c$  será

$$\begin{aligned} m &\approx \prod_{\vec{\delta}=1}^z \left[ \langle \cosh(\beta J_{i,i+\vec{\delta}} D) \rangle_c + m \langle \sinh(\beta J_{i,i+\vec{\delta}} D) \rangle_c \right] \langle \tanh(x) \rangle_c \Big|_{x=0} \\ &= \left[ \langle \cosh(\beta J_{i,i+\vec{\delta}} D) \rangle_c + m \langle \sinh(\beta J_{i,i+\vec{\delta}} D) \rangle_c \right]^z \langle \tanh(x) \rangle_c \Big|_{x=0} , \end{aligned} \quad (4.5)$$

onde a última igualdade foi obtida desprezando correlação configuracional entre dois sítios, ou seja,  $\langle AB \rangle_c = \langle A \rangle_c \langle B \rangle_c$ .

Como a equação de estado a campo nulo  $H = 0$  sempre é invariante quando trocamos  $m \rightarrow -m$  a eq. (4.5) será ímpar e resultará em algo do tipo

$$m = f(m) = A_1 m + A_2 m^3 + A_3 m^5 + \dots . \quad (4.6)$$

No limite em que  $T \rightarrow T_c$  teremos  $m \rightarrow 0$  e a equação acima se reduzirá a  $m \approx A_1 m$ , obtendo

$$A_1 = 1 , \quad (4.7)$$

sendo este resultado geral e capaz de nos fornecer uma aproximação para a temperatura crítica do sistema. Vários casos podem ser agora analisados dentro dessa aproximação de um sítio.

## Sistema puro

No caso de sistemas puros, como já dissemos,  $J_{ij} = J$ . Desta forma a eq. (4.5) se reduz a

$$m \approx [\cosh(\beta J D) + m \sinh(\beta J D)]^z \tanh(x) \Big|_{x=0} . \quad (4.8)$$

Lembrando que

$$\cosh(\alpha D) = \frac{e^{\alpha D} + e^{-\alpha D}}{2},$$

e

$$\sinh(\alpha D) = \frac{e^{\alpha D} - e^{-\alpha D}}{2},$$

aplicamos a eq. (3.7) na eq. (4.8) utilizando o programa *maple* [30] para diversas redes hipercúbicas diferentes, ou seja, variando o valor  $z$ , e obtivemos as expressões para os coeficientes da eq. (4.6),  $A_1$ ,  $A_2$ , etc., em cada caso. Alguns destes valores estão listadas abaixo para diferentes redes

- $z = 2$ :

$$A_1 = \tanh\left(\frac{2}{t}\right),$$

$$A_2 = A_3 = A_4 = 0.$$

- $z = 4$ :

$$A_1 = 0.5 \tanh\left(\frac{4}{t}\right) + \tanh\left(\frac{2}{t}\right),$$

$$A_2 = 0.5 \tanh\left(\frac{4}{t}\right) - \tanh\left(\frac{2}{t}\right),$$

$$A_3 = A_4 = 0.$$

- $z = 6$ :

$$A_1 = 0.1875 \tanh\left(\frac{6}{t}\right) + 0.75 \tanh\left(\frac{4}{t}\right) + 0.9375 \tanh\left(\frac{2}{t}\right),$$

$$A_2 = 0.625 \tanh\left(\frac{6}{t}\right) - 1.875 \tanh\left(\frac{2}{t}\right),$$

$$A_3 = 0.1875 \tanh\left(\frac{6}{t}\right) - 0.75 \tanh\left(\frac{4}{t}\right) + 0.9375 \tanh\left(\frac{2}{t}\right),$$

$$A_4 = 0.$$

- $z = 8$ :

$$A_1 = 0.0625 \tanh\left(\frac{8}{t}\right) + 0.375 \tanh\left(\frac{6}{t}\right) + 0.875 \tanh\left(\frac{4}{t}\right) + 0.875 \tanh\left(\frac{2}{t}\right),$$

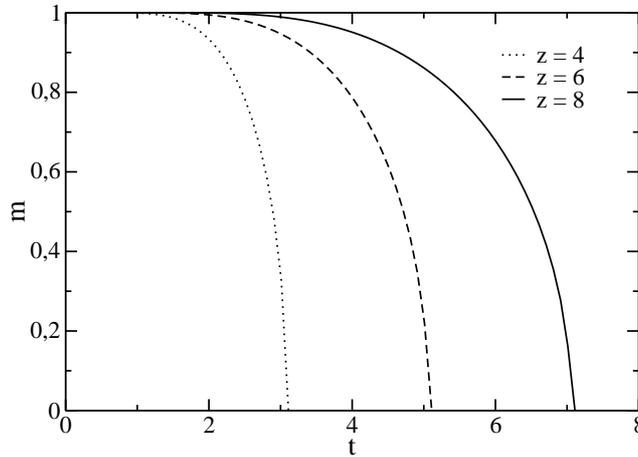
$$A_2 = 0.4375 \tanh\left(\frac{8}{t}\right) + 0.875 \tanh\left(\frac{6}{t}\right) - 0.875 \tanh\left(\frac{4}{t}\right) - 2.625 \tanh\left(\frac{2}{t}\right),$$

$$A_3 = 0.4375 \tanh\left(\frac{8}{t}\right) - 0.875 \tanh\left(\frac{6}{t}\right) - 0.875 \tanh\left(\frac{4}{t}\right) + 2.625 \tanh\left(\frac{2}{t}\right),$$

$$A_4 = 0.0625 \tanh\left(\frac{8}{t}\right) - 0.375 \tanh\left(\frac{6}{t}\right) + 0.875 \tanh\left(\frac{4}{t}\right) - 0.875 \tanh\left(\frac{2}{t}\right),$$

onde  $t = k_B T/J$ .

Para se obter a temperatura crítica resolvemos a equação transcendental  $A_1 = 1$  aplicando o método de Newton-Raphson [31] na linguagem *fortran*. O comportamento da magnetização por spin em função da temperatura reduzida,  $t$ , e do número de coordenação da rede,  $z$ , foi obtido de modo semelhante resolvendo numericamente a eq. (4.6) e pode ser visto na Fig. 4.1.



**Figura 4.1:** Magnetização em função da temperatura reduzida com  $\Omega_\alpha = \{\sigma_i\}$ , para as redes quadrada ( $z = 4$ ), cúbica simples ( $z = 6$ ) e cúbica de corpo centrado ( $z = 8$ ). Para cadeia linear ( $z = 2$ ) a magnetização é nula qualquer que seja  $t$ .

Para redes em duas ou mais dimensões,  $d \geq 2$ , a magnetização por spin vai rapidamente a zero quando  $t \rightarrow t_c$  (temperatura crítica). Note que a derivada da magnetização se torna infinita quando  $m \rightarrow 0$  o que dificulta a aplicação do método de Newton-Raphson para valores próximos à temperatura de transição.

A aproximação de um spin é a mais simples possível e nos dá o comportamento qualitativo da magnetização em função da temperatura de forma razoável. Regiões maiores devem entretanto melhorar os resultados. Note que a medida que  $z$  cresce, a temperatura cresce monotonicamente, uma vez que os spins ficam mais correlacionados.

## Sistema diluído por ligação

Para descrever sistemas diluídos por ligação utilizaremos a energia de interação entre spins vizinhos que obedece a eq. (4.2). Neste caso, para encontrarmos a magnetização, dada pela eq. (4.5), é necessário calcular as médias configuracionais, ou seja,

$$\begin{aligned} \langle \cosh(\beta J_{i,i+\delta} D) \rangle_c &= \int \cosh(\beta J_{ij} D) [p\delta(J_{ij} - J) + q\delta(J_{ij})] dJ_{ij} \\ &= p \cosh(\beta JD) + 1 - p, \end{aligned} \quad (4.9)$$

e, de forma análoga

$$\langle \sinh(\beta J_{i,i+\delta} D) \rangle_c = p \sinh(\beta JD). \quad (4.10)$$

Note que  $\langle \tanh(x) \rangle_c = \tanh(x)$  pois não depende de  $J_{ij}$ , neste caso. Com esses resultados em mãos teremos

$$m \approx [p \cosh(\beta JD) + 1 - p + mp \sinh(\beta JD)]^z \tanh(x) \Big|_{x=0}. \quad (4.11)$$

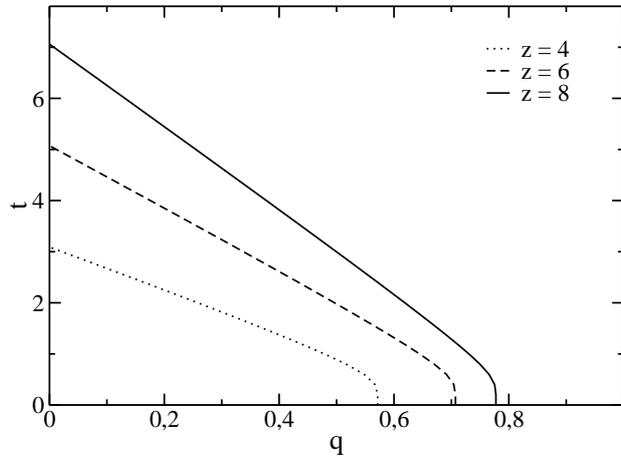
Para sistemas diluídos, têm-se um grande interesse no comportamento do diagrama de fases em função da diluição, ou seja, como a temperatura crítica se comporta a medida que aumentamos a concentração do elemento diluidor,  $q$ . Para se obter a temperatura de transição basta usarmos  $A_1 = 1$  o que

resulta, de forma geral, em

$$zp \sinh(\beta JD) [p \cosh(\beta JD) + 1 - p]^{z-1} \tanh(x) \Big|_{x=0} = 1 ,$$

sendo que o coeficiente  $A_1$  é facilmente obtido fazendo  $(\partial f(m)/\partial m)|_{m=0}$  e  $f(m)$  foi definida na eq. (4.6).

Alguns destes coeficientes para diferentes valores de  $z$  foram listados no apêndice A.



**Figura 4.2:** Temperatura crítica reduzida em função da concentração  $q$  para sistema diluído com remoção de ligação e  $\Omega_\alpha = \{\sigma_i\}$ , para as redes quadrada ( $z = 4$ ), cúbica simples ( $z = 6$ ) e cúbica de corpo centrado ( $z = 8$ ). Para a cadeia linear ( $z = 2$ )  $t_c = 0$  para qualquer concentração.

