



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SERGIPE
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Estudo de modelos de spins com interação Dzyaloshinskii-Moriya

TESE DE DOUTORADO

Joeliton Barros da Silva

São Cristóvão/SE

Setembro/2022

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SERGIPE
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Joeliton Barros da Silva

**Estudo de modelos de spins com interação
Dzyaloshinskii-Moriya**

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Sergipe como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor em Física.

Orientador: Prof. Dr. Douglas F. de Albuquerque

São Cristóvão/SE

Setembro/2022

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SERGIPE
Programa de Pós-Graduação em Física

**“Estudo de modelos de spins com interação
Dzyaloshinskii-Moriya”**

por

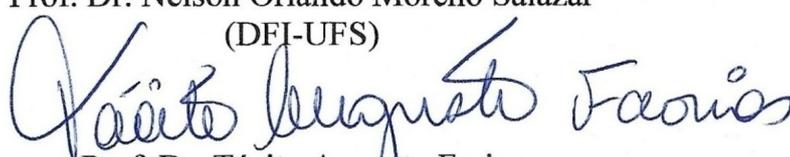
Joeliton Barros da Silva

Tese de doutorado **APROVADA** em sessão pública no dia vinte e um de setembro do ano dois mil e vinte e dois perante a banca examinadora constituída pelos seguintes professores:


Prof. Dr. Douglas Ferreira de Albuquerque
(DMA-UFS)


Prof. Dr. Nilson dos Santos Ferreira
(DFI-UFS)


Prof. Dr. Nelson Orlando Moreno Salazar
(DFI-UFS)


Prof. Dr. Tácito Augusto Farias
(DEE-UFS)


Prof. Dr. José Ricardo de Sousa
(DF-UFAM)

Agradecimentos

Agradeço ao prof. Douglas de Albuquerque, pela orientação, amizade e conselhos dados ao longo da minha vida acadêmica.

Aos professores do PPGFI/UFS que contribuíram para a minha formação. Particularmente, agradeço ao prof. Nelson Salazar, que sempre se mostrou prestativo em discutir aspectos relacionados à pesquisa. Aos membros da banca examinadora, pelas discussões e contribuições.

Aos meus pais, Antonio e Valdice, que foram a base de tudo.

Aos meus irmãos, José Jaedson e Maria Jirlaine.

A minha esposa, Vivia Santana, pela dedicação e companheirismo de sempre. Agradeço também aos meus sogros, Lenaldo e Edvânia e a minha cunhada, Tauany.

A Denisson Pereira, colega e aluno do programa, pelo estudo e discussão de alguns tópicos após a defesa, contribuindo para as correções feitas na versão final do texto.

A Álvaro, secretário da pós-graduação.

De modo geral, agradeço a todos os familiares e amigos que direta ou indiretamente contribuíram de alguma forma para tornar este trabalho possível.

Por fim, às agências FAPITEC e CAPES, pelo apoio financeiro.

*“It is the direction and not the magnitude
which is to be taken into consideration.”
(Thomas Paine)*

Resumo

As propriedades críticas de sistemas que exibem magnetismo têm sido objeto de intensa pesquisa ao longo dos anos. O estudo do comportamento crítico de muitos materiais magnéticos, isolantes e anisotrópicos pode ser abordado através de modelos tais como Ising e Heisenberg. A consideração de efeitos anisotrópicos em modelos de spins usualmente resulta na presença de comportamento tricrítico no diagrama de fases. Em particular, a interação Dzyaloshinskii-Moriya consiste em um importante tipo de anisotropia, que tem atraído atenção ao longo das últimas décadas, desempenhando um papel relevante na descrição de algumas classes de isolantes, bem como no estudo dos fenômenos envolvendo quiralidade, dentre outros. A presença de desordem nos modelos, introduzida através de variáveis aleatórias governadas por distribuições de probabilidades, também resulta na alteração do comportamento crítico em relação a sistemas puros. Nesta tese, o modelo de Heisenberg anisotrópico ferromagnético com interação Dzyaloshinskii-Moriya é estudado nas versões spin-3/2 e spin-2 através de uma aproximação de pares. O formalismo pode ser aplicado a diversos tipos de redes. Contudo, os resultados aqui apresentados tratam em detalhes o caso da rede cúbica simples ($q = 6$). Os diagramas de fases e as propriedades magnéticas investigados revelam a existência de pontos tricríticos e transições de fase de primeira ordem. Para o modelo de spin-1, são tratados os casos envolvendo a desordem gerada a partir da inclusão de campo aleatório. Além disso, alguns resultados com aplicação da teoria de campo efetivo, bem como o modelo antiferromagnético são discutidos.

Palavras-chave: Interação Dzyaloshinskii-Moriya. Transições de fases. Modelo de Heisenberg. Campo aleatório. Ponto tricrítico.

Abstract

The critical properties of systems that exhibit magnetism have been the subject of intense research over the years. The study of the critical behavior of many magnetic, insulating and anisotropic materials can be approached through Ising and Heisenberg models, for example. Taking into account anisotropic effects in spin models usually results in the presence of tricritical behavior in the phase diagram. In particular, the Dzyaloshinskii-Moriya interaction consists of an important type of anisotropy, which has attracted attention over the last decades, playing an important role in the description of some classes of insulators, as well as in the study of phenomena involving chirality, among others. The presence of disorder in the models, introduced through random variables governed by probability distributions, also results in a change in critical behavior in relation to pure systems. In this thesis, the ferromagnetic anisotropic Heisenberg model with Dzyaloshinskii-Moriya interaction is studied in spin-3/2 and spin-2 versions within the pair approximation. The formalism can be applied to different types of lattice. However, the results presented here deal in detail with the case of the simple cubic lattice ($q = 6$). The phase diagrams and magnetic properties reveal the existence of tricritical points and first-order phase transitions. For the spin-1 model, cases involving the disorder generated from the inclusion of a random field are treated. In addition, some results with the application of the effective field theory, as well as the antiferromagnetic model, are discussed.

Keywords: Dzyaloshinskii-Moriya interaction. Phase transitions. Heisenberg model. Random field. Tricritical point.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Representação esquemática de diversas estruturas em duas e três dimensões.	18
Figura 2 – Magnetização em função do campo magnético no modelo de Ising unidimensional, Eq. (2.3), para os valores $\beta J = 0$, $\beta J = 0,5$ e $\beta J = 1$. Não há magnetização espontânea.	19
Figura 3 – Magnetização espontânea em função da temperatura reduzida para o modelo de Ising na rede quadrada, de acordo com a solução analítica (—) dada pela Eq. (2.4).	20
Figura 4 – Magnetização espontânea (a) e susceptibilidade magnética (b) em função da temperatura reduzida no modelo de Ising tridimensional, obtidas através de simulação de Monte Carlo para os tamanhos de rede N^3 . . .	21
Figura 5 – Diagramas de fases: (a) pressão por temperatura para um fluido simples. As linhas indicam as transições de primeira ordem (coexistência de fases). Além disso, temos o ponto triplo (T_t, P_t) e o ponto crítico (T_c, P_c) indicados; (b) campo magnético por temperatura num ferromagneto simples, onde a linha cheia indica a coexistência de duas fases ferromagnéticas distintas.	22
Figura 6 – Curvas da energia livre em função do parâmetro de ordem m : teoria de Landau para transições contínuas.	24
Figura 7 – Curvas da energia livre em função do parâmetro de ordem m na teoria de Landau para uma transição descontínua ou de primeira ordem. A temperatura de transição, nesse caso, corresponde à curva preta (—), na qual os mínimos com $m = 0$ e $m \neq 0$ possuem valores iguais.	25
Figura 8 – Ilustração do comportamento característico do parâmetro de ordem em função da temperatura nas transições de fase magnéticas: (a) primeira ordem e (b) segunda ordem. No caso magnético, o parâmetro de ordem é a magnetização.	26
Figura 9 – Ilustração gráfica da relação $\langle e^{-x} \rangle \geq e^{-\langle x \rangle}$. A desigualdade de Gibbs-Bogoliubov provém da convexidade da função exponencial.	28
Figura 10 – Gráficos de $y = \text{tgh}(m)$ e $y = m$. As soluções são dadas pelas interseções.	30
Figura 11 – Magnetização em função da temperatura no modelo de Ising spin-1/2 para a rede quadrada. As linhas cheias, tracejadas e pontilhadas são para os casos $N = 1$, $N = 2$ e $N = 4$, respectivamente.	33

Figura 12 – Magnetização em função da temperatura no modelo de Ising com $S = 1$. Os números com cores correspondentes às curvas indicam o valor de q . Linhas cheias e tracejadas são para os casos $N = 1$ e $N = 2$, respectivamente.	34
Figura 13 – Magnetização em função da temperatura no modelo de Ising com $S = 3/2$. As linhas cheias e tracejadas são para os casos $N = 1$ e $N = 2$, respectivamente. Os números com cores correspondentes às curvas indicam o valor de q	36
Figura 14 – Magnetização em função da temperatura no modelo de Ising com $S = 2$. Os números com cores correspondentes às curvas indicam o valor de q . Linhas cheias e tracejadas são para os casos $N = 1$ e $N = 2$, respectivamente.	37
Figura 15 – Magnetização em função da temperatura no modelo de Ising com $S = 5/2$. As linhas cheias e tracejadas são para os casos $N = 1$ e $N = 2$, respectivamente. Os números com cores correspondentes às curvas indicam o valor de q	39
Figura 16 – Magnetização em função da temperatura no modelo de Ising spin-1/2 para a rede quadrada com aproximações MFA e EFT. Os tamanhos dos <i>clusters</i> são indicados com as cores das curvas. As linhas cheias e tracejadas são para MFA e EFT, respectivamente. Pode-se comparar com a solução exata, nesse caso.	44
Figura 17 – Variações térmicas da magnetização para $\Delta = 1$ com diferentes valores do parâmetro DM: a) $D/J = 1$, b) $D/J = 3$, c) $D/J = 4,7$, d) $D/J = 4,95$ e e) $D/J = 5$. As linhas cheias e tracejadas correspondem às soluções estáveis e instáveis, respectivamente. As linhas pontilhadas verticais indicam a descontinuidade de m nas temperaturas críticas de primeira ordem para as curvas d) e e).	52
Figura 18 – Diagrama de fases do modelo de Heisenberg com spin-3/2 para valores selecionados de Δ . As linhas cheias e pontilhadas indicam as transições de fase contínuas e descontínuas, respectivamente. Os pontos tricríticos são marcados pelos pontos no gráfico. A inserção mostra em detalhes a região tricrítica e as linhas de transição de primeira ordem.	53
Figura 19 – Energia interna em função da temperatura para valores selecionados de D/J e anisotropia $\Delta = 1$	54
Figura 20 – Calor específico em função da temperatura para valores selecionados de D/J e anisotropia $\Delta = 1$	55
Figura 21 – Susceptibilidade magnética a campo nulo em função da temperatura para valores selecionados de D/J e anisotropia $\Delta = 1$	55

Figura 22 – Variações térmicas da magnetização para $\Delta = 1$ com diferentes valores do parâmetro DM: a) $D/J = 1,0$, b) $D/J = 3,5$, c) $D/J = 5,0$, d) $D/J = 5,20$ e e) $D/J = 5,25$. As linhas cheias e tracejadas correspondem às soluções estáveis e instáveis, respectivamente. As linhas pontilhadas verticais indicam a descontinuidade de m nas temperaturas críticas de primeira ordem para as curvas d) e e).	59
Figura 23 – Temperatura crítica do modelo de Heisenberg spin-2 como função da interação DM para valores selecionados de Δ . As linhas cheias e pontilhadas indicam as transições de fase contínuas e descontínuas, respectivamente. Os pontos tricríticos são marcados pelos pontos no gráfico. A inserção mostra em detalhes a região tricrítica e as linhas de transição de primeira ordem.	60
Figura 24 – Energia interna em função da temperatura para valores selecionados de D/J e anisotropia $\Delta = 1$.	61
Figura 25 – Calor específico em função da temperatura para valores selecionados de D/J e anisotropia $\Delta = 1$.	61
Figura 26 – Susceptibilidade magnética a campo nulo em função da temperatura para valores selecionados de D/J e anisotropia $\Delta = 1$.	62
Figura 27 – Diagrama de fases $k_B T_c/J - D/J$ com $\Delta = 0,3$ para $S = 1/2$, $S = 1$, $S = 3/2$ e $S = 2$ na rede cúbica simples.	63
Figura 28 – Magnetização em função da temperatura com $D/J = 0,5$ e $\Delta = 1$ para os casos de $S = 1/2$ a $S = 2$.	64
Figura 29 – Energia interna em função da temperatura para diferentes tipos de spin e valores fixos $\Delta = 1$ e $D/J = 0,5$.	65
Figura 30 – Calor específico em função da temperatura para diferentes tipos de spin e valores fixos $\Delta = 1$ e $D/J = 0,5$.	65
Figura 31 – Susceptibilidade magnética a campo nulo em função da temperatura para diferentes tipos de spin e valores fixos $\Delta = 1$ e $D/J = 0,5$.	66
Figura 32 – Diagramas de fases $k_B T_c/J - D/J - H/J$ mostrando as superfícies de transições para (a) $p = 1$ e (b) $p = 0$. As curvas em vermelho separando as superfícies, para ambos os casos, correspondem às soluções dos pontos tricríticos.	70
Figura 33 – (a) Plano $H/J - D/J$ com p variando de 0 a 1 com incremento 0,1; (b) Plano $k_B T_c/J - D/J$ com p variando de 0 a 0,6 com um incremento de 0,1. Em ambos os diagramas, as linhas cheias demarcam soluções tricríticas. Para casos com $0,1 \leq p \leq 0,6$, a presença dos pontos críticos de quarta ordem é indicada. A linha pontilhada vermelha indica a projeção dos pontos críticos de quarta ordem para todos os valores de p .	71

Figura 34 – Diagrama de fases: (a) $k_B T_c/J - H/J - p$ com $D/J = 0,5$. As curvas cheias e tracejadas representam as soluções de transições de segunda e de primeira ordem, respectivamente. A linha preta determina a solução dos pontos tricríticos, terminando em um ponto crítico de quarta ordem (vermelho). (b) $k_B T_c/J - p$ mostrando o comportamento das curvas tricríticas para diferentes valores de D/J	71
Figura 35 – Modelo de Heisenberg no limite Ising ($\Delta = 1$) com interação DM: (a) Magnetização em função da temperatura para o valor reduzido $D/J = 0,8$; (b) Diagrama de fases $k_B T_c/J - D/J$	73
Figura 36 – Diagramas de fases do modelo de Heisenberg via EFT-2 (com $\Delta = 1$). As curvas determinam as transições de fase de segunda ordem para os modelos de spin-1/2 e spin-1.	73
Figura 37 – Resultados no modelo de Heisenberg isotrópico antiferromagnético para rede cúbica simples: (a) Diagrama de fases no plano $k_B T_N/ J - D/ J $; (b) Magnetizações de sub-redes e alternada em função da temperatura para $D/ J = 0,5$. Os resultados são comparados com $S = 1/2$. Nesse caso, como não há campo magnético aplicado, as curvas da magnetização alternada m_S coincidem com a magnetização de sub-red m_A	74
Figura 38 – Curvas da magnetização alternada em função da temperatura para alguns valores fixos de $D/ J $ no modelo isotrópico antiferromagnético com $S = 1$	75

Lista de tabelas

Tabela 1	– Exemplos de transições de fases com os respectivos parâmetros de ordem.	26
Tabela 2	– Temperaturas críticas para redes diversas obtidas através das aproximações de um e dois sítios no modelo de Ising spin-1.	34
Tabela 3	– Temperaturas críticas para redes diversas obtidas através das aproximações de um e dois sítios no modelo de Ising spin-3/2.	35
Tabela 4	– Temperaturas críticas para redes diversas obtidas através das aproximações de um e dois sítios no modelo de Ising spin-2.	37
Tabela 5	– Temperaturas críticas para redes diversas obtidas através das aproximações de um e dois sítios no modelo de Ising spin-5/2.	39
Tabela 6	– Localização dos pontos tricríticos, valores críticos da interação DM ($k_B T_c / J \rightarrow 0$) e temperaturas críticas com $D = 0$ para $S = 1/2$, $S = 1$, $S = 3/2$ e $S = 2$ na rede cúbica simples.	64

