



NAYARA FERREIRA

**PROPRIEDADES MAGNETOELÁSTICAS DE UMA CADEIA
DE DIAMANTE ISING-HEISENBERG COM SPIN-1/2 NA
VIZINHANÇA DE UM PONTO TRIPLO**

LAVRAS – MG

2020

NAYARA FERREIRA

**PROPRIEDADES MAGNETOELÁSTICAS DE UMA CADEIA DE DIAMANTE
ISING-HEISENBERG COM SPIN-1/2 NA VIZINHANÇA DE UM PONTO TRIPLO**

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

Prof. Dr. Sérgio Martins de Souza
Orientador

Prof. Dr. Onofre Rojas Santos
Coorientador

Profa. Dra. Jordana Torrico Ferreira
Coorientadora

LAVRAS – MG

2020

**Ficha catalográfica elaborada pelo Sistema de Geração de Ficha Catalográfica da Biblioteca
Universitária da UFLA, com dados informados pelo(a) próprio(a) autor(a).**

Ferreira, Nayara.

Propriedades magnetoelásticas de uma cadeia de diamante Ising-
Heisenberg com spin-1/2 na vizinhança de um ponto triplo /
Nayara Ferreira. - 2020.

60 p. : il.

Orientador(a): Sérgio Martins de Souza.

Coorientador(a): Onofre Rojas, Jordana Torrico.

Dissertação (mestrado acadêmico) - Universidade Federal de
Lavras, 2020.

Bibliografia.

1. Modelo Ising-Heisenberg. 2. Propriedades magnetoelásticas.
3. Ponto triplo. I. Souza, Sérgio Martins de. II. Rojas, Onofre. III.
Torrico, Jordana. IV. Título.

NAYARA FERREIRA

**PROPRIEDADES MAGNETOELÁSTICAS DE UMA CADEIA DE DIAMANTE
ISING-HEISENBERG COM SPIN-1/2 NA VIZINHANÇA DE UM PONTO TRIPLO**

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

APROVADA em 27 de Novembro de 2020.

Prof. Dr. Sérgio Martins de Souza	DFI-UFLA
Profa. Dra. Angélica Souza da Mata	DFI-UFLA
Prof. Dr. Antônio dos Anjos Pinheiro da Silva	DEX-UFLA
Profa. Dra Maria do Socorro Seixas Pereira	IF-UFAL

Prof. Dr. Sérgio Martins de Souza
Orientador

Prof. Dr. Onofre Rojas Santos
Co-Orientador

Profa. Dra. Jordana Torrico Ferreira
Co-Orientadora

**LAVRAS – MG
2020**

À minha amada mãe.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus que me possibilitou chegar até aqui. A minha mãe que fez tudo o que pode, e além, pra cuidar de mim. Sempre meu apoio. Ao meu noivo Dimas, por me apoiar, ouvir e incentivar; e por tornar meus dias mais felizes. Agradeço a amiga sempre presente Ana Luiza (Luly) e sua família (Cida, Jean) que ao longo dos anos se tornou também minha família. Aos meus familiares.

Obrigada ao meu orientador Sérgio, sempre disposto a tirar dúvidas e ajudar. Obrigada pela paciência e compreensão. Também agradeço ao professor Onofre pela colaboração nesse trabalho. Obrigada Jordana, pela ajuda e pelas conversas.

Aos professores do DFI e do DEX (Iraziet Charret, Antônio dos Anjos, Helena Libardi e Antônio Marcelo) pelos seus ensinamentos, dos quais sempre me lembrarei.

Aos colegas do programa de pós graduação em física pela amizade, pela ajuda, pelas discussões sobre física, pelas conversas, pelos momentos divertidos.

Agradeço aos funcionários do DFI (em especial Lú e Cleusa) que proporcionaram um bom ambiente para o trabalho.

Agradeço a Capes pelo apoio financeiro.

A maravilhosa disposição e harmonia do universo só pode ter tido origem segundo o plano de um Ser que tudo sabe e tudo pode. Isso fica sendo a minha última e mais elevada descoberta.
(Sir Isaac Newton)

Nature is pleased with simplicity. (Sir Isaac Newton)

RESUMO

Estudamos as propriedades magnetoelásticas de uma cadeia de diamante Ising-Heisenberg com $\text{spin-}\frac{1}{2}$, cuja célula unitária elementar consiste de dois spins Heisenberg decorados e um spin Ising nodal. É assumido que os átomos dos spins Heisenberg decorados vibram harmonicamente, perpendicular ao eixo da cadeia, enquanto os átomos nodais envolvendo os spins Ising, são rígidos e ignorados quando a cadeia vibra. O efeito do acoplamento magnetoelástico no estado fundamental e nas propriedades de temperatura finita é particularmente investigado nas vizinhanças do ponto triplo, dependendo da constante de rigidez da mola atribuída à interação tipo Heisenberg. A natureza magnetoelástica dos dímeros Heisenberg é refletida através de um platô não nulo da entropia emergente em uma região de baixas temperaturas, enquanto o calor específico exibe um pico anômalo ligeiramente abaixo da região de temperatura correspondente ao platô da entropia. A magnetização também exibe um platô na mesma região de temperatura com um valor quase saturado, antes de gradualmente tender a zero quando a temperatura aumenta. A suscetibilidade magnética exibe na região do platô uma dependência inversa da temperatura, que falha levemente acima desse platô, enquanto para temperaturas suficientemente altas uma dependência inversa da temperatura é novamente recuperada.

Palavras-chave: Modelo Ising-Heisenberg. Propriedades magnetoelásticas. Ponto triplo.

ABSTRACT

We study magnetoelastic properties of a spin-1/2 Ising-Heisenberg diamond chain, whose elementary unit cell consist from two decorating Heisenberg spins and one nodal Ising spin. It is assumed that each couple of the decorating atoms including the Heisenberg spins harmonically vibrates perpendicularly to the chain axis, while the nodal atoms involving the Ising spins are placed at rigid positions when ignoring their lattice vibrations. An effect of the magnetoelastic coupling on a ground state and finite-temperature properties is particularly investigated close to a triple coexistence point depending on a spring-stiffness constant ascribed to the Heisenberg interaction. The magnetoelastic nature of the Heisenberg dimers is reflected through a non-null plateau of the entropy emergent in a low-temperature region, whereas the specific heat displays an anomalous peak slightly below the temperature region corresponding to the entropy plateau. The magnetization also exhibits a plateau in the same temperature region at almost saturated value before it gradually tends to zero upon increasing of temperature. The magnetic susceptibility displays within the plateau region an inverse temperature dependence, which fails slightly above this plateau, whereas an inverse temperature dependence is repeatedly recovered at high enough temperatures.

Keywords: Ising-Heisenberg Model. Magnetoelastic properties. Triple point.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Esquemática de ponto de equilíbrio.	14
Figura 2.2 – Oscilador harmônico com duas massas iguais e constantes de mola também iguais. Esse sistema pode ser visto como uma aproximação de uma célula unitária da cadeia trabalhada.	14
Figura 3.1 – Movimento do elétron ao redor do núcleo.	19
Figura 3.2 – Momento angular intrínseco do elétron.	20
Figura 3.3 – Interação de troca.	24
Figura 3.4 – Levitação diamagnética.	25
Figura 3.5 – Estrutura paramagnética.	26
Figura 3.6 – Estrutura ferromagnética.	27
Figura 3.7 – Estrutura antiferromagnética.	27
Figura 3.8 – Estrutura ferrimagnética.	28
Figura 4.1 – Cadeia de spins cíclica.	30
Figura 5.1 – Uma representação esquemática da cadeia diamante de spin $-\frac{1}{2}$ Ising-Heisenberg com acoplamento magnetoelástico. Os spins Ising σ_j estão localizados em posições rígidas na rede, enquanto os spins Heisenberg $S_{a,j}$ e $S_{b,j}$ vibram harmonicamente em uma direção perpendicular em relação ao eixo da cadeia.	37
Figura 5.2 – Uma especificação da célula unitária do diamante sob deformação geométrica através dos deslocamentos (a) e das interações de troca (b).	38
Figura 5.3 – Diagrama de fase no plano $J_z - h$ para $J_0 = -1, J_x = 1$ e: (a) - (b) $\kappa = 0,5, \theta = \pi/2$ e $k_H = \{25,50,200,1000\}$; (c) $\kappa = 0,5, k_H = 50$ e $\theta = \{2\pi/3, \pi/2, \pi/3, \pi/4, \pi/8\}$; (d) $\theta = \pi/3, k_H = 50$ e $\kappa = \{0.1,0.2,0.3,0.4,0.5\}$	46
Figura 5.4 – Entropia e Calor específico em função da temperatura.	52
Figura 5.5 – (a) A magnetização total por célula unitária em função da temperatura em uma escala semi-logarítmica para valores fixos de $\kappa = 0,5, J_0 = -1, J_x = 1, J_z = -1, \theta = \pi/2, h = 2$ e para quatro valores diferentes de $k_H = \{25,50,100,200\}$; (b) Um gráfico semi-logarítmico da suscetibilidade magnética pela temperatura (χT) para o mesmo conjunto de parâmetros usado na Fig. 5.5 (a) para a magnetização.	54

SUMÁRIO

1	Introdução	9
2	Pequenas Oscilações	13
3	Magnetismo	18
3.1	Momento Magnético Orbital	18
3.2	Momento Magnético de Spin	20
3.3	Momento Magnético Atômico	21
3.4	Magnetização	22
3.5	Susceptibilidade	23
3.6	Interação de troca (Exchange)	24
3.7	Tipos de comportamento magnético	25
4	Modelos de Baixa Dimensionalidade	29
4.1	Modelo de Ising	29
4.2	Matriz Transferência	32
4.3	Termodinâmica do Modelo	33
4.4	Modelo de Heisenberg	35
5	Resultados	37
5.1	Cadeia diamante Ising-Heisenberg com acoplamento magnetoelástico	37
5.1.1	Transformação canônica local	40
5.1.2	Diagonalização da parte magnetoelástica	41
5.1.3	Diagonalização da parte do fônon	43
5.2	Diagrama de fase no estado fundamental	45
5.3	Termodinâmica	49
6	Conclusão	55

1 INTRODUÇÃO

O magnetismo é um fenômeno que fascina o ser humano desde sua descoberta na Antiguidade Grega, embora haja relatos anteriores na China (TONIDANDEL; ARAÚJO; BOA-VENTURA, 2018). Diz-se que um pastor na região da Magnésia - vem daí o nome atual do minério magnetita - observou que havia um tipo de pedra que atraía outras do mesmo tipo e alguns metais. Desde então a curiosidade que este fenômeno gera possibilitou muitos avanços científicos, e os materiais magnéticos desenvolvidos movem um mercado bilionário. Porém, entre a descoberta da magnetita até as aplicações do magnetismo gerarem bilhões houve um longo percurso. A primeira aplicação conhecida é a bússola, embora muito antes tivesse sido inventado na China um aparelho semelhante em forma de colher (COEY, 2010).

Muitas pessoas tentaram explicar o magnetismo, e por muito tempo não houve qualquer explicação que poderia ser considerada "científica". Foi apenas no séc. XIX, por meio de cientistas como Ampère, Faraday, Oersted, Curie, etc. que começou-se a entender este fenômeno. No ano de 1873, Maxwell, em seu "Treatise on electricity and magnetism", sintetizou as quatro equações do eletromagnetismo (MAXWELL, 1873).

Já no século XX com o surgimento da teoria quântica e o interesse pelo mundo subatômico, possibilitaram o melhor entendimento do magnetismo. Nesse mesmo período houve a proposição dos primeiros modelos magnéticos, destacando-se os de Ising e Heisenberg, que estudamos nesse trabalho (COEY, 2010).

Há alguns anos o magnetismo em sistemas de baixa dimensionalidade vem se destacando, em parte devido aos materiais que vem surgindo desde então, com várias aplicações tecnológicas, que são usados para fabricar transistores, transmitir dados etc. e também por ser relativamente menos complicado encontrar as soluções analíticas (BAXTER, 2016).

As vibrações atômicas dos materiais cristalinos podem influenciar o ordenamento magnético e vice-versa. A aplicação de um campo magnético externo pode induzir deformações nas redes através das interações magnetoelásticas e conseqüentemente as propriedades magneto-termodinâmicas e materiais ferromagnéticos também poderão ser alteradas (HENRIQUES; SALINAS, 1987; MASSIMINO; DIEP, 2000; BOUBCHEUR; MASSIMINO; DIEP, 2001). Um estudo termodinâmico rigoroso dos cristais magnéticos envolvendo suas propriedades magnéticas, vibracionais e elásticas ainda permanece um problema desafiador de interesse da pesquisa atual devido a dificuldades computacionais decorrentes de um acoplamento mútuo dos graus de liberdade da parte magnética e da rede, através da interação magnetoelástica.

As mudanças magnetoelásticas são tipicamente muito pequenas, a taxa de deformação é, por exemplo, de ordem entre 10^{-5} e 10^{-4} para ligas a base de *Fe*-, *Ni*- e *Co*-, embora alguns materiais específicos, como $Tb_{0.3}Dy_{0.7}Fe_{1.9}$ pode exibir grandes alterações magnetoelásticas com medidas de taxa de deformação de 10^{-3} (ARMSTRONG, 1997). Um novo tipo de magnetostricção foi encontrado nos materiais posteriormente chamadas de ligas ferromagnéticas com memória de forma, como Ni_2MnGa (TICKLE et al., 1999).

O efeito do acoplamento magnetoelástico foi previamente investigado em uma classe de modelos Ising mistos de spin- $(1/2, S)$ em redes planares decoradas (STREČKA; ROJAS; SOUZA, 2012; STREČKA et al., 2019). Os graus de liberdade magnéticos e da rede foram, neste caso particular, foram desacoplando através da transformação canônica local (ENTING, 1973), a qual deu origem a uma interação efetiva de primeiros vizinhos para o caso de spin $S = 1/2$ (STREČKA; ROJAS; SOUZA, 2012) ou a uma interação efetiva de três sítios com quatro spins mais uma anisotropia uniaxial de um único íon para o caso de spin $S > 1/2$ (STREČKA et al., 2019). Tem sido evidenciado que o acoplamento magnetoelástico impõe uma frustração de spin notável nos átomos de decoração, o que tem sido amplamente analisado em redes de Ising de spins mistos com a interação de três sítios com quatro spins em redes decoradas planares (JAŠČUR et al., 2016; ŠTUBŇA; JAŠČUR, 2017) com a ajuda de mapeamentos (transformações) exatas (FISHER, 1959; ESSAM; DOMB; GREEN, 1972; ROJAS; VALVERDE; SOUZA, 2009; STREČKA, 2010; ROJAS; SOUZA, 2011).

Por outro lado, o comportamento magnético das redes unidimensionais chamou atenção devido a influência da compressibilidade da rede. No início dos anos sessenta, Mattis e Schultz (MATTIS; SCHULTZ, 1963) apresentaram uma solução exata para o modelo de Ising compressível com condição de contorno livre e concluíram que não há efeito devido ao acoplamento spin-rede. Posteriormente Enting (ENTING, 1973) considerou a condição de contorno periódica e verificou que a Hamiltoniana efetiva do spin é equivalente a uma cadeia Ising rígida com interações de primeiro e segundo vizinhos. Salinas (SALINAS, 1973) obteve a energia livre da cadeia Ising compressível sujeita a forças fixas por uma transformação padrão de Legendre, que a relaciona à energia livre da cadeia Ising compressível confinada em um comprimento fixo. No início dos anos 80, Knežević e Milošević (KNEZEVIC; MILOSEVIC, 1980) consideraram a cadeia Ising compressível com valores de spin mais altos $S = 1$ e $S = 3/2$, que podem ser mapeados para uma Hamiltoniana efetiva de spin rígido, com uma interação biquadrática adicional.