Utilizando a relação acima obtivemos a temperatura reduzida em função da concentração de impurezas ( $q = 1 - p$ ) que pode ser vista na Fig. 4.2. Note que o resultado obtido está em perfeito acordo com o esperado, ou seja, a medida que a concentração do elemento diluidor,  $q$ , aumenta, ou a concentração do elemento magnético,  $p$ , diminui, a temperatura crítica do sistema diminui até uma concentração crítica, em que a ordem do sistema desaparece. Note ainda que, para todas as redes, a derivada da curva  $\frac{\partial t_c(q)}{\partial q} \Big|_{q \rightarrow q_c} \rightarrow \infty$ , uma característica marcante da simetria Ising do sistema.

## Sistema diluído por sítio

Utilizando a eq. (4.3) encontraremos

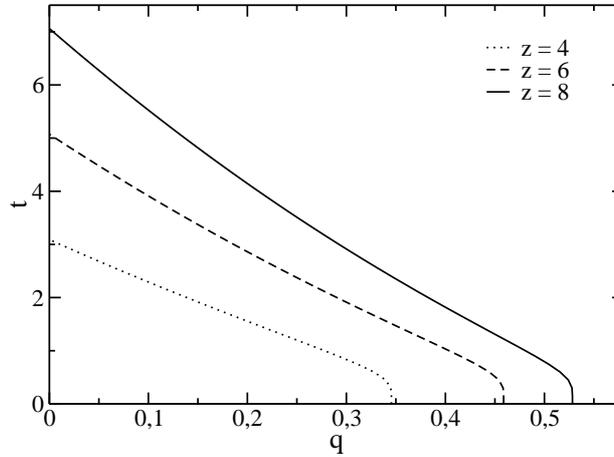
$$\begin{aligned}
 \langle \cosh(\beta \varepsilon_i \varepsilon_{i+\delta} J D) \rangle_c &= \int \cosh(\beta \varepsilon_i \varepsilon_j J D) [p \delta(\varepsilon_i - 1) + q \delta(\varepsilon_i)] P(\varepsilon_j) d\varepsilon_i d\varepsilon_j \\
 &= \int [p \cosh(\beta \varepsilon_j J D) + 1 - p] [p \delta(\varepsilon_j - 1) + q \delta(\varepsilon_j)] d\varepsilon_j \\
 &= p^2 \cosh(\beta J D) + 1 - p^2, \tag{4.12}
 \end{aligned}$$

e

$$\langle \sinh(\beta J_{i,i+\delta} D) \rangle_c = p^2 \sinh(\beta J D), \tag{4.13}$$

onde  $\langle \tanh(x) \rangle_c = \tanh(x)$  pelo mesmo motivo discutido anteriormente. Desta forma a magnetização se reduzirá a

$$m \approx [p^2 \cosh(\beta J D) + 1 - p^2 + m p^2 \sinh(\beta J D)]^z \tanh(x) \Big|_{x=0}, \tag{4.14}$$

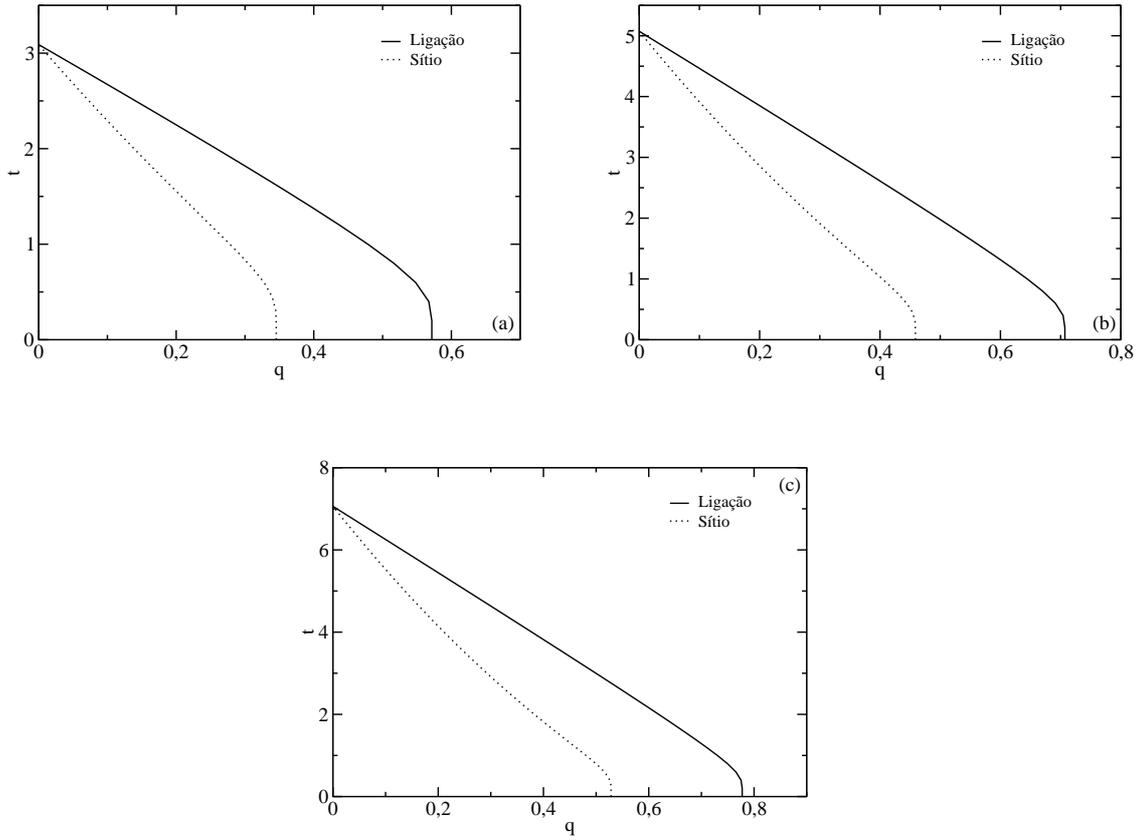


**Figura 4.3:** Temperatura crítica reduzida em função da concentração de impurezas,  $q$ , para sistema diluído com remoção de sítio e  $\Omega_\alpha = \{\sigma_i\}$ , para redes quadrada ( $z = 4$ ), cúbica simples ( $z = 6$ ) e cúbica de corpo centrado ( $z = 8$ ).

e a eq. (4.7) resultará em

$$zp^2 \sinh(\beta JD) [p^2 \cosh(\beta JD) + 1 - p^2]^{z-1} \tanh(x) \Big|_{x=0} = 1 ,$$

e de forma análoga a anterior pode-se encontrar os coeficientes  $A_1$  para alguns valores de  $z$  no apêndice A.



**Figura 4.4:** Comparação do diagrama de fases para sistema diluído com remoção de ligação e sítio com  $\Omega_\alpha = \{\sigma_i\}$  para redes quadrada (a), cúbica simples (b) e cúbica de corpo centrado (c).

As dependências da temperatura crítica reduzida com a concentração de elemento diluidor  $q$ , obtidas pelos coeficientes  $A_1$  para alguns valores de  $z$ , podem ser visualizadas na Fig. 4.3. Vemos nesse caso que o comportamento

qualitativo do diagrama de fases é bem parecido. Entretanto, as concentrações críticas são diferentes para ambos os casos. Uma comparação entre os resultados obtidos para sistemas diluídos por ligação e por sítio pode ser visto na Fig. 4.4. Perceba que é necessário uma maior concentração de material magnético para que haja “ordem” em sistemas diluídos por sítio, o que está de acordo com o esperado, pois uma menor concentração de diluição (maior  $p$ ) causa maior desordem ao sistema diluído por sítio, sendo que isso pode ser facilmente observado na Fig. 2.5. Os valores obtidos para as concentrações críticas se encontram na Tab. 4.2.

## 4.2 Aglomerado de dois spins

Se usarmos um aglomerado contendo dois spins vizinhos (digamos  $\sigma_i$  e  $\sigma_j$ ) o Hamiltoniano que dependa apenas dos mesmos e possua interação somente entre primeiros vizinhos poderá ser descrito por

$$\mathcal{H}_\alpha = -J_{ij}\sigma_i\sigma_j - \sum_{\vec{\delta}_i=1}^{z-1} J_{i,i+\vec{\delta}_i}\sigma_i\sigma_{i+\vec{\delta}_i} - \sum_{\vec{\delta}_j=1}^{z-1} J_{j,j+\vec{\delta}_j}\sigma_j\sigma_{j+\vec{\delta}_j},$$

onde a primeira soma é feita sobre todos os vizinhos do spin  $\sigma_i$ , excluindo  $\sigma_j$ , e a segunda é feita sobre todos os vizinhos de  $\sigma_j$ , excluindo  $\sigma_i$ . A média térmica da variável de spin será

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i \rangle &= \left\langle \frac{\sum_{\sigma_i=-1}^1 \sum_{\sigma_j=-1}^1 \sigma_i e^{\beta(J_{ij}\sigma_i\sigma_j + \sum_{\vec{\delta}_i=1}^{z-1} J_{i,i+\vec{\delta}_i}\sigma_i\sigma_{i+\vec{\delta}_i} + \sum_{\vec{\delta}_j=1}^{z-1} J_{j,j+\vec{\delta}_j}\sigma_j\sigma_{j+\vec{\delta}_j})}}{\sum_{\sigma_i=-1}^1 \sum_{\sigma_j=-1}^1 e^{\beta(J_{ij}\sigma_i\sigma_j + \sum_{\vec{\delta}_i=1}^{z-1} J_{i,i+\vec{\delta}_i}\sigma_i\sigma_{i+\vec{\delta}_i} + \sum_{\vec{\delta}_j=1}^{z-1} J_{j,j+\vec{\delta}_j}\sigma_j\sigma_{j+\vec{\delta}_j})}} \right\rangle \\ &= \left\langle \frac{\sinh[\beta(a_i + a_j)] + e^{-2\beta J_{ij}} \sinh[\beta(a_i - a_j)]}{\cosh[\beta(a_i + a_j)] + e^{-2\beta J_{ij}} \cosh[\beta(a_i - a_j)]} \right\rangle, \end{aligned}$$

onde  $a_i = \sum_{\vec{\delta}_i} J_{i,i+\vec{\delta}_i}\sigma_{i+\vec{\delta}_i}$  e  $a_j = \sum_{\vec{\delta}_j} J_{j,j+\vec{\delta}_j}\sigma_{j+\vec{\delta}_j}$ . Analogamente teremos

$$\langle \sigma_j \rangle = \left\langle \frac{\sinh[\beta(a_i + a_j)] - e^{-2\beta J_{ij}} \sinh[\beta(a_i - a_j)]}{\cosh[\beta(a_i + a_j)] + e^{-2\beta J_{ij}} \cosh[\beta(a_i - a_j)]} \right\rangle.$$