Sumário

1	Introdução	14
2	Magnetismo e transições de fases	16
2.1	Modelos magnéticos	17
2.2	Transições de fases	21
2.2.1	Teoria de Landau	22
3	Métodos aproximativos	27
3.1	Aproximações de campo médio	27
3.1.1	Spin-1/2	27
3.1.1.1	Minimização da energia livre	27
3.1.2	Spin-1	33
3.1.3	Spin-3/2	35
3.1.4	Spin-2	36
3.1.5	Spin-5/2	38
3.2	Teoria de campo efetivo	39
3.2.1	Método do operador diferencial	41
3.2.2	Método de integração funcional	44
3.2.3	Identidade de van der Waerden para $S \geq 1$	46
4	Modelo de Heisenberg anisotrópico com interação Dzyaloshinskii-Moriya	48
4.1	Caso $S = 3/2$	49
4.1.1	Forma matricial do hamiltoniano	49
4.1.2	Autovalores	50
4.1.3	Função de partição e magnetização	50
4.1.4	Resultados	52
4.2	Caso $S = 2$	56
4.2.1	Forma matricial do hamiltoniano	56
4.2.2	Autovalores	57
4.2.3	Função de partição e magnetização	58
4.2.4	Resultados	59
4.3	Comparação com os casos $S \leq 1$	62
4.4	Abordagem a outras versões do modelo	66
4.4.1	Modelo isotrópico com interação DM e campo aleatório	66
4.4.2	Abordagem EFT-2 ao modelo ferromagnético de spin-1	72
4.4.3	Modelo spin-1 antiferromagnético	74
5	Considerações finais	76

Referências	78
Apêndices	90
APÊNDICE A Produto de Kronecker	91
APÊNDICE B Códigos em Fortran	95
APÊNDICE C Artigos publicados	103

1 Introdução

As propriedades magnéticas dos materiais têm sido um tópico de grande interesse ao longo do tempo [1,2]. Atualmente, a investigação de transições de fases e fenômenos críticos em sistemas de spins possui grande relevância [3–5], pois possibilitam muitas vantagens relacionadas a aplicações em novas tecnologias. Dessa forma, abordagens teóricas que lidam com diferentes efeitos anisotrópicos, tais como campo cristalino, Dzyaloshinskii-Moriya e campo magnético aleatório têm tido crescente interesse [6–11]. É bem conhecido o fato de que o tratamento da desordem em sistemas magnéticos representam um grande desafio, uma vez que suas propriedades são tipicamente mais complexas em relação a sistemas puros ou não desordenados. O modelo de Heisenberg, por exemplo, tem sido vastamente empregado na abordagem a sistemas com tais características [12–19].

Usualmente, o hamiltoniano $\mathcal{H} = -J_{12}\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$ descreve a interação de troca¹ (ou *exchange*) entre dois spins no modelo de Heisenberg [21]. \mathcal{H} é dado em termos de um produto escalar entre \mathbf{S}_1 e \mathbf{S}_2 , de modo que a energia é minimizada se eles estiverem numa orientação colinear (paralela ou antiparalela). Nesse caso, a interação é dita simétrica e qualquer desvio desta configuração está associado a um custo energético. Quando atua entre dois spins \mathbf{S}_1 e \mathbf{S}_2 , a interação Dzyaloshinskii-Moriya (DM) [22,23], por sua vez, é descrita pelo termo $\mathcal{H}_{DM} = -\mathbf{D}_{12} \cdot (\mathbf{S}_1 \times \mathbf{S}_2)$. O produto vetorial resulta num vetor perpendicular ao plano de \mathbf{S}_1 e \mathbf{S}_2 vezes (produto escalar) o vetor \mathbf{D} . Isto assegura que pode ocorrer ganho energético na configuração de ângulo não-nulo entre dois spins. Normalmente, diz-se que a interação DM é de natureza antissimétrica.

A interação DM possui aplicação direta em antiferromagnetos [24,25], explicando o efeito conhecido como ferromagnetismo fraco [26], como no composto La_2CuO_4 [27]. Tal efeito pode ocorrer também em ferrimagnetos [28]. Essa interação é levada em conta na explicação de fenômenos com presença de quiralidade² [29,30], especialmente em sistemas bidimensionais [29,30], em estruturas denominadas *skyrmions* [31–38]. Além disso, o papel da interação DM para coexistência e forte acoplamento entre ferroeletricidade e ordem magnética incomensurável tem sido considerado [39]. A explicação da polarização elétrica espontânea ou induzida em compostos como CuFeO_2 [40] e $\text{Ni}_3\text{V}_2\text{O}_8$ [41] também leva em conta a presença desta interação.

De um ponto de vista teórico, esta interação tem sido investigada em alguns modelos

¹ De acordo com a mecânica quântica, a interação de troca está fundamentalmente baseada no princípio de exclusão de Pauli, a partir da exigência de que as funções de onda das partículas sejam antissimétricas em relação à troca das coordenadas. Para uma derivação matemática completa, vide Ref. [20].

² Quiralidade é uma forma de assimetria do sistema. Se a estrutura atômica de um magneto possui ausência de simetria por inversão, diz-se que é um magneto quiral. Um exemplo de composto intermetálico com tal característica é o monossilicida de manganês (MnSi).

aplicados ao estudo sistema com emaranhamento quântico [42–46]. Experimentalmente, observações recentes têm indicado que a variação da temperatura é possivelmente uma forma de controle da interação DM [47]. Isso pode ter influência significativa em potenciais aplicações, especialmente em filmes finos. Recentemente, a contribuição da interação DM tem sido estudada para $S = 3/2$ em estruturas do tipo kagomé, como $\text{Co}_3\text{V}_2\text{O}_8$ [48].

O estudo desenvolvido na presente tese trata das propriedades magnéticas e críticas do modelo de Heisenberg ferromagnético de spin-3/2 e spin-2 com interações anisotrópicas de troca e Dzyaloshinskii-Moriya. Uma das principais motivações é o fato de que apenas os modelos com $S = 1/2$ e $S = 1$ haviam sido estudados anteriormente. Assim, os resultados são discutidos em comparação com estes casos. Para o caso spin-1, também são mostrados alguns resultados para os modelos antiferromagnético e ferromagnético isotrópico com inclusão de campo aleatório numa distribuição trimodal. Além disso, foi analisado o modelo com $S = 1$ através de uma abordagem via teoria de campo efetivo.

O texto está organizado da seguinte forma: no [Capítulo 2](#) são discutidos alguns modelos magnéticos e a teoria de Landau para as transições de fases. No [Capítulo 3](#) é feita uma descrição detalhada de algumas técnicas aproximativas, inclusive para spins $S > 1/2$. Os resultados são apresentados e discutidos no [Capítulo 4](#). Por fim, no [Capítulo 5](#), são feitas as considerações finais.

2 Magnetismo e transições de fases

O estudo dos fenômenos críticos baseia-se, de modo geral, em modelos que procuram se adequar à descrição dos materiais, através de seus constituintes microscópicos. No caso do magnetismo, o momento magnético intrínseco do elétron, denominado spin, é o elemento que desempenha papel fundamental na descrição das propriedades. Neste Capítulo são descritos alguns modelos utilizados no estudo de sistemas magnéticos interagentes e localizados. É de particular interesse a classe de materiais sólidos que exibem não apenas regularidade no arranjo espacial atômico, mas também no alinhamento de seus momentos magnéticos. A estrutura magnética dos ferromagnetos, antiferromagnetos e ferrimagnetos são as mais comuns nos materiais magneticamente ordenados.

Os momentos magnéticos em materiais paramagnéticos são desordenados até a aplicação de um campo magnético externo. No estado cristalino, a maioria dos elementos mostram este comportamento. Contudo, em certos metais 3d, terras raras e seus compostos, os momentos magnéticos tornam-se espontaneamente ordenados ou alinhados em uma direção particular, abaixo de uma temperatura característica. Com base na orientação relativa dos momentos, os materiais ferromagnéticos, antiferromagnéticos e ferrimagnéticos são distinguidos.

Um material ferromagnético ocorre quando os momentos magnéticos são de igual magnitude e alinhados paralelamente numa direção comum (eixo fácil de magnetização). Tal configuração é exatamente o que ocorre em baixas temperaturas. No entanto, em altas temperaturas, pode se falar neste alinhamento apenas em termos de médias. Acima de uma certa temperatura T_c , chamada usualmente de temperatura crítica ou temperatura de Curie, o ordenamento é completamente destruído, tornando-se um paramagneto.

Quando ocorre ordenamento dos momentos magnéticos, conquanto a magnetização espontânea líquida seja nula, temos o fenômeno do antiferromagnetismo. Uma nova classe de materiais que exibem esse comportamento foi sugerida inicialmente por Néel. Nesse caso, fala-se de temperatura de transição T_N ou temperatura de Néel [49]. Diferentemente do caso de sistemas ferromagnéticos, muitos arranjos diferentes são possíveis, por exemplo, em estruturas antiferromagnéticas cúbicas.

Os ferrimagnetos, por sua vez, são constituídos de dois ou mais tipos de acoplamentos antiferromagnéticos com momentos magnéticos de diferentes magnitudes. Por possuírem magnetização espontânea, pode-se esperar um comportamento similar ao ferromagnetismo, porém há características significativamente diferentes, como no caso da temperatura de compensação [50, 51]. Geralmente denotada como T_{comp} , esta é a temperatura na qual as magnetizações de duas sub-redes são iguais e opostas entre si, de forma que a soma da

magnetização total é nula [52]. Embora a temperatura de compensação seja semelhante à temperatura crítica em termos de marcar uma transição no comportamento magnético, ela não é necessariamente associada a uma mudança de fase no material, como acontece com os ferromagnetos na temperatura crítica.

Em suma, o estudo das transições de fase magnéticas é essencial para o entendimento da física dos materiais e tem aplicações significativas em diversas áreas, desde a tecnologia de gravação magnética em discos rígidos até a pesquisa em nanomateriais e dispositivos magnéticos avançados. Essas transições não apenas revelam a riqueza do comportamento magnético, mas também proporcionam uma valiosa compreensão sobre a natureza fundamental da matéria e suas interações.

2.1 Modelos magnéticos

No estudo do magnetismo, os modelos são fundamentais para a previsão de transições de fase nos materiais. De forma resumida, eles descrevem as interações entre os momentos magnéticos do material, especificando as energias associadas às configurações dos spins e suas interações, o que permite calcular a energia do sistema em uma configuração magnética específica.

Desse modo, na modelagem magnética dos materiais, a energia é descrita em termos de variáveis de spins. Uma formulação básica é dada pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H} = - \sum_{i,j} J_{ij} \left[\alpha (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + \beta S_i^z S_j^z \right], \quad (2.1)$$

em que i, j representam posições na rede, J é a interação de troca, S_i^μ ($\mu = x, y, z$) é a componente μ do spin e α e β são parâmetros. A partir da expressão (2.1) podem ser definidos três dos modelos mais utilizados no estudo dos fenômenos magnéticos:

$\alpha = \beta = 1$, modelo de Heisenberg;

$\alpha = 1, \beta = 0$, modelo XY;

$\alpha = 0, \beta = 1$, modelo de Ising.

Em essência, os modelos magnéticos estão associados ao tipo de spin e à estrutura de rede (dimensionalidade). Em relação ao tipo do spin, podemos ter, por exemplo, $\vec{S}_i = S_i^z \hat{z}$; $S_i^z = [-S, S]$ (Ising), $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y)$ (XY) e $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ (Heisenberg). Em relação às estruturas, alguns exemplos são as redes quadrada, kagomé e triangular (em duas dimensões), e as redes cúbica simples, cúbica de corpo centrado (*bcc*) e cúbica de face centrada (*fcc*) em três dimensões. Ilustrações esquemáticas para estas redes são apresentadas na [Figura 1](#).

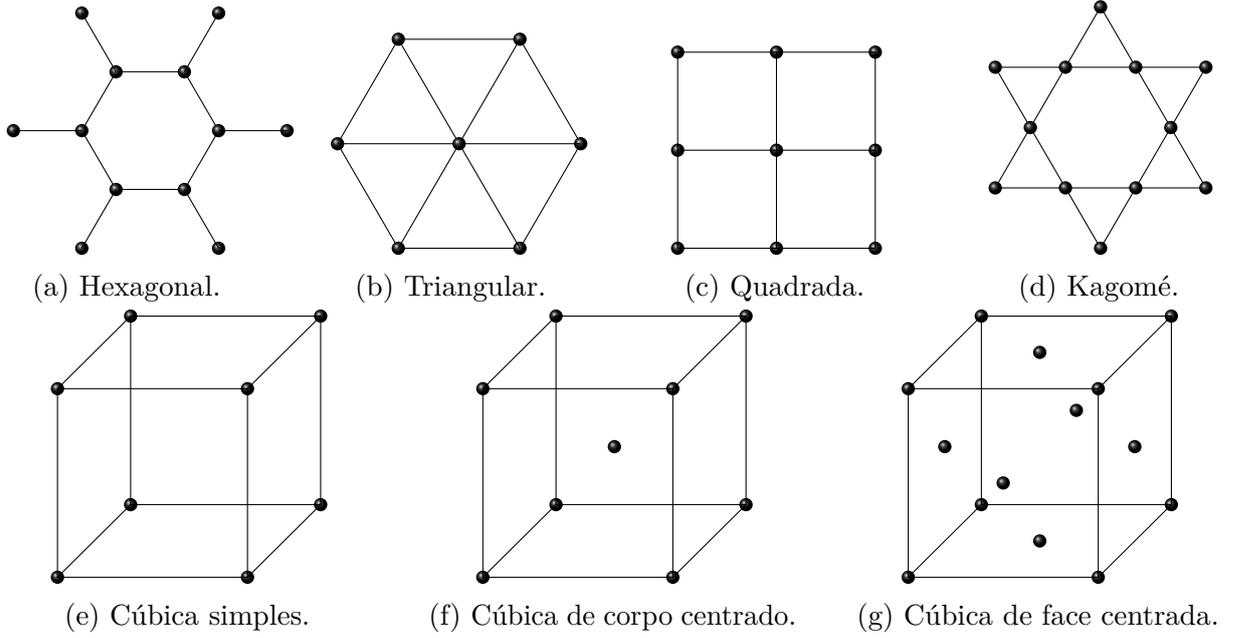


Figura 1 – Representação esquemática de diversas estruturas em duas e três dimensões.

Dentre as diversas variantes de modelos magnéticos presentes na literatura, o modelo de Ising tem grande destaque, principalmente pela simplicidade em relação aos demais. Entretanto, novas adaptações podem ser feitas em busca do tratamento de casos específicos, seja introduzindo novas interações ou aumentando o tipo de spin. Dessa forma, várias modificações foram introduzidas ao longo do tempo, incluindo os bem conhecidos modelos de Blume-Capel (BC) [53, 54] e Blume-Emery-Griffiths (BEG) [55], por exemplo. Em particular, o modelo BC de spin-1 é o caso mais simples em que há ocorrência de ponto tricrítico. Por outro lado, o mesmo modelo com spin-3/2 foi também introduzido através da aproximação de campo médio para se obter um entendimento qualitativo das transições de fase no composto DyVO_4 [56] e propriedades críticas de fluidos ternários [57].