Mais recentemente, vários aspectos das cadeias de spins compressíveis foram investigados, como por exemplo, o efeito de dois campos independentes na cadeia Ising compressível (LEMOS et al., 2019), propriedades termodinâmicas do modelo de Ising, levando em consideração os graus de liberdade elástico e vibracional (BALCERZAK; SZAŁOWSKI, 2020) e as propriedades magnetocalóricas da cadeia Ising (QI et al., 2016). A contribuição seminal neste campo de estudo foi feita por Derzhko e colaboradores ao resolver rigorosamente um conjunto de quatro modelos de cadeias de spin deformáveis (DERZHKO; STREČKA; GÁLISOVÁ, 2013). Entre outros assuntos, Derzhko *et al.* provaram que a compressibilidade (inversa) da cadeia Ising em um campo longitudinal e a cadeia XX quântica em um campo transversal mostra um salto repentino na transição de fase quântica acionada por campo, enquanto diminui gradualmente perto de pontos críticos quânticos da cadeia Ising em um campo transversal e a cadeia Ising-Heisenberg (DERZHKO; STREČKA; GÁLISOVÁ, 2013).

Ultimamente, diferentes versões das cadeias diamante Ising-Heisenberg têm proporcionado um playground útil, cheio de características intrigantes e descobertas inesperadas, como por exemplo a existência de platôs de magnetização intermediários (LISNYI; STREČKA, 2016; ANANIKIAN; STREČKA; HOVHANNISYAN, 2014), expoente e superestabilidade de Lyapunov (ANANIKIAN; HOVHANNISYAN, 2013), não conservação da magnetização e estados fundamentais *gelo e fogo* (TORRICO; OHANYAN; ROJAS, 2018), efeito magnetocalórico pronunciado (GÁLISOVÁ, 2013), comportamento pseudo-crítico imitando uma transição de fase (SOUZA; ROJAS, 2018; GÁLISOVÁ; STREČKA, 2015; TORRICO et al., 2016; CARVALHO, 2018) ou a pseudo-universalidade (ROJAS et al., 2019). Mais importante ainda, Derzhko e colaboradores (DERZHKO et al., 2015) evidenciaram de forma convincente que a solução exata para a cadeia de diamante de Ising-Heisenberg pode ser usada como um ponto de partida útil para o tratamento perturbativo do modelo homólogo completo de Heisenberg. Foi demonstrado que esse tipo de teoria da perturbação de muitos corpos pode até trazer informações sobre estados quânticos exóticos, como um líquido quântico de spin não capturado pelo modelo original de Ising-Heisenberg (DERZHKO et al., 2015).

Além disso, o efeito magnetoelástico tem sido muito utilizado na construção de sensores, com as mais diversas aplicações, que incluem desde detecção de doenças a caracterização de materiais (ROMBALDI, 2019), (TORMES et al.,), (FELIZARI, 2016).

Tendo tudo isso em vista, com este trabalho, objetiva-se estudar o magnetismo e os diversos efeitos gerados na associação das partes mecânica e a magnética na rede tipo diamante de spin $1/2$ Ising-Heisenberg XXZ.

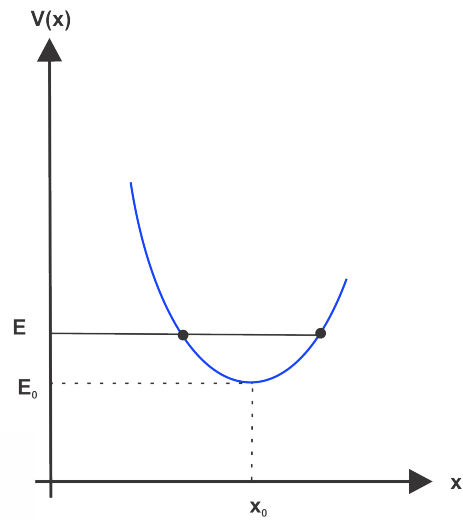
Esta dissertação está organizado da seguinte maneira. Os Capítulos 2 a 4 temos um referencial teórico, abordando pequenas oscilações, magnetismo, o modelo de Ising e a matriz transferência, e o modelo de Heisenberg. No Capítulo 5 temos os resultados originais da dissertação. A Seção 5.1 é dedicada a uma definição e solução da cadeia diamante Ising-Heisenberg spin- $1/2$ com o caráter vibratório dos dímeros Heisenberg. O diagrama de fases do estado fundamental em função da rigidez da mola, constante magnetoelástica e estrutura geométrica são exploradas na Seção 5.2. Na Seção 5.3 apresentamos a termodinâmica do modelo, onde a magnetização, a entropia e o calor específico são analisados em detalhes. Finalmente, nossas conclusões são relatadas no Capítulo 6.

2 PEQUENAS OSCILAÇÕES

Movimentos oscilatórios estão presentes em diversos fenômenos e situações do cotidiano. Para citar alguns temos os pêndulos, as cordas de instrumentos musicais, circuitos com corrente elétrica alternada, etc. (NUSSENZVEIG, 2018). O oscilador harmônico é um dos problemas mais importantes da física (WATARI, 2004), visto que com ele é possível modelar diversas situações de forma aproximada. Um desses casos, que é de especial interesse nesse trabalho, é o estudo de moléculas. Uma boa forma de obter uma medida da agitação térmica ou da energia cinética *média* dos átomos e moléculas é a temperatura absoluta. Temperatura termodinâmica é um outro nome dado a temperatura absoluta, o conceito consiste em medir a temperatura em uma escala que comece em zero, a escala absoluta mais conhecida é a Kelvin (K). Próximo ao zero absoluto ($T = 0\text{K}$) o movimento térmico arrefece e os átomos estão em seu menor estado de energia, ou seja, quanto menor a temperatura, menor é o grau de agitação (BLUNDELL; BLUNDELL, 2009).

Neste trabalho consideramos temperaturas muito baixas, próximas ao zero absoluto. Dessa forma, podemos considerar as vibrações, mencionadas no Capítulo 1, como pequenas oscilações. Em sistemas conservativos, ao deslocá-lo ligeiramente da sua posição de equilíbrio estável, ele experimenta oscilações. O que ocasiona a oscilação são as forças restauradoras. O trabalho dessas forças pode ser positivo, quando transformam energia potencial em energia cinética, ou negativo, ao transformar energia cinética de volta em energia potencial. Quando o sistema não está muito longe do equilíbrio, existe uma relação de proporcionalidade entre o deslocamento x e a força restauradora F ($F = -kx$). Este é o chamado oscilador harmônico simples. No caso unidimensional, se a energia potencial passa por um mínimo num certo ponto x_0 , Figura 2.1, esse ponto x_0 é um ponto de equilíbrio da partícula e se a energia da partícula for um pouco maior que a energia potencial no ponto de equilíbrio x_0 , então a partícula executará pequenas oscilações em torno da posição de equilíbrio.

Figura 2.1 – Esquemática de ponto de equilíbrio.

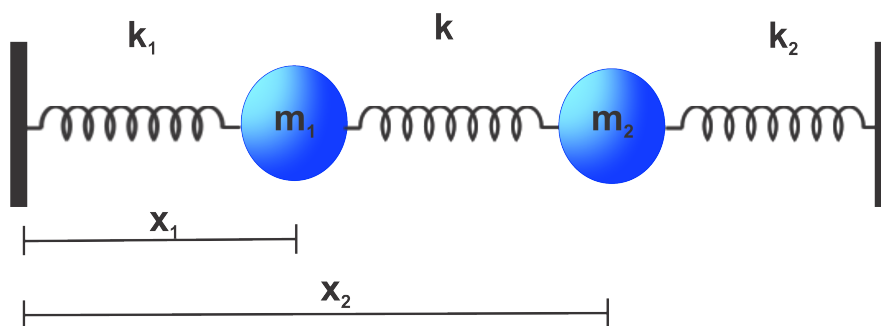


Fonte: Autora (2020).

Sistema massa-mola

O modelo da Figura 2.2 pode representar uma molécula diatômica. Também é uma boa representação de uma célula da cadeia com que trabalhamos. Consideremos que as massas m_1 e m_2 representam as partículas com spins tipo Heisenberg, que são livres para se mover, as paredes representam partículas com spins tipo Ising que são rígidos, e, por fim, as molas representam as ligações entre eles.

Figura 2.2 – Oscilador harmônico com duas massas iguais e constantes de mola também iguais. Esse sistema pode ser visto como uma aproximação de uma célula unitária da cadeia trabalhada.



Fonte: Autora (2020).

O Hamiltoniano \mathcal{H} representa a energia do sistema, sendo construído a partir da soma da energia cinética e da energia potencial, nesse caso temos energia potencial elástica, portanto o Hamiltoniano desse sistema é dado por

$$\mathcal{H} = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + \frac{1}{2}(k+k_1)x_1^2 + \frac{1}{2}(k+k_2)x_2^2 - kx_1x_2, \quad (2.1)$$

os termos cruzados representam a interação do sistema, e se essa interação for desligada, ou seja, se fizermos $k = 0$, o Hamiltoniano será o mesmo de dois osciladores independentes. A partir do Hamiltoniano podemos obter as equações de movimento,

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_1} = -\dot{p}_1 = -m_1\ddot{x}_1 = (k+k_1)x_1 - kx_2, \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_2} = -\dot{p}_2 = -m_2\ddot{x}_2 = (k+k_2)x_2 - kx_1, \quad (2.3)$$

onde \mathcal{H} é o Hamiltoniano (2.1), p_1 , p_2 , \dot{p}_1 e \dot{p}_2 são os momentos das partículas 1 e 2 e suas derivadas, x_1 , x_2 , \dot{x}_1 e \dot{x}_2 são seus deslocamentos e suas derivadas, k , k_1 e k_2 são as constantes das molas.

Reescrevendo as equações (2.2) e (2.3) na forma matricial:

$$\begin{pmatrix} \ddot{x}_1 \\ \ddot{x}_2 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \frac{(k+k_1)}{m_1} & \frac{-k}{m_1} \\ \frac{-k}{m_2} & \frac{(k+k_2)}{m_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}. \quad (2.4)$$

De forma simplificada:

$$\ddot{R} = -\tilde{A}R, \quad (2.5)$$

onde $\tilde{A} = \begin{pmatrix} \frac{(k+k_1)}{m_1} & \frac{-k}{m_1} \\ \frac{-k}{m_2} & \frac{(k+k_2)}{m_2} \end{pmatrix}$, R e \ddot{R} são as matrizes coluna $\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$ e $\begin{pmatrix} \ddot{x}_1 \\ \ddot{x}_2 \end{pmatrix}$, respectivamente.

A equação (2.5) tem a mesma forma de um oscilador harmônico simples, $F = -kx$. Portanto, tem soluções do tipo:

$$x = A \sin(\omega t) + B \cos(\omega t), \quad (2.6)$$

$$R = X e^{i\omega t}, \quad (2.7)$$

em que A e B são coeficientes. Ao substituirmos (2.7) em (2.5), temos

$$X \omega^2 = \tilde{A} X. \quad (2.8)$$

Esta é uma equação de autovalores, sendo assim pode-se usar

$$\det | \tilde{A} - \mathbb{1} \omega^2 | = 0, \quad (2.9)$$

de onde segue

$$\begin{vmatrix} \frac{(k+k_1)}{m_1} - \omega^2 & \frac{-k}{m_1} \\ \frac{-k}{m_2} & \frac{(k+k_2)}{m_2} - \omega^2 \end{vmatrix} = 0.$$

Supondo que as massas são iguais $m_1 = m_2 = m$, e também que as constantes das molas sejam iguais $k_1 = k_2 = k$, temos que

$$\begin{vmatrix} \frac{(2k)}{m} - \omega^2 & \frac{-k}{m} \\ \frac{-k}{m} & \frac{(2k)}{m} - \omega^2 \end{vmatrix} = 0.$$

Calculando este determinante, encontra-se as quatro raízes:

$$\omega_1 = \pm \sqrt{\frac{3k}{m}}, \quad (2.10)$$

$$\omega_2 = \pm \sqrt{\frac{k}{m}}. \quad (2.11)$$

Como a equação de autovalores (2.8) só depende de ω^2 e não de ω , apenas duas raízes são fisicamente distinguíveis. Substituindo ω_1 na equação (2.8) para encontrar o primeiro autovetor, temos

$$\begin{pmatrix} \frac{2k}{m} - \omega^2 & \frac{-k}{m} \\ \frac{-k}{m} & \frac{2k}{m} - \omega^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \left(\sqrt{\frac{3k}{m}} \right)^2 \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

Resolvendo (2.12), encontramos

$$X^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad (2.13)$$

substituindo ω_2 na equação (2.8) encontra-se o segundo autovetor:

$$X^2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.14)$$

A primeira solução apresenta as duas massas oscilando com uma defasagem π e frequência $\omega_1 = \sqrt{\frac{3k}{m}}$. Enquanto que a segunda solução tem uma defasagem 0 e frequência $\omega_2 = \sqrt{\frac{k}{m}}$.

Estes são os chamados modos normais de vibração do sistema em que ω_1 e ω_2 são as frequências do sistema. Esses modos são linearmente independentes e qualquer movimento de m_1 e m_2 pode ser descrito por uma superposição destes modos normais. E quando o sistema se move em um destes modos ele se comporta como um oscilador simples.

Um sistema com N graus de liberdade possui, no máximo, N modos normais de vibração; no caso duas partículas, dois modos normais de vibração.

3 MAGNETISMO

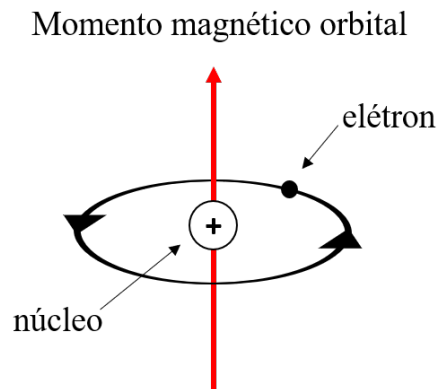
Como citado no Capítulo 1, o magnetismo atrai atenção há milênios. Durante muito tempo questionou-se como tal fenômeno ocorreria. Hoje sabemos que as propriedades magnéticas dos materiais têm sua origem na estrutura eletrônica dos átomos. Com o desenvolvimento do estudo da estrutura do átomo e descoberta das partículas foi possível determinar que o elétron é a entidade responsável pelo magnetismo das partículas elementares. O elétron ao entrar em movimento dá origem ao momento magnético ou momento de dipolo, e torna-se um pequeno magneto. Sendo assim, todo material tem o magnetismo como uma propriedade básica, ou seja, toda substância em qualquer estado da matéria, sólido, líquido ou gasoso, em qualquer temperatura, possui alguma característica magnética, já que esta é relacionada à carga elétrica em movimento. Podemos considerar que são, do ponto de vista clássico, basicamente dois movimentos, relacionados aos elétrons, que possibilitam explicar a origem dos momentos magnéticos: o momento angular orbital do elétron, e o momento angular do “spin” do elétron.

Quando uma camada eletrônica está completa, a soma de seus momentos magnéticos é igual a zero, dessa forma, apenas camadas incompletas contribuem para a magnetização (LOPES, 2017), o que pode ser observado na Figura 3.3. O magnetismo é muito estudado por grupos teóricos e experimentais nas mais diversas abordagens, visando maior entendimento do fenômeno e também suas aplicações que gera uma movimentação de grande quantidade de dinheiro todos os anos. Quanto a possibilidade ou o tipo de aplicação tecnológica que um material magnético pode ter depende diretamente da resposta que esse material dá quando um campo magnético é aplicado (3.7). Neste Capítulo serão abordados conceitos básicos concernentes à magnetização dos materiais.

3.1 Momento Magnético Orbital

O momento magnético orbital está relacionado ao movimento translacional do elétron em torno do núcleo, como pode ser visto na Figura 3.1. Tal movimento provoca o surgimento de uma corrente elétrica, que dá origem a um campo magnético de direção perpendicular ao movimento do elétron. O campo originado é o mesmo do dipolo magnético (FERREIRA, 2018). Para que haja um momento magnético não nulo, os momentos dependem que a camada eletrônica esteja incompleta (BLUNDELL, 2003).

Figura 3.1 – Movimento do elétron ao redor do núcleo.