Note que, para este caso, a magnetização por sítio pode ser definida como  $m = \langle \langle \frac{\sigma_i + \sigma_j}{2} \rangle \rangle_c$ , portanto, temos interesse em

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\sigma_i + \sigma_j}{2} \right\rangle &= \left\langle \frac{\sinh[\beta(a_i + a_j)]}{\cosh[\beta(a_i + a_j)] + e^{-2\beta J_{ij}} \cosh[\beta(a_i - a_j)]} \right\rangle \\ &= \left\langle e^{\beta(\sum_{\vec{\delta}_i} J_{i,i+\vec{\delta}_i} \sigma_{i+\vec{\delta}_i} D_x + \sum_{\vec{\delta}_j} J_{j,j+\vec{\delta}_j} \sigma_{j+\vec{\delta}_j} D_y)} \right\rangle g(x, y) \Big|_{x,y=0}, \end{aligned}$$

onde

$$g(x, y) = \frac{\sinh(x + y)}{\cosh(x + y) + e^{-2\beta J_{ij}} \cosh(x - y)}, \quad (4.15)$$

que não possui nenhuma variável de spin, podendo então ser tirada da média térmica na equação anterior. Utilizando novamente a eq. (3.9), a magnetização resultante será

$$\begin{aligned} m \approx & \prod_{\vec{\delta}_i=1}^{z-1} \langle [\cosh(\beta J_{i,i+\vec{\delta}_i} D_x) + \langle \sigma_{i+\vec{\delta}_i} \rangle \sinh(\beta J_{i,i+\vec{\delta}_i} D_x)] \rangle_c \\ & \prod_{\vec{\delta}_j=1}^{z-1} \langle [\cosh(\beta J_{j,j+\vec{\delta}_j} D_y) + \langle \sigma_{j+\vec{\delta}_j} \rangle \sinh(\beta J_{j,j+\vec{\delta}_j} D_y)] \rangle_c \langle g(x, y) \rangle_c \Big|_{x,y=0}, \end{aligned} \quad (4.16)$$

ou

$$\begin{aligned} m \approx & [\langle \cosh(\beta J_{i,i+\vec{\delta}_i} D_x) \rangle_c + m \langle \sinh(\beta J_{i,i+\vec{\delta}_i} D_x) \rangle_c]^{z-1} \\ & [\langle \cosh(\beta J_{j,j+\vec{\delta}_j} D_y) \rangle_c + m \langle \sinh(\beta J_{j,j+\vec{\delta}_j} D_y) \rangle_c]^{z-1} \langle g(x, y) \rangle_c \Big|_{x,y=0}. \end{aligned}$$

Notamos aqui que, contrário ao que ocorre no aglomerado de um spin, a função  $g(x, y)$  não pode ser tirada da média configuracional pois a mesma possui uma dependência da variável aleatória  $J_{ij}$ , a qual é uma contribuição devido a interação entre os dois spins do aglomerado considerado, e deve portanto contribuir para a média configuracional da desordem.

## Sistema Puro

Utilizando  $J_{ij} = J$ , teremos

$$\begin{aligned} m \approx & (\cosh(\beta J D_x) + m \sinh(\beta J D_x))^{z-1} \\ & (\cosh(\beta J D_y) + m \sinh(\beta J D_y))^{z-1} g(x, y) \Big|_{x,y=0}. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Fazendo uso, novamente, da eq. (3.7) e lembrando que a função  $g(x, y)$  é dada pela eq. (4.15), com  $J_{ij} = J$ , desenvolvemos a eq. (4.17) e listamos abaixo alguns dos coeficientes obtidos

- $z = 2$ :

$$A_1 = \frac{\sinh\left(\frac{2}{t}\right)}{\cosh\left(\frac{2}{t}\right) + e^{-\frac{2}{t}}},$$

$$A_2 = A_3 = A_4 = 0.$$

- $z = 4$ :

$$A_1 = \frac{0.1875 \sinh\left(\frac{6}{t}\right)}{\cosh\left(\frac{6}{t}\right) + e^{-\frac{2}{t}}} + \frac{0.75 \sinh\left(\frac{4}{t}\right)}{\cosh\left(\frac{4}{t}\right) + e^{-\frac{2}{t}} \cosh\left(\frac{2}{t}\right)} + \frac{0.375 \sinh\left(\frac{2}{t}\right)}{\cosh\left(\frac{2}{t}\right) + e^{-\frac{2}{t}} \cosh\left(\frac{4}{t}\right)}$$

$$+ \frac{0.5625 \sinh\left(\frac{2}{t}\right)}{\cosh\left(\frac{2}{t}\right) + e^{-\frac{2}{t}}},$$

$$A_2 = \frac{0.625 \sinh\left(\frac{6}{t}\right)}{\cosh\left(\frac{6}{t}\right) + e^{-\frac{2}{t}}} - \frac{0.75 \sinh\left(\frac{2}{t}\right)}{\cosh\left(\frac{2}{t}\right) + e^{-\frac{2}{t}} \cosh\left(\frac{4}{t}\right)} - \frac{1.125 \sinh\left(\frac{2}{t}\right)}{\cosh\left(\frac{2}{t}\right) + e^{-\frac{2}{t}}},$$

$$A_3 = \frac{0.1875 \sinh\left(\frac{6}{t}\right)}{\cosh\left(\frac{6}{t}\right) + e^{-\frac{2}{t}}} - \frac{0.75 \sinh\left(\frac{4}{t}\right)}{\cosh\left(\frac{4}{t}\right) + e^{-\frac{2}{t}} \cosh\left(\frac{2}{t}\right)} + \frac{0.375 \sinh\left(\frac{2}{t}\right)}{\cosh\left(\frac{2}{t}\right) + e^{-\frac{2}{t}} \cosh\left(\frac{4}{t}\right)}$$

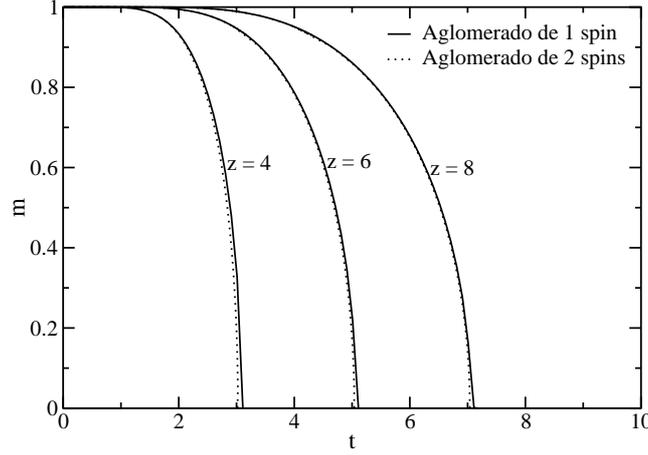
$$+ \frac{0.5625 \sinh\left(\frac{2}{t}\right)}{\cosh\left(\frac{2}{t}\right) + e^{-\frac{2}{t}}},$$

$$A_4 = 0.$$

Para  $z = 6$  e  $z = 8$  esses coeficientes são muito grandes e não serão explicitados aqui.

Uma comparação entre os resultados obtidos para o comportamento da magnetização em função da temperatura reduzida para redes diferentes neste caso ( $\Omega_\alpha = \{\sigma_i, \sigma_j\}$ ) e para o anterior ( $\Omega_\alpha = \{\sigma_i\}$ ) pode ser visualizado na

Fig. 4.5. Note que não há uma melhora muito grande nos resultados que se aproximam, minimamente, dos valores exatos da temperatura crítica reduzida, sendo que os mesmos podem ser vistos na Tab. 4.1.



**Figura 4.5:** Comparação entre a magnetização obtida em função da temperatura reduzida com  $\Omega_\alpha = \{\sigma_i\}$  e  $\Omega_\alpha = \{\sigma_i, \sigma_j\}$ , para redes quadrada ( $z = 4$ ), cúbica simples ( $z = 6$ ) e cúbica de corpo centrado ( $z = 8$ ).

## Sistema diluído por Ligação

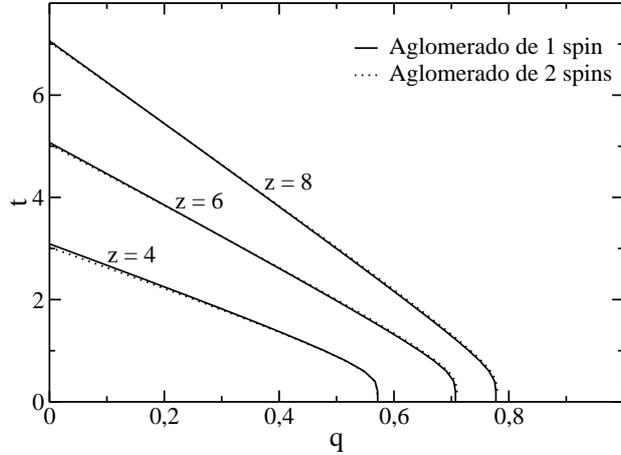
Como mudamos somente o tamanho do aglomerado considerado para calcular a igualdade de Callen-Suzuki e não a energia de interação entre spins vizinhos, as eqs. (4.9) e (4.10) continuam sendo válidas porém, agora, é necessário calcular a média configuracional de  $g(x, y)$  dada por

$$\begin{aligned} \langle g(x, y) \rangle_c &= \int \left[ \frac{\sinh(x+y)}{\cosh(x+y) + e^{-2\beta J_{ij}} \cosh(x-y)} \right] P(J_{ij}) dJ_{ij} \\ &= \frac{p \sinh(x+y)}{\cosh(x+y) + e^{-2\beta J} \cosh(x-y)} + \frac{(1-p) \sinh(x+y)}{\cosh(x+y) + \cosh(x-y)}, \end{aligned}$$

resultando em

$$m \approx [p \cosh(\beta J D_x) + 1 - p + mp \sinh(\beta J D_x)]^{z-1} [p \cosh(\beta J D_y) + 1 - p + mp \sinh(\beta J D_y)]^{z-1} \left[ \frac{p \sinh(x+y)}{\cosh(x+y) + e^{-2\beta J} \cosh(x-y)} + \frac{(1-p) \sinh(x+y)}{\cosh(x+y) + \cosh(x-y)} \right] \Big|_{x,y=0}, \quad (4.18)$$

com a equação anterior obtivemos o coeficiente  $A_1$  para diversos valores de  $z$  (sendo que alguns deles podem ser vistos no apêndice B) e, através do mesmo, o diagrama de fases que se encontra na Fig. 4.6. Temos nessa mesma Figura os respectivos resultados obtidos do aglomerado de um spin para comparação. Podemos notar que apesar de menores temperaturas críticas, como esperado, os resultados são, praticamente, os mesmos encontrados ao se utilizar aglomerado de dois spins.