Para uma rede de N spins, o modelo de Ising é usualmente definido por:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i, \quad (2.2)$$

em que a primeira soma é efetuada sobre os vizinhos mais próximos, o que é denotado por $\langle i,j \rangle$, enquanto a segunda descreve o campo externo atuando sobre cada sítio i da rede. H aqui já inclui o momento magnético em cada spin, J é a constante de troca ou *exchange* e σ diz respeito às variáveis de spin, assumindo dois possíveis estados: +1 e -1 (modelo binário). O modelo de Ising foi inicialmente sugerido por Lenz [58], em 1920, como um modelo simples para descrever o ferromagnetismo. O caso unidimensional foi então estudado em detalhes por Ising [59], que em 1925 provou não haver transição de fase em $T > 0$. A magnetização por spin, nesse caso, é dada por

$$m = \frac{\sinh(\beta H)}{\sqrt{\sinh^2(\beta H) + e^{-4\beta J}}}, \quad (2.3)$$

podendo ser obtida sem grandes dificuldades pela técnica da matriz da transferência [60]. No regime $\beta J \rightarrow 0$, a solução é simplificada para $m = \tanh(\beta H)$. Porém, independentemente do valor finito assumido por βJ , no limite $H \rightarrow 0$ sempre ocorre que $m = 0$ (magnetização espontânea nula). Uma análise gráfica da solução de (2.3) como função de βH para diferentes valores de βJ é mostrada na Figura 2.

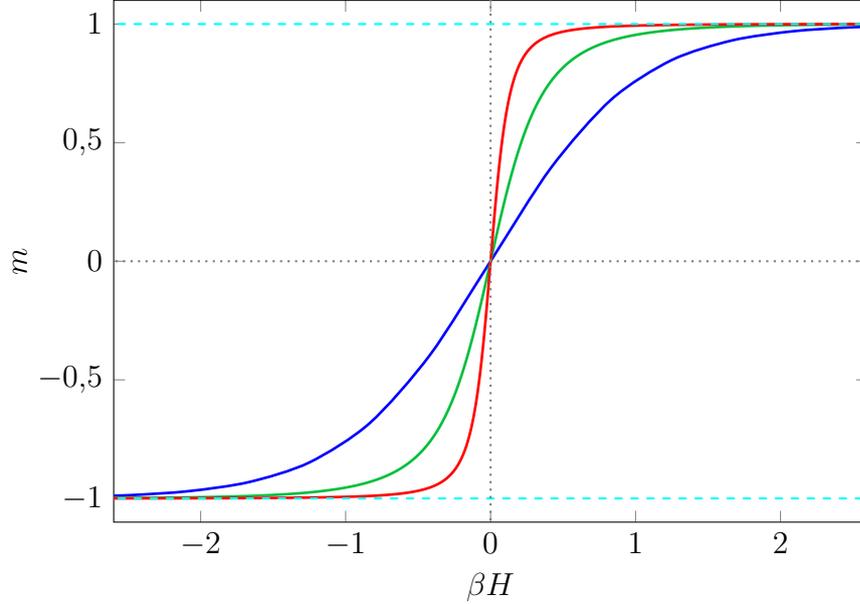


Figura 2 – Magnetização em função do campo magnético no modelo de Ising unidimensional, Eq. (2.3), para os valores $\beta J = 0$ (—), $\beta J = 0,5$ (—) e $\beta J = 1$ (—). Não há magnetização espontânea.

A partir do resultado “frustrante” em uma dimensão, Ising supôs que para dimensões maiores o sistema de spins interagentes também não exibiria transição de fase. No entanto, o fato é que em duas dimensões o modelo já apresenta um nível de complexidade muito maior do que para $d = 1$. Assim, em 1936, Peierls [61] elaborou um argumento sugestivo para a existência de uma magnetização espontânea com temperatura não nula para o modelo em duas dimensões. A temperatura de transição exata na rede quadrada foi encontrada primeiramente em 1941 por Kramers e Wannier [62]. Isto foi seguido pela solução exata para a energia livre, em 1944, por Onsager [63]. Em termos históricos, a expressão para a magnetização espontânea

$$m = \left[1 - \frac{1}{\sinh^4\left(\frac{2J}{k_B T}\right)} \right]^{1/8} \quad (2.4)$$

e, conseqüentemente, o valor exato do expoente crítico $\beta = 1/8$ parecem ter sido anunciados por Onsager apenas de maneira informal em alguma conferência [64, 65], tendo sido depois elaborada e publicada uma prova mais rigorosa por Yang [66]. Um gráfico da magnetização espontânea dada pela Eq. (2.4) pode ser visto na Figura 3.

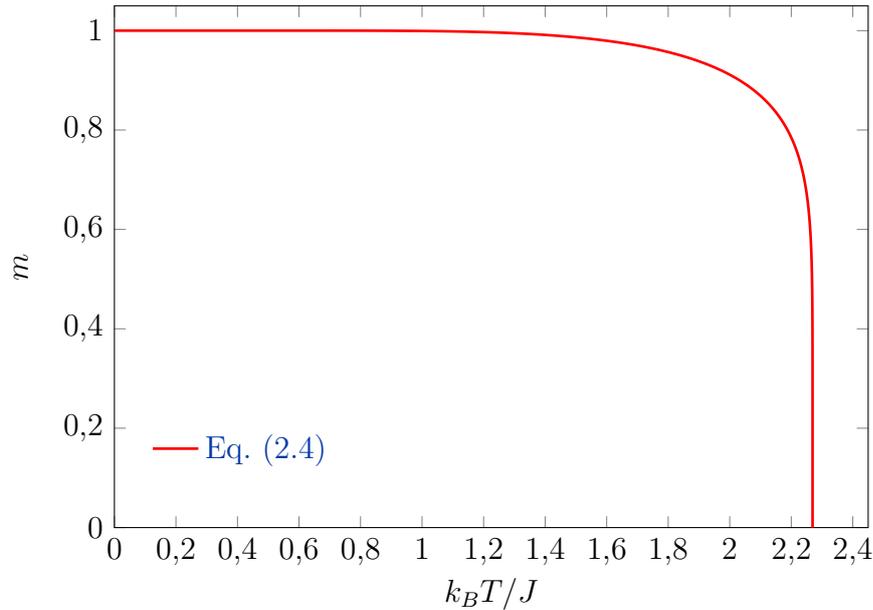


Figura 3 – Magnetização espontânea em função da temperatura reduzida para o modelo de Ising na rede quadrada, de acordo com a solução analítica (—) descrita pela Eq. (2.4).

A Eq. (2.4) pode ser resolvida para encontrar $k_B T / J$, resultando em

$$\frac{k_B T}{J} = \frac{2}{\operatorname{argsenh}\left(\frac{1}{\sqrt{1-m^8}}\right)}, \quad (2.5)$$

que no limite $m \rightarrow 0$ fornece a temperatura crítica¹:

$$\frac{k_B T_c}{J} = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} \approx 2,2692. \quad (2.6)$$

Devido à grande complexidade no caso tridimensional, as soluções exatas de alguns modelos da mecânica estatística geralmente ocorrem para uma e duas dimensões [67]. Em 2000, [Istrail](#) [68] mostrou que obter a solução exata do modelo de Ising não planar consiste essencialmente em um problema NP-completo, o que basicamente significa ser computacionalmente intratável. Entretanto, nos últimos anos [Zhang](#) [69] e colaboradores [70, 71] têm reivindicado uma solução para o caso do modelo em três dimensões, ao que [Fisher e Perk](#) [72] têm rebatido veementemente, apontando algumas falhas [73, 74] na solução alegada. Dessa forma, as simulações computacionais, tais como o método de Monte Carlo, continuam sendo o resultado mais confiável em relação às estimativas das propriedades do modelo 3D. Atualmente, pode-se considerar que o melhor valor estimado para a temperatura inversa crítica na rede cúbica simples é o da referência [75]: $K_c = 0,221654626(5)$, com simulações de tamanhos de rede de até 1024^3 .

¹ Na verdade, a partir de (2.4), já é imediato que a criticalidade é satisfeita simplesmente resolvendo-se a condição $\operatorname{senh}(2J/k_B T_c) = 1$.

A título de ilustração, na [Figura 4](#) são mostrados alguns resultados de uma simulação feita em Python para o modelo de Ising 3D, via método de Monte Carlo², em redes cúbicas relativamente pequenas. Em ambos os gráficos, as linhas verticais tracejadas indicam o valor da “pseudotemperatura” crítica obtido pela Ref. [75].

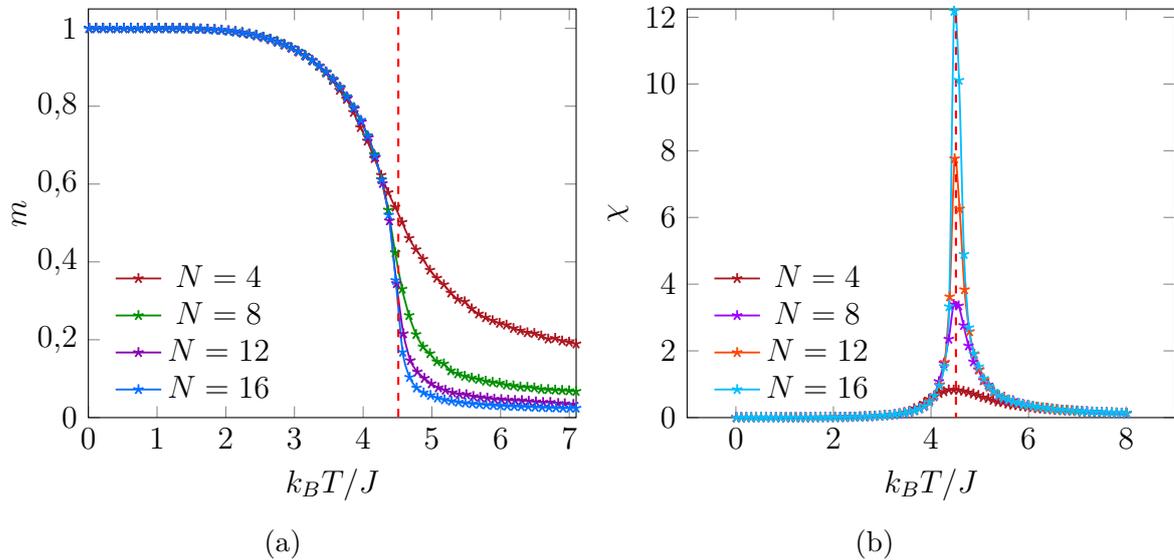


Figura 4 – Magnetização espontânea (a) e susceptibilidade magnética (b) em função da temperatura reduzida no modelo de Ising tridimensional, obtidas através de simulação de Monte Carlo para os tamanhos de rede N^3 .

2.2 Transições de fases

Uma fase consiste num estado da matéria em equilíbrio termodinâmico. Um mesmo sistema pode estar em vários estados ou fases diferentes, dependendo da condição macroscópica (pressão, temperatura, campo magnético etc.). Um caso típico da nossa experiência diária trata-se da água, para a qual os estados de gelo, líquido e vapor são facilmente observados. Dada uma condição macroscópica, os sistemas espontaneamente vão para uma fase particular correspondente à menor energia livre.

Há uma vasta gama de transições de fase começando pelos casos de líquido-gás, paramagneto-ferromagneto, condutor-supercondutor, dentre muitas outras. A maioria delas pertencem a um dos dois tipos: primeira ordem e segunda ordem. Pelo critério de Ehrenfest, uma transição de fase de ordem n corresponde a uma descontinuidade da n -ésima derivada da energia livre. Comumente, as transições de fase são estudadas através da variação da temperatura do sistema e a transição se dá em $T = T_c$, sendo T_c a temperatura crítica.

Na [Figura 5](#), pode-se ver que as linhas de transição de primeira ordem (curva de vaporização para um fluido e a linha $H - T$ para sistemas magnéticos) terminam em um

² Dentre alguns dos algoritmos que podem ser encontrados *online* e adaptados, está um código em Fortran no [site do Prof. Rubin H. Landau](#) (ver também na [Wayback Machine](#)).

ponto crítico em $T = T_c$.

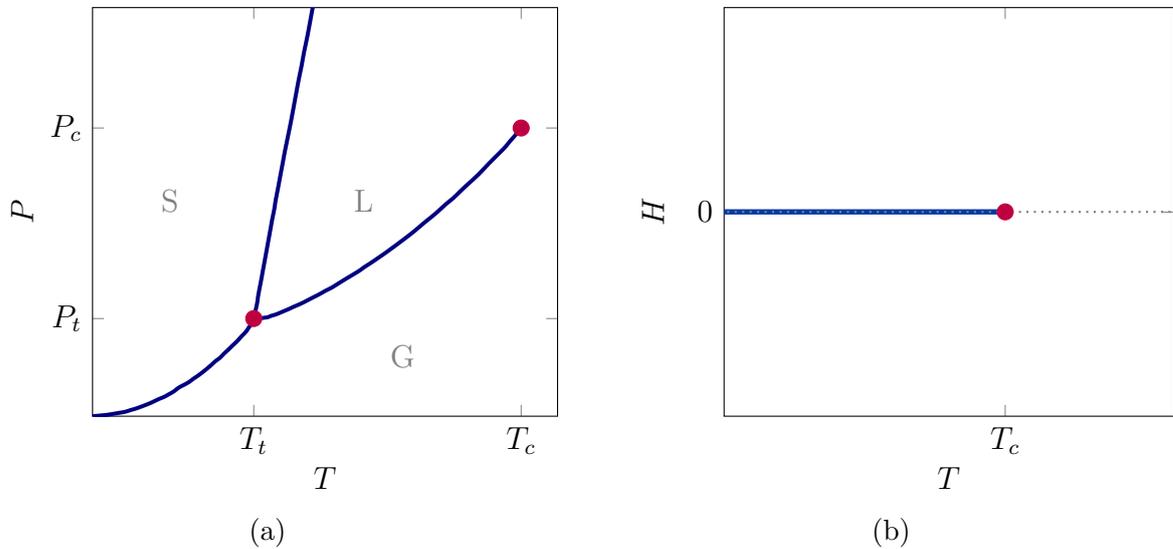


Figura 5 – Diagramas de fases: (a) pressão por temperatura para um fluido simples. As linhas indicam as transições de primeira ordem (coexistência de fases). Além disso, temos o ponto triplo (T_t, P_t) e o ponto crítico (T_c, P_c) indicados; (b) campo magnético por temperatura num ferromagneto simples, onde a linha cheia indica a coexistência de duas fases ferromagnéticas distintas.

O diagrama $P - T$, por sua vez, mostra os domínios das três fases distintas (sólida, líquida e gasosa) para um fluido. Existem dois pontos particulares: o ponto triplo (P_t, T_t) na junção dos três domínios e o ponto crítico (P_c, T_c) , ponto final na fronteira entre os domínios das fases líquida e gasosa. Ao contornar ao redor do ponto crítico pode-se passar continuamente de um estado líquido para um estado gasoso (sem transição descontínua).

2.2.1 Teoria de Landau

Em geral, as equações de estado de um sistema podem ser expressas em termos de quantidades termodinâmicas, tais como pressão, volume, entropia etc. Estas quantidades podem sempre ser escritas como derivadas da energia livre [76]. A ideia central da teoria de Landau é que a energia livre de qualquer sistema próxima à transição de fase pode ser escrita como um funcional do parâmetro de ordem que, por sua vez, depende da temperatura.

No caso de uma transição de fase contínua, o parâmetro de ordem é seguramente pequeno nas proximidades da temperatura crítica podendo, então, ser avaliado através de uma expansão. O tipo de termos dessa expansão depende fortemente da natureza do parâmetro de ordem e das simetrias do sistema. Para o caso do magnetismo, no qual o parâmetro de ordem é a magnetização m , temos

$$F(T, m) = F_0(T) + a(T)m^2 + b(T)m^4. \quad (2.7)$$

Em (2.7), por questões de simetria, é notável o fato de que a energia livre não depende do sinal de m , ou seja, $F(T, m) = F(T, -m)$, de modo que apenas potências pares devem aparecer na expansão.