Fonte: Autora (2020)

O momento magnético orbital de um átomo é dado pela soma dos momentos angulares orbitais de todos os seus elétrons, ou seja, através dessa soma podemos obter as propriedades magnéticas macroscópicas de um determinado material:

$$\vec{\mu}_l = \sum_1 \vec{L}. \quad (3.1)$$

Um elétron de momento angular orbital \vec{L} tem um momento magnético $\vec{\mu}$ associado:

$$\vec{\mu}_l = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}, \quad (3.2)$$

onde $\vec{\mu}_l$ é o momento magnético orbital, m_e é a massa do elétron, e é o módulo da carga do elétron, \vec{L} é o momento angular orbital. Tem-se que $\vec{\mu}_l$ e \vec{L} são proporcionais mas em sentidos opostos. Sabemos, pela teoria quântica, que a componente orbital do momento angular do elétron em uma determinada direção é quantizada em termos de $n\hbar$, com $n = 1, 2, 3, \dots$. Se escolhermos uma direção, por exemplo z , o menor valor de \vec{L} associado à esta direção é $L_z = \hbar$ (BLUNDELL, 2003). O menor valor do módulo de $\vec{\mu}_l$ é definido a partir deste resultado, é o chamado magneton de Bohr. Ele é dado por

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}, \quad (3.3)$$

em outras palavras o magneton de Bohr é o quantum de momento magnético para o elétron e seu valor é $\mu_B = 9,27 \times 10^{-24} \text{ A.m}^2$.

A equação (3.2) pode ser reescrita em função do fator g de Landé, ou fator giromagnético, da forma

$$\vec{\mu}_l = g\vec{L}, \quad (3.4)$$

onde, para o elétron, $g = 2,0023$.

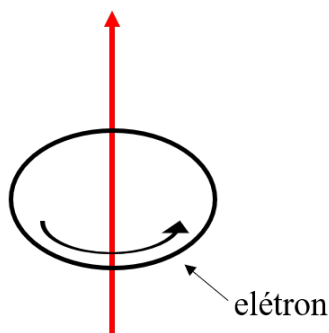
Um fator g é uma quantidade adimensional ligada ao momento magnético e ao momento angular de um átomo ou partícula, estabelece uma proporcionalidade entre o momento magnético observado de uma dada partícula com o seu número quântico de momento angular e também uma unidade de momento magnético, para garantir a adimensionalidade, no caso usamos o magneton de Bohr. O fator de Landé é um exemplo, é chamado assim em homenagem a Alfred Landé, o primeiro a descrevê-lo no ano de 1921.

3.2 Momento Magnético de Spin

Esta grandeza está associada a partículas elementares, como por exemplo o elétron, que possuem spin ou momento angular intrínseco veja a Figura 3.2. É uma propriedade intrínseca e exclusivamente quântica, sem nenhum análogo clássico. Em termos do magneton de Bohr, citado na seção 3.1, podemos escrever que o momento magnético de spin é $\pm\mu_B$.

Figura 3.2 – Momento angular intrínseco do elétron.

Momento magnético de spin



Fonte: Autora (2020)

Ao aplicar-se um campo magnético podemos obter duas respostas, usualmente *up* e *down*, indicando as duas orientações distintas. Este resultado foi obtido inicialmente por Otto Stern e Walther Gerlach, quando chegaram a importante constatação de que o momento angular de um átomo é quantizado (GERLACH; STERN, 1922). O momento magnético de spin é dado por

$$\vec{\mu}_s = -\frac{e}{2m_e}\vec{S}, \quad (3.5)$$

onde podemos ver que $\vec{\mu}_s$ e \vec{S} são proporcionais mas em sentido oposto.

As componentes do operador \vec{S}_α podem ser escritas em termos de $S_\alpha = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}_\alpha$, em que:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.6)$$

Estas são as chamadas matrizes de Pauli. Em mecânica quântica cada uma das três matrizes de Pauli está ligada a um operador de momento angular, que por sua vez corresponde a um observável que descreve o spin de uma dada partícula com spin $\frac{1}{2}$ em todas as direções do espaço tridimensional.

3.3 Momento Magnético Atômico

O momento magnético atômico, momento magnético total ou acoplamento spin-órbita de um sistema é a soma entre o momento orbital e o momento intrínseco dos elétrons, visto que estes são os principais responsáveis pelo magnetismo dos átomos (GRIFFITHS, 2005). Assim podemos escrevê-lo da forma

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_l + \vec{\mu}_s = g\vec{L} + g\vec{S}, \quad (3.7)$$

à vista disso, a magnetização depende totalmente dos momentos magnéticos, podendo esses serem induzidos por um campo magnético externo ou não. Veremos nas próximas seções que alguns materiais, chamados ferromagnéticos, apresentam magnetização espontânea, mesmo sem a aplicação de um campo magnético externo (PEREIRA et al., 2008).

3.4 Magnetização

Ao aplicar um campo magnético externo em um determinado material, ele tende a alinhar os momentos magnéticos dos átomos deste material, neste caso ele pode ser dito como magnetizado. De forma que a sua resposta \vec{M} ao campo externo \vec{h} é

$$\vec{B} = \mu_0(\vec{M} + \vec{h}). \quad (3.8)$$

onde \vec{B} é a indução magnética e μ_0 é a permeabilidade magnética do vácuo. Em materiais paramagnéticos e ferromagnéticos (ver seção 3.7), \vec{M} e \vec{h} estão na mesma direção, nos diamagnéticos estão em direções opostas. Na maioria das vezes, para materiais paramagnéticos e diamagnéticos, a magnetização \vec{M} é proporcional ao campo magnético aplicado.

A magnetização, a nível microscópico, surge pela ordenação dos momentos magnéticos atômicos, como falado anteriormente, sendo definida como a quantidade de momentos magnéticos por unidade de volume do material (OLIVEIRA; JESUS, 2005)

$$\vec{M} = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta V} \sum_{\{i\}} \vec{\mu}_i. \quad (3.9)$$

É possível calculá-la também por meio da energia livre de Helmholtz f de um sistema

$$M = -\frac{\partial f}{\partial h}, \quad (3.10)$$

onde h é o campo magnético aplicado.

Para que haja magnetização é necessário que os momentos magnéticos estejam, na média, apontando para a mesma direção; para que isto ocorra é preciso que haja um campo magnético atuando no sistema e/ou se a temperatura for suficientemente baixa (OLIVEIRA; JESUS, 2005).

Cada material tem um dado limite de temperatura que, se atingido, ele deixa de ser magneticamente ordenado. Esta temperatura é chamada temperatura crítica, T_c . A do ferro, por exemplo, é de cerca de 1000K.

3.5 Susceptibilidade

A susceptibilidade é uma grandeza adimensional que quantifica qual a parcela de um material pode ser magnetizado quando submetido a um campo magnético externo, ou seja, descreve o comportamento da magnetização em função do campo aplicado, e é muito usada para classificar as propriedades magnéticas

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial h} = -\frac{\partial^2 f}{\partial h^2}. \quad (3.11)$$

Em materiais diamagnéticos, por exemplo, a susceptibilidade é pequena e negativa. Em outros casos a susceptibilidade magnética varia com a intensidade de campo magnético, pois a relação entre magnetização e campo aplicado é não linear. Dependendo de alguns fatores como a origem microscópica de sua magnetização e interações internas, podemos classificar os materiais em uma das categorias (ver seção 3.7) listadas na Tabela ?? (COEY, 2010) (CARVALHO, 2018)

Tabela 3.1 – Susceptibilidade e comportamentos magnéticos.

Materiais	χ
Paramagnético	> 0
Diamagnético	< 0
Ferromagnético	$\gg 0$
Ferrimagnético	$\gg 0$
Antiferromagnético	> 0

Quando \vec{M} e \vec{h} são linearmente relacionados podemos escrever

$$\vec{M} = \chi \vec{h}, \quad (3.12)$$

nesses casos diz-se que o material teve uma resposta linear ao campo aplicado (OLIVEIRA; JESUS, 2005), e também podemos escrever

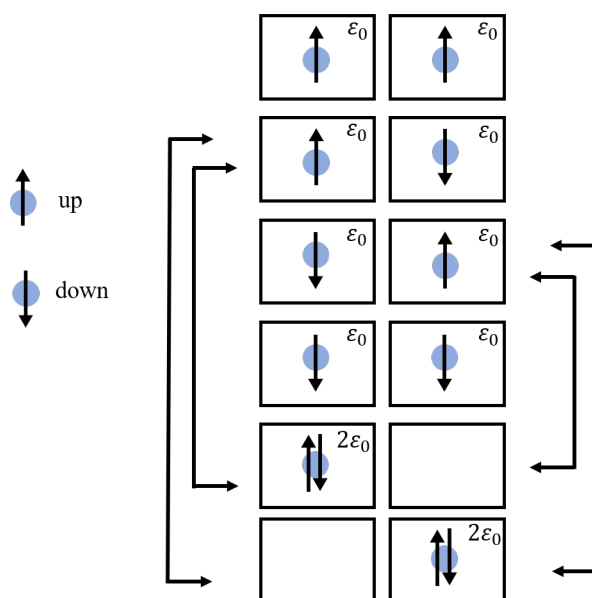
$$\vec{B} = \mu_0(1 + \chi)\vec{h}, \quad (3.13)$$

onde $(1 + \chi)$ é a permeabilidade relativa, que é a razão entre a permeabilidade absoluta do material e a permeabilidade do vácuo μ_0 .

3.6 Interação de troca (Exchange)

Outro conceito importante para este trabalho é a interação de troca, também é exclusivamente quântico, é decorrente do princípio de exclusão de Pauli, que nos diz que dois férmions idênticos não podem ocupar um mesmo estado quântico, ou seja, devem ter spins contrários. Ele ocorre quando as funções de onda do mesmo átomo, com elétrons desemparelhados, se sobrepõem. A sobreposição de orbitais atômicos parcialmente localizados é o principal mecanismo da interação de troca em metais, ferromagnéticos e antiferromagnéticos. A interação de troca também ocorre pela interação de elétrons puramente deslocalizados ou de elétrons localizados e deslocalizados no metal (COEY, 2010).

Figura 3.3 – Interação de troca.



Fonte: Autora (2020) adaptado de (FERREIRA, 2018)

Os spins alinhados paralelamente não podem ocupar o mesmo orbital atômico. Neste caso os dois não podem realizar a *hopping*, ou seja, um saltar para o orbital do outro. O mesmo não ocorre se os spins estiverem alinhados antiparalelamente. A figura 3.3 ilustra essas afirmações. Para a maioria dos materiais magnéticos o estado de menos energia ocorre quando o alinhamento é antiparalelo, originando materiais antiferromagnéticos. Para alguns outros ocorre o oposto, o estado de menor energia é quando o alinhamento é paralelo, originando materiais ferromagnéticos. Por isso, os materiais antiferromagnéticos são mais comuns na natureza.

3.7 Tipos de comportamento magnético

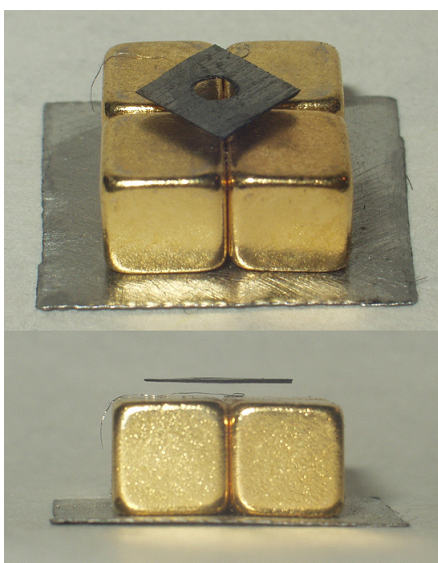
Quando se fala em magnetismo a maioria das pessoas tem em mente os materiais ferromagnéticos, no entanto essa não é a única forma que o fenômeno se apresenta. Nessa seção serão apresentados os principais tipos de comportamentos magnéticos conhecidos.

- **Diamagnetismo**

Um material diamagnético possui magnetização nula na ausência de um campo magnético em temperatura finita e são repelidos na presença de campo magnético. Seu efeito só é observado enquanto o campo magnético externo é aplicado, quando os momentos se alinham na direção oposta à do campo aplicado. Na figura 3.4 vemos a manifestação desse efeito.

É um efeito quântico existente em todos os materiais que têm cargas em movimento quando sujeitos a um campo externo ou a sua variação; porém é muito fraco, o tipo mais fraco de resposta magnética e não é notado se o material possui outras propriedades magnéticas. Os dipolos elementares não são permanentes, sendo que esses materiais não são afetados com a mudança de temperatura e o valor da sua susceptibilidade magnética é tipicamente próximo de milionésimo 10^{-6} e é sempre negativo.

Figura 3.4 – Levitação diamagnética.

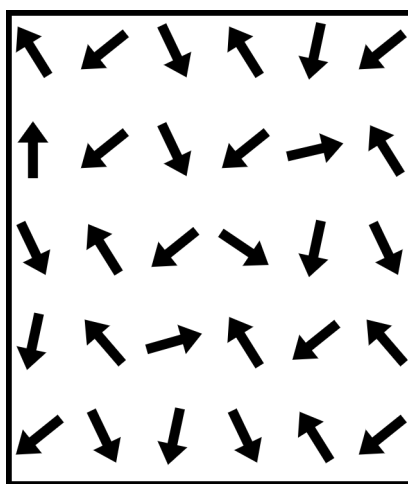


Fonte: https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/c/c9/Diamagnetic_graphite_levitation.jpg

- **Paramagnetismo**

Nos materiais paramagnéticos (Figura 3.5) a uma temperatura finita seus spins apresentam uma disposição aleatória, devido à agitação térmica, resultando em um momento de dipolo médio nulo. A magnetização é nula na ausência de campo magnético externo. O valor da susceptibilidade é pequeno e positivo. Se for aplicado um campo magnético externo em um material paramagnético, os momentos magnéticos tendem a se alinhar a este, porém o alinhamento deve competir com a agitação térmica.

Figura 3.5 – Estrutura paramagnética.



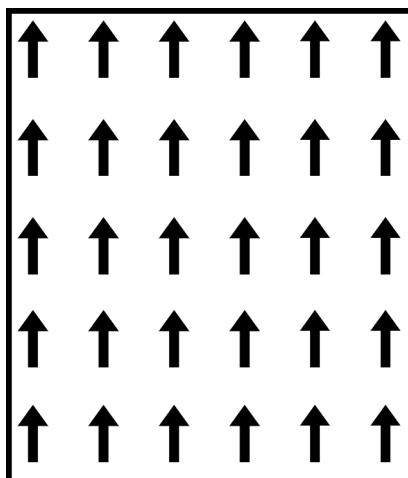
Fonte: Autora (2020)

- **Ferromagnetismo**

Neste tipo de material os momentos magnéticos estão orientados paralelamente entre si, na mesma direção e sentido, como pode ser visto na Figura 3.6. A magnetização é espontânea abaixo da temperatura de Curie e não cessa na ausência do campo magnético externo. Acima da temperatura crítica, esses materiais têm uma dependência linear entre a susceptibilidade e o inverso da temperatura, obedecendo a lei de Curie-Weiss. Ao aumentar a temperatura o alinhamento dos spins é modificado devido à agitação térmica, até que atinja um valor crítico que resulta no anulamento da magnetização espontânea; é quando ocorre a transição de fase de ordem ferromagnética para a paramagnética.

As substâncias ferromagnéticas possuem um momento magnético espontâneo, o que significa que ele não muda mesmo na ausência de campo magnético aplicado.

Figura 3.6 – Estrutura ferromagnética.