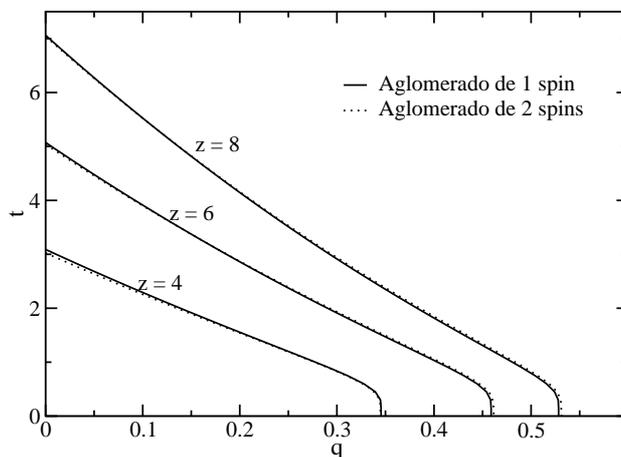
**Figura 4.6:** Comparação entre o comportamento obtido para a temperatura crítica reduzida, de um sistema com diluição por ligação, em função de  $q$  com  $\Omega_\alpha = \{\sigma_i\}$  e  $\Omega_\alpha = \{\sigma_i, \sigma_j\}$ , para redes quadrada ( $z = 4$ ), cúbica simples ( $z = 6$ ) e cúbica de corpo centrado ( $z = 8$ ).

## Sistema diluído por Sítio

Analogamente ao que foi obtido para aglomerado de 1 spin, é fácil perceber que a média configuracional de  $g(x, y)$  será dada por

$$\langle g(x, y) \rangle_c = \frac{p^2 \sinh(x + y)}{\cosh(x + y) + e^{-2\beta J} \cosh(x - y)} + \frac{(1 - p^2) \sinh(x + y)}{\cosh(x + y) + \cosh(x - y)}.$$

Utilizando as eqs. (4.12) e (4.13), o parâmetro  $A_1$  foi obtido e, em seguida, o diagrama de fases, que pode ser observado na Fig. 4.7.



**Figura 4.7:** Comparação entre o comportamento obtido para a temperatura crítica reduzida, de um sistema com diluição por sítio em função de  $q$  com  $\Omega_\alpha = \{\sigma_i\}$  e  $\Omega_\alpha = \{\sigma_i, \sigma_j\}$ , para redes quadrada ( $z = 4$ ), cúbica simples ( $z = 6$ ) e cúbica de corpo centrado ( $z = 8$ ).

A temperatura crítica reduzida para sistemas sem diluição (puros) pode ser facilmente obtida pelos cálculos realizados para sistemas diluídos, para isto basta fazer  $p = 1$  (ou  $q = 0$ ). Isto foi feito, tanto para sistema diluído por sítio quanto por ligação, através do *maple*, e na Tab. (4.1) pode-se observar uma comparação entre os resultados aqui obtidos (que foram iguais nos dois casos, como esperado) com os que foram encontrados através da aplicação

do método variacional da desigualdade de Bogoliubov, para sistemas puros, [32].

**Tabela 4.1:** *Temperatura crítica reduzida obtida, para diversas redes, pela técnica do operador diferencial com aglomerados de um (EFT1) e dois spins (EFT2) e da desigualdade de Bogoliubov com Hamiltonianos tentativa de spins não interagentes (Um), interagentes em par (Par), quatro (Quatro) e cadeia (Cadeia).*

$N^\circ$ Correlação	EFT1	EFT2	Um[32]	Par[32]	Quatro[32]	Cadeia[32]	Exato
$z = 2$	0	0	2	1.564	—	0	0 [12, 13]
$z = 4$	3.0898	3.0250	4	3.776	3.500	3.526	2.269 [2, 13]
$z = 6$	5.0733	5.0392	6	5.847	5.678	5.686	4.512 [33]
$z = 8$	7.0606	7.0394	8	—	—	—	6.353 [1]

Os valores encontrados para a concentração crítica de material magnético ( $p_c$ ), abaixo da qual o sistema deixa a fase ordenada, pode ser observado na Tab. 4.2 para sistemas diluídos por ligação e por sítio. Perceba que os valores encontrados estão de acordo com os cálculos desenvolvidos no sentido que a alteração que se faz quando passamos de sistemas com remoção de ligação para sítio é, simplesmente,  $p^l = (p^s)^2$ . Mas os valores de percolação não obedecem a isto.

É visto para este modelo que, comparado com a aproximação de aglomerado de um spin, a aproximação de 2 spins tende a melhorar os resultados para a concentração crítica para algumas redes, mas não para todas (o que pode ser observado na Tab. 4.2 para  $p^s$  com  $z = 4$ ). Mas isto pode ser explicado. Nos os dois casos, para obtermos  $A_1$ , utilizamos a aproximação  $\langle \sigma_i \sigma_j \dots \sigma_n \rangle = \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \dots \langle \sigma_n \rangle$ . Porém perceba, nas eqs. (4.5) e (4.16), que os produtos em questão são feitos sobre os vizinhos do aglomerado, portanto estamos desprezando as correlações entre esses vizinhos. No caso em que  $\Omega_\alpha = \{\sigma_i\}$ , de fato, os vizinhos não interagem, para as redes consideradas aqui, pois o Hamiltoniano de Ising considera apenas interações entre primeiros vizinhos. Já para  $\Omega_\alpha = \{\sigma_i, \sigma_j\}$  há interações que são desprezadas.

**Tabela 4.2:** Concentrações críticas  $p_c^l$  e  $p_c^s$  para sistemas diluídos por ligação e sítio, respectivamente, para várias redes.

$N^\circ$ Correlação	EFT1		EFT2		Percolação[1]	
	$p_c^l$	$p_c^s$	$p_c^l$	$p_c^s$	$p_c^l$	$p_c^s$
$z = 2$	1	1	1	1	1	1
$z = 4$	0.4284	0.6545	0.4294	0.6552	0.5000	0.5927
$z = 6$	0.2929	0.5412	0.2902	0.5387	0.247	0.3117
$z = 8$	0.2225	0.4717	0.2200	0.4690	0.178	0.2460

Portanto, com respeito ao desacoplamento desses spins, a teoria aproximativa de 2 spins é menos refinada do que a aproximação de 1 spin.

# Capítulo 5

## Aplicação da técnica do operador diferencial a liga Fe-Al

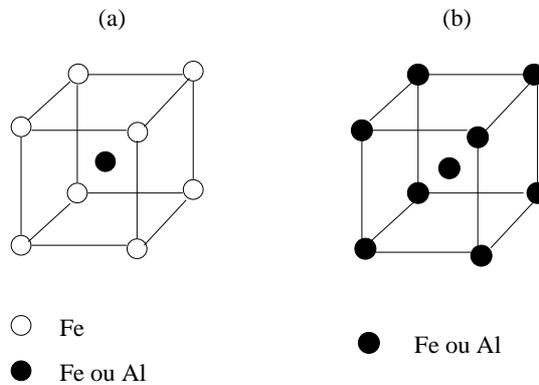
Nesse Capítulo vamos descrever, através do modelo de Ising, as propriedades magnéticas das ligas Fe-Al e utilizar os resultados teóricos aproximados do Capítulo anterior numa tentativa de reproduzir o diagrama de fases experimental desses compostos. Uma comparação com resultados obtidos por outra técnica aproximada (baseada na desigualdade de Bogoliubov) será apresentada.

### 5.1 Ligas Fe-Al

As ligas de Fe-Al (bem como ligas Fe-Mn e outras ligas ternárias) têm sido exaustivamente estudadas não só por apresentarem propriedades magnéticas muito interessantes, mas também por poderem ser descritas por diversos modelos estatísticos, como o de Ising e Heisenberg. Estas ligas podem possuir diferentes fases magnéticas e estruturais, sendo que as fases estruturais dependem do tratamento térmico a que são submetidas (ver, por exemplo, a tese de doutorado de Perez Alcazar [34]).

No caso particular da liga Fe-Al, sua estrutura cristalina é cúbica de corpo centrado. Na faixa de  $0 \leq q \leq 0,18$ , sendo  $q$  a concentração de Al (ou seja, para concentrações de Al menores que 18%), estas ligas são ferromagnéticas e desordenadas estruturalmente, significando que cada sítio da rede pode estar, indistintamente, ocupado por átomos de Al ou Fe, independente do tratamento térmico. Quando temperadas desde  $T \geq 800^\circ\text{C}$  (ou seja, resfriadas rapidamente) ou trabalhadas a frio (sem tratamento térmico) elas também são totalmente desordenadas e ferromagnéticas na faixa de  $0 \leq q \leq 0,5$  (esta concentração já foi estendida para 0,65). Por outro lado, dependendo das concentrações de Fe e Al e do tratamento térmico para  $T \simeq 750^\circ\text{C}$ , estas ligas são ordenadas estruturalmente, ou seja, se considerarmos que a rede cúbica de corpo centrado pode ser dividida em duas sub-redes cúbicas simples, enquanto uma sub-rede sempre tem átomos de Fe a outra sempre terá seus sítios ocupados por átomos de Fe ou Al. A Fig. 5.1 mostra, esquematicamente, as estruturas ordenadas e desordenadas dessas ligas.