A dependência de a com relação à temperatura é considerada de tal forma que para $T \geq T_c$ a energia livre será minimizada apenas para $m = 0$, já para $T < T_c$, a energia apresenta mínimos³ $|m| > 0$.

Assim, temos duas situações distintas: $a > 0$ quando $T > T_c$ e $a < 0$ quando $T < T_c$. Dessa forma, a energia livre será mínima em $m = 0$ quando $T > T_c$ e em $m \neq 0$ quando $T < T_c$. Além disso, há ocorrência do ponto crítico em $T = T_c$ quando $a(T_c) = 0$, uma vez que F deve variar continuamente na região de transição. Com isto, pode-se escrever:

$$a = \alpha(T - T_c), \quad \alpha > 0. \quad (2.8)$$

Minimizando com relação a m , a energia livre tem os extremos:

$$m = 0 \quad \text{e} \quad m = \pm \sqrt{\frac{-a}{2b}} = \pm \sqrt{\frac{\alpha}{2b}(T_c - T)}. \quad (2.9)$$

Quando $T > T_c$, um mínimo ocorre para $m = 0$. Por outro lado, quando $T < T_c$ a minimização se dá para $m = \pm \sqrt{(\alpha/2b)(T_c - T)}$. Dessa forma, abaixo de T_c o parâmetro de ordem é não nulo e cresce proporcional a $(T_c - T)^{1/2}$.

Assim, pode-se expressar a energia livre da seguinte maneira:

$$F(T, m) = \begin{cases} F_0, & \text{se } T > T_c; \\ F_0 - \frac{\alpha^2(T_c - T)^2}{4b}, & \text{se } T < T_c. \end{cases} \quad (2.10)$$

Na Figura 6 é esquematizado o comportamento da energia livre para o caso de uma transição de fase de segunda ordem. Acima de T_c há um mínimo global da energia livre em $m = 0$. Em T_c , a curva torna-se mais achatada na vizinhança de $m = 0$ e, finalmente, em $T < T_c$ passam a existir dois mínimos simétricos da energia livre cujas posições indicam os valores finitos do parâmetro de ordem $\pm m_0$; enquanto $m = 0$ passa a ser um máximo local.

³ O que garante que F será mínima são as condições $(\partial F/\partial m)_T = 0$ e $(\partial^2 F/\partial m^2)_T \geq 0$ para o equilíbrio. Isto assegura que $b > 0$ para o equilíbrio mais estável (graficamente, um mínimo global).

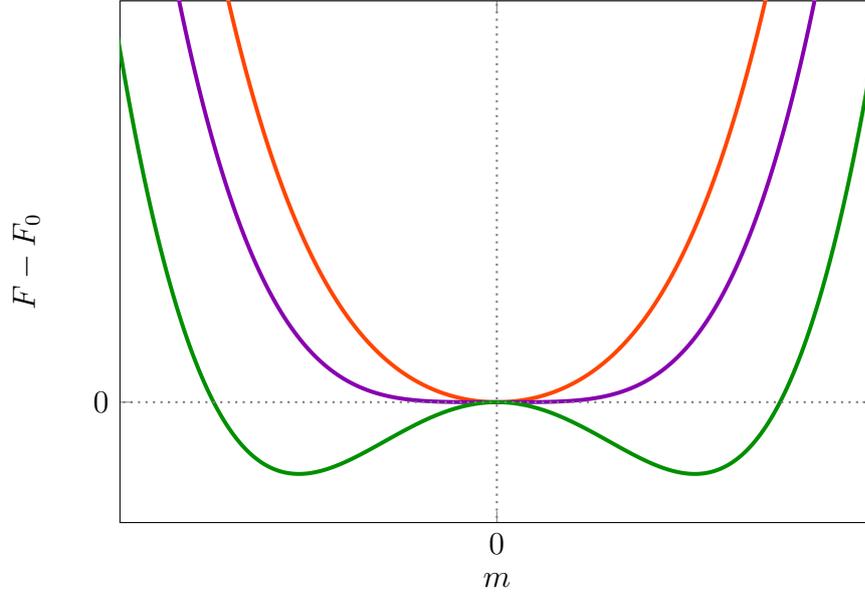


Figura 6 – Curvas da energia livre em função do parâmetro de ordem m : teoria de Landau para uma transições contínuas. As linhas são para temperaturas $T > T_c$ (—), $T = T_c$ (—) e $T < T_c$ (—).

A teoria de Landau permite também descrever um ponto tricrítico [77], onde termina uma linha de transição de segunda ordem. Para isso, deve-se levar em conta também um termo de sexta ordem na expansão da energia livre, escrevendo-a como:

$$F(m, T) = F_0(T) + a(T)m^2 + b(T)m^4 + c(T)m^6 + \dots, \quad (2.11)$$

cujos extremos são dados por:

$$\left. \frac{\partial F}{\partial m} \right|_T = 2am + 4bm^3 + 6cm^5 = 0. \quad (2.12)$$

As soluções para (2.12) são:

$$m = 0 \quad \text{e} \quad m^2 = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 3ac}}{3c}. \quad (2.13)$$

Nesta situação pode-se ter dois regimes: uma linha de transições de fase contínuas e uma de transições descontínuas. As condições que devem satisfazer uma transição descontínua ou de primeira ordem são $F = F_0$ e $(\partial F / \partial m)_T = 0$. Essas equações simultaneamente resolvidas fornecem:

$$m^2 = \frac{-b}{2c}, \quad (2.14)$$

de modo que para $m^2 > 0$ exige-se $b < 0$, e

$$a = \frac{b^2}{4c}, \quad (2.15)$$

que determina a linha de transição de primeira ordem. Já para transições de segunda ordem, tem-se a condição $a = 0$.

Na [Figura 7](#) é apresentado o comportamento da energia livre para uma transição de fase de primeira ordem.

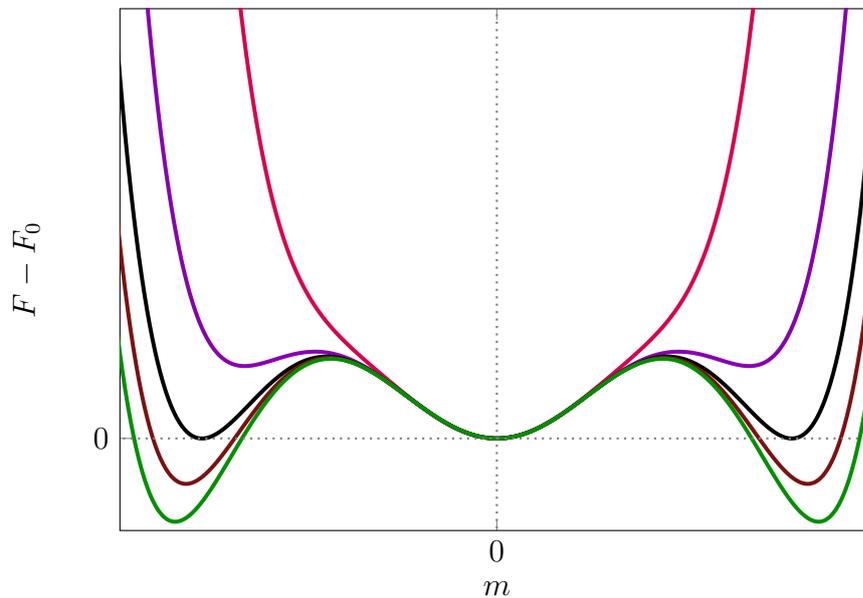


Figura 7 – Curvas da energia livre em função do parâmetro de ordem m na teoria de Landau para uma transição descontínua ou de primeira ordem. A temperatura de transição, nesse caso, corresponde à curva preta (—), na qual os mínimos com $m = 0$ e $m \neq 0$ possuem valores iguais.

As linhas começam com temperaturas acima de T_c , onde o sistema encontra-se na fase desordenada, pois F tem apenas um mínimo em $m = 0$. As temperaturas vão decrescendo até $T = T_c$, que corresponde à temperatura para a qual ocorre transição de primeira ordem, quando os mínimos da energia livre $m \neq 0$ são iguais ao mínimo $m = 0$. Neste ponto, as fases ordenada e desordenada coexistem. Para $T < T_c$, o mínimo global $m \neq 0$ garante a estabilidade do sistema na fase ordenada.

Vale observar ainda que para temperaturas um pouco acima da transição de primeira ordem aparecem mínimos locais, que representam a situação de metaestabilidade da fase ordenada (o equilíbrio se dá na fase desordenada, pois $m = 0$ é mínimo global). O parâmetro de ordem é uma grandeza termodinâmica que reflete a presença ou ausência de uma ordem específica no sistema, como a magnetização em transições magnéticas, a densidade em transições líquido-sólido, ou a ordem de longo alcance em transições ferroelétricas, entre outras. Na [Tabela 1](#) são listados alguns exemplos de transições de fase. Além disso, o comportamento do parâmetro de ordem em termos da temperatura nas transições de fase pode ser visto na [Figura 8](#).

Tabela 1 – Exemplos de transições de fases com os respectivos parâmetros de ordem [78].

Transição de fase	Parâmetro de ordem	Exemplos
Paramagnética-ferromagnética	Magnetização m	Fe, Ni
Paraelétrica-ferroelétrica	Polarização p	BaTiO ₃ , BiFeO ₃
Paramagnética-antiferromagnética	Magnetização alternada (<i>staggered</i>) $m_s = m_A - m_B$	RbMnF ₃
Gás-líquido	Densidade $\rho - \rho_c$	CO ₂ , H ₂ O

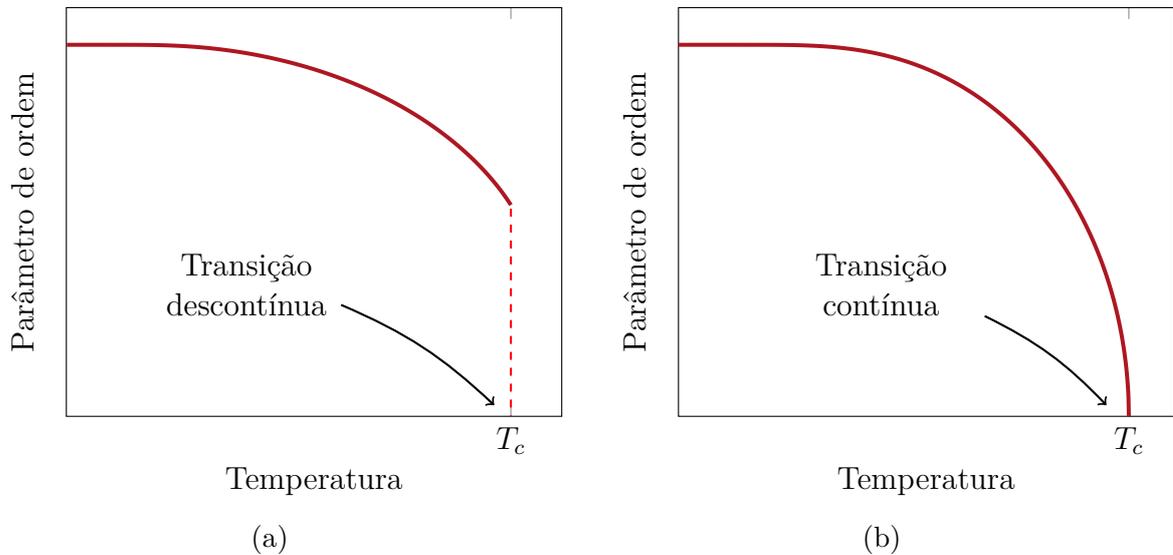


Figura 8 – Ilustração do comportamento característico do parâmetro de ordem em função da temperatura nas transições de fase magnéticas: (a) primeira ordem e (b) segunda ordem. No caso magnético, o parâmetro de ordem é a magnetização.

3 Métodos aproximativos

No tratamento de sistemas magnéticos interagentes, geralmente torna-se inviável levar em conta os detalhes de todas as possíveis interações nos modelos. É o clássico problema de muitos corpos. Desse modo, quando as soluções tornam-se muito complicadas para um tratamento analítico exato, aproximações tais como as teorias de campo médio (MFA) e campo efetivo (EFT)¹ são ferramentas de grande utilidade para obtenção de importantes propriedades físicas. Ocasionalmente, recursos de simulação numérica, a exemplo do método de Monte Carlo, são também utilizados na estimativa de resultados.

3.1 Aproximações de campo médio

Por simplicidade, serão abordadas as expressões para o modelo de Ising, embora o método possa ser aplicado da mesma forma ao modelo de Heisenberg, por exemplo.

3.1.1 Spin-1/2

3.1.1.1 Minimização da energia livre

O método fundamenta-se na desigualdade de Gibbs-Bogoliubov, que é a base formal da teoria de campo médio [79]:

$$G \leq G_0 + \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0, \quad (3.1)$$

onde G é a energia livre do sistema descrito por um hamiltoniano \mathcal{H} (exato), G_0 é a energia livre associada ao sistema simplificado, dado pelo hamiltoniano \mathcal{H}_0 (aproximado) e $\langle \dots \rangle_0$ denota a média tomada do *ensemble* definido por \mathcal{H}_0 .

Seja um sistema dado por um hamiltoniano \mathcal{H} . A energia livre correspondente é definida por:

$$G = -k_B T \ln Z, \quad (3.2)$$

onde Z é a função de partição canônica do sistema:

$$Z = \sum_{\{s\}} e^{-\beta \mathcal{H}\{s\}}, \quad (3.3)$$

cuja soma é realizada sobre todas as configurações de spins (caso magnético). G é a verdadeira energia livre do sistema, sem aproximações.

Considerando agora que:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 \quad (3.4)$$

¹ Optou-se por manter as siglas em inglês: MFA (*mean field approximation*) e EFT (*effective field theory*).

$$Z = \sum e^{-\beta\mathcal{H}} = \sum e^{-\beta\mathcal{H}_1 - \beta\mathcal{H}_0} = \sum e^{-\beta\mathcal{H}_1} e^{-\beta\mathcal{H}_0} \quad (3.5)$$

Dividindo ambos os membros por Z_0 , teremos:

$$\frac{Z}{Z_0} = \frac{\sum e^{-\beta\mathcal{H}_1} e^{-\beta\mathcal{H}_0}}{\sum e^{-\beta\mathcal{H}_0}} = \langle e^{-\beta\mathcal{H}_1} \rangle_0. \quad (3.6)$$

Pela propriedade de convexidade² da função $f(x) = e^{-x}$ (ver Figura 9) é obtida a relação:

$$\langle e^{-\beta\mathcal{H}_1} \rangle_0 \geq e^{-\beta\langle\mathcal{H}_1\rangle_0} \quad (3.7)$$

Com a desigualdade (3.7) segue então de (3.6) que:

$$\frac{Z}{Z_0} \geq e^{-\beta\langle\mathcal{H}_1\rangle_0} \quad \text{ou} \quad \ln Z - \ln Z_0 \geq -\beta\langle\mathcal{H}_1\rangle_0 \quad (3.8)$$

Uma vez que $G = -\frac{1}{\beta} \ln Z$, $G_0 = -\frac{1}{\beta} \ln Z_0$ e $\langle\mathcal{H}_1\rangle_0 = \langle\mathcal{H} - \mathcal{H}_0\rangle_0$, prova-se imediatamente a relação (3.1):

$$G \leq G_0 + \langle\mathcal{H} - \mathcal{H}_0\rangle_0. \quad (3.9)$$

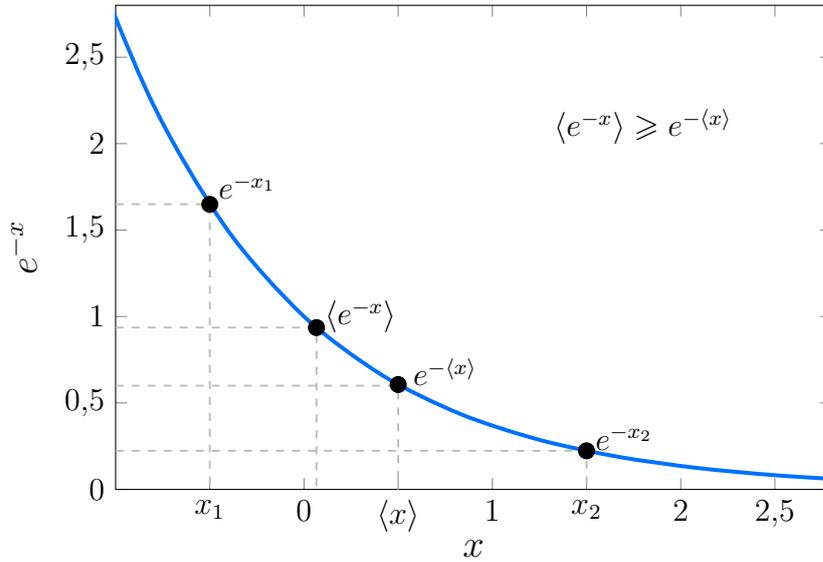


Figura 9 – Ilustração gráfica da relação $\langle e^{-x} \rangle \geq e^{-\langle x \rangle}$. A desigualdade de Gibbs-Bogoliubov provém da convexidade da função exponencial.