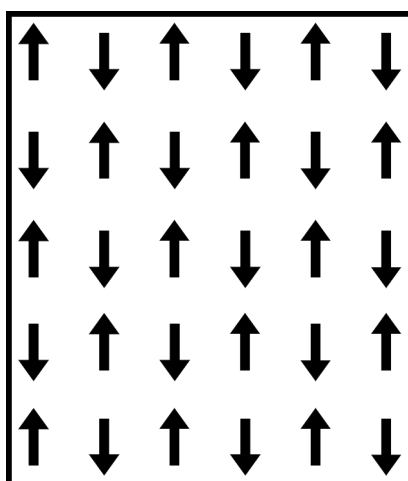


Fonte: Autora (2020)

- **Antiferromagnetismo**

Nos materiais antiferromagnéticos existem regiões onde os momentos estão na mesma direção, mas em sentidos opostos (alinhamento antiparalelo) em pares, tornando a magnetização por sítio nula, ou seja, não há um momento magnético total líquido se não houver a aplicação de um campo externo, ainda que as interações entre seus spins sejam fortes. Uma esquematização pode ser vista na Figura 3.7.

Figura 3.7 – Estrutura antiferromagnética.

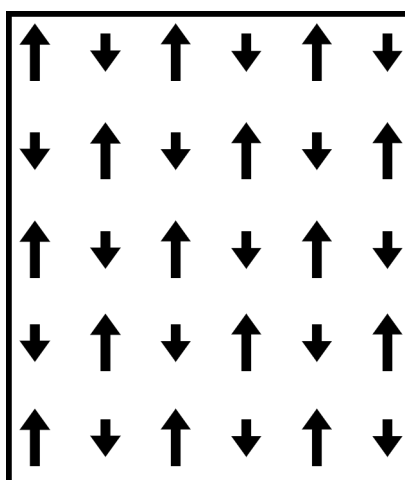


Fonte: Autora (2020)

- **Ferrimagnetismo**

O comportamento dos materiais ferrimagnéticos é de certa forma semelhante aos materiais ferromagnéticos por terem magnetização espontânea, abaixo de temperaturas críticas, mesmo na ausência de campo magnético externo. Os momentos magnéticos estão alinhados antiparalelamente, porém a magnetização por sítio é não nula, ainda que menor que no caso ferromagnético, como pode ser visto na Figura 3.8.

Figura 3.8 – Estrutura ferrimagnética.



Fonte: Autora (2020)

Em resumo, nos materiais diamagnéticos o campo de magnetização opõe-se ao campo aplicado e desaparece quando o campo é retirado, alguns exemplos são zinco, cobre e estanho. Nos ferromagnéticos a susceptibilidade é grande e a magnetização não desaparece quando o campo é retirado, ferro, níquel e cobalto são exemplos de materiais ferromagnéticos. Em materiais paramagnéticos como o alumínio, platina e titânio a magnetização desaparece quando cessa a aplicação do campo. Ferrites, magnetites são exemplos de materiais ferrimagnéticos, nesses materiais sempre haverá um momento resultante.

Podemos também classificar estes comportamentos magnéticos em relação à magnitude da magnetização \vec{M} . Nessa classificação são considerados de intensidade fraca o diamagnetismo, o antiferromagnetismo e o paramagnetismo, e são considerados de forte intensidade o ferromagnetismo e o ferrimagnetismo.

4 MODELOS DE BAIXA DIMENSIONALIDADE

4.1 Modelo de Ising

Ernst Ising estudou em seu doutorado um modelo proposto por seu orientador Wilhelm Lenz (LENZ, 1920), cujo objetivo era estudar uma cadeia linear de spins que poderiam assumir apenas os estados *up* e *down*, em que a posição de cada spin influencia na posição de seus vizinhos, conectados pelas interações com os spins mais próximos. A motivação era estudar o fenômeno do ferromagnetismo, Ising queria encontrar uma transição de fase para poder explicar estatisticamente o magnetismo natural dos ímãs, pois até aquele momento não havia qualquer indicação se o fenômeno era resultante da estatística do problema ou de alguma propriedade atômica desconhecida (ISING et al., 2017). Em sua tese publicada em 1924 Ising resolveu o caso unidimensional, ele concluiu que não haveria transição de fase em qualquer dimensão, tal conclusão o frustrou, porém mais tarde provou-se não ser verdade, a transição de fase ocorre para duas ou mais dimensões, e ainda no caso unidimensional há transição no zero absoluto (ISING et al., 2017).

O químico norueguês Lars Onsager - ganhador do Nobel em 1968 - resolveu o modelo de Ising bidimensional sem campo magnético em 1944, e em 1949 anunciou a fórmula para a magnetização espontânea para o mesmo modelo (ONSAGER, 1944).

Apesar de existirem soluções matemáticas para os casos uni e bidimensional, o pesquisador Sorin Istrail da Brown University, à época ligado ao Sandia National Laboratories, mostrou que a solução do modelo de Ising não pode ser estendida a três dimensões para qualquer rede, e assim soluções exatas para três ou mais dimensões não existem (ISTRAIL, 2000).

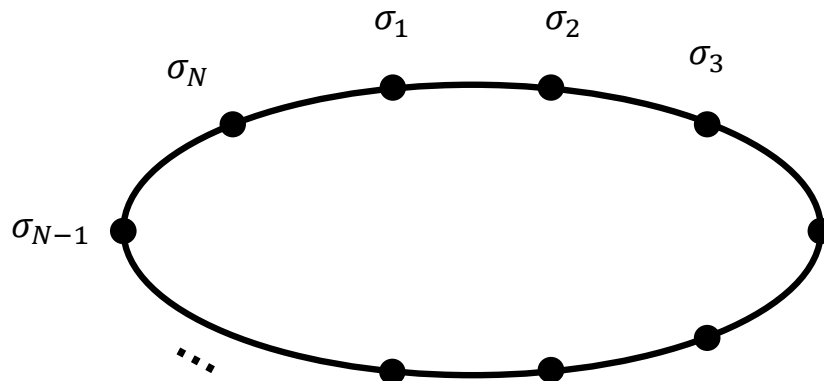
Foi apenas em 1949 que Ising tomou conhecimento da importância e abrangência de seu trabalho. Atualmente cerca de 800 artigos relacionados a este modelo são publicados todos os anos nas mais variadas áreas, como a própria física, economia, redes neurais, enovelamento de proteínas, comportamento flocking, criminalística entre outras (SILVA, 2003; ALVES, 1999; TEIXEIRA, 2018; JÚNIOR, 2014; ZHOU; SORNETTE, 2007; MUÑOZ, 2001).

O modelo de Ising quantifica a transição de fase entre o ferromagnetismo e o antiferromagnetismo, esta ocorre na temperatura crítica. A interação entre os spins se dá através da interação de troca (exchange) J , a energia de interação. Como essa energia diminui com a distância, neste trabalho somente as interações com primeiros vizinhos são consideradas.

O modelo de Ising unidimensional trabalhado aqui considera cadeias de spins cíclicas, em que $\sigma_{N+1} = \sigma_1$, veja a Figura 4.1, e é descrito matematicamente na presença de um campo magnético externo como evidenciado no Hamiltoniano abaixo, e assumem apenas os valores 1 e -1 (BARBOZA, 2017):

$$\mathcal{H} = - \sum_{i=1}^N \left(\sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{h}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right), \quad (4.1)$$

Figura 4.1 – Cadeia de spins cíclica.



Fonte: Autora (2020).

em que J é o termo de interação entre os spins, também é chamado de interação de troca (exchange).

É possível descrever o papel de cada termo do Hamiltoniano da equação (4.1). A primeira parte indica quando a energia do sistema é máxima, os spins dos átomos vizinhos estão alinhados paralelamente, ou mínima, quando os spins dos átomos vizinhos estão alinhados antiparalelamente. No primeiro caso, J é positivo e é propício ao ferromagnetismo, no segundo caso J é negativo e favorece o antiferromagnetismo, quando J é nulo não há interação. Na segunda parte temos a constante h , que é o campo magnético externo, a qual tem a função de descrever o diamagnetismo para h negativo ou o paramagnetismo para h positivo (BARBOZA, 2017; PEREIRA et al., 2008).

Para estudar a termodinâmica do modelo de Ising unidimensional é necessário obtermos sua função de partição (SALINAS, 1997), dada por

$$Z_N = Z(\beta, N, h) = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta \mathcal{H}}, \quad (4.2)$$

onde $\beta = \frac{1}{k_B T}$, k_B é a constante de Boltzmann, o hamiltoniano \mathcal{H} é dado por (4.1) e a soma é efetuada em todas as configurações possíveis das variáveis de spin. Assim, substituindo (4.2) em (4.1), temos

$$Z_N = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{\beta J \sigma_1 \sigma_2 + \frac{\beta h}{2} (\sigma_1 + \sigma_2)} e^{\beta J \sigma_2 \sigma_3 + \frac{\beta h}{2} (\sigma_2 + \sigma_3)} \dots e^{\beta J \sigma_{N-1} \sigma_N + \frac{\beta h}{2} (\sigma_{N-1} + \sigma_N)} e^{\beta J \sigma_N \sigma_1 + \frac{\beta h}{2} (\sigma_N + \sigma_1)}. \quad (4.3)$$

onde foi usado a condição de contorno $\sigma_{N+1} = \sigma_1$. Assim, pode-se escrever a função de partição (4.3) de uma forma mais compacta, chegando a

$$Z_N = \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_N} \prod_{i=1}^N \mathbf{V}(\sigma_i, \sigma_{i+1}), \quad (4.4)$$

onde $\mathbf{V}(\sigma_i, \sigma_{i+1}) = e^{\beta J (\sigma_i \sigma_{i+1}) + \frac{\beta h}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1})}$, que nos dá os chamados pesos de Boltzmann. Pela mecânica estatística, em um sistema em equilíbrio térmico a probabilidade de que ocupe um estado com energia E é proporcional a $e^{-\frac{E}{k_B T}}$, em que T é a temperatura absoluta.

4.2 Matriz Transferência

Um método muito utilizado para resolver o modelo em questão (NETO, 2009; GRANDE, 2009; KAYA; TAMBAŞ, 2020), assim como diversos modelos em uma e duas dimensões com interações entre primeiros vizinhos, é a técnica da matriz transferência. Este método pode ser usado na análise de propagação de ondas de partículas quânticas, como o elétron, assim como ondas eletromagnéticas, elásticas e acústicas (MARKOŠ; SOUKOULIS, 2008). Ela é construída a partir dos pesos de Boltzmann, que são obtidos dos autoestados, permitindo escrever a função de partição em termos de seus autovalores. A ordem da matriz vai de acordo com o alcance da interação dos spins assim como o número de estados de cada variável de spin. Os pesos de Boltzmann são dados por

$$\mathbf{V}(\sigma_i, \sigma_{i+1}) = e^{\beta J(\sigma_i \sigma_{i+1}) + \frac{\beta h}{2}(\sigma_i + \sigma_{i+1})}. \quad (4.5)$$

A função de partição pode ser reescrita como

$$Z_N = \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_N} \prod_{i=1}^N \mathbf{V}(\sigma_i, \sigma_{i+1}) = \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_N} \prod_{i=1}^N e^{\beta J(\sigma_i \sigma_{i+1}) + \frac{\beta h}{2}(\sigma_i + \sigma_{i+1})} = \text{tr}(\mathbf{V}_N). \quad (4.6)$$

Considerando que $\sigma_i = \pm \frac{1}{2}$, as configurações possíveis para (σ_i, σ_{i+1}) , são $(1/2, 1/2)$, $(1/2, -1/2)$, $(-1/2, 1/2)$, $(-1/2, -1/2)$. Com isso a matriz transferência fica

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} e^{\frac{\beta J}{4} + \frac{\beta h}{2}} & e^{-\frac{\beta J}{4}} \\ e^{-\frac{\beta J}{4}} & e^{\frac{\beta J}{4} - \frac{\beta h}{2}} \end{pmatrix}.$$

Para uma matriz 2×2 , como é o caso, temos

$$Z_N = \text{tr}(\mathbf{V}_N) = \sum_{\{i\}} \lambda_i^N = \lambda_+^N + \lambda_-^N, \quad (4.7)$$

com λ_{\pm} sendo os autovalores da matriz transferência \mathbf{V} dados por

$$\lambda_{\pm} = e^{\frac{\beta J}{4}} \left[\cosh\left(\frac{\beta h}{2}\right) \pm \sqrt{\sinh^2\left(\frac{\beta h}{2}\right) + e^{-\frac{\beta J}{2}}} \right]. \quad (4.8)$$

A partir da obtenção dos autovalores é possível utilizar a equação da energia livre de Helmholtz para obter os resultados termodinâmicos e magnéticos do modelo em questão. Para N muito grande a função de partição dependerá apenas do maior autovalor de \mathbf{V} (SANTRA, 2013), ou seja

$$Z_N = \lambda_+^N \left[1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right], \quad (4.9)$$

como $\frac{\lambda_-}{\lambda_+} < 1$, então temos que $\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \rightarrow 0$ quando $N \rightarrow \infty$. Sendo assim temos

$$Z_N \approx \lambda_+^N, \quad (4.10)$$

onde λ_+ é dado pela equação (4.8), ou seja, a função de partição Z_N depende apenas do maior autovalor da matriz transferência.

4.3 Termodinâmica do Modelo

Energia livre de Helmholtz

Energia livre de Helmholtz é a denominação dada à porção de energia interna do sistema que pode ser utilizada na realização de trabalho, sendo dada por (BLUNDELL; BLUNDELL, 2009)

$$f = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{\beta N} \ln(Z_N) \right] = -k_B T \ln(\lambda_+) \quad (4.11)$$

onde Z_N é a função de partição de um sistema cuja cadeia tem N sítios. A partir do cálculo da energia livre de Helmholtz f podemos obter a maioria das propriedades termodinâmicas do sistema. Além disso a probabilidade de encontrar um sistema num dado nível com energia E é $\mathcal{P} = e^{-\beta \frac{E}{Z_N}}$. Geralmente f depende de diversos parâmetros, vamos assumir aqui a dependência da temperatura T e do campo magnético h .

Magnetização

Como vimos na seção 3.4 também podemos escrever a magnetização em função da energia livre de Helmholtz a temperatura constante como

$$M = - \left(\frac{\partial f}{\partial h} \right)_T. \quad (4.12)$$

Entropia

É associada à desordem do sistema e à porção de energia que não pode mais ser revertida em trabalho, ela define quais processos são reversíveis e quais são irreversíveis. Nos processos reversíveis a entropia é mantida constante; e nos processos irreversíveis há um aumento da entropia. uma observação importante é que o equilíbrio térmico é atingido quando o sistema chega ao estado de entropia máxima. De maneira geral é uma grandeza que fornece uma medida da quantidade de microestados possíveis para uma dada configuração do sistema. A entropia com campo h constante, em termos de f , é dada por

$$s = - \left(\frac{\partial f}{\partial T} \right)_h. \quad (4.13)$$

Calor Específico

O calor específico é uma medida da variação da temperatura em relação a quantidade de calor injetado em um sistema, e ele nunca é menor que zero. Temos a descrição de um calor específico medido (experimentalmente) a pressão contante C_P , e uma medida teórica feita a volume constante C_V , podemos calcular tanto C_P quanto C_V em termos da entropia:

$$C_P = T \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_P, \quad (4.14)$$

e

$$C_V = T \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_V, \quad (4.15)$$

também podemos obtê-lo em função da energia livre de Helmholtz f

$$C_V = -T \left(\frac{\partial^2 f}{\partial T^2} \right)_V. \quad (4.16)$$

4.4 Modelo de Heisenberg

O objetivo de Ising com seu modelo, como visto, era explicar de maneira estatística o magnetismo natural de alguns materiais. Para isso ele tinha basicamente dois desafios. Um deles era configurar o modelo para a interação dos momentos magnéticos, mas tal desafio requeria um conhecimento até então muito novo e pouco desenvolvido, a mecânica quântica. O outro era calcular analiticamente a magnetização utilizando métodos de mecânica estatística (ISING et al., 2017).

O primeiro artigo publicado por Heisenberg (HEISENBERG, 1928), após ser indicado para a Universidade de Leipzig, foi um trabalho no qual considerou os operadores de spin \vec{S}_i , ao invés dos momentos magnéticos σ_i , usando o princípio de exclusão de Pauli e a superposição das funções de onda, levando em conta a característica quântica dos spins (PEREIRA et al., 2008; ISING et al., 2017). Neste trabalho ele respondeu à primeira parte do desafio enfrentado por Ising. A segunda parte coube a Onsager em 1942 (ONSAGER, 1944).