Próximo de  $q = 0,3$ , as ligas na fase ordenada são ferromagnéticas e

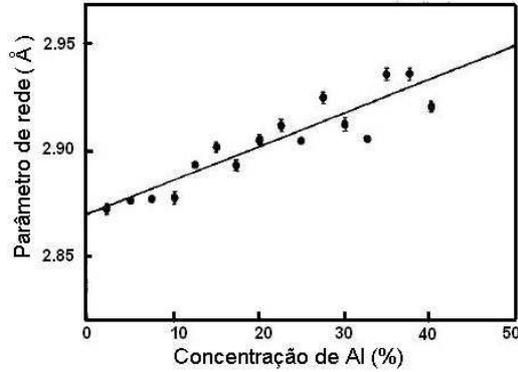


**Figura 5.1:** Distribuição de átomos Fe e Al nas ligas de Fe-Al com rede cúbica de corpo centrado, vista como duas sub-redes cúbicas simples. Em (a) a distribuição na estrutura ordenada onde os átomos de Al podem ocupar sítios de apenas uma das sub-redes, com concentração máxima de 50%; em (b) a distribuição na estrutura desordenada onde todos os sítios podem ser ocupados por átomos de Al, concentração máxima de 100%.

apresentam uma queda brusca na magnetização até  $q = 0,4$ , para depois cair lentamente até 0 em  $q = 0,5$ , [5], um comportamento muito estranho se pensarmos que o agente diluidor Al se trata de um elemento que não possui momento magnético. Em uma tentativa de explicar este comportamento anômalo Sato e Arrot [5, 7] propuseram um modelo onde consideraram a presença de uma interação de troca (*exchange*) ferromagnética entre primeiros vizinhos Fe-Fe, e uma interação de supertroca (*superexchange*) antiferromagnética entre átomos de Fe separados por átomos de Al (Fe-Al-Fe). Este modelo, entretanto, prediz que a baixas temperaturas deve haver uma transição de fase ferro-antiferromagnética, o que não é observado experimentalmente. Por outro lado, Shiga [35] propôs a existência de uma fase vidro de spin (*spin glass*) como estado perto da região anômala, que foi testada teoricamente, [36, 37] e obteve resultados que concordavam com os experimentais.

Contrário as ligas na fase ordenada, as ligas não apresentam este comportamento anômalo na fase desordenada. Porém, a temperatura de transição em função da concentração  $q$ , para pequenas proporções de Al, é praticamente constante e só decai a partir de  $q \geq 0.1$ . Essa constância na temperatura de transição (ou pelo menos um decaimento muito suave), é também não esperado se levarmos em conta o agente diluidor Al. Tal comportamento também é dito anômalo (porém diferente daquele das ligas ordenadas estruturalmente) e carece de uma explicação teórica.

O primeiro modelo proposto para descrever as propriedades magnéticas dessas ligas na fase desordenada [9] foi baseado no modelo de Ising diluído, utilizando a aproximação variacional baseada na desigualdade de Bogoliubov, em que se considerou que a interação de troca deveria ser dependente da concentração de Al uma vez que o parâmetro de rede desses compostos aumentam à medida que a concentração de Al aumenta, Fig. 5.2. Embora qualitativamente o diagrama de fases e a magnetização em função da temperatura e concentração, obtidas aproximadamente, estivessem em acordo com os dados experimentais, a maior discrepância reside justamente na declividade



**Figura 5.2:** *Variação do parâmetro de rede em função da concentração de Al. Figura retirada de [5].*

da linha de transição de fases ferromagnética-paramagnética do diagrama de fases para baixas concentrações de Al. Na verdade, modelos teóricos diluídos mostram uma declividade muito bem definida, e diferente de zero, à medida que  $q \rightarrow 0$  [1]. Num trabalho feito por Plascak, Zamora e Alcazar [39], os autores acrescentam ao modelo uma interações de supertroca entre segundos vizinhos induzida pela diluição Al, sendo que a mesma também dependia de  $q$ . Utilizaram novamente a aproximação variacional baseada na desigualdade de Bogoliubov e obtiveram um diagrama de fases mais compatível com o experimental. Neste trabalho faremos as mesmas considerações, porém utilizaremos a técnica de operador diferencial a fim de verificar se melhores ajustes podem ser obtidos nesse sistema diluído através de uma outra técnica aproximativa.

## 5.2 Modelo

O Hamiltoniano tipo Ising proposto neste caso, em que há interações entre segundos vizinhos, pode ser descrito por

$$\mathcal{H} = -J_1 \sum_{\langle NN \rangle} \varepsilon_i \varepsilon_j \sigma_i \sigma_j - J_2 \sum_{\langle NNN \rangle} \varepsilon_i \varepsilon_j \sigma_i \sigma_j, \quad (5.1)$$

onde a primeira soma é feita entre todos os pares de primeiros vizinhos ( $NN$ ), sendo  $J_1$  a interação de troca entre eles, a segunda é feita entre os pares de segundos vizinhos ( $NNN$ ), com  $J_2$  a interação de supertroca,  $\sigma_i = \pm 1$  é a variável de spin e  $\varepsilon_i = 0$  se o sítio estiver ocupado por um átomo de Al e  $\varepsilon_i = 1$  se estiver ocupado por um átomo de Fe. Como cada sítio pode estar independentemente ocupado por um átomo de Al ou de Fe a distribuição de probabilidade para  $\varepsilon_i$  será dada por

$$P(\varepsilon_i) = p\delta(\varepsilon_i - 1) + q\delta(\varepsilon_i) ,$$

onde  $p$  é a concentração de Fe e  $q$  é a concentração de Al, como já discutido no capítulo 4. Observe que nesta distribuição de probabilidade um sítio pode estar ocupado, ou não, independente do outro, portanto estamos considerando que a desordem na liga é temperada, ou seja, uma rede cúbica de corpo centrado aplicável às ligas na fase estrutural desordenada.

No capítulo anterior pôde-se perceber que não há uma melhora significativa dos resultados obtidos para aglomerados de 2 spins com relação ao aglomerado de 1 spin. Portanto, consideraremos aqui somente  $\Omega_\alpha = \sigma_i$  a fim de simplificar os cálculos aproximativos.

O Hamiltoniano correspondente a todas as contribuições de um aglomerado de 1 spin será descrito por

$$\mathcal{H}_i = -J_1\varepsilon_i\sigma_i \sum_{\vec{\delta}=1}^z \varepsilon_{i+\vec{\delta}}\sigma_{i+\vec{\delta}} - J_2\varepsilon_i\sigma_i \sum_{\vec{\delta}'=1}^{z'} \varepsilon_{i+\vec{\delta}'}\sigma_{i+\vec{\delta}'} ,$$

sendo  $z = 8$  a quantidade de primeiros vizinhos e  $z' = 6$  a quantidade de segundos vizinhos por se tratar de uma rede cúbica de corpo centrado. A magnetização,  $m = \langle\langle\sigma_i\rangle\rangle_c$ , será

$$m = \left\langle\left\langle\frac{\sum_{\sigma_i=-1}^1 \sigma_i e^{-\beta\mathcal{H}_i}}{\sum_{\sigma_i=-1}^1 e^{-\beta\mathcal{H}_i}}\right\rangle\right\rangle_c = \langle\langle\tanh(\beta b)\rangle\rangle_c ,$$

com  $b = \varepsilon_i\sigma_i \left( J_1 \sum_{\vec{\delta}=1}^z \varepsilon_{i+\vec{\delta}}\sigma_{i+\vec{\delta}} + J_2 \sum_{\vec{\delta}'=1}^{z'} \varepsilon_{i+\vec{\delta}'}\sigma_{i+\vec{\delta}'} \right)$  e  $\beta = 1/k_B T$ , portanto, utilizando a técnica do operador diferencial, a magnetização resultará

em

$$\begin{aligned}
m &= \left\langle \left\langle e^{\beta b D} \right\rangle \right\rangle_c \tanh x \Big|_{x=0} = \left\langle \left\langle \prod_{\vec{\delta}=1}^z e^{\varepsilon_i \varepsilon_{i+\vec{\delta}} \sigma_{i+\vec{\delta}} \beta J_1} \prod_{\vec{\delta}'=1}^{z'} e^{\varepsilon_i \varepsilon_{i+\vec{\delta}'} \sigma_{i+\vec{\delta}'} \beta J_2} \right\rangle \right\rangle_c \tanh x \Big|_{x=0} \\
&\simeq [p^2 \cosh(\beta J_1 D) + 1 - p^2 + mp^2 \sinh(\beta J_1 D)]^z \\
&\quad [p^2 \cosh(\beta J_2 D) + 1 - p^2 + mp^2 \sinh(\beta J_2 D)]^{z'} \tanh x \Big|_{x=0} . \tag{5.2}
\end{aligned}$$

No limite de  $J_1 \rightarrow J$  e  $J_2 \rightarrow 0$  voltamos ao caso estudado no capítulo anterior. Porém, como já discutido anteriormente, essas energias de interação dependem ainda da concentração de Al.

No caso da energia de interação de troca entre primeiros vizinhos podemos supor

$$J_1 = J(1 - Lq) , \tag{5.3}$$

onde  $J$  e  $L$  são parâmetros do sistema. Note que  $J_1$  decai linearmente, em acordo com os dados da Fig. 5.2 onde se observa um aumento do parâmetro de rede à medida que a concentração de Al aumenta. Este aumento no espaçamento pode causar uma diminuição na interação de troca. Para  $q = 0$  temos a interação de troca do Fe puro. Já o parâmetro  $L$  será ajustado com os dados experimentais.

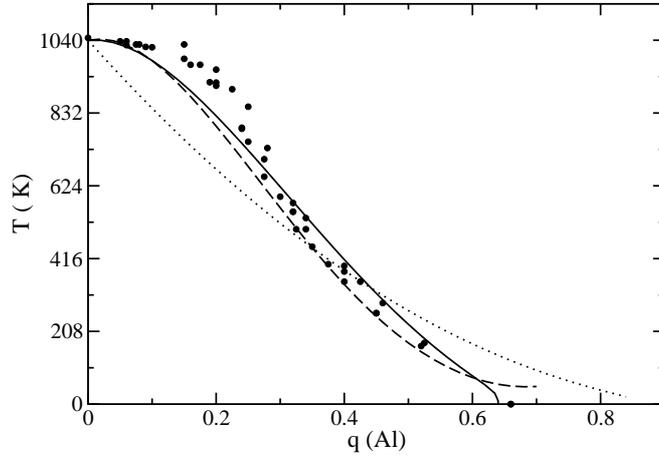
Por outro lado a energia de interação de supertroca será

$$J_2 = J(A - Bq)(C - q) , \tag{5.4}$$

e, de forma análoga, os parâmetros  $A$ ,  $B$  e  $C$  também serão ajustados. A forma apresentada na equação acima também foi usada na Ref. [39].