Para exemplificar a aplicação, vamos considerar inicialmente uma aproximação de um sítio no modelo de Ising, descrito pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle}^{Nq/2} S_i S_j - H \sum_{i=1}^N S_i \quad (3.10)$$

² Uma função $f(x)$ é convexa se $f\left(\frac{x_1+x_2}{2}\right) \leq \frac{f(x_1)+f(x_2)}{2}$ para todo x_1 e x_2 pertencentes ao domínio. Se o sinal da desigualdade for invertido, a função é dita côncava.

Nesse caso, o hamiltoniano tentativa será dado por:

$$\mathcal{H}_0 = -\lambda \sum_i S_i, \quad (3.11)$$

em que λ é o parâmetro variacional. A energia livre de campo médio pode ser obtida minimizando $G_0 + \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0$ em relação a λ . A função de partição de um único spin Z_0 e a energia livre G_0 correspondentes a \mathcal{H}_0 são dadas por:

$$Z_0 = e^{+\beta\lambda} + e^{-\beta\lambda} = 2 \cosh(\beta\lambda),$$

$$G_0 = -Nk_B T \ln Z_0 = -Nk_B T [\ln 2 + \ln \cosh(\beta\lambda)],$$

e, assim, $m_0 = -\frac{1}{N} \frac{\partial G_0}{\partial \lambda} = \text{tgh}(\beta\lambda)$. O segundo termo do lado direito da desigualdade, por sua vez, pode ser calculado como:

$$\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 = \frac{\sum_{\{S\}} \left[-J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + (\lambda - H) \sum_i S_i \right] e^{\beta\lambda \sum_i S_i}}{\sum_{\{S\}} e^{\beta\lambda \sum_i S_i}} \quad (3.12)$$

$$= -J \sum_{\langle i,j \rangle} \langle S_i \rangle_0 \langle S_j \rangle_0 + (\lambda - H) \sum_i \langle S_i \rangle_0, \quad (3.13)$$

onde se considera que $\langle S_i S_j \rangle_0 \equiv \langle S_i \rangle_0 \langle S_j \rangle_0 = m_0^2$. Desse modo, para um sistema de N spins em uma rede com número de coordenação q :

$$\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 = -\frac{Nq}{2} J m_0^2 + (\lambda - H) N m_0. \quad (3.14)$$

Desse modo, a desigualdade será então dada por:

$$G_0 + \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 = -Nk_B T \ln 2 - Nk_B T \ln \cosh(\beta\lambda) - \frac{Nq}{2} J m_0^2 - N(H - \lambda) m_0, \quad (3.15)$$

cuja minimização fornece:

$$\frac{\partial G_0}{\partial \lambda} - Nq J m_0 \frac{\partial m_0}{\partial \lambda} + N(\lambda - H) \frac{\partial m_0}{\partial \lambda} + N m_0 = 0 \quad (3.16)$$

$$\implies \left(q J m_0 + H - \lambda \right) \frac{\partial m_0}{\partial \lambda} = 0, \quad (3.17)$$

De (3.17), implica que o valor do parâmetro variacional é dado por³ $\lambda = q J m + H$, logo:

$$m = \text{tgh}[K(qm + h)], \text{ com } K = \beta J \text{ e } h = H/J. \quad (3.18)$$

A chamada equação de estado auto-consistente obtida via aproximação de campo médio (3.18) tem uma solução gráfica mostrada na Figura 10 para o caso $H = 0$. Nesse

³ Com notação $m_0 \equiv m$.

caso, há claramente dois regimes: $T > T_c$ e $T < T_c$. No primeiro, apenas a solução $m = 0$ é possível. Já no segundo, há três interseções entre as curvas: $0, \pm m$. Pode-se verificar que $G(0) > G(\pm m)$, de modo que as soluções $\pm m$ são as soluções, nesse caso.

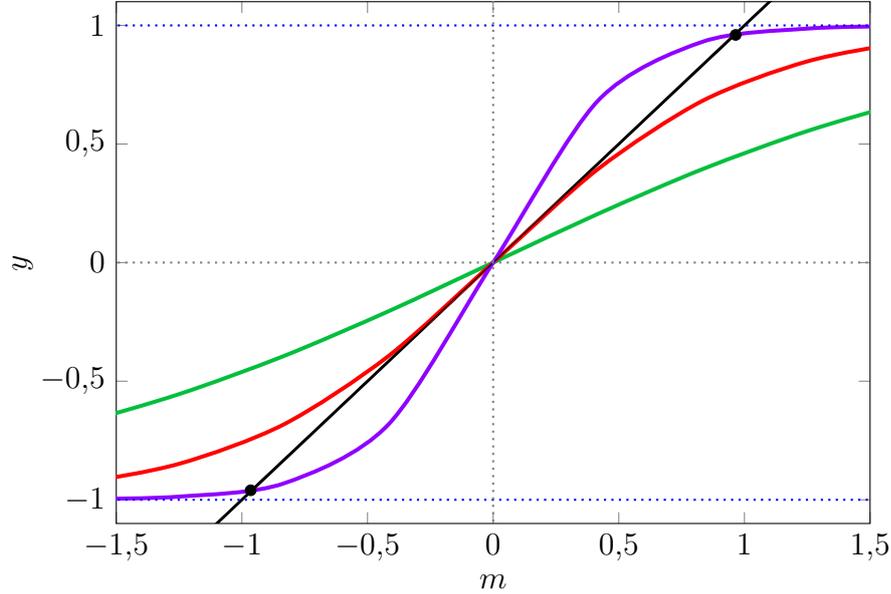


Figura 10 – Gráficos de $y = \text{tgh}(m)$ e $y = m$. As soluções são dadas pelas interseções.

Em $T = T_c$, as inclinações das curvas $y = m$ (—) e $y = \text{tgh}(m)$ (—), de modo que:

$$Kq \operatorname{sech}^2(Kqm) \Big|_{m=0} = 1, \quad (3.19)$$

que no limite $m \rightarrow 0$ dá o resultado $k_B T_c / J = q$.

Vamos agora considerar o caso de uma aproximação de dois sítios. Em uma rede hipercúbica temos $Nq/2$ pares de vizinhos mais próximos⁴ (número de ligações). Assim, no modelo de Ising:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - H \sum_{i=1}^N S_i \quad (3.20)$$

e

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\text{pares}} \mathcal{H}_2, \quad \text{onde } \mathcal{H}_2 = -JS_1 S_2 - \lambda(S_1 + S_2) \quad (3.21)$$

Temos $N/2$ pares de spins no hamiltoniano tentativa e então:

$$Z_0 = Z_2^{N/2}, \quad \text{onde } Z_2 = 2e^{\beta J} \cosh(2\beta\lambda) + 2e^{-\beta J}. \quad (3.22)$$

Logo:

$$G_0 = -\frac{N}{2\beta} \ln \left[2e^{\beta J} \cosh(2\beta\lambda) + 2e^{-\beta J} \right] \quad (3.23)$$

⁴ Cada um dos N sítios possui q ligações, sendo que cada uma destas é compartilhada entre dois vizinhos.

E assim, a magnetização por sítio com relação a \mathcal{H}_0 será:

$$m_0 = -\frac{1}{N} \frac{\partial G_0}{\partial \lambda} = \frac{\sinh(2\beta\lambda)}{\cosh(2\beta\lambda) + e^{-2\beta J}} \quad (3.24)$$

Para o cálculo do segundo termo, temos:

$$\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 = \langle \mathcal{H} \rangle_0 - \langle \mathcal{H}_0 \rangle_0 = -\frac{Nq}{2} J m_0^2 - H N m_0 + J \frac{N}{2} m_0^2 + \lambda N m_0 \quad (3.25)$$

$$\implies \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 = -\frac{NJ}{2} (q-1) m_0^2 - N(H - \lambda) m_0 \quad (3.26)$$

Assim, a partir da minimização

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \left[G_0 - \frac{NJ}{2} (q-1) m_0^2 - N(H - \lambda) m_0 \right] = 0, \quad (3.27)$$

teremos:

$$-N m_0 - NJ(q-1)m_0 \frac{\partial m_0}{\partial \lambda} - NH \frac{\partial m_0}{\partial \lambda} + N m_0 + N \lambda \frac{\partial m_0}{\partial \lambda} = 0 \quad (3.28)$$

$$\left[-NJ(q-1)m_0 - N(H - \lambda) \right] \frac{\partial m_0}{\partial \lambda} = 0 \quad (3.29)$$

Logo, segue de (3.29) que o parâmetro variacional é dado por

$$\lambda = J(q-1)m + H \quad (3.30)$$

e a energia livre, nesse caso, terá a forma:

$$G = G_0 + \underbrace{NJ(q-1)m^2}_{\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0}, \text{ com } G_0 \text{ dada por (3.23)}. \quad (3.31)$$

E a magnetização (3.24) torna-se:

$$m = \frac{\sinh \{2K [(q-1)m + H/J]\}}{\cosh \{2K [(q-1)m + H/J]\} + e^{-2K}}, \quad (3.32)$$

com $K = J/k_B T$.

A aproximação de pares ou método de Oguchi [2] é a maneira mais direta de se melhorar os resultados de campo médio de um sítio. A relação (3.32) fornece uma estimativa ligeiramente melhor da temperatura crítica em relação a Eq. (3.18), conforme será discutido a seguir.

Cluster de um sítio

Em resumo, para $S = 1/2$, um *cluster* de um sítio dá como resultado:

$$m = \operatorname{tgh}(Kqm), \text{ com } K = J/k_B T \text{ e } H = 0. \quad (3.33)$$

Resolvendo diretamente (3.33) para $1/K \equiv k_B T/J$ se obtém:

$$\frac{k_B T}{J} = \frac{qm}{\operatorname{argtanh}(m)}, \quad (3.34)$$

de modo que:

$$\frac{k_B T_c}{J} = \lim_{m \rightarrow 0} \frac{qm}{\operatorname{argtanh}(m)} = q. \quad (3.35)$$

Cluster de dois sítios

Já para um *cluster* de dois sítios:

$$m = \frac{\sinh[2K(q-1)m]}{\cosh[2K(q-1)m] + e^{-2K}} \quad (3.36)$$

Resolvendo também (3.36) para $k_B T/J \equiv K^{-1}$ e tomando o limite para $m \rightarrow 0$, teremos a expressão da temperatura crítica dada por:

$$\frac{k_B T_c}{J} = \frac{2(q-1)}{1 + (q-1)W\left[\frac{\exp\left(\frac{1}{1-q}\right)}{q-1}\right]}, \quad (3.37)$$

em que W é a chamada *função W de Lambert*⁵. Assim, se $q = 4$ (rede quadrada), por exemplo, teremos numericamente a solução

$$\frac{k_B T_c}{J} = \frac{6}{1 + 3W\left[\frac{1}{3}\exp\left(-\frac{1}{3}\right)\right]} \approx 3,7764 < 4. \quad (3.38)$$

Para uma rede cúbica simples, temos $k_B T_c/J = 6$ na aproximação com $N = 1$ e $k_B T_c/J = 5,8469$ para $N = 2$, em que N diz respeito ao número de spins do *cluster*.

Cluster de quatro sítios

Em se tratando do caso spin-1/2, não é tão difícil de se obter resultados para *clusters* de tamanhos ainda maiores. Para $N = 4$, por exemplo, temos:

$$m = \frac{2 \sinh(2\gamma) + e^{4K} \sinh(4\gamma)}{2 + e^{-4K} + 4 \cosh(2\gamma) + e^{4K} \cosh(4\gamma)} \quad (3.39)$$

⁵ A função $W(x)$ é definida como a inversa da função $f(x) = xe^x$, para todo $x \geq -1$. Logo, assim como pelas propriedades logarítmicas, $e^x = a \Leftrightarrow x = \ln(a)$, analogamente, $xe^x = b \Leftrightarrow x = W(b)$. Para maiores detalhes, ver Refs. [80, 81].

com $\gamma = K(q - 2)m$. Nesse caso, as temperaturas críticas das redes quadrada e cúbica simples são, respectivamente, $k_B T_c/J = 3,4996$ e $k_B T_c/J = 5,6784$.

Percebe-se, através das representações gráficas de m versus $k_B T/J$ na Figura 11, a exata proporção nas diferenças dos resultados obtidos para $k_B T_c/J$ à medida que o número de sítios aumenta.

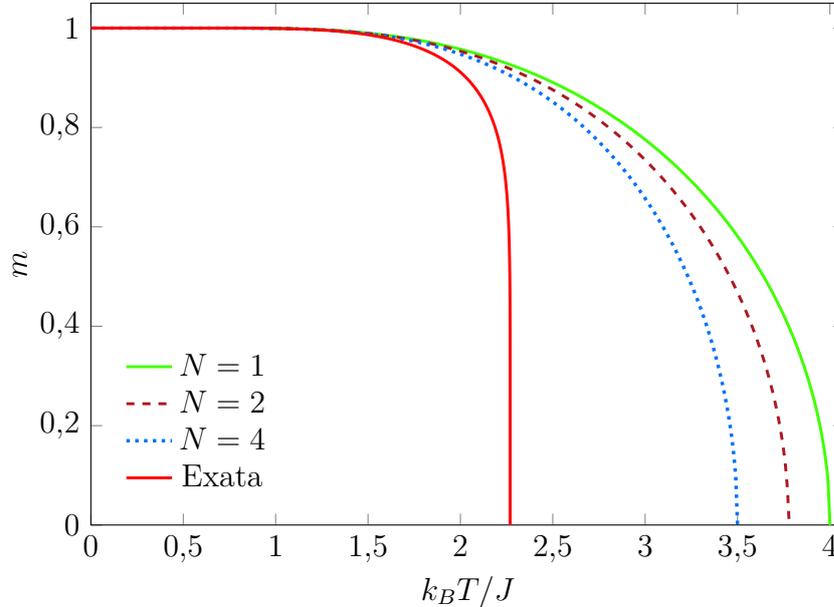


Figura 11 – Magnetização em função da temperatura no modelo de Ising spin-1/2 para a rede quadrada. As linhas cheias, tracejadas e pontilhadas são para os casos $N = 1$, $N = 2$ e $N = 4$, respectivamente.

A seguir, serão mostradas expressões da magnetização para os casos das aproximações de um e dois sítios quando $S > 1/2$, usando o mesmo procedimento abordado nesta seção.