O caráter quântico do modelo de Heisenberg é a principal diferença entre os dois modelos supracitados, resultando em uma grande dificuldade para resolvê-lo tanto analítica como numericamente (YEOMANS, 1992). Entretanto, também é muito utilizado no estudo de materiais magnéticos (TORELLI; OLSEN, 2020; HUCHT; MOSCHEL; USADEL, 1995; RESTREPO-PARRA et al., 2011). É um exemplo teórico importante para a aplicação da renormalização da matriz de densidade (DZIUBYNA, 2020; WENG et al., 2006; ÖSTLUND; ROMMER, 1995).

Analogamente ao modelo de Ising temos que para $J > 0$ as interações são do tipo ferromagnéticas, se $J < 0$ temos interações do tipo antiferromagnéticas. E, se o parâmetro J for igual em todas as direções, temos o chamado modelo isotrópico. E podemos obter caso mais geral do modelo de Heisenberg fazendo com que as interações nos três eixos de coordenadas sejam diferentes, chegando ao modelo de Heisenberg anisotrópico. O Hamiltoniano em sua forma mais geral fica

$$\mathcal{H} = - \sum_1^N (J_x S_i^x S_{i+1}^x + J_y S_i^y S_{i+1}^y + J_z S_i^z S_{i+1}^z). \quad (4.17)$$

onde, $J_i = J_x, J_y, J_z$ são as interação de troca (exchange) entre os spins Heisenberg e primeiros vizinhos nas três componentes, esses parâmetros definem as anisotropias ao longos dos eixos x , y e z , e S_i são dados por $S_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i$, em que σ_i

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

O modelo com anisotropia em todas direções, em que $J_x \neq J_y \neq J_z$ comumente é abreviado como modelo XYZ. No caso no qual apenas uma direção possui anisotropia, por exemplo $J_x = J_y \neq J_z$, o modelo é chamado XXZ. Se o modelo é isotrópico, $J_x = J_y = J_z$, chamamos de XXX.

5 RESULTADOS

5.1 Cadeia diamante Ising-Heisenberg com acoplamento magnetoelástico

Vamos considerar a cadeia diamante de spin-1/2 Ising-Heisenberg representada esquematicamente na Fig. 5.1, a qual contém na célula unitária, dois spins de Heisenberg $S_{a,j}$ e $S_{b,j}$ e um spin nodal Ising σ_j . Será assumido ainda que os átomos decoradores que envolvem os spins de Heisenberg vibram harmonicamente perpendicularmente ao eixo da cadeia, enquanto os átomos nodais que envolvem os spins de Ising são considerados suficientemente rígidos, ignorando as vibrações da rede.

Sob essa condição, a cadeia diamante spin-1/2 Ising-Heisenberg pode ser definida através da Hamiltoniana

$$\mathcal{H} = \sum_{j=1}^N \mathcal{H}_j = \sum_{j=1}^N \left(\mathcal{H}_j^{(p)} + \mathcal{H}_j^{(me)} \right), \quad (5.1)$$

onde $\mathcal{H}_j^{(p)}$ corresponde a parte puramente relacionada ao fônon e $\mathcal{H}_j^{(me)}$ é referente a parte magnetoelástica da Hamiltoniana, explicitamente dado a seguir.

Uma especificação dos deslocamentos dentro da célula unitária do diamante é mostrada na Fig. 5.2(a), onde x_0 é a distância de equilíbrio entre os spins Ising, y_0 corresponde a distância de equilíbrio entre os spins Heisenberg e d_0 é a distância de equilíbrio entre os spins Ising e Heisenberg. Supõe-se que os átomos decoradores a e b , incluindo os spins Heisenberg, estão realizando oscilações harmônicas em torno de suas posições de equilíbrio na rede, que podem ser caracterizadas por pequenos deslocamentos y_a e y_b . Consequentemente, as distâncias instantâneas entre os spins de Heisenberg e Ising são alteradas para $d_a = d_0 + y_a \sin(\frac{\theta}{2})$ e

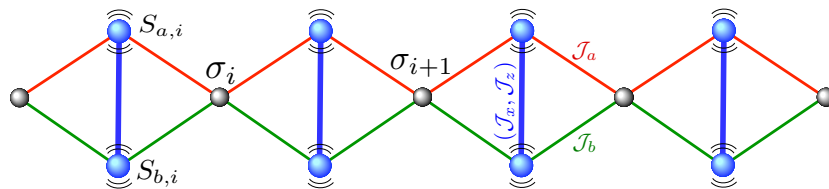


Figura 5.1 – Uma representação esquemática da cadeia diamante de spin $-\frac{1}{2}$ Ising-Heisenberg com acoplamento magnetoelástico. Os spins Ising σ_j estão localizados em posições rígidas na rede, enquanto os spins Heisenberg $S_{a,j}$ e $S_{b,j}$ vibram harmonicamente em uma direção perpendicular em relação ao eixo da cadeia.

Fonte: Autora (2020).

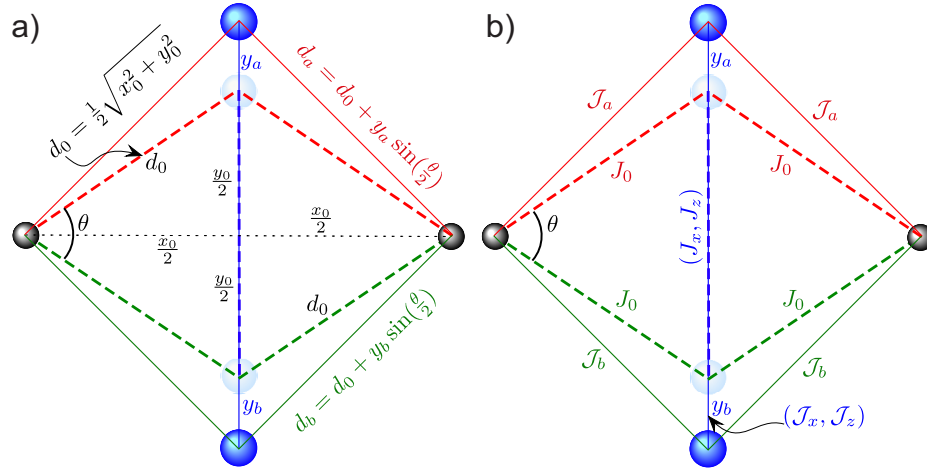


Figura 5.2 – Uma especificação da célula unitária do diamante sob deformação geométrica através dos deslocamentos (a) e das interações de troca (b).

Fonte: Autora (2020).

$d_b = d_0 + y_b \sin(\frac{\theta}{2})$, embora a distância x_0 entre os spins Ising permaneça inalterada. Na parte b) temos a representação das interações de troca.

Sob a aproximação linear, a parte magnetoelástica da Hamiltoniana de ligação (5.1) pode ser escrita desta forma

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_j^{(me)} = & - \mathcal{I}_{x,j} (S_{a,j}^x S_{b,j}^x + S_{a,j}^y S_{b,j}^y) - \mathcal{I}_{z,j} S_{a,j}^z S_{b,j}^z - (\mathcal{I}_{a,j} S_{a,j}^z + \mathcal{I}_{b,j} S_{b,j}^z) (\sigma_j + \sigma_{j+1}) \\ & - h_H (S_{a,j}^z + S_{b,j}^z) - \frac{h_I}{2} (\sigma_j + \sigma_{j+1}), \end{aligned} \quad (5.2)$$

onde as interações de troca [ver Fig. 5.2(b)] são dadas por

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{x,j} &= J_x [1 - \kappa(y_{a,j} + y_{b,j})], & \mathcal{I}_{z,j} &= J_z [1 - \kappa(y_{a,j} + y_{b,j})], \\ \mathcal{I}_{a,j} &= J_0 [1 - \eta y_{a,j} \sin(\frac{\theta}{2})], & \mathcal{I}_{b,j} &= J_0 [1 - \eta y_{b,j} \sin(\frac{\theta}{2})]. \end{aligned} \quad (5.3)$$

Aqui, J_x e J_z correspondem às componentes xy e z da interação de troca Heisenberg ao assumir os átomos decoradores nas suas posições de equilíbrio. Da mesma forma, J_0 corresponde a interação de troca de Ising com os spins Heisenberg e Ising em suas posições de equilíbrio. Finalmente, κ é o coeficiente de expansão linear do acoplamento magnetoelástico nos dímeros de Heisenberg e η é o coeficiente de expansão linear do acoplamento magnetoelástico entre os spins de Ising e Heisenberg.

A parte puramente elástica da Hamiltoniana de ligação (5.1) pode ser definida da seguinte forma

$$\mathcal{H}_j^{(p)} = \frac{p_{a,j}^2}{2m} + \frac{p_{b,j}^2}{2m} + \frac{\bar{K}}{2} (y_{a,j}^2 + y_{b,j}^2) + \frac{k_H}{2} (y_{a,j} + y_{b,j})^2, \quad (5.4)$$

onde $p_{a,j}$ e $p_{b,j}$ são os momentos dos átomos decoradores com a massa m , $y_{a,j}$ e $y_{b,j}$ $\bar{K} = 2kI \sin^2(\frac{\theta}{2})$ denotam seus deslocamentos das posições de equilíbrio, k_H é a constante de rigidez da mola atribuída ao acoplamento Heisenberg e a constante efetiva de rigidez da mola do acoplamento Ising quando k_I é a verdadeira constante de rigidez da mola atribuída ao acoplamento Ising.

5.1.1 Transformação canônica local

O Hamiltoniano (5.1) envolve contribuições magnetoelásticas e elásticas puras (fônons), que são acopladas através dos coeficientes de expansão linear κ e η pertinentes aos acoplamentos magnetoelásticos. No entanto, ambas as contribuições podem ser dissociadas através da transformação de coordenadas canônicas locais

$$q_j = \frac{1}{\sqrt{2}} (y_{a,j} + y_{b,j}) \quad \text{e} \quad \bar{q}_j = \frac{1}{\sqrt{2}} (y_{a,j} - y_{b,j}), \quad (5.5)$$

que define as posições de duas partículas fictícias, uma o centro de massa q_j do dímero Heisenberg e outra é associada à posição relativa \bar{q}_j dos átomos decoradores. Analogamente, os momentos nas coordenadas canônicas assumem a forma

$$p_j = \frac{1}{\sqrt{2}} (p_{a,j} + p_{b,j}) \quad \text{e} \quad \bar{p}_j = \frac{1}{\sqrt{2}} (p_{a,j} - p_{b,j}), \quad (5.6)$$

que possuem significado físico do momento geral p_j e do momento relativo \bar{p}_j do dímero Heisenberg. Assim, o Hamiltoniano (5.4) nas coordenadas canônicas pode ser reescrito da seguinte maneira

$$\mathcal{H}_j^{(p)} = \frac{p_j^2}{2m} + \frac{\bar{p}_j^2}{2m} + \frac{\bar{K}}{2} (q_j^2 + \bar{q}_j^2) + k_H q_j^2. \quad (5.7)$$

Podemos ver que a parte do fônon da Hamiltoniana de ligação (5.4) permanece invariante sob a transformação canônica (5.5) e (5.6).

5.1.2 Diagonalização da parte magnetoelástica

Como a relação de comutação $[\mathcal{H}_i^{(\text{me})}, \mathcal{H}_j^{(\text{me})}] = 0$ é satisfeita, a parte magnetoelástica da ligação Hamiltoniana (5.2) pode ser diagonalizada localmente para cada célula unitária. Os autovalores do Hamiltoniano (5.2) podem ser expressos em função da coordenada canônica do centro de massa q_j da seguinte forma

$$\epsilon_{k,j} = \epsilon_{k,j}^{(0)} + \epsilon_{k,j}^{(1)} q_j, \quad (5.8)$$

com o primeiro índice sendo $k = \{1, 2, 3, 4\}$ e o segundo índice especificando a célula unitária. Os autovalores (5.8) foram decompostos em dois termos, enquanto os primeiros termos $\epsilon_{k,j}^{(0)}$ correspondem a uma cadeia de diamante rígida

$$\epsilon_{1,j}^{(0)} = -\frac{J_z}{4} - h_H - \left(\frac{h_I}{2} + J_0\right)\mu_j, \quad (5.9)$$

$$\epsilon_{2,j}^{(0)} = -\frac{J_z}{4} + h_H - \left(\frac{h_I}{2} - J_0\right)\mu_j, \quad (5.10)$$

$$\epsilon_{3,j}^{(0)} = \frac{J_z}{4} + \frac{J_x}{2} - \frac{h_I}{2}\mu_j, \quad (5.11)$$

$$\epsilon_{4,j}^{(0)} = \frac{J_z}{4} - \frac{J_x}{2} - \frac{h_I}{2}\mu_j, \quad (5.12)$$

que podem ser interpretados como os autovalores de energia quando os átomos decoradores estão em posições de equilíbrio $y_{a,j} = y_{b,j} = 0$ e, por simplicidade, denotamos $\mu_j = (\sigma_j + \sigma_{j+1})$. Os segundos termos $\epsilon_{k,j}^{(1)}$ determinam uma contribuição vibracional para a energia, que é dada por

$$\epsilon_{1,j}^{(1)} = \frac{\sqrt{2}}{4} (J_z \kappa + 2J_0 \eta \mu_j \sin(\frac{\theta}{2})), \quad (5.13)$$

$$\epsilon_{2,j}^{(1)} = \frac{\sqrt{2}}{4} (J_z \kappa - 2J_0 \eta \mu_j \sin(\frac{\theta}{2})), \quad (5.14)$$

$$\epsilon_{3,j}^{(1)} = -\frac{\sqrt{2}}{4} \kappa (2J_x + J_z), \quad (5.15)$$

$$\epsilon_{4,j}^{(1)} = \frac{\sqrt{2}}{4} \kappa (2J_x - J_z). \quad (5.16)$$

Os autovetores, que correspondem aos autovalores (5.8), podem ser expressos da seguinte maneira

$$|\varphi_1\rangle_j = |^+\rangle_j, \quad (5.17)$$

$$|\varphi_2\rangle_j = |^-\rangle_j, \quad (5.18)$$

$$|\varphi_3\rangle_j = \sin(\vartheta_j)|^+\rangle_j - \cos(\vartheta_j)|^-\rangle_j, \quad (5.19)$$

$$|\varphi_4\rangle_j = \cos(\vartheta_j)|^+\rangle_j + \sin(\vartheta_j)|^-\rangle_j, \quad (5.20)$$

com

$$\tan(2\vartheta_j) = \frac{J_x(1-\kappa\sqrt{2}q_j)}{\sqrt{2}J_0\eta\sin(\frac{\theta}{2})\bar{q}_j}. \quad (5.21)$$

A partir de agora, assumiremos a igualdade das constantes magnetoelásticas $\eta = \kappa$ e os campos magnéticos locais $h = h_I = h_H$ atuando nos spins de Ising e Heisenberg, que correspondem fisicamente a igualdade de seus fatores g de Landé. Vale ressaltar que os dois últimos autovetores dependem da posição relativa \bar{q}_j e da posição do centro de massa q_j dos átomos decoradores.