Como se pode perceber dos apêndices A e B, as expressões para o coeficiente  $A_1$  são muito longas e, por motivos de espaço, não serão reproduzidas aqui. Fazendo então uso da relação  $A_1 = 1$  obtivemos o diagrama de fases teórico para esta liga, sendo que a mesma foi ajustada, por um programa escrito por nós em *Fortran*, ao diagrama obtido através de valores experimentais. O melhor ajuste visual pode ser observado na Fig. 5.3.

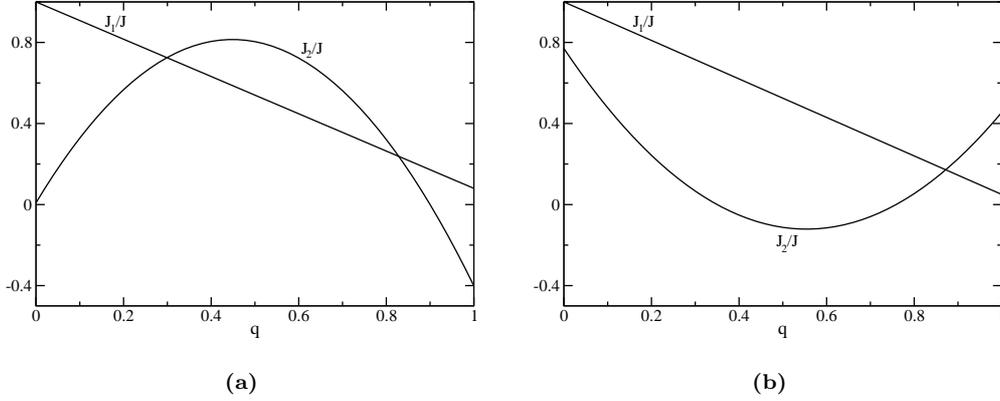
A temperatura crítica reduzida obtida com  $q = 0$ , ou seja, sistema puro,



**Figura 5.3:** *Temperatura crítica em função da concentração Al, onde os pontos (●) são os dados experimentais [39], a curva pontilhada (··) é o ajuste obtido teoricamente pela técnica da desigualdade de Bogoliubov com interação apenas entre primeiros vizinhos [9], a curva tracejada (—) incluindo interação entre segundos vizinhos [39] e a curva cheia (—) ajuste obtido pela técnica do operador diferencial com interação entre primeiros e segundos vizinhos.*

foi  $t_c = k_B T_c / J = 7,0606$ . Levando em consideração que  $T_c = 1040K$ , para o Fe puro e  $k_B = 8,617 \times 10^{-5} eV/K$  encontramos  $J = 0,013eV$ . Este valor é praticamente o mesmo obtido em ajuste anteriores com o emprego da técnica da desigualdade de Bogoliubov. No ajuste apresentado na Fig. 5.3 foi usado  $L = 0,92$ ,  $A = 0,01$ ,  $B = -4,0$  e  $C = 0,9$ . Podemos notar que o resultado obtido aqui melhorou muito com relação a [9], onde se considerou a desigualdade de Bogoliubov apenas interações entre primeiros vizinhos, mas não melhorou com relação aos resultados encontrados com a desigualdade de Bogoliubov quando se considerou interações entre segundos vizinhos [39].

O comportamento das interações  $J_1$  e  $J_2$  em função da concentração de Al na faixa de  $0 \leq q \leq 1$  podem ser vistos na Fig. 5.4. Note que à medida que a concentração de Al aumenta a interação entre segundos vizinhos supera a de primeiros. Nesta mesma Figuras podemos comparar as interações ajustadas neste trabalho com as obtidas em [39].



**Figura 5.4:** Razão  $J_1/J$  e  $J_2/J$  em função da concentração de Al obtidas através do operador diferencial (a) e através da desigualdade de Bogoliubov (b).

O valor ajustado para  $J_1$  nos dois casos foi praticamente o mesmo, pois foi ajustado  $L = 0,95$  em [39]. Já o comportamento obtido nestes trabalhos para  $J_2$  foram totalmente diferentes, note que os mesmos possuem concavidades opostas, o que não era esperado.

# Capítulo 6

## Conclusão

Neste trabalho, utilizamos a teoria de campo efetivo, baseada na técnica do operador diferencial, no estudo do modelo de Ising diluído em redes hipercúbicas, considerando, a princípio, apenas interação entre primeiros vizinhos. A medida que aumentamos o aglomerado utilizado na aproximação, observamos uma melhora nas temperaturas e concentrações críticas reduzidas, Tab. 4.1, porém não houve sempre melhora nas concentrações críticas de todas as redes, Tab. 4.2. Assim como já foi discutido, essa característica é consequência de termos desprezado maior quantidade de correlação entre spins vizinhos quando consideramos aglomerados maiores. Por esse motivo, passamos a considerar aglomerados menores a partir de então.

Aplicamos esse modelo para explicar o comportamento crítico da liga Fe-Al, porém consideramos não somente interações de troca, entre todos os pares de primeiros vizinhos Fe-Fe, mas também interações de supertroca, interações entre átomos de Fe separados por átomos de Al, Fe-Al-Fe, sendo que essas interações possuem dependência com a concentração de Al. A aproximação aqui utilizada, empregando o modelo de Ising diluído, nos forneceu dados capazes de ajustar uma curva experimental para o diagrama de fases, temperatura reduzida em função da concentração de Al ( $q$ ), e obtivemos resultados muito bons, melhores aos obtidos em [9] considerando a desigualdade de Bogoliubov com interação somente entre primeiros vizinhos, porém não

melhores aos obtidos em [39] considerando a desigualdade de Bogoliubov com interação entre primeiros e segundos vizinhos. Desta forma podemos concluir que os resultados só serão melhores se considerarmos modelos mais sofisticados e não apenas melhorando as técnicas utilizadas.

Extensões a este trabalho podem ser realizados, tais como utilizando o modelo de Heisenberg diluído com interações entre primeiros e segundos vizinhos

# Apêndice A

## Coeficientes obtidos com aglomerado de 1 spin

Coeficientes obtidos para sistemas diluídos através do modelo de Ising utilizando a técnica do operador diferencial com  $\Omega_\alpha = \{\sigma_i\}$ , eq. (4.6), com diluição por ligação e por sítio para algumas redes hipercúbicas.

### A.1 Sistema diluído por ligação

- $z = 2$

$$A_1 = p^2 \tanh\left(\frac{2}{t}\right) - 2p^2 \tanh\left(\frac{1}{t}\right) + 2p \tanh\left(\frac{1}{t}\right).$$

- $z = 4$

$$A_1 = 0.5p^4 \tanh\left(\frac{4}{t}\right) - 3p^4 \tanh\left(\frac{3}{t}\right) + 7p^4 \tanh\left(\frac{2}{t}\right) - 7p^4 \tanh\left(\frac{1}{t}\right) + 3p^3 \tanh\left(\frac{3}{t}\right) - 12p^3 \tanh\left(\frac{2}{t}\right) + 15p^3 \tanh\left(\frac{1}{t}\right) + 6p^2 \tanh\left(\frac{2}{t}\right) - 12p^2 \tanh\left(\frac{1}{t}\right) + 4p \tanh\left(\frac{1}{t}\right).$$

- $z = 6$

$$\begin{aligned}
A_1 &= 0.1875p^6 \tanh\left(\frac{6}{t}\right) - 1.875p^6 \tanh\left(\frac{5}{t}\right) + 8.25p^6 \tanh\left(\frac{4}{t}\right) \\
&- 20.625p^6 \tanh\left(\frac{3}{t}\right) + 30.9375p^6 \tanh\left(\frac{2}{t}\right) - 24.75p^6 \tanh\left(\frac{1}{t}\right) \\
&+ 1.875p^5 \tanh\left(\frac{5}{t}\right) - 15.0p^5 \tanh\left(\frac{4}{t}\right) + 50.625p^5 \tanh\left(\frac{3}{t}\right) \\
&- 90.0p^5 \tanh\left(\frac{2}{t}\right) + 78.75p^5 \tanh\left(\frac{1}{t}\right) \\
&+ 7.5p^4 \tanh\left(\frac{4}{t}\right) - 45p^4 \tanh\left(\frac{3}{t}\right) + 105p^4 \tanh\left(\frac{2}{t}\right) - 105p^4 \tanh\left(\frac{1}{t}\right) \\
&+ 15p^3 \tanh\left(\frac{3}{t}\right) - 60p^3 \tanh\left(\frac{2}{t}\right) + 75p^3 \tanh\left(\frac{1}{t}\right) \\
&+ 15p^2 \tanh\left(\frac{2}{t}\right) - 30p^2 \tanh\left(\frac{1}{t}\right) \\
&+ 6p \tanh\left(\frac{1}{t}\right) .
\end{aligned}$$

é fácil perceber que para  $z = 8$   $A_1$  ficará bem maior, portanto não o escrevemos aqui.