3.1.2 Spin-1

Cluster de um sítio

Nesse caso, a magnetização é dada por:

$$m = \frac{2 \sinh(Kqm)}{1 + 2 \cosh(Kqm)}, \quad (3.40)$$

equivalente ao modelo Blume-Capel no limite do campo cristalino tendendo a zero. Resolvendo (3.40) para $k_B T/J \equiv K^{-1}$, teremos a expressão:

$$\frac{k_B T}{J} = \frac{qm}{\ln\left(\frac{-m - \sqrt{4 - 3m^2}}{2(m-1)}\right)}. \quad (3.41)$$

E tomando o limite para $m \rightarrow 0$, obtém-se a temperatura crítica

$$\frac{k_B T_c}{J} = \frac{2q}{3}. \quad (3.42)$$

Assim, para a rede quadrada ($q = 4$), por exemplo, teremos a solução da temperatura crítica $k_B T_c/J = 8/3 \approx 2,667$. Já para a rede cúbica simples ($q = 6$): $k_B T_c/J = 4$. Valores críticos para outros tipos de estruturas são dados na Tabela 2 para *clusters* de um e dois spins. As curvas de m em função de $k_B T/J$ para alguns valores de q podem ser vistas na Figura 12.

Cluster de dois sítios

Na aproximação de pares, a magnetização é dada pela equação:

$$m = \frac{2 \sinh(\gamma) + 2e^K \sinh(2\gamma)}{1 + 2e^{-K} + 4 \cosh(K) + 2e^K \cosh(2\gamma)}, \quad (3.43)$$

com $\gamma = K(q - 1)m$.

Tabela 2 – Temperaturas críticas para redes diversas obtidas através das aproximações de um e dois sítios no modelo de Ising spin-1.

Redes	q	$N = 1$	$N = 2$
hexagonal	3	2	1,8482
quadrada	4	2,667	2,5515
cúbica simples	6	4	3,9218
<i>bcc</i>	8	5,333	5,2739
<i>fcc</i>	12	8	7,9598

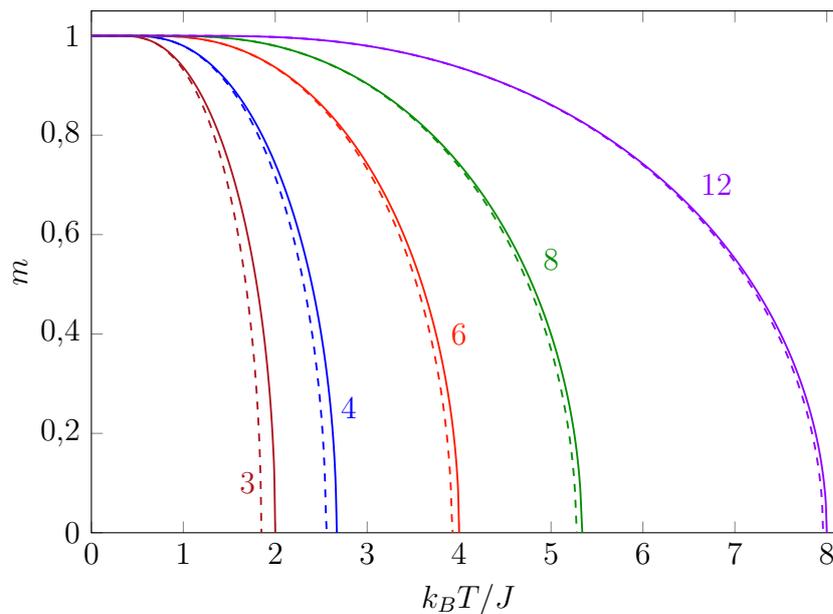


Figura 12 – Magnetização em função da temperatura no modelo de Ising com $S = 1$. Os números com cores correspondentes às curvas indicam o valor de q . Linhas cheias e tracejadas são para os casos $N = 1$ e $N = 2$, respectivamente.

3.1.3 Spin-3/2

Cluster de um sítio

Magnetização na aproximação de campo médio para spin-3/2:

$$m = \frac{3 \sinh\left(\frac{3\gamma}{2}\right) + \sinh\left(\frac{\gamma}{2}\right)}{2 \cosh\left(\frac{3\gamma}{2}\right) + 2 \cosh\left(\frac{\gamma}{2}\right)}, \quad (3.44)$$

com $\gamma = Kqm$.

Cluster de dois sítios

Para uma aproximação de dois sítios com $S = 3/2$, teremos:

$$m = \frac{1}{2} \frac{\Omega}{Z}, \quad (3.45)$$

sendo o numerador Ω dado por

$$\begin{aligned} \Omega = & 2 \left[\exp\left(\frac{K}{4}\right) + 2 \exp\left(-\frac{3K}{4}\right) \right] \sinh(\gamma) \\ & + 8 \exp\left(\frac{3K}{4}\right) \sinh(2\gamma) + 6 \exp\left(\frac{9K}{4}\right) \sinh(3\gamma) \end{aligned} \quad (3.46)$$

e a função de partição

$$\begin{aligned} Z = & 2 \left[\exp\left(-\frac{K}{4}\right) + \exp\left(-\frac{9K}{4}\right) \right] \\ & + 2 \left[\exp\left(\frac{K}{4}\right) \cosh(\gamma) + 2 \exp\left(-\frac{3K}{4}\right) \cosh(\gamma) \right] \\ & + 2 \left[2 \exp\left(\frac{3K}{4}\right) \cosh(2\gamma) + \exp\left(\frac{9K}{4}\right) \cosh(3\gamma) \right], \end{aligned} \quad (3.47)$$

com $\gamma = K(q-1)m$, sendo $K = \beta J$.

Valores críticos para diversos tipos de redes são apresentados na [Tabela 3](#), enquanto o comportamento das curvas de magnetização em função da temperatura é visto na [Figura 13](#).

Tabela 3 – Temperaturas críticas para redes diversas obtidas através das aproximações de um e dois sítios no modelo de Ising spin-3/2.

Redes	q	$N = 1$	$N = 2$
hexagonal	3	3,75	3,4892
quadrada	4	5	4,8026
cúbica simples	6	7,5	7,3662
<i>bcc</i>	8	10	9,8985
<i>fcc</i>	12	15	14,9315

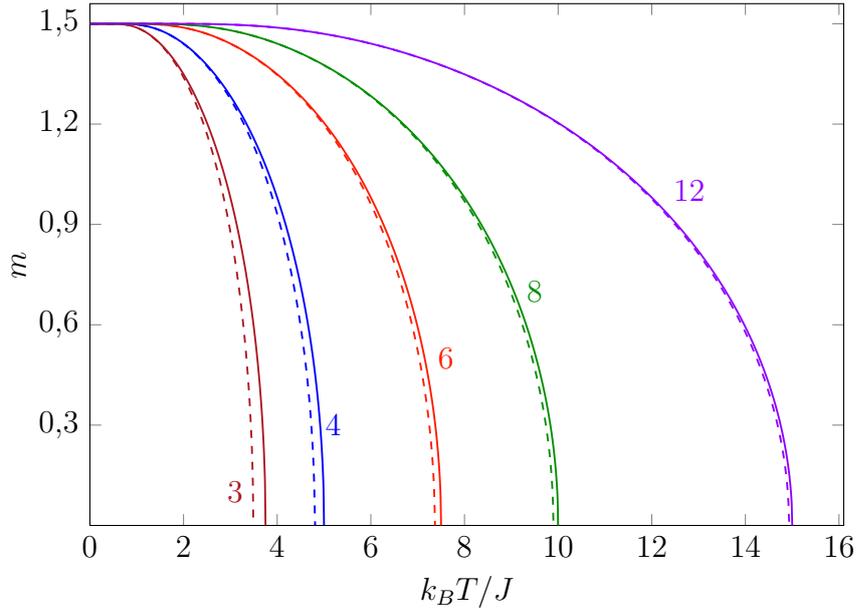


Figura 13 – Magnetização em função da temperatura no modelo de Ising com $S = 3/2$. As linhas cheias e tracejadas são para os casos $N = 1$ e $N = 2$, respectivamente. Os números com cores correspondentes às curvas indicam o valor de q .

3.1.4 Spin-2

Cluster de um sítio

Para $S = 2$, a aproximação de campo médio fornece

$$m = \frac{4 \sinh(2\gamma) + 2 \sinh(\gamma)}{1 + 2 \cosh(2\gamma) + 2 \cosh(\gamma)}, \quad (3.48)$$

com $\gamma = Kqm$.

Nesse caso, para uma rede cúbica simples, $k_B T_c / J = 12$. Esse é o valor que deveria constar na Tabela 5.1 da Ref. [82]. É notável que o valor da temperatura crítica nesse caso é praticamente equivalente ao da aproximação EFT-1⁶ obtida por Freitas [82]. Isso provavelmente se dá por conta da aproximação dos momentos de ordens mais altas na forma $\langle S^n \rangle \equiv \langle S \rangle^n$ ($n \geq 2$), introduzida pelas Refs. [83–86].

Cluster de dois sítios

Para uma aproximação de dois sítios com $S = 2$, teremos

$$m = \frac{1}{2} \frac{\Omega}{Z}, \quad (3.49)$$

sendo o numerador Ω dado por

$$\Omega = 8e^{4K} \sinh(4\gamma) + 12e^{2K} \sinh(3\gamma) + 4e^K \sinh(2\gamma)$$

⁶ A teoria de campo efetivo será descrita na seção 3.2.

$$+ 8 \sinh(2\gamma) + 4e^{-2K} \sinh(\gamma) + 4 \sinh(\gamma) \quad (3.50)$$

e a função de partição

$$\begin{aligned} Z = 1 + 2 [e^{-K} + e^{-4K} + 2 \cosh(\gamma) + 2 \cosh(2\gamma) + e^{4K} \cosh(4\gamma)] \\ + 2 [2e^{-2K} \cosh(\gamma) + 2e^{2K} \cosh(3\gamma) + e^K \cosh(2\gamma)], \end{aligned} \quad (3.51)$$

sendo $\gamma = K(q - 1)m$, com $K = \beta J$.

Na Tabela 4 estão listados os valores críticos para redes diversas, enquanto a Figura 14 exibe as curvas de magnetização em relação à temperatura.

Tabela 4 – Temperaturas críticas para redes diversas obtidas através das aproximações de um e dois sítios no modelo de Ising spin-2.

Redes	q	$N = 1$	$N = 2$
hexagonal	3	6	5,5993
quadrada	4	8	7,6970
cúbica simples	6	12	11,7948
<i>bcc</i>	8	16	15,8445
<i>fcc</i>	12	24	23,8950

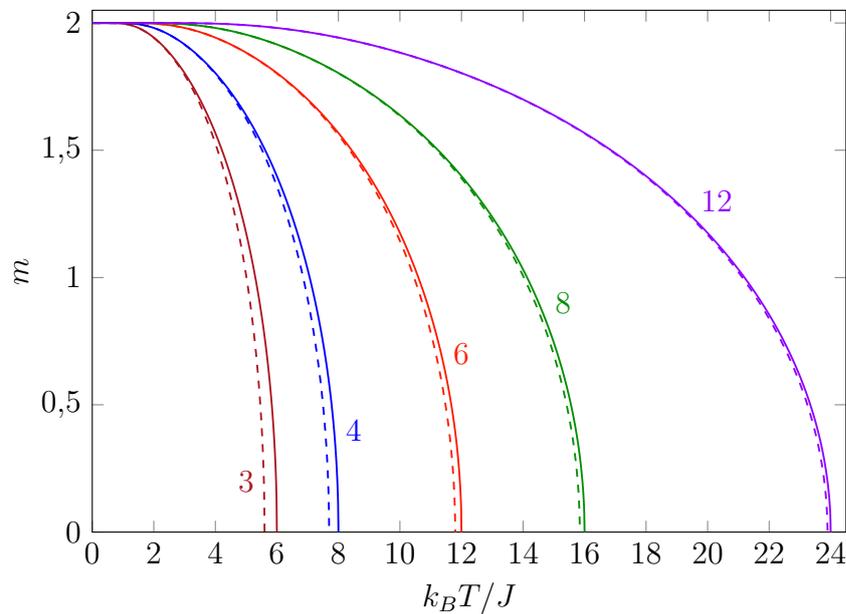


Figura 14 – Magnetização em função da temperatura no modelo de Ising com $S = 2$. Os números com cores correspondentes às curvas indicam o valor de q . Linhas cheias e tracejadas são para os casos $N = 1$ e $N = 2$, respectivamente.

3.1.5 Spin-5/2

Cluster de um sítio

Nesse caso, a magnetização é dada pela expressão:

$$m = \frac{\sinh\left(\frac{\gamma}{2}\right) + 3\sinh\left(\frac{3\gamma}{2}\right) + 5\sinh\left(\frac{5\gamma}{2}\right)}{2\cosh\left(\frac{\gamma}{2}\right) + 2\cosh\left(\frac{3\gamma}{2}\right) + 2\cosh\left(\frac{5\gamma}{2}\right)}, \quad (3.52)$$

com $\gamma = Kqm$.

Cluster de dois sítios

Para uma aproximação de dois sítios com $S = 5/2$, teremos:

$$m = \frac{1}{2} \frac{\Omega}{Z}, \quad (3.53)$$

sendo o numerador Ω dado por

$$\begin{aligned} \Omega = & 10 \exp\left(\frac{25K}{4}\right) \sinh(5\gamma) + 16 \exp\left(\frac{15K}{4}\right) \sinh(4\gamma) \\ & + 12 \exp\left(\frac{5K}{4}\right) \sinh(3\gamma) + 6 \exp\left(\frac{9K}{4}\right) \sinh(3\gamma) \\ & + 8 \exp\left(\frac{3K}{4}\right) \sinh(2\gamma) + 8 \exp\left(-\frac{5K}{4}\right) \sinh(2\gamma) \\ & + 2 \left[\exp\left(\frac{K}{4}\right) + 2 \exp\left(-\frac{3K}{4}\right) + 2 \exp\left(-\frac{15K}{4}\right) \right] \sinh(\gamma) \end{aligned} \quad (3.54)$$

e a função de partição

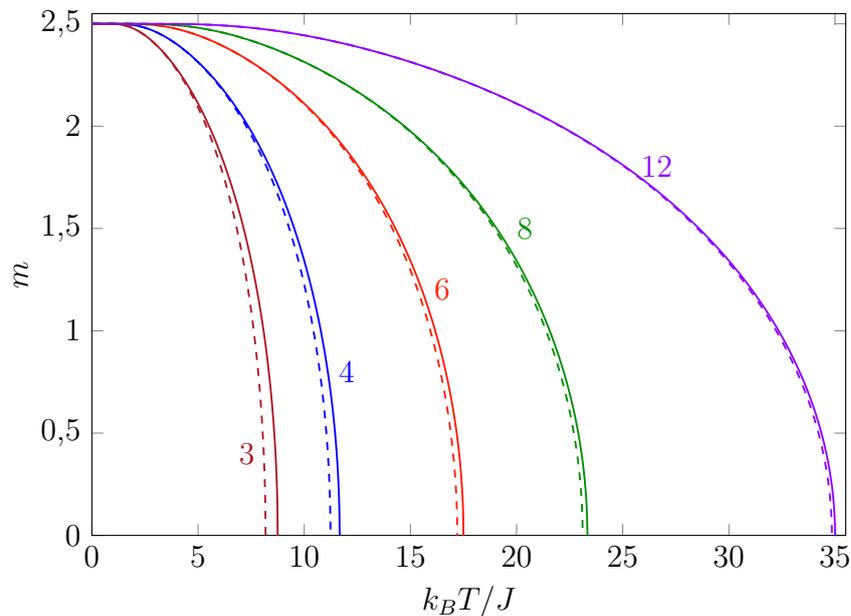
$$\begin{aligned} Z = & 2 \left[\exp\left(-\frac{K}{4}\right) + \exp\left(-\frac{9K}{4}\right) + \exp\left(-\frac{25K}{4}\right) \right] \\ & + 4 \left[\exp\left(-\frac{3K}{4}\right) \cosh(\gamma) + \exp\left(-\frac{15K}{4}\right) \cosh(\gamma) \right] \\ & + 4 \left[\exp\left(\frac{3K}{4}\right) \cosh(2\gamma) + \exp\left(-\frac{5K}{4}\right) \cosh(2\gamma) \right] \\ & + 4 \left[\exp\left(\frac{5K}{4}\right) \cosh(3\gamma) + \exp\left(\frac{15K}{4}\right) \cosh(4\gamma) \right] \\ & + 2 \exp\left(\frac{K}{4}\right) \cosh(\gamma) + 2 \exp\left(\frac{9K}{4}\right) \cosh(3\gamma) \\ & + 2 \exp\left(\frac{25K}{4}\right) \cosh(5\gamma), \end{aligned} \quad (3.55)$$

com $\gamma = K(q-1)m$.