5.1.3 Diagonalização da parte do fônon

Após realizar a transformação de coordenadas canônicas e diagonalizar a parte magnetoelástica, a Hamiltoniana assume a forma

$$\mathcal{H}_j = \epsilon_{k,j}^{(0)} + \epsilon_{k,j}^{(1)} q_j + \frac{p_j^2}{2m} + \frac{\bar{p}_j^2}{2m} + \frac{\bar{K}}{2} (q_j^2 + \bar{q}_j^2) + k_H q_j^2. \quad (5.22)$$

A Hamiltoniana de ligação (5.22) pode ser subsequentemente desacoplada e diagonalizada, completando o quadrado através de uma transformação adicional na posição do centro de massa dos dímeros Heisenberg

$$q_j = q'_j - \frac{\epsilon_{k,j}^{(1)}}{K}, \quad (5.23)$$

em que a constante da mola efetiva é definida como

$$K = \bar{K} + 2k_H \quad \text{e} \quad \bar{K} = 2k_l \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right). \quad (5.24)$$

Substituindo o deslocamento da coordenada canônica para o centro de massa (5.23) na Eq. (5.22) efetivamente se obtém um desacoplamento das partes puramente do fônon e magnetoelástica na Hamiltoniana de ligação. A parte efetiva do fônon se torna

$$\mathcal{H}_j^{(p)} = \frac{p_j^2}{2m} + \frac{\bar{p}_j^2}{2m} + \frac{K}{2} (q'_j)^2 + \frac{\bar{K}}{2} \bar{q}_j^2, \quad (5.25)$$

enquanto a parte magnetoelástica efetiva resulta em

$$\mathcal{H}_{k,j}^{(me)} = \epsilon_{k,j}^{(0)} - \frac{(\epsilon_{k,j}^{(1)})^2}{2K}. \quad (5.26)$$

Para prosseguir, introduzimos os operadores bosônicos de aniquilação b_j e de criação b_j^\dagger para descrever os fônons do centro de massa, que satisfazem os relações de comutação bosônica padrão $[b_j, b_{j'}^\dagger] = \delta_{j,j'}$ e $[b_j, b_{j'}] = 0$. A posição deslocada do centro de massa q'_j e o operador de momento geral p_j do dímero Heisenberg podem ser consequentemente reescritos em termos dos operadores bosônicos de criação b_j^\dagger e aniquilação b_j (em unidades de $\hbar = 1$)

$$q'_j = \frac{1}{\sqrt{2m\omega}} (b_j^\dagger + b_j) \quad \text{e} \quad p_j = i\sqrt{\frac{m\omega}{2}} (b_j^\dagger - b_j), \quad (5.27)$$

onde $\omega = \sqrt{K/m}$ é a respectiva frequência do fônon. Da mesma forma, pode-se também introduzir os operadores bosônicos de aniquilação \bar{b}_j e criação \bar{b}_j^\dagger que descrevem o termo do fônon pertinente ao deslocamento relativo dentro dos dímeros Heisenberg, que também satisfazem as tradicionais relações de comutação bosônicas $[\bar{b}_j, \bar{b}_{j'}^\dagger] = \delta_{j,j'}$ e $[\bar{b}_j, \bar{b}_{j'}] = 0$. Como resultado, a posição relativa \bar{q}_j e momento relativo \bar{p}_j também podem ser reescritas no seguinte formato

$$\bar{q}_j = \frac{1}{\sqrt{2m\bar{\omega}}}(\bar{b}_j^\dagger + \bar{b}_j) \quad \text{and} \quad \bar{p}_j = i\sqrt{\frac{m\bar{\omega}}{2}}(\bar{b}_j^\dagger - \bar{b}_j), \quad (5.28)$$

onde $\bar{\omega} = \sqrt{\bar{K}/m}$ é a respectiva frequência do fônon. A parte do Hamiltoniano do fônon (5.25) pode ser consequentemente expressa em termos dos operadores número n_j e \bar{n}_j para os dois tipos de fônons descritos anteriormente

$$\mathcal{H}_j^{(p)} = \left(\frac{1}{2} + b_j^\dagger b_j\right)\omega + \left(\frac{1}{2} + \bar{b}_j^\dagger \bar{b}_j\right)\bar{\omega} = \left(\frac{1}{2} + n_j\right)\omega + \left(\frac{1}{2} + \bar{n}_j\right)\bar{\omega}. \quad (5.29)$$

Dessa maneira, diagonalizamos a parte do Hamiltoniano (5.29) em termos dos operadores número n_j e \bar{n}_j como seguinte conjunto de autovalores n_j e $\bar{n}_j \in \{0, 1, 2, \dots\}$. Por último, mas não menos importante, vale a pena observar que a Hamiltoniana de ligação $\mathcal{H}_{k,j} = \mathcal{H}_{k,j}^{(me)} + \mathcal{H}_j^{(p)}$ agora é expressa em uma forma totalmente diagonal as partes magnetoelástica (5.26) e do fônon (5.29), que adicionalmente comutam mutuamente entre si, o que será da maior importância para o cálculo da função de partição apresentada na seção 5.3.

5.2 Diagrama de fase no estado fundamental

Antes de explorar as propriedades magnetoelásticas, primeiro analisemos um diagrama de fases no estado fundamental da cadeia tipo diamante de spin-1/2 Ising-Heisenberg complementada com o acoplamento magnetoelástico, que exhibe três estados fundamentais na suposição de que $k_H = k_I$ e $\kappa = \eta$. O primeiro estado fundamental pode ser classificado como o estado paramagnético saturado (SA) fornecido pelo autovetor

$$|SA\rangle = \prod_{j=1}^N |^+_+\rangle_j | \uparrow \rangle_j, \quad (5.30)$$

enquanto o primeiro (segundo) vetor de estado define um estado dos spins do dímero Heisenberg (o spin do Ising) da j -ésima célula unitária. O estado paramagnético saturado possui a seguinte energia do estado fundamental

$$E_{SA} = -\frac{J_z}{4} - h_H - \frac{h_I}{2} - J_0 - \frac{(J_z \kappa + 2J_0 \eta \sin \frac{\theta}{2})^2}{16K}. \quad (5.31)$$

O segundo estado fundamental pode ser interpretado como a fase ferrimagnética clássica (FI_1) fornecida pelo autovetor

$$|FI_1\rangle = \prod_{j=1}^N |^+_+\rangle_j | \downarrow \rangle_j, \quad (5.32)$$

enquanto a energia correspondente se torna

$$E_{FI_1} = -\frac{J_z}{4} - h_H + \frac{h_I}{2} + J_0 - \frac{(J_z \kappa - 2J_0 \eta \sin \frac{\theta}{2})^2}{16K}. \quad (5.33)$$

A magnetização da sub-rede dos spins Ising é de $M_I = -1/2$ por célula unitária, a magnetização da sub-rede dos spins Heisenberg resulta em $M_H = 1$ por célula unitária, de modo que a magnetização total por célula unitária se torna $M_t = 1/2$.

O terceiro estado fundamental pode ser classificado como a fase ferrimagnética quântica (FI_2) fornecida pelo autovetor

$$|FI_2\rangle = \prod_{j=1}^N (\cos(\vartheta_j) |^+_-\rangle_j + \sin(\vartheta_j) |^-_+\rangle_j) | \uparrow \rangle_j, \quad (5.34)$$

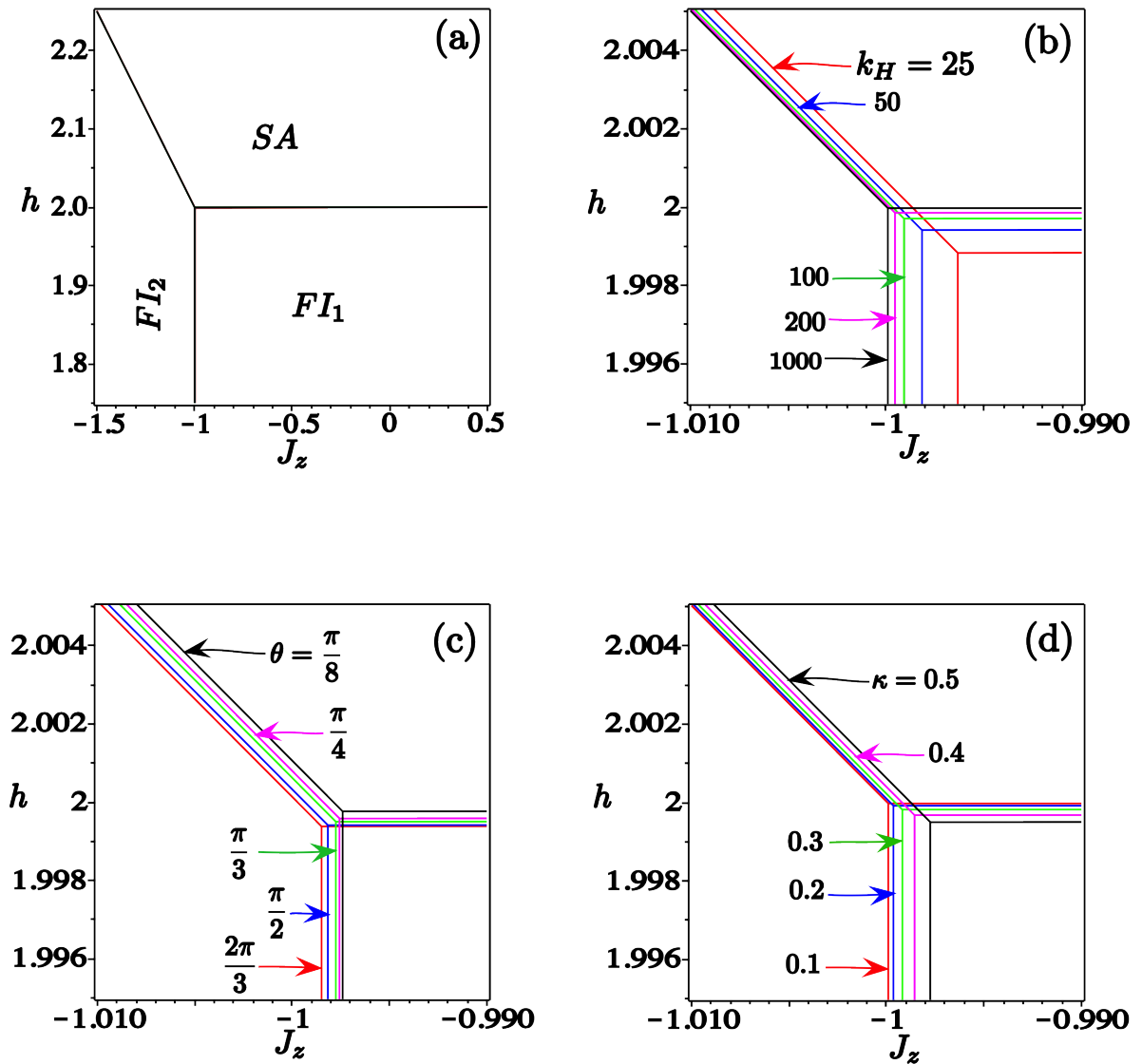


Figura 5.3 – Diagrama de fase no plano $J_z - h$ para $J_0 = -1$, $J_x = 1$ e: (a) - (b) $\kappa = 0,5$, $\theta = \pi/2$ e $k_H = \{25, 50, 200, 1000\}$; (c) $\kappa = 0,5$, $k_H = 50$ e $\theta = \{2\pi/3, \pi/2, \pi/3, \pi/4, \pi/8\}$; (d) $\theta = \pi/3$, $k_H = 50$ e $\kappa = \{0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5\}$.

Fonte: Autora (2020).

cuja energia fundamental é dada por

$$E_{FI_2} = \frac{J_z}{4} - \frac{J_x}{2} - \frac{h_I}{2} - \frac{\kappa^2(2J_x - J_z)^2}{16K}. \quad (5.35)$$

A magnetização da sub-rede dos spins Heisenberg é de $M_H = 0$ devido a um caráter singlete dos dímeros Heisenberg e, portanto, a magnetização da sub-rede dos spins Ising $M_I = 1/2$ fornece a única contribuição diferente de zero para a magnetização total por célula unitária $M_t = 1/2$.

Alguns diagramas de fases típicos do estado fundamental são plotados na Fig.5.3 no plano $J_z - h$ para valores fixos das constantes de acoplamento $J_0 = -1$ e $J_x = 1$. É evidente que as fronteiras da fase no estado fundamental são gradualmente alterados devido a alteração da rigidez da cadeia ao assumir valores realistas (suficientemente grandes) das constantes de rigidez da mola (consulte a referência. (ČANOVÁ; STREČKA; JAŠČUR, 2006) para uma comparação). De fato, as alterações no diagrama de fases do estado fundamental mostradas na Fig.5.3 (a) para os valores fixos de $\kappa = 0,5$ e $\theta = \pi/2$ devido à variação da constante de rigidez de mola $k_H = \{25, 50, 200, 1000\}$ são quase indistinguíveis dentro da escala exibida, enquanto se tornam evidentes apenas em uma escala ampliada, como ilustrado na Fig.5.3 (b). Podemos observar efeitos semelhantes quando alternamos os outros parâmetros de interação [veja Fig.5.3(c)-(d)].

O efeito da geometria na rede pode ser verificado na Fig.5.3(c), onde os diagramas de fases do estado fundamental são plotados para valores fixos de $\kappa = 0,5$, $k_H = 50$ e vários valores do ângulo $\theta = \{2\pi/3, \pi/2, \pi/3, \pi/4, \pi/8\}$. Finalmente, a contribuição da constante magneto-elástica nos diagramas de fase do estado fundamental é ilustrado na Fig.5.3 (d) assumindo o valor fixo de $\theta = \pi/3$, $k_H = 50$, e variando de $\kappa = \{0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5\}$. A fronteira entre duas fases ferrimagnéticas FI_1 e FI_2 é dada por

$$J_z = \frac{[4(2J_0 + J_x)k_H - J_0^2 \kappa^2] (\sin^2 \frac{\theta}{2} + 1) + (J_0^2 + J_x^2) \kappa^2}{\kappa^2 (J_x - J_0 \sin \frac{\theta}{2}) + 4k_H (\sin^2 \frac{\theta}{2} + 1)}, \quad (5.36)$$

o qual é independente do campo magnético h , como pode ser verificado por uma linha vertical das fronteiras de fase na Fig. 5.3. Enquanto a fronteira entre as fases FI_1 e SA pode ser dada pela fórmula

$$h = -2J_0 - \frac{J_0 J_z \kappa^2 \sin \frac{\theta}{2}}{4k_H (\sin^2 \frac{\theta}{2} + 1)}. \quad (5.37)$$

Embora essa fronteira seja para um modelo perfeitamente rígido ($\kappa = 0$) completamente independente de J_z , o modelo com constante de acoplamento magnetoelástico diferente de zero $\kappa \neq 0$ mostra uma leve dependência da constante de acoplamento J_z porque κ geralmente é uma quantidade muito pequena ($\kappa \ll 1$), enquanto a constante de rigidez de mola $k_H \gg \epsilon_{k,j}^{(1)}$ [ie $k_H \gg gJ_0J_z$, veja a Fig. 5.3 (b) - (d) para ilustração]. De modo similar podemos encontrar uma função na fronteira entre as fases FI_2 e SA , fornecidas por

$$h = \frac{1}{2} (J_x - 2J_0 - J_z) + \kappa^2 \frac{(J_x + J_0 \sin \frac{\theta}{2}) (J_x - J_z - J_0 \sin \frac{\theta}{2})}{8k_H (\sin^2 \frac{\theta}{2} + 1)}. \quad (5.38)$$

Nesta região a fronteira da fase depende da constante de acoplamento J_z mesmo quando a fronteira é perfeitamente rígida ($\kappa = 0$), mas parece haver uma pequena correção nessa dependência, já que a constante de acoplamento magnetoelástico é diferente de zero ($\kappa \neq 0$).

5.3 Termodinâmica

Como comentado anteriormente as Hamiltonianas do fônon $\mathcal{H}_j^{(p)}$ e magnetoelástica $\mathcal{H}_{k,j}^{(me)}$, (5.26) e (5.29), comutam entre si. A Hamiltoniana de ligação correspondente a duas células unitárias diferentes também satisfazem a relação de comutação $[\mathcal{H}_j, \mathcal{H}_{j'}] = 0$. Tendo isso em mente, a função de partição da cadeia diamante de spin-1/2 Ising-Heisenberg, responsável pela interação magnetoelástica, pode ser obtida usando a abordagem da matriz de transferência. Devido ao caráter desacoplado do fônon e da parte magnetoelástica do Hamiltoniano, isto permite fatorar a função de partição em um produto de dois termos

$$\mathcal{Z}_N = \mathcal{Z}_N^{(p)} \mathcal{Z}_N^{(me)}, \quad (5.39)$$

considerando que o primeiro $\mathcal{Z}_N^{(p)}$ indica a contribuição do fônon e o último $\mathcal{Z}_N^{(me)}$ corresponde à contribuição magnetoelástica.