## A.2 Sistema diluído por sítio

- $z = 2$

$$\begin{aligned}
A_1 &= p^4 \tanh\left(\frac{2}{t}\right) - 2p^4 \tanh\left(\frac{1}{t}\right) \\
&+ 2p^2 \tanh\left(\frac{1}{t}\right) .
\end{aligned}$$

- $z = 4$

$$\begin{aligned}
A_1 &= 0.5p^8 \tanh\left(\frac{4}{t}\right) - 3p^8 \tanh\left(\frac{3}{t}\right) + 7p^8 \tanh\left(\frac{2}{t}\right) - 7p^8 \tanh\left(\frac{1}{t}\right) \\
&+ 3p^6 \tanh\left(\frac{3}{t}\right) - 12p^6 \tanh\left(\frac{2}{t}\right) + 15p^6 \tanh\left(\frac{1}{t}\right) \\
&+ 6p^4 \tanh\left(\frac{2}{t}\right) - 12p^4 \tanh\left(\frac{1}{t}\right) \\
&+ 4p^2 \tanh\left(\frac{1}{t}\right) .
\end{aligned}$$

- $z = 6$

$$\begin{aligned}
A_1 &= 0.1875p^{12} \tanh\left(\frac{6}{t}\right) - 1.875p^{12} \tanh\left(\frac{5}{t}\right) + 8.25p^{12} \tanh\left(\frac{4}{t}\right) \\
&- 20.625p^{12} \tanh\left(\frac{3}{t}\right) + 30.9375p^{12} \tanh\left(\frac{2}{t}\right) - 24.75p^{12} \tanh\left(\frac{1}{t}\right) \\
&+ 1.875p^{10} \tanh\left(\frac{5}{t}\right) - 15.0p^{10} \tanh\left(\frac{4}{t}\right) + 50.625p^{10} \tanh\left(\frac{3}{t}\right) \\
&- 90.0p^{10} \tanh\left(\frac{2}{t}\right) + 78.75p^{10} \tanh\left(\frac{1}{t}\right) \\
&+ 7.5p^8 \tanh\left(\frac{4}{t}\right) - 45p^8 \tanh\left(\frac{3}{t}\right) + 105p^8 \tanh\left(\frac{2}{t}\right) - 105p^8 \tanh\left(\frac{1}{t}\right) \\
&+ 15p^6 \tanh\left(\frac{3}{t}\right) - 60p^6 \tanh\left(\frac{2}{t}\right) + 75p^6 \tanh\left(\frac{1}{t}\right) \\
&+ 15p^4 \tanh\left(\frac{2}{t}\right) - 30p^4 \tanh\left(\frac{1}{t}\right) \\
&+ 6p^2 \tanh\left(\frac{1}{t}\right) .
\end{aligned}$$

# Apêndice B

## Coeficientes obtidos com aglomerado de 2 spin

Coeficientes obtidos para sistemas diluídos através do modelo de Ising utilizando a técnica do operador diferencial com  $\Omega_\alpha = \{\sigma_i, \sigma_j\}$ , eq. (4.16), com diluição por ligação e por sítio para algumas redes hipercúbicas.

### B.1 Sistema diluído por ligação

- $z = 2$

$$\begin{aligned} A_1 &= p^2 \left( \frac{p \sinh \left( \frac{2}{t} \right)}{\cosh \left( \frac{2}{t} \right) + e^{-\frac{2}{t}}} + \frac{(1-p) \sinh \left( \frac{2}{t} \right)}{\cosh \left( \frac{2}{t} \right) + 1} \right) \\ &- 2p^2 \left( \frac{p \sinh \left( \frac{1}{t} \right)}{\cosh \left( \frac{1}{t} \right) + e^{-2\frac{1}{t}} \cosh \left( \frac{1}{t} \right)} + \frac{(1-p) \sinh \left( \frac{1}{t} \right)}{2 \cosh \left( \frac{1}{t} \right)} \right) \\ &+ 2p \left( \frac{p \sinh \left( \frac{1}{t} \right)}{\cosh \left( \frac{1}{t} \right) + e^{-2\frac{1}{t}} \cosh \left( \frac{1}{t} \right)} + \frac{(1-p) \sinh \left( \frac{1}{t} \right)}{2 \cosh \left( \frac{1}{t} \right)} \right). \end{aligned}$$

•  $z = 4$

$$\begin{aligned}
A_1 = & \frac{9}{2}p^4 \left( \frac{p \sinh \left(\frac{4}{t}\right)}{\cosh \left(\frac{4}{t}\right) + e^{-\frac{2}{t}}} + \frac{(1-p) \sinh \left(\frac{4}{t}\right)}{\cosh \left(\frac{4}{t}\right) + 1} \right) \\
& + 9p^2 \left( \frac{p \sinh \left(\frac{2}{t}\right)}{\cosh \left(\frac{2}{t}\right) + e^{-\frac{2}{t}}} + \frac{(1-p) \sinh \left(\frac{2}{t}\right)}{\cosh \left(\frac{2}{t}\right) + 1} \right) \\
& - \frac{15}{8}p^6 \left( \frac{p \sinh \left(\frac{5}{t}\right)}{\cosh \left(\frac{5}{t}\right) + e^{-\frac{2}{t}} \cosh \left(\frac{1}{t}\right)} + \frac{(1-p) \sinh \left(\frac{5}{t}\right)}{\cosh \left(\frac{1}{t}\right) + \cosh \left(\frac{5}{t}\right)} \right) \\
& + \frac{3}{2}p^3 \left( \frac{p \sinh \left(\frac{3}{t}\right)}{\cosh \left(\frac{3}{t}\right) + e^{-\frac{2}{t}} \cosh \left(\frac{3}{t}\right)} + \frac{(1-p) \sinh \left(\frac{3}{t}\right)}{2 \cosh \left(\frac{3}{t}\right)} \right) \\
& - 24p^3 \left( \frac{p \sinh \left(\frac{2}{t}\right)}{\cosh \left(\frac{2}{t}\right) + e^{-\frac{2}{t}} \cosh \left(\frac{2}{t}\right)} + \frac{(1-p) \sinh \left(\frac{2}{t}\right)}{2 \cosh \left(\frac{2}{t}\right)} \right) \\
& + 6p^2 \left( \frac{p \sinh \left(\frac{2}{t}\right)}{\cosh \left(\frac{2}{t}\right) + e^{-\frac{2}{t}} \cosh \left(\frac{2}{t}\right)} + \frac{(1-p) \sinh \left(\frac{2}{t}\right)}{2 \cosh \left(\frac{2}{t}\right)} \right) \\
& + \frac{9}{2}p^6 \left( \frac{p \sinh \left(\frac{4}{t}\right)}{\cosh \left(\frac{4}{t}\right) + e^{-\frac{2}{t}}} + \frac{(1-p) \sinh \left(\frac{4}{t}\right)}{\cosh \left(\frac{4}{t}\right) + 1} \right) \\
& + \frac{15}{16}p^6 \left( \frac{p \sinh \left(\frac{2}{t}\right)}{\cosh \left(\frac{2}{t}\right) + e^{-\frac{2}{t}} \cosh \left(\frac{4}{t}\right)} + \frac{(1-p) \sinh \left(\frac{2}{t}\right)}{\cosh \left(\frac{2}{t}\right) + \cosh \left(\frac{4}{t}\right)} \right) \\
& - \frac{135}{8}p^6 \left( \frac{p \sinh \left(\frac{3}{t}\right)}{\cosh \left(\frac{3}{t}\right) + e^{-\frac{2}{t}} \cosh \left(\frac{1}{t}\right)} + \frac{(1-p) \sinh \left(\frac{3}{t}\right)}{\cosh \left(\frac{3}{t}\right) + \cosh \left(\frac{1}{t}\right)} \right) \\
& + \frac{255}{4}p^5 \left( \frac{p \sinh \left(\frac{1}{t}\right)}{\cosh \left(\frac{1}{t}\right) + e^{-\frac{2}{t}} \cosh \left(\frac{1}{t}\right)} + \frac{(1-p) \sinh \left(\frac{1}{t}\right)}{2 \cosh \left(\frac{1}{t}\right)} \right) \\
& - 6p^5 \left( \frac{p \sinh \left(\frac{4}{t}\right)}{\cosh \left(\frac{4}{t}\right) + e^{-\frac{2}{t}} \cosh \left(\frac{2}{t}\right)} + \frac{(1-p) \sinh \left(\frac{4}{t}\right)}{\cosh \left(\frac{2}{t}\right) + \cosh \left(\frac{4}{t}\right)} \right) \\
& + \frac{15}{4}p^6 \left( \frac{p \sinh \left(\frac{4}{t}\right)}{\cosh \left(\frac{4}{t}\right) + e^{-\frac{2}{t}} \cosh \left(\frac{2}{t}\right)} + \frac{(1-p) \sinh \left(\frac{4}{t}\right)}{\cosh \left(\frac{2}{t}\right) + \cosh \left(\frac{4}{t}\right)} \right) \\
& - \frac{3}{16}p^5 \left( \frac{p \sinh \left(\frac{1}{t}\right)}{\cosh \left(\frac{1}{t}\right) + e^{-\frac{2}{t}} \cosh \left(\frac{5}{t}\right)} - \frac{(1-p) \sinh \left(\frac{1}{t}\right)}{\cosh \left(\frac{1}{t}\right) + \cosh \left(\frac{5}{t}\right)} \right) \\
& - 42p^5 \left( \frac{p \sinh \left(\frac{2}{t}\right)}{\cosh \left(\frac{2}{t}\right) + e^{-\frac{2}{t}} \cosh \left(\frac{2}{t}\right)} + \frac{(1-p) \sinh \left(\frac{2}{t}\right)}{2 \cosh \left(\frac{2}{t}\right)} \right) \\
& + \frac{3}{2}p^5 \left( \frac{p \sinh \left(\frac{2}{t}\right)}{\cosh \left(\frac{2}{t}\right) + e^{-\frac{2}{t}} \cosh \left(\frac{4}{t}\right)} - \frac{(1-p) \sinh \left(\frac{2}{t}\right)}{\cosh \left(\frac{2}{t}\right) + \cosh \left(\frac{4}{t}\right)} \right) + \dots,
\end{aligned}$$

esta equação possui muitos outros termos, porém fica inviável de colocá-los aqui. De forma que esta relação foi colocada aqui afim de se ter uma noção de como se aumentam as contas quando se altera de um aglomerado para o outro.