Com base nestas equações, a [Tabela 5](#) fornece os resultados dos valores críticos de diferentes redes, ao passo que a [Figura 15](#) ilustra como as curvas de magnetização variam com relação à temperatura.

Tabela 5 – Temperaturas críticas para redes diversas obtidas através das aproximações de um e dois sítios no modelo de Ising spin-5/2.

Redes	q	$N = 1$	$N = 2$
hexagonal	3	8,75	8,1784
quadrada	4	11,667	11,2346
cúbica simples	6	17,5	17,2076
<i>bcc</i>	8	23,333	23,1118
<i>fcc</i>	12	35	34,8505

Figura 15 – Magnetização em função da temperatura no modelo de Ising com $S = 5/2$. As linhas cheias e tracejadas são para os casos $N = 1$ e $N = 2$, respectivamente. Os números com cores correspondentemente às curvas indicam o valor de q .

3.2 Teoria de campo efetivo

A teoria de campo efetivo (EFT) consiste, sem dúvida, em um dos formalismos mais utilizados na literatura para o estudo de sistemas de Ising e Heisenberg. A aproximação consiste em separar o hamiltoniano do sistema em duas partes distintas: \mathcal{H}_Ω e \mathcal{H}' , de tal forma que a primeira inclui as contribuições do conjunto de sítios Ω da rede, enquanto a segunda diz respeito ao restante. É relevante mencionar que, em geral, os hamiltonianos \mathcal{H}_Ω e \mathcal{H}' não comutam, ou seja, $[\mathcal{H}_\Omega, \mathcal{H}'] \neq 0$. No entanto, mesmo nesses casos a teoria tem sido empregada de maneira aproximada, fornecendo resultados superiores à aproximação tradicional de campo médio.

Inicialmente, o valor esperado de uma grandeza física A relacionada à parte

aproximada do hamiltoniano pode ser calculada da relação:

$$\langle A \rangle_\Omega = \frac{\text{Tr} A e^{-\beta \mathcal{H}}}{Z}, \quad (3.56)$$

na qual $Z = \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}}$.

Considerando a definição $\mathcal{H} = \mathcal{H}_\Omega + \mathcal{H}'$, o traço total em (3.56) pode ser expresso como um produto dos traços parciais da seguinte maneira:

$$\langle A \rangle_\Omega = \frac{1}{Z} \left[\text{Tr}' \text{Tr}_\Omega A e^{-\beta(\mathcal{H}_\Omega + \mathcal{H}')} \right] \quad (3.57)$$

$$= \frac{1}{Z} \left[\text{Tr}' \left(\text{Tr}_\Omega A e^{-\beta \mathcal{H}_\Omega} \right) e^{-\beta \mathcal{H}'} \right]. \quad (3.58)$$

Inserindo $\text{Tr}_\Omega e^{-\beta \mathcal{H}_\Omega} / \text{Tr}_\Omega e^{-\beta \mathcal{H}_\Omega} \equiv 1$ em (3.58), com algumas manipulações podemos reescrever:

$$\langle A \rangle_\Omega = \frac{1}{Z} \left[\text{Tr}' \left(\frac{\text{Tr}_\Omega A e^{-\beta \mathcal{H}_\Omega}}{\text{Tr}_\Omega e^{-\beta \mathcal{H}_\Omega}} \right) \text{Tr}_\Omega e^{-\beta \mathcal{H}_\Omega} e^{-\beta \mathcal{H}'} \right]. \quad (3.59)$$

Empregando o fato de que $\text{Tr}' \text{Tr}_\Omega \equiv \text{Tr}$ e $e^{-\beta \mathcal{H}_\Omega} e^{-\beta \mathcal{H}'} = e^{-\beta(\mathcal{H}_\Omega + \mathcal{H}')} = e^{-\beta \mathcal{H}}$, teremos:

$$\langle A \rangle_\Omega = \frac{\text{Tr} \left(\frac{\text{Tr}_\Omega A e^{-\beta \mathcal{H}_\Omega}}{\text{Tr}_\Omega e^{-\beta \mathcal{H}_\Omega}} \right) e^{-\beta \mathcal{H}}}{Z}, \quad (3.60)$$

ou, equivalentemente⁷:

$$\langle A \rangle_\Omega = \left\langle \frac{\text{Tr}_\Omega A e^{-\beta \mathcal{H}_\Omega}}{\text{Tr}_\Omega e^{-\beta \mathcal{H}_\Omega}} \right\rangle, \quad (3.61)$$

que é conhecida na literatura como identidade de Callen-Suzuki [87, 88] e implica que o valor médio de A , nessa aproximação, se reduz ao cálculo do traço no aglomerado finito convenientemente escolhido. Pode-se dizer que este é o ponto de partida da aproximação de campo efetivo para as descrições termodinâmicas de modelos de spins localizados. A relação (3.61) torna-se naturalmente exata no caso particular em que haja comutatividade entre os hamiltonianos: $[\mathcal{H}_\Omega, \mathcal{H}'] = 0$.

Por simplicidade, se considerarmos o modelo de Ising spin-1/2 e Ω como sendo os *clusters* de tamanhos finitos $\Omega_1 = \{\sigma_1\}$ e $\Omega_2 = \{\sigma_1, \sigma_2\}$, então as magnetizações médias por spin serão definidas por:

$$m = \langle \sigma_1 \rangle = \left\langle \text{tgh} \left(K \sum_j \sigma_j \right) \right\rangle, \quad (3.62)$$

$$m = \left\langle \frac{\sigma_1 + \sigma_2}{2} \right\rangle = \left\langle \frac{\text{senh}(u + v)}{\cosh(u + v) + e^{-2K} \cosh(u - v)} \right\rangle, \quad (3.63)$$

sendo que em (3.63), $u = K \sum_j \sigma_j$ e $v = K \sum_k \sigma_k$, com $K = \beta J$ e $\sigma = \pm 1$.

⁷ Comparar com a Eq. (3.56).

3.2.1 Método do operador diferencial

Basicamente, a utilização do operador diferencial nos permite transformar a identidade exata (3.61) de modo a levar em consideração as autocorrelações de spins na vizinhança do *cluster*, bem como as correlações de multi-sítios, tornando os resultados EFT melhores do que a abordagem clássica de campo médio.

A técnica consiste essencialmente em considerar a expansão em série de Taylor de uma função em torno de um ponto arbitrário x_0 :

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} f^{(n)}(x_0) (x - x_0)^n. \quad (3.64)$$

Vamos definir o deslocamento $\lambda = x - x_0$, de modo que possamos reescrever a expressão (3.64) da seguinte forma:

$$f(x_0 + \lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} f^{(n)}(x_0) \lambda^n. \quad (3.65)$$

De forma explícita, a n -ésima derivada de $f(x)$ é dada por:

$$f^{(n)}(x) = \underbrace{\frac{d}{dx} \frac{d}{dx} \cdots \frac{d}{dx}}_{n \text{ vezes}} f(x) = \left(\frac{d}{dx} \right)^n f(x). \quad (3.66)$$

Além disso, tomando $x_0 \equiv x$ e aplicando (3.66), reescrevemos de maneira mais conveniente a relação (3.65):

$$f(x + \lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{d}{dx} \right)^n f(x) \lambda^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\lambda \frac{d}{dx} \right)^n f(x) \quad (3.67)$$

Essa já é basicamente a relação na forma que queremos. Resta apenas compará-la com a expansão da função exponencial

$$e^z = 1 + z + \frac{1}{2!} z^2 + \frac{1}{3!} z^3 + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!}, \quad (3.68)$$

considerando a substituição $z = \lambda D_x$ ($D_x \equiv d/dx$), de tal forma que a equação (3.67) torna-se⁸:

$$f(x + \lambda) = e^{\lambda D_x} f(x) \quad (3.69)$$

⁸ Podemos generalizar (3.69), considerando em vez de $f(x)$, uma função de várias variáveis. Nesse caso, teremos:

$$f(\mathbf{r} + \boldsymbol{\lambda}) = e^{\boldsymbol{\lambda} \cdot \nabla} f(\mathbf{r}),$$

em que para três dimensões, por exemplo, $\mathbf{r} = (x, y, z)$, $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_x, \lambda_y, \lambda_z)$ e $\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$.

A relação (3.69) foi utilizada inicialmente por Honmura e Kaneyoshi [89] para a transformação da identidade de Callen-Suzuki. Desde então, passou a ser aplicada em diversos trabalhos tratando ligas magnéticas [90, 91], supercondutores [92], sistemas amorfos [93], grafeno [94], diamante [95], filmes finos [96], nanofios [97], nanotubos [98], dentre outros.

A fim de ilustrar uma aplicação, vamos considerar a aproximação de *cluster* de um sítio no modelo de Ising spin-1/2. Dessa forma, a Eq. (3.62) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$m = \left\langle e^{K \sum_j \sigma_j D_x} \right\rangle \operatorname{tgh}(x) \Big|_{x=0} \quad (3.70)$$

$$m = \left\langle \prod_j^q e^{K \sigma_j D_x} \right\rangle \operatorname{tgh}(x) \Big|_{x=0} \quad (3.71)$$

Considerando a expansão⁹:

$$\begin{aligned} e^{\lambda \sigma} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (\lambda \sigma)^n = 1 + \lambda \sigma + \frac{1}{2!} (\lambda \sigma)^2 + \frac{1}{3!} (\lambda \sigma)^3 + \frac{1}{4!} (\lambda \sigma)^4 + \frac{1}{5!} (\lambda \sigma)^5 + \dots \\ &= 1 + \lambda \sigma + \frac{1}{2!} \lambda^2 + \frac{1}{3!} \lambda^3 \sigma + \frac{1}{4!} \lambda^4 + \frac{1}{5!} \lambda^5 \sigma + \dots \\ &= \left(1 + \frac{\lambda^2}{2} + \frac{\lambda^4}{4!} + \dots \right) + \sigma \left(\lambda + \frac{\lambda^3}{3!} + \frac{\lambda^5}{5!} + \dots \right) \\ &= \cosh(\lambda) + \sigma_j \sinh(\lambda), \end{aligned} \quad (3.72)$$

e substituindo em (3.71), teremos:

$$m = \left\langle \prod_j^q \left[\cosh(K D_x) + \sigma_j \sinh(K D_x) \right] \right\rangle \operatorname{tgh}(x) \Big|_{x=0}. \quad (3.73)$$

Fazendo uso da chamada aproximação de Zernike¹⁰:

$$m = (C_x + m S_x)^q \operatorname{tgh}(x) \Big|_{x=0}, \quad (3.74)$$

em que $C_x = \cosh(K D_x)$ e $S_x = \sinh(K D_x)$.

Logo, no caso unidimensional ou de uma cadeia linear ($q = 2$):

$$m = (C_x + m S_x)^2 \operatorname{tgh}(x) \Big|_{x=0} = (C_x^2 + 2m C_x S_x + S_x^2) \operatorname{tgh}(x) \Big|_{x=0} \quad (3.75)$$

⁹ Resultado conhecido na literatura como identidade de van der Waerden.

¹⁰ Vamos aproximar as correlações de multi-spins da seguinte forma:

$$\langle \sigma_j \sigma_k \sigma_l \dots \sigma_n \rangle \approx \langle \sigma_j \rangle \langle \sigma_k \rangle \langle \sigma_l \rangle \dots \langle \sigma_n \rangle,$$

para $j \neq k \neq l \neq \dots \neq n$.

O primeiro e o último termos (C_x^2 e S_x^2) dessa expansão são funcionais pares, de modo que podem ser desconsiderados quando aplicados à tangente hiperbólica¹¹ (ímpar). Logo, teremos:

$$m = A_1 m \Rightarrow A_1 = 1, \quad (3.76)$$

sendo $A_1 = 2 C_x S_x \operatorname{tgh}(x)|_{x=0}$. Ou seja:

$$1 = 2 \cosh(K D_x) \sinh(K D_x) \operatorname{tgh}(x)|_{x=0} \quad (3.77)$$

$$= \sinh(2K D_x) \operatorname{tgh}(x)|_{x=0} \quad (3.78)$$

$$= \frac{1}{2} (e^{2K D_x} - e^{-2K D_x}) \operatorname{tgh}(x)|_{x=0} \quad (3.79)$$

$$= \frac{1}{2} [\operatorname{tgh}(2K) - \operatorname{tgh}(-2K)] \quad (3.80)$$

$$= \operatorname{tgh}(2K) \quad (3.81)$$

Resolvendo, então, a equação $1 = \operatorname{tgh}(2K)$, temos $K_c^{-1} = 0$ (previsão correta para o modelo de Ising unidimensional). Resultado que pode ser interpretado graficamente, uma vez que 1 é uma das assíntotas horizontais da função $\operatorname{tgh}(x)$. Para qualquer outro valor do número de coordenação, o procedimento é análogo, aumentando apenas o número de coeficientes e, conseqüentemente, o trabalho matemático. Em geral, em vez de (3.76), a expansão da magnetização é da forma:

$$m = \sum_{n=1}^q A_n(K) m^n, \text{ com } n \text{ ímpar}, \quad (3.82)$$

embora a criticalidade seja avaliada sempre pela condição $A_1 = 1$, uma vez que, nesse caso, $m \ll 1$. De (3.82), numa rede cúbica simples, por exemplo:

$$m = A_1 m + A_3 m^3 + A_5 m^5. \quad (3.83)$$

Na aproximação de dois sítios, o procedimento é análogo, de modo que a aplicação do operador diferencial na média dada pela Eq. (3.63) resulta em:

$$m = \left\langle \prod_j e^{K \sigma_j D_x} \prod_{j'} e^{K \sigma_{j'} D_y} \prod_k e^{(K D_x + K D_y) \sigma_k} \right\rangle f(x, y) \Big|_{x=0, y=0}, \quad (3.84)$$

sendo que

$$f(x, y) = \frac{\sinh(x + y)}{\cosh(x + y) + e^{-2K} \cosh(x - y)}. \quad (3.85)$$

Na relação (3.84), os dois primeiros produtos são para os vizinhos isolados dos sítios σ_1 e σ_2 , respectivamente. Já o terceiro produtório aparece se a estrutura possuir

¹¹ Isso é generalizado para qualquer função $f(x)$ ímpar, de modo que:

$$\Phi(\lambda D)_{\text{par}} f(x)|_{x=0} = 0 \text{ e } \Phi(\lambda D)_{\text{ímpar}} f(x)|_{x=0} = f(\lambda).$$

vizinhos em comum aos dois sítios do *cluster*, como nos casos das redes kagomé, triangular e *bcc*, por exemplo. Esse é um aspecto destacável da teoria de campo efetivo em relação às aproximações de campo médio: conseguir diferenciar tipos de estruturas com mesmo número de coordenação. Definindo q' como o número de vizinhos comuns aos dois spins da aproximação, os dois primeiros produtórios irão de 1 até $q - 1 - q'$, enquanto o último irá de $k = 1$ até q' . Por exemplo, nas redes cúbica simples e triangular, teremos, respectivamente:

$$m = (C_x + mS_x)^5(C_y + mS_y)^5 f(x, y) \Big|_{x=0, y=0}, \quad (q = 6 \text{ e } q' = 0) \quad (3.86)$$

$$m = (C_x + mS_x)^3(C_y + mS_y)^3(C_{xy} + mS_{xy})^2 f(x, y) \Big|_{x=0, y=0}, \quad (q = 6 \text{ e } q' = 2) \quad (3.87)$$

sendo $C_\nu = \cosh(KD_\nu)$, $S_\nu = \sinh(KD_\nu)$ ($\nu = x, y$), $C_{xy} = \cosh[K(D_x + D_y)]$ e $S_{xy} = \sinh[K(D_x + D_y)]$.