Vale ressaltar que os fônons correspondentes ao centro de massa e deslocamento relativo dos dímeros de Heisenberg são independentes um do outro e, portanto, a parte do fônon da função de partição pode ser expressa mais explicitamente da seguinte maneira

$$\mathcal{Z}_N^{(p)} = (u\bar{u})^N, \quad (5.40)$$

onde contribuições individuais decorrentes de dois tipos de fônons envolvidos no Hamiltoniano (5.26) seguem uma soma sobre todos os valores acessíveis dos números quânticos n_j e \bar{n}_j

$$\begin{aligned} u &= \sum_{n_j=0}^{\infty} e^{-\beta\left(\frac{1}{2}+n_j\right)\omega} = \frac{1}{2\sinh\left(\frac{\beta\omega}{2}\right)}, \\ \bar{u} &= \sum_{\bar{n}_j=0}^{\infty} e^{-\beta\left(\frac{1}{2}+\bar{n}_j\right)\bar{\omega}} = \frac{1}{2\sinh\left(\frac{\beta\bar{\omega}}{2}\right)}. \end{aligned} \quad (5.41)$$

A parte magnetoelástica da função de partição pode ser calculada usando a matriz de transferência

$$W = \begin{pmatrix} w_1 & w_0 \\ w_0 & w_{-1} \end{pmatrix}, \quad (5.42)$$

que envolve os fatores de Boltzmann do j -ésimo dímero Heisenberg definido da seguinte forma

$$w_{\mu_j} = \sum_{k=1}^4 e^{-\beta \left[\epsilon_{k,j}^{(0)} - \frac{1}{2K} (\epsilon_{k,j}^{(1)})^2 \right]}. \quad (5.43)$$

Acima, as contribuições da energia $\epsilon_{k,j}^{(0)}$ e $\epsilon_{k,j}^{(1)}$ são dadas pelas Eqs. (5.9) - (5.12) e (5.13) - (5.16), respectivamente. Após uma diagonalização direta da matriz de transferência (5.42), obtém-se dois autovalores

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2} \left(w_1 + w_{-1} \pm \sqrt{(w_1 - w_{-1})^2 + 4w_0^2} \right). \quad (5.44)$$

A parte magnetoelástica da função de partição pode ser expressa em termos dos autovalores da matriz de transferência

$$\mathcal{Z}_N^{(me)} = \lambda_+^N + \lambda_-^N. \quad (5.45)$$

Nesse estágio, pode-se substituir as partes do fônon e magnetoelástica das funções de partição (5.40) e (5.45) na Eq. (5.39) para obter o resultado final da função de partição, e consequentemente obtemos a energia livre associada, que no limite termodinâmico se reduz à forma

$$f = -\frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \mathcal{Z}_N = -\frac{1}{\beta} \ln(u\bar{u}) - \frac{1}{\beta} \ln(\lambda_+). \quad (5.46)$$

Com a energia livre em mãos, podemos discutir as propriedades magnetoelásticas da cadeia diamante spin-1/2 Ising-Heisenberg em temperaturas diferentes de zero. A seguir, nossa atenção particular será dedicada ao comportamento magnetoelástico em um ponto triplo e próximo a ele, onde todas as três fases SA , FI_1 e FI_2 coexistem juntas à temperatura zero. No caso do modelo completamente rígido ($\kappa = \eta = 0$), as três fases coexistem juntas para parâmetros fixos $J_0 = -1$, $J_x = 1$, $J_z = -1$ quando o campo magnético $h \rightarrow 2$ [veja na Fig.5.3 (a)]. Após algumas manipulações algébricas, obtém-se a seguinte expressão assintótica para a energia livre do modelo rígido $f_0 = -k_B T \ln(\lambda_+)$ no limite de temperatura zero $T \rightarrow 0$

$$f_0 = E_0 - T \ln \left(\frac{3 + \sqrt{5}}{2} \right) - \frac{\sqrt{5}}{10} (h_I - 2) - \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\sqrt{5}}{5} \right) (h_H - 2), \quad (5.47)$$

onde $E_0 = E_{FI_2} = E_{FI_1} = E_{SA}$ define a energia do estado fundamental correspondente em um ponto triplo. Agora, pode-se derivar a energia livre (5.47) para calcular a entropia

$$\mathcal{S}_0 = - \left(\frac{\partial f_0}{\partial T} \right)_h = k_B \ln \left(\frac{3 + \sqrt{5}}{2} \right) \approx 0.962423 k_B, \quad (5.48)$$

A magnetização da sub-rede dos spins Ising é dada por

$$M_{I,0} = - \left(\frac{\partial f_0}{\partial h_I} \right)_T = \frac{\sqrt{5}}{10}, \quad (5.49)$$

e a magnetização da sub-rede dos spins Heisenberg resulta em

$$M_{H,0} = - \left(\frac{\partial f_0}{\partial h_H} \right)_T = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\sqrt{5}}{5} \right), \quad (5.50)$$

enquanto a magnetização total por célula unitária fica

$$M_{t,0} = M_{I,0} + M_{H,0} = \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{5}}{5} \approx 0.9472136. \quad (5.51)$$

Este resultado exato será confirmado futuramente em um outro trabalho, por computação numérica, a temperaturas finitas.

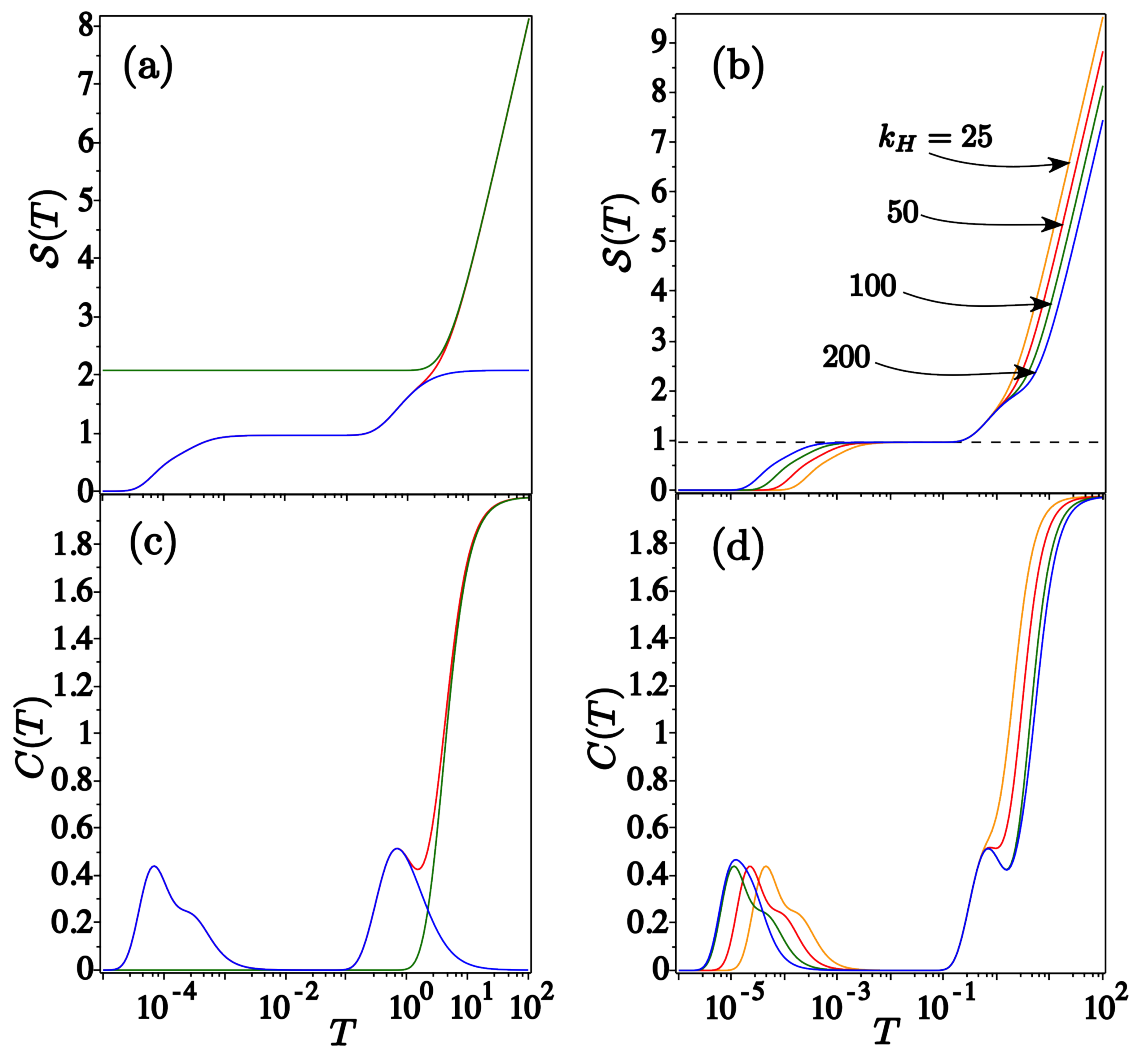


Figura 5.4 – Entropia e Calor específico em função da temperatura.
Fonte: Autora (2020).

Na figura 5.4 temos em (a) a entropia em função da temperatura em uma escala semi-logarítmica para valores fixos de $k_H = 100$, $\kappa = 0,5$, $J_0 = -1$, $J_x = 1$, $J_z = -1$, $\theta = \pi/2$ e $h = 2$. A linha azul corresponde ao modelo rígido, a linha verde descreve a contribuição do fônon e a linha vermelha informa a entropia geral do modelo com o acoplamento magnetoelástico; em (b) a entropia geral em função da temperatura em uma escala semi-logarítmica para valores fixos de $\kappa = 0,5$, $J_0 = -1$, $J_x = 1$, $J_z = -1$, $\theta = \pi/2$, $h = 2$ e quatro valores diferentes de $k_H = \{25, 50, 100, 200\}$; em (c) Variações de temperatura do calor específico correspondente ao painel (a). Observamos aqui um pico anômalo, chamado Anomalia de Schottky, que ocorre quando o calor específico tem um pico a baixas temperaturas, isso porque geralmente o calor específico aumenta com a temperatura ou permanece constante; em (d) Variações de temperatura do calor específico correspondente ao painel (b).

Agora, vamos comparar um comportamento magnético do modelo magnetoelástico investigado nas proximidades do ponto triplo com o do modelo totalmente rígido, a fim de descobrir diferenças decorrentes do acoplamento magnetoelástico. Para esse fim, a entropia é plotada na Fig.5.4 (a) em função da temperatura em escala semi-logarítmica, enquanto a linha azul corresponde ao modelo totalmente rígido, a linha verde descreve a contribuição do fônon e a linha vermelha informa a entropia para os valores fixos $k_H = 100$, $\kappa = 0,5$, $J_0 = -1$, $J_x = 1$, $J_z = -1$, $\theta = \pi/2$ e $h = 2$.

Pode-se observar que a entropia acompanha muito bem a entropia do modelo rígido a temperaturas suficientemente baixas, enquanto para temperaturas suficientemente alta aproxima-se da contribuição do fônon. A Fig.5.4 (c) representa as dependências de temperatura do calor específico correspondente à Fig.5.4 (a). Fig.5.4 (b) ilustra a entropia do modelo responsável pelo acoplamento magnetoelástico para os valores fixos de $\kappa = 0,5$, $J_0 = -1$, $J_x = 1$, $J_z = -1$, $\theta = \pi/2$, $h = 2$ e para quatro valores diferentes da constante de rigidez de mola $k_H = \{25, 50, 100, 200\}$. É evidente nesta figura que a entropia exibe um platô em $\mathcal{S}_0 = k_B \ln \left(\frac{3+\sqrt{5}}{2} \right)$ independentemente de a constante de rigidez da mola na faixa de temperaturas moderadas $10^{-3} \lesssim T \lesssim 10^{-1}$ antes da entropia tender a zero no limite assintótico $T \rightarrow 0$. Note que o modelo totalmente rígido ($k_H \rightarrow \infty$) exibe uma entropia residual $\mathcal{S}_0 = k_B \ln \left(\frac{3+\sqrt{5}}{2} \right)$ para o conjunto de parâmetros considerado, que, no entanto, é elevado para valores finitos da constante de rigidez da mola devido a uma mudança nas fronteira de fase no estado fundamental. Finalmente, a Fig.5.4 (d) representa variações de temperatura do calor específico correspon-

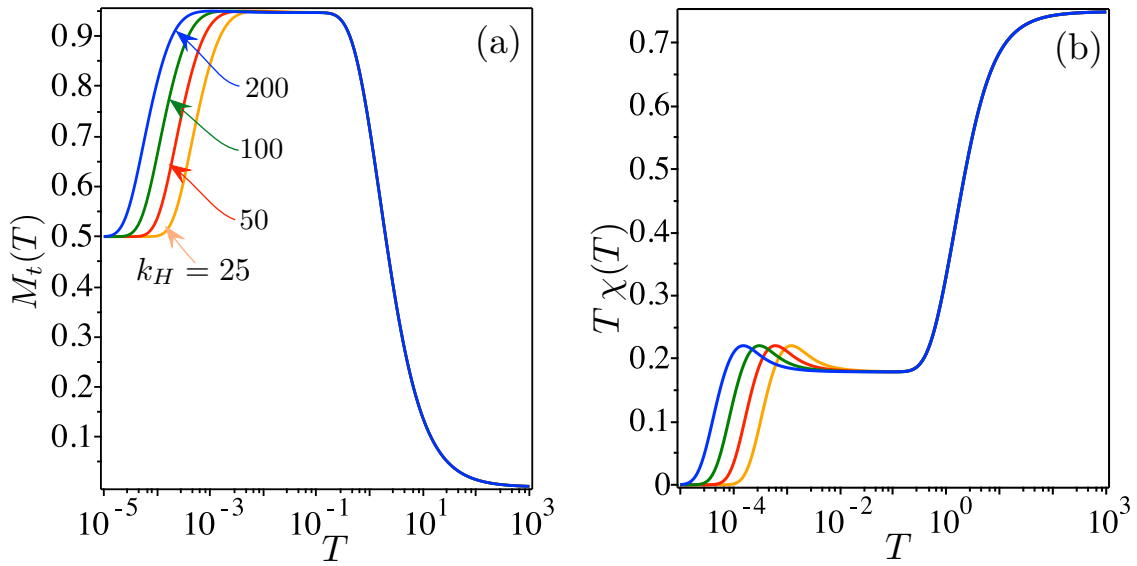


Figura 5.5 – (a) A magnetização total por célula unitária em função da temperatura em uma escala semi-logarítmica para valores fixos de $\kappa = 0,5$, $J_0 = -1$, $J_x = 1$, $J_z = -1$, $\theta = \pi/2$, $h = 2$ e para quatro valores diferentes de $k_H = \{25, 50, 100, 200\}$; (b) Um gráfico semi-logarítmico da susceptibilidade magnética pela temperatura (χT) para o mesmo conjunto de parâmetros usado na Fig. 5.5 (a) para a magnetização.

Fonte: Autora (2020).

dente à Fig.5.4 (b), onde uma formação do pico pequeno adicional pode ser observado em uma região de baixa temperatura devido às respectivas alterações da entropia de um platô diferente de zero para nulo.

A magnetização total é representada na Fig.5.5 (a) versus a temperatura em uma escala semi-logarítmica, assumindo valores fixos de $\kappa = 0,5$, $J_0 = -1$, $J_x = 1$, $J_z = -1$, $\theta = \pi/2$, $h = 2$ e quatro valores diferentes da constante de rigidez de mola $k_H = \{25, 50, 100, 200\}$. Observamos que a magnetização total por célula unitária tende no limite de temperatura zero ao valor inicial $M_t = 0,5$, que é independente da constante de rigidez da mola, e aumenta de acordo com a fórmula (5.51) para o valor $M_t \sim 0.947$ na faixa de temperaturas moderadas $10^{-3} \lesssim T \lesssim 10^{-1}$ antes que finalmente tenda a zero na região de altas temperaturas. Fig.5.5 (b) ilustra as respectivas variações da susceptibilidade magnética vezes a temperatura (χT) como função da temperatura para o mesmo conjunto de parâmetros usado na fig.5.5 (a). É óbvio que o produto desaparece $\chi T \rightarrow 0$ quando a temperatura chega a zero, um platô intermediário em torno do valor $\chi T \sim 0.18$ é encontrado em temperaturas moderadas $10^{-3} \lesssim T \lesssim 10^{-1}$ e o produto tende ao valor assintótico $\chi T \sim 0,8$ no limite de altas temperaturas.