## B.2 Sistema diluído por sítio

- $z = 2$

$$\begin{aligned}
 A_1 &= p^4 \left( \frac{p^2 \sinh\left(\frac{2}{t}\right)}{\cosh\left(\frac{2}{t}\right) + e^{-\frac{2}{t}}} + \frac{(1-p^2) \sinh\left(\frac{2}{t}\right)}{\cosh\left(\frac{2}{t}\right) + 1} \right) \\
 &- 2p^4 \left( \frac{p^2 \sinh\left(\frac{1}{t}\right)}{\cosh\left(\frac{1}{t}\right) + e^{-2\frac{1}{t}} \cosh\left(\frac{1}{t}\right)} + \frac{(1-p^2) \sinh\left(\frac{1}{t}\right)}{2 \cosh\left(\frac{1}{t}\right)} \right) \\
 &+ 2p^2 \left( \frac{p^2 \sinh\left(\frac{1}{t}\right)}{\cosh\left(\frac{1}{t}\right) + e^{-2\frac{1}{t}} \cosh\left(\frac{1}{t}\right)} + \frac{(1-p^2) \sinh\left(\frac{1}{t}\right)}{2 \cosh\left(\frac{1}{t}\right)} \right).
 \end{aligned}$$

•  $z = 4$

$$\begin{aligned}
A_1 = & \frac{9}{2} p^8 \left( \frac{p^2 \sinh \left( \frac{4}{t} \right)}{\cosh \left( \frac{4}{t} \right) + e^{-\frac{2}{t}}} + \frac{(1-p^2) \sinh \left( \frac{4}{t} \right)}{\cosh \left( \frac{4}{t} \right) + 1} \right) \\
& + 9 p^4 \left( \frac{p^2 \sinh \left( \frac{2}{t} \right)}{\cosh \left( \frac{2}{t} \right) + e^{-\frac{2}{t}}} + \frac{(1-p^2) \sinh \left( \frac{2}{t} \right)}{\cosh \left( \frac{2}{t} \right) + 1} \right) \\
& - \frac{15}{8} p^{12} \left( \frac{p^2 \sinh \left( \frac{5}{t} \right)}{\cosh \left( \frac{5}{t} \right) + e^{-\frac{2}{t}} \cosh \left( \frac{1}{t} \right)} + \frac{(1-p^2) \sinh \left( \frac{5}{t} \right)}{\cosh \left( \frac{1}{t} \right) + \cosh \left( \frac{5}{t} \right)} \right) \\
& + \frac{3}{2} p^6 \left( \frac{p^2 \sinh \left( \frac{3}{t} \right)}{\cosh \left( \frac{3}{t} \right) + e^{-\frac{2}{t}} \cosh \left( \frac{3}{t} \right)} + \frac{(1-p^2) \sinh \left( \frac{3}{t} \right)}{2 \cosh \left( \frac{3}{t} \right)} \right) \\
& - 24 p^6 \left( \frac{p^2 \sinh \left( \frac{2}{t} \right)}{\cosh \left( \frac{2}{t} \right) + e^{-\frac{2}{t}} \cosh \left( \frac{2}{t} \right)} + \frac{(1-p^2) \sinh \left( \frac{2}{t} \right)}{2 \cosh \left( \frac{2}{t} \right)} \right) \\
& + 6 p^4 \left( \frac{p^2 \sinh \left( \frac{2}{t} \right)}{\cosh \left( \frac{2}{t} \right) + e^{-\frac{2}{t}} \cosh \left( \frac{2}{t} \right)} + \frac{(1-p^2) \sinh \left( \frac{2}{t} \right)}{2 \cosh \left( \frac{2}{t} \right)} \right) \\
& + \frac{9}{2} p^{12} \left( \frac{p^2 \sinh \left( \frac{4}{t} \right)}{\cosh \left( \frac{4}{t} \right) + e^{-\frac{2}{t}}} + \frac{(1-p^2) \sinh \left( \frac{4}{t} \right)}{\cosh \left( \frac{4}{t} \right) + 1} \right) \\
& + \frac{15}{16} p^{12} \left( \frac{p^2 \sinh \left( \frac{2}{t} \right)}{\cosh \left( \frac{2}{t} \right) + e^{-\frac{2}{t}} \cosh \left( \frac{4}{t} \right)} + \frac{(1-p^2) \sinh \left( \frac{2}{t} \right)}{\cosh \left( \frac{2}{t} \right) + \cosh \left( \frac{4}{t} \right)} \right) \\
& - \frac{135}{8} p^{12} \left( \frac{p^2 \sinh \left( \frac{3}{t} \right)}{\cosh \left( \frac{3}{t} \right) + e^{-\frac{2}{t}} \cosh \left( \frac{1}{t} \right)} + \frac{(1-p^2) \sinh \left( \frac{3}{t} \right)}{\cosh \left( \frac{3}{t} \right) + \cosh \left( \frac{1}{t} \right)} \right) \\
& + \frac{255}{4} p^{10} \left( \frac{p^2 \sinh \left( \frac{1}{t} \right)}{\cosh \left( \frac{1}{t} \right) + e^{-\frac{2}{t}} \cosh \left( \frac{1}{t} \right)} + \frac{(1-p^2) \sinh \left( \frac{1}{t} \right)}{2 \cosh \left( \frac{1}{t} \right)} \right) \\
& - 6 p^{10} \left( \frac{p^2 \sinh \left( \frac{4}{t} \right)}{\cosh \left( \frac{4}{t} \right) + e^{-\frac{2}{t}} \cosh \left( \frac{2}{t} \right)} + \frac{(1-p^2) \sinh \left( \frac{4}{t} \right)}{\cosh \left( \frac{2}{t} \right) + \cosh \left( \frac{4}{t} \right)} \right) \\
& + \frac{15}{4} p^{12} \left( \frac{p^2 \sinh \left( \frac{4}{t} \right)}{\cosh \left( \frac{4}{t} \right) + e^{-\frac{2}{t}} \cosh \left( \frac{2}{t} \right)} + \frac{(1-p^2) \sinh \left( \frac{4}{t} \right)}{\cosh \left( \frac{2}{t} \right) + \cosh \left( \frac{4}{t} \right)} \right) \\
& - \frac{3}{16} p^{10} \left( -\frac{p^2 \sinh \left( \frac{1}{t} \right)}{\cosh \left( \frac{1}{t} \right) + e^{-\frac{2}{t}} \cosh \left( \frac{5}{t} \right)} - \frac{(1-p^2) \sinh \left( \frac{1}{t} \right)}{\cosh \left( \frac{1}{t} \right) + \cosh \left( \frac{5}{t} \right)} \right) \\
& - 42 p^{10} \left( \frac{p^2 \sinh \left( \frac{2}{t} \right)}{\cosh \left( \frac{2}{t} \right) + e^{-\frac{2}{t}} \cosh \left( \frac{2}{t} \right)} + \frac{(1-p^2) \sinh \left( \frac{2}{t} \right)}{2 \cosh \left( \frac{2}{t} \right)} \right) \\
& + \frac{3}{2} p^{10} \left( -\frac{p^2 \sinh \left( \frac{2}{t} \right)}{\cosh \left( \frac{2}{t} \right) + e^{-\frac{2}{t}} \cosh \left( \frac{4}{t} \right)} - \frac{(1-p^2) \sinh \left( \frac{2}{t} \right)}{\cosh \left( \frac{2}{t} \right) + \cosh \left( \frac{4}{t} \right)} \right) + \dots,
\end{aligned}$$

# Referências

- [1] R. B. Stinchcombe, *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol. 7, Editado por C. Domb e J. L. Lebowitz, Academic Press (New York, 1983).
- [2] Lars Onsager, *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944).
- [3] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Eitenne, G. Creuzet, A. Freiederich e J. Chazelas, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2472 (1988).
- [4] G. Binasch, P. Grünberg, F. Saurenbach e W. Zinn, *Phys. Rev. B* **39**, 4828 (1989).
- [5] A. Arrot e H. Sato, *Phys. Rev.* **114**, 1420 (1959).
- [6] Nelson O. Moreno e F. C. Montenegro, *Phys. Rev. B* **56**, 13708 (1997).
- [7] H. Sato e A. Arrot, *Phys. Rev.* **114**, 1427 (1959).
- [8] F. T. Kaneyoshi, I. P. Fitipaldi e H. Beyer, *Phys. Stat. Sol. B* **102**, 393 (1980).
- [9] G. A. Pérez Alcazar, J. A. Plascak e E. Galvão da Silva, *Phys. Rev. B* **34**, 1940 (1986).
- [10] R. Honmura e T. Kaneyoshi, *J. Phys. C* **12**, 3979 (1979).
- [11] E. Mina, A. Bohórquez, Ligia E. Zamora e G. A. Pérez Alcazar, *Phys. Rev. B* **47**, 7925 (1993).

- [12] H. Eugene Stanley, *Introduction to phase transitions and critical phenomena*, Oxford University Press, 1971.
- [13] Sílvio R. A. Salinas, *Introdução a física estatística*, edusp, 1997.
- [14] T. Andrews, Phil. Trans. R. Soc. **159**, 575 (1896).
- [15] P. Weiss, J. Phys. Radium **4**, 661 (1907).
- [16] W. K. Heisenberg, Z. Phys. **49**, 619 (1928).
- [17] J.J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics - Revised Edition*, San Fu Tuan, Editor.
- [18] Igor Tavares Padilha. *Estudo das Propriedades Termodinâmicas no modelo de Ising aleatoriamente decorado com interações competitivas*, tese entregue a UFAM, 2006.
- [19] P. A. M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*, Clarendon Press (Oxford, 1958).
- [20] E. Ising, Z. Phys. **31**, 253 (1925).
- [21] Mário José de Oliveira, *Termodinâmica*, Editora Livraria da Física (São Paulo, 2005).
- [22] B. Widom, J. Chem. Phys. **43**, 3892 e 3898 (1965).
- [23] David Chandler, *Introduction to modern statistical mechanics*, Oxford University Press (New York, 1987).
- [24] F. C. Sá Barreto e I. P. Fitipaldi, Rev. Bras. Física **11**, 745 (1981).
- [25] H. B. Callen, Phys. Lett. **4**, 161 (1963).
- [26] M. Suzuki, Phys. Lett. **19**, 267 (1965).
- [27] J. W. Tucker, J. Phys. A **27**, 659 (1994).

- [28] W. P. Wolf, Braz. J. Phys. **30**, 682 (2000).
- [29] M. E. J. Newman e R. M. Ziff, Phys. Rev. Lett. **85**, 4104 (2000); Phys. Rev. E **64**, 016706 (2001).
- [30] M. B. Monagan, *Maple V programming guide*, Springer, (New York, 1996).
- [31] F. F. Campos, *Algoritoms Numéricos*, LTC Editora (Rio de Janeiro, 2001).
- [32] Daniele Alves Dias. *Método variacional aplicado a sistemas magnéticos*, monografia entregue a UFMG, 2006.
- [33] D. P. Landau e K. Binder, *A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics*, Cambridge University Press (Cambridge, 2000).
- [34] German Antonio Perez Alcazar. *Estudo das propriedades magnéticas e estruturais dos sistemas de ligas FeAl, FeMn e FeMnAl*, tese entregue a UFMG, 1986.
- [35] M. Shiga e Y. Nakamura, J. Phys. Soc. Jpn. **40**, 5 (1976).
- [36] P. Shukla e M. Wortis, Phys. Rev. B **21**, 159 (1980).
- [37] G. S. Grest, Phys. Rev. B **21**, 165 (1980).
- [38] G. A. Perez Alcazar e E. Galvão da Silva, J. Phys. F **17**, 2323 (1987).
- [39] J. A. Plascak, L. E. Zamora e G. A. Pérez Alcazar, Phys. Rev. B **61**, 3188 (2000).