6 CONCLUSÃO

No presente trabalho, examinamos detalhadamente as propriedades magnetoelásticas da cadeia de diamante Ising-Heisenberg com spin-1/2, que envolve dois spins Heisenberg e um spin Ising nodal em cada célula unitária. Supõe-se que os átomos decorados que envolvem os spins de Heisenberg vibram harmonicamente perpendicularmente ao eixo da cadeia, enquanto os átomos nodais que envolvem os spins de Ising são colocados em posições rígidas na rede ao ignorar completamente suas vibrações da rede. Em particular, investigamos primeiro o diagrama de fase no estado fundamental, como função da constante magnetoelástica e da constante de rigidez da mola atribuída ao acoplamento Heisenberg, principalmente focando numa região próxima a um ponto triplo de duas fases ferrimagnéticas e uma fase paramagnética saturada. Vimos que quanto menores os valores de k_H temo valores maiores de J_z , também vimos que, quanto a geometria da rede, J_z assume valores maiores conforme θ assume valores menores. Em seguida, examinamos em detalhes também as propriedades termodinâmicas em baixas temperaturas. Verificou-se que a natureza magnetoelástica dos dímeros Heisenberg é refletida através de um platô diferente de zero da entropia em uma região de baixas temperaturas, enquanto o calor específico exibe um pico anômalo ligeiramente abaixo da região de temperatura correspondente ao platô de entropia. Em detalhes observamos que a entropia geral a baixas temperaturas acompanha o modelo rígido, quando T aumenta ela acompanha a entropia do fônon. Já em $T = 0$, devido a configuração de spins, há uma frustração de spin que gera uma entropia residual. Também observamos que quanto maior o valor de k_H menor influência da temperatura e o platô também aumenta. Além disso, quando o calor específico vai a zero não há absorção de calor, os picos do calor específico coincidem com os da entropia, então há absorção de calor. A magnetização exibe um platô com valor quase saturado na mesma região de temperatura, como mencionado acima, a entropia gradualmente tende a zero quando aumentamos a temperatura. A suscetibilidade magnética exibe na mesma região do platô uma dependência inversa da temperatura, a qual falha levemente acima desse platô, enquanto uma dependência inversa da temperatura é novamente recuperada em temperaturas suficientemente altas.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ALVES, C. A. P. Propagação de danos no modelo de ising em redes de bravais e em fractais. Universidade Federal do Rio Grande do Norte, 1999.
- ANANIKIAN, N.; HOVHANNISYAN, V. Magnetic properties, lyapunov exponent and superstability of the spin-1/2 ising–heisenberg model on a diamond chain. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, Elsevier, v. 392, n. 10, p. 2375–2383, 2013.
- ANANIKIAN, N.; STREČKA, J.; HOVHANNISYAN, V. Magnetization plateaus of an exactly solvable spin-1 ising–heisenberg diamond chain. **Solid state communications**, Elsevier, v. 194, p. 48–53, 2014.
- ARMSTRONG, W. D. The magnetization and magnetostriction of tbo. 3dy0-7fe1. 9 fiber actuated epoxy matrix composites. **Materials Science and Engineering: B**, Elsevier, v. 47, n. 1, p. 47–53, 1997.
- BALCERZAK, T.; SZAŁOWSKI, K. The pair approximation method for the ferromagnetic heisenberg model with spin $s=1$ and arbitrary range of interactions. application for the magnetic semiconductor crias. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, Elsevier, p. 167157, 2020.
- BARBOZA, F. S. Propriedades termodinâmicas e emaranhamento quântico de um modelo para compostos magnéticos heterotrimetálicos. 2017.
- BAXTER, R. J. **Exactly solved models in statistical mechanics**. [S.l.]: Elsevier, 2016.
- BLUNDELL, S. **Magnetism in condensed matter**. [S.l.]: AAPT, 2003.
- BLUNDELL, S. J.; BLUNDELL, K. M. **Concepts in thermal physics**. [S.l.]: OUP Oxford, 2009.
- BOUBCHEUR, E.; MASSIMINO, P.; DIEP, H. Effects of magnetoelastic coupling: Critical behavior and structure deformation. **Journal of magnetism and magnetic materials**, Elsevier, v. 223, n. 2, p. 163–168, 2001.
- ČANOVÁ, L.; STREČKA, J.; JAŠČUR, M. Geometric frustration in the class of exactly solvable ising–heisenberg diamond chains. **Journal of Physics: Condensed Matter**, IOP Publishing, v. 18, n. 20, p. 4967, 2006.
- CARVALHO, I. M. **Funções de correlação para uma cadeia de ising decorada com spins heisenberg numa estrutura diamante**. 2018.
- COEY, J. M. **Magnetism and magnetic materials**. [S.l.]: Cambridge university press, 2010.
- DERZHKO, O. et al. Effective low-energy description of almost ising-heisenberg diamond chain. **EPL (Europhysics Letters)**, IOP Publishing, v. 112, n. 3, p. 37002, 2015.
- DERZHKO, O.; STREČKA, J.; GÁLISOVÁ, L. Compressibility of deformable spin chains near quantum critical points. **The European Physical Journal B**, Springer, v. 86, n. 3, p. 88, 2013.
- DZIUBYNA, A. Density matrix renormalization group simulations of heisenberg $s=1$ spin chains with zero-field splitting for ni chain coordination polymers. 2020.

- ENTING, I. The second-neighbour ising chain as a model for spin-phonon interactions: susceptibility. **Journal of Physics A: Mathematical, Nuclear and General**, IOP Publishing, v. 6, n. 2, p. 170, 1973.
- ESSAM, b. J.; DOMB, C.; GREEN, M. Phase transitions and critical phenomena. **Phase Transit. Crit. Phenomena**, v. 2, p. 1583–1585, 1972.
- FELIZARI, A. Caracterização e monitoramento remoto aplicado a um sensor magnetoelástico. 2016.
- FERREIRA, J. T. **Modelos Ising-Heisenberg e spin-elétron: emaranhamento quântico e propriedades magnéticas e termodinâmicas**. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Alagoas, 2018.
- FISHER, M. E. Transformations of ising models. **Physical Review**, APS, v. 113, n. 4, p. 969, 1959.
- GÁLISOVÁ, L. Magnetocaloric effect in the spin-1/2 ising-heisenberg diamond chain with the four-spin interaction. **arXiv preprint arXiv:1310.0277**, 2013.
- GÁLISOVÁ, L.; STREČKA, J. Vigorous thermal excitations in a double-tetrahedral chain of localized ising spins and mobile electrons mimic a temperature-driven first-order phase transition. **Physical Review E**, APS, v. 91, n. 2, p. 022134, 2015.
- GERLACH, W.; STERN, O. Der experimentelle nachweis der richtungsquantelung im magnetfeld. **Zeitschrift für Physik**, Springer, v. 9, n. 1, p. 349–352, 1922.
- GRANDE, H. L. C. **Modelos de dímeros em redes planas. Matriz de transferência e soluções por meio da representação de férmions**. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2009.
- GRIFFITHS, D. J. **Introduction to electrodynamics**. [S.l.]: American Association of Physics Teachers, 2005.
- HEISENBERG, W. Zur theorie des ferromagnetismus. In: **Original Scientific Papers Wissenschaftliche Originalarbeiten**. [S.l.]: Springer, 1928. p. 580–597.
- HENRIQUES, V. B.; SALINAS, S. Effective spin hamiltonians for compressible ising models. **Journal of Physics C: Solid State Physics**, IOP Publishing, v. 20, n. 16, p. 2415, 1987.
- HUCHT, A.; MOSCHEL, A.; USADEL, K. Monte-carlo study of the reorientation transition in heisenberg models with dipole interactions. **Journal of magnetism and magnetic materials**, Elsevier, v. 148, n. 1-2, p. 32–33, 1995.
- ISING, T. et al. The fate of ernst ising and the fate of his model. **arXiv preprint arXiv:1706.01764**, 2017.
- ISTRAIL, S. Statistical mechanics, three-dimensionality and np-completeness: I. universality of intracatability for the partition function of the ising model across non-planar surfaces. In: **STOC**. [S.l.: s.n.], 2000. p. 87–96.
- JASČUR, M. et al. Frustration in an exactly solvable mixed-spin ising model with bilinear and three-site four-spin interactions on a decorated square lattice. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, Elsevier, v. 417, p. 92–99, 2016.

JÚNIOR, J. E. d. L. **Modelo de Ising aplicado ao estudo da criminalidade**. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2014.

KAYA, T.; TAMBAŞ, B. Configurational mean-field reduced transfer matrix method for ising systems. **Modern Physics Letters B**, World Scientific, p. 2050297, 2020.

KNEZEVIC, M.; MILOSEVIC, S. One-dimensional compressible ising chain with general spin. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, IOP Publishing, v. 13, n. 7, p. 2479, 1980.

LEMONS, C. et al. Fluctuation theorem with two independent field parameters: The one-dimensional compressible ising model. **Physical Review E**, APS, v. 99, n. 1, p. 012129, 2019.

LENZ, W. **Beitrag zum verständnis der magnetischen eigenschaften in festen körpern** **Phys.** [S.l.]: Z, 1920.

LISNYI, B.; STREČKA, J. Exactly solved mixed spin-(1, 1/2) ising–heisenberg distorted diamond chain. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, Elsevier, v. 462, p. 104–116, 2016.

LOPES, F. A. Produção hidrometalúrgica de óxidos magnéticos a partir de concentrado de pirita proveniente de rejeitos da mineração de carvão. 2017.

MARKOŠ, P.; SOUKOULIS, C. M. **Wave propagation: from electrons to photonic crystals and left-handed materials**. [S.l.]: Princeton University Press, 2008.

MASSIMINO, P.; DIEP, H. Effect of magnetoelastic interactions on the phase transition of two-dimensional ising spin system. **Journal of Applied Physics**, American Institute of Physics, v. 87, n. 9, p. 7043–7045, 2000.

MATTIS, D.; SCHULTZ, T. Theory of magnetothermomechanics. **Physical Review**, APS, v. 129, n. 1, p. 175, 1963.

MAXWELL, J. C. **A treatise on electricity and magnetism**. [S.l.]: Oxford: Clarendon Press, 1873. v. 1.

MUÑOZ, V. What can we learn about protein folding from ising-like models? **Current opinion in structural biology**, Elsevier, v. 11, n. 2, p. 212–216, 2001.

NETO, E. M. d. C. O modelo de ising na cadeia linear com interações competitivas de longo alcance. Programa de Pós-Graduação em Educação da UFBA, 2009.

NUSSENZVEIG, H. M. **Curso de Física Básica: fluidos, oscilações e ondas, calor**. [S.l.]: Editora Blucher, 2018. v. 2.

OLIVEIRA, I. S.; JESUS, V. L. D. **Introdução à física do estado sólido**. [S.l.]: Editora Livraria da Física, 2005.

ONSAGER, L. A two-dimensional model with an order–disorder transition (crystal statistics i). **Phys. Rev**, v. 65, p. 117–49, 1944.

ÖSTLUND, S.; ROMMER, S. Thermodynamic limit of density matrix renormalization. **Physical review letters**, APS, v. 75, n. 19, p. 3537, 1995.

PEREIRA, M. S. S. et al. Platô na magnetização e efeito magnetocalórico na cadeia diamante cineticamente frustrada. Universidade Federal de Alagoas, 2008.

QI, Y. et al. Magnetocaloric effect in ferroelectric ising chain magnet. **Solid State Communications**, Elsevier, v. 233, p. 1–5, 2016.

RESTREPO-PARRA, E. et al. Magnetic phase diagram simulation of $1-x$ CaMnO₃ system by using monte carlo, metropolis algorithm and heisenberg model. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, Elsevier, v. 323, n. 11, p. 1477–1483, 2011.

ROJAS, O.; SOUZA, S. D. Direct algebraic mapping transformation for decorated spin models. **Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical**, IOP Publishing, v. 44, n. 24, p. 245001, 2011.

ROJAS, O. et al. Universality and quasicritical exponents of one-dimensional models displaying a quasitransition at finite temperatures. **Physical Review E**, APS, v. 99, n. 4, p. 042117, 2019.

ROJAS, O.; VALVERDE, J.; SOUZA, S. D. Generalized transformation for decorated spin models. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, Elsevier, v. 388, n. 8, p. 1419–1430, 2009.

ROMBALDI, F. B. Avaliação do efeito protetivo de revestimentos de silano aplicados sobre sensores magnetoelásticos metglas 2826mb3. 2019.

SALINAS, S. On the one-dimensional compressible ising model. **Journal of Physics A: Mathematical, Nuclear and General**, IOP Publishing, v. 6, n. 10, p. 1527, 1973.

SALINAS, S. R. **Introdução a física estatística vol. 09**. [S.l.]: Edusp, 1997.

SANTRA, S. B. **Advanced Statistical Mechanics**. 2013. Disponível em: <<nptel.ac.in/courses/115103028/26>>.

SILVA, J. M. N. **Redes Neurais Artificiais: Rede Hopfield e Redes Estocásticas**. [S.l.]: Niterói, 2003.

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

STREČKA, J. Generalized algebraic transformations and exactly solvable classical-quantum models. **Physics Letters A**, Elsevier, v. 374, n. 36, p. 3718–3722, 2010.

STREČKA, J. et al. Anomalous spin frustration enforced by a magnetoelastic coupling in the mixed-spin ising model on decorated planar lattices. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, Elsevier, v. 469, p. 655–664, 2019.

STREČKA, J.; ROJAS, O.; SOUZA, S. M. de. Spin-phonon coupling induced frustration in the exactly solved spin-1/2 ising model on a decorated planar lattice. **Physics Letters A**, Elsevier, v. 376, n. 3, p. 197–202, 2012.

ŠTUBŇA, V.; JAŠČUR, M. Mixed spin-1/2 and 3/2 ising model with multi-spin interactions on a decorated square lattice. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, Elsevier, v. 442, p. 364–370, 2017.

TEIXEIRA, E. F. Modelagem de movimentos coletivos de matéria ativa. 2018.

TICKLE, R. et al. Ferromagnetic shape memory in the nimnga system. **IEEE Transactions on Magnetics**, IEEE, v. 35, n. 5, p. 4301–4310, 1999.

TONIDANDEL, D. A. V.; ARAÚJO, A. E. A. d.; BOAVENTURA, W. d. C. História da eletricidade e do magnetismo: da antiguidade à idade média. 2018.

TORELLI, D.; OLSEN, T. First principles heisenberg models of 2d magnetic materials: the importance of quantum corrections to the exchange coupling. **Journal of Physics: Condensed Matter**, IOP Publishing, v. 32, n. 33, p. 335802, 2020.

TORMES, C. et al. Caracterização de secagem de materiais cerâmicos utilizando sensores magnetoelásticos.

TORRICO, J.; OHANYAN, V.; ROJAS, O. Non-conserved magnetization operator and ‘fire-and-ice’ ground states in the ising-heisenberg diamond chain. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, Elsevier, v. 454, p. 85–96, 2018.

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

WATARI, K. Mecânica clássica, volume i. **Editora Livraria da Física**, 2004.

WENG, M. et al. Spin-liquid phase in an anisotropic triangular-lattice heisenberg model: Exact diagonalization and density-matrix renormalization group calculations. **Physical Review B**, APS, v. 74, n. 1, p. 012407, 2006.

YEOMANS, J. M. **Statistical mechanics of phase transitions**. [S.l.]: Clarendon Press, 1992.

ZHOU, W.-X.; SORNETTE, D. Self-organizing ising model of financial markets. **The European Physical Journal B**, Springer, v. 55, n. 2, p. 175–181, 2007.