Apenas para ilustrar e dar uma melhor noção do quão superiores são os resultados EFT em relação às aproximações discutidas na seção 3.1, na Figura 16 são apresentadas as curvas da magnetização para a rede quadrada no modelo de Ising.

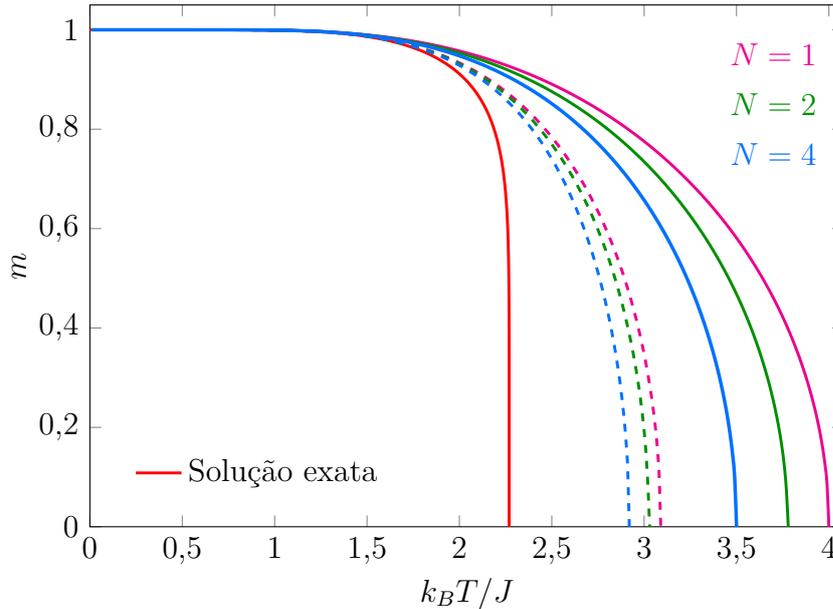


Figura 16 – Magnetização em função da temperatura no modelo de Ising spin-1/2 para a rede quadrada com aproximações MFA e EFT. Os tamanhos dos *clusters* são indicados com as cores das curvas. As linhas cheias e tracejadas são para MFA e EFT, respectivamente. Pode-se comparar com a solução exata, nesse caso.

3.2.2 Método de integração funcional

Nesta seção é abordado de forma breve um método alternativo, menos utilizado na literatura, que consiste em reescrever as funções hiperbólicas da identidade de Callen-Suzuki por meio da utilização da função delta de Dirac e suas propriedades [99–101].

Para o caso de um sítio, por exemplo, vamos aplicar a propriedade da função delta de Dirac

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x-\alpha)dx = f(\alpha) \quad (3.88)$$

à identidade (3.62), considerando $f(x) \equiv \text{tgh}(x)$. Assim, teremos¹²:

$$m = \left\langle \text{tgh} \left(K \sum_j \sigma_j \right) \right\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \text{tgh}(x) \left\langle \delta \left(x - K \sum_j \sigma_j \right) \right\rangle dx, \quad (3.89)$$

onde $K = J/k_B T$. Aplicando a representação integral da função delta

$$\delta(x-\alpha) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega(x-\alpha)} d\omega, \quad (3.90)$$

ficaremos com¹³:

$$\begin{aligned} m &= \int_{-\infty}^{+\infty} \text{tgh}(x) \left\langle \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega \left(x - K \sum_j \sigma_j \right)} d\omega \right] \right\rangle dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \text{tgh}(x) \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \left\langle \exp \left(-i\omega K \sum_j \sigma_j \right) \right\rangle e^{i\omega x} d\omega \right] dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \text{tgh}(x) \left(\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \left\langle \prod_j^q e^{-i\omega K \sigma_j} \right\rangle e^{i\omega x} d\omega \right) dx \end{aligned} \quad (3.91)$$

A partir daqui, aplicando a aproximação de Zernike, já discutida na [subseção 3.2.1](#), podemos reescrever que:

$$\left\langle \prod_j e^{-i\omega K \sigma_j} \right\rangle \approx \prod_j \langle e^{-i\omega K \sigma_j} \rangle, \quad (3.92)$$

e expandindo $\exp(-i\lambda\sigma_j)$ ($\lambda = \omega K$) em série de potências:

$$\begin{aligned} e^{-i\lambda\sigma_j} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-i\lambda\sigma_j)^n \\ &= 1 - i\lambda\sigma_j + \frac{1}{2!} (-i\lambda)^2 \sigma_j^2 + \frac{1}{3!} (-i\lambda)^3 \sigma_j^3 + \frac{1}{4!} (-i\lambda)^4 \sigma_j^4 + \frac{1}{5!} (-i\lambda)^5 \sigma_j^5 + \dots \\ &= 1 - i\lambda\sigma_j - \frac{1}{2!} \lambda^2 + i \frac{1}{3!} \lambda^3 \sigma_j + \frac{1}{4!} \lambda^4 - i \frac{1}{5!} \lambda^5 \sigma_j - \dots \\ &= \left(1 - \frac{\lambda^2}{2} + \frac{\lambda^4}{4!} - \dots \right) - i\sigma_j \left(\lambda - \frac{\lambda^3}{3!} + \frac{\lambda^5}{5!} - \dots \right) \\ &= \cos(\lambda) - i\sigma_j \text{sen}(\lambda). \end{aligned} \quad (3.93)$$

Agora, com os resultados (3.93) e (3.94), a Eq. (3.91) passa a ser reescrita na forma:

$$m = \int_{-\infty}^{+\infty} \text{tgh}(x) \left\{ \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\cos(\omega K) - im \text{sen}(\omega K) \right]^q e^{iK\omega x} d\omega \right\} dx, \quad (3.94)$$

¹² Por simplicidade, consideraremos as equações na ausência de campo.

¹³ Note que $\alpha = K \sum_j \sigma_j$ em (3.89).

em que se considera $m = \langle \sigma_j \rangle$.

Similar ao que ocorre na aplicação do operador diferencial, da expansão de $[\cos(\omega K) - im \operatorname{sen}(\omega K)]^q$ só irão contribuir os termos (coeficientes) ímpares com o fator i . E levando em conta que [102]:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \operatorname{tgh}(x) \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} i \operatorname{sen}(n\omega K) e^{i\omega x} d\omega \right] dx = -\operatorname{tgh}(nK), \quad (3.95)$$

onde n é uma constante arbitrária, os mesmos resultados da [subseção 3.2.1](#) podem ser facilmente obtidos. Por exemplo, no caso $q = 2$, o termo que interessa da expansão polinomial em (3.94) é

$$-2i \cos(\omega K) \operatorname{sen}(\omega K) = -i \operatorname{sen}(2\omega K), \quad (3.96)$$

que aplicado a (3.95) dará o resultado $\operatorname{tgh}(2K)$, conforme esperado.

3.2.3 Identidade de van der Waerden para $S \geq 1$

Até aqui foram abordadas aplicações EFT ao caso $S = 1/2$. Para $S > 1/2$, por outro lado, embora o formalismo seja semelhante, a complexidade matemática aumenta consideravelmente, uma vez que se faz necessária a utilização de novas formas da identidade de van der Waerden. Há dois modos de se proceder nesses casos: escolher entre as identidades de van der Waerden generalizadas exata ou aproximada. Ambas as situações serão brevemente discutidas a seguir.

Em geral, para um valor de spin arbitrário S , é válida a relação:

$$e^{\alpha S_j} = \sum_{n=0}^{2S} A_n(\alpha) S_j^n, \quad (3.97)$$

onde α é um parâmetro arbitrário e $S_j = -S, -S + 1, \dots, S - 1, S$.

Assim, para $S = 1$:

$$e^{\alpha S_j} = A_0 + A_1 S_j + A_2 S_j^2, \quad (3.98)$$

e sendo $S_j = -1, 0, +1$, pode ser facilmente demonstrado que:

$$e^{\alpha S_j} = 1 + S_j \operatorname{senh}(\alpha) + S_j^2 [\cosh(\alpha) - 1]. \quad (3.99)$$

Já para $S = 3/2$:

$$e^{\alpha S_j} = A_0 + A_1 S_j + A_2 S_j^2 + A_3 S_j^3, \quad (3.100)$$

com os coeficientes:

$$A_0 = \frac{1}{8} \left[9 \cosh\left(\frac{\alpha}{2}\right) - \cosh\left(\frac{3\alpha}{2}\right) \right],$$

$$\begin{aligned}
A_1 &= \frac{1}{12} \left[27 \sinh\left(\frac{\alpha}{2}\right) - \sinh\left(\frac{3\alpha}{2}\right) \right], \\
A_2 &= \frac{1}{2} \left[\cosh\left(\frac{3\alpha}{2}\right) - \cosh\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right], \\
A_3 &= \frac{1}{3} \left[\sinh\left(\frac{3\alpha}{2}\right) - 3 \sinh\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right],
\end{aligned}$$

e assim por diante, para os demais tipos de spins.

O grande problema, nesse caso, está na necessidade de se avaliar os valores esperados $\langle S_j^n \rangle$, ($n = 1, \dots, 2S$). A fim de evitar tais dificuldades inerentes ao uso da identidade exata de spin- S , é possível separar (3.97) em duas somas de potências pares e ímpares:

$$e^{\alpha S_j} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^{2n}}{(2n)!} S_j^{2n} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^{2n+1}}{(2n+1)!} S_j^{2n+1}, \quad (3.101)$$

e considerando as aproximações $S_j^{2n} \approx \langle S_j^2 \rangle^n$, $S_j^{2n+1} \approx S_j \langle S_j^2 \rangle^n$ com a definição $\eta^2 = \langle S_j^2 \rangle$, teremos:

$$e^{\alpha S_j} = \cosh(\alpha \eta) + \frac{S_j}{\eta} \sinh(\alpha \eta), \quad (3.102)$$

que corresponde à identidade de van der Waerden geral, mas aproximada. Para spins $S \geq 3/2$, por exemplo, já é bem mais “acessível” de se trabalhar com (3.102) no formalismo EFT. Usualmente, costuma-se definir $q_D = \langle S_j^2 \rangle$ como o momento quadrupolar, de modo que podemos representar (3.102) também na forma:

$$e^{\alpha S_j} = \cosh(\alpha \sqrt{q_D}) + \frac{S_j}{\sqrt{q_D}} \sinh(\alpha \sqrt{q_D}). \quad (3.103)$$

Pode-se notar que para $S = 1/2$, essa identidade retoma a forma exata já conhecida, mas para $S = 1$, já temos uma pequena diferença em relação à identidade exata (3.99).

4 Modelo de Heisenberg anisotrópico com interação Dzyaloshinskii-Moriya

Neste Capítulo são discutidos os diagramas de fases e as propriedades termodinâmicas do modelo de Heisenberg com interação DM, através da aproximação de pares. Na [seção 4.1](#) é apresentado o formalismo e são discutidos os resultados no modelo de spin-3/2, enquanto a [seção 4.2](#) é dedicada aos resultados para o caso spin-2. Na [seção 4.3](#) são mostrados os resultados em comparação com os casos $S \leq 1$. Por fim, a [seção 4.4](#) trata de algumas variações do modelo, incluindo o caso antiferromagnético e aplicação da teoria de campo efetivo para $S = 1$.

O ponto de partida para as próximas seções é o hamiltoniano dado pela equação

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} [(1 - \Delta)(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z] - \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{D}_{ij} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j), \quad (4.1)$$

na qual os somatórios levam em conta as interações entre primeiros vizinhos, com S_i^α ($\alpha = x, y, z$) denotando as componentes do operador de spin no i -ésimo sítio da rede. Na primeira soma, J_{ij} é a interação de troca e $\Delta \in [0, 1]$ é o parâmetro de troca anisotrópico. Em particular, os casos $\Delta = 0$ e $\Delta = 1$ correspondem aos modelos de Heisenberg isotrópico e Ising, respectivamente. Além disso, temos o vetor de acoplamento DM antissimétrico ($\mathbf{D}_{ij} = -\mathbf{D}_{ji}$). Aqui consideraremos $J_{ij} > 0$ (acoplamento ferromagnético) e $\mathbf{D} = D \mathbf{z}$ (\mathbf{z} é o vetor axial).

Dessa forma, o hamiltoniano para um *cluster* de dois sítios é dado por:

$$-\beta \mathcal{H}_{12} = K[(1 - \Delta)(S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y) + S_1^z S_2^z] + L(S_1^x S_2^y - S_1^y S_2^x) + \gamma(S_1^z + S_2^z), \quad (4.2)$$

em que $K = \beta J$, $L = \beta D$, $\beta = 1/k_B T$ (k_B é a constante de Boltzmann e T é a temperatura). Por fim, temos o parâmetro $\gamma = K(q - 1)m$, sendo q o número de coordenação da rede e m a magnetização por sítio.

Nas seções seguintes são abordados os casos de spin-3/2 e spin-2, levando-se em conta a aproximação (4.2) ao modelo (4.1).

4.1 Caso $S = 3/2$

Para o tratamento do modelo nesse caso, consideraremos agora a aplicação das matrizes de spin-3/2 com as seguintes definições¹:

$$S^x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.3)$$

$$S^y = \frac{1}{2i} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ -\sqrt{3} & 0 & 2 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & -\sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.4)$$

$$S^z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{pmatrix}. \quad (4.5)$$

4.1.1 Forma matricial do hamiltoniano

Usando as matrizes de spin-3/2 descritas pelas Eqs. (4.3) a (4.5), a aproximação (4.2) resulta numa matriz 16×16^2 , cuja forma explícita é relativamente grande, porém com muitos elementos iguais a zero. Desse modo, a seguir são listados todos os elementos não-nulos³:

$$\begin{aligned} \mathfrak{h}_{1,1} &= \frac{9K}{4} + 3\gamma, \\ \mathfrak{h}_{2,2} &= \frac{3K}{4} + 2\gamma, & \mathfrak{h}_{2,5} &= \frac{3}{2} [K(1 - \Delta) + iL], \\ \mathfrak{h}_{3,3} &= -\frac{3K}{4} + \gamma, & \mathfrak{h}_{3,6} &= \sqrt{3} [K(1 - \Delta) + iL], \\ \mathfrak{h}_{4,4} &= -\frac{9K}{4}, & \mathfrak{h}_{4,7} &= \frac{3}{2} [K(1 - \Delta) + iL], \\ \mathfrak{h}_{5,2} &= \frac{3}{2} [K(1 - \Delta) - iL], & \mathfrak{h}_{5,5} &= \frac{3K}{4} + 2\gamma, \\ \mathfrak{h}_{6,3} &= \sqrt{3} [K(1 - \Delta) - iL], & \mathfrak{h}_{6,6} &= \frac{K}{4} + \gamma, & \mathfrak{h}_{6,9} &= \sqrt{3} [K(1 - \Delta) + iL], \\ \mathfrak{h}_{7,4} &= \frac{3}{2} [K(1 - \Delta) - iL], & \mathfrak{h}_{7,7} &= -\frac{K}{4}, & \mathfrak{h}_{7,10} &= 2 [K(1 - \Delta) + iL], \\ \mathfrak{h}_{8,8} &= -\frac{3K}{4} - \gamma, & \mathfrak{h}_{8,11} &= \sqrt{3} [K(1 - \Delta) + iL], \\ \mathfrak{h}_{9,6} &= \sqrt{3} [K(1 - \Delta) - iL], & \mathfrak{h}_{9,9} &= -\frac{3K}{4} + \gamma, \end{aligned}$$

¹ Ver, por exemplo: <<http://easyspin.org/documentation/spinoperators.html>>

² Para mais detalhes, ver o Apêndice A ou consultar as Refs. [103, 104].

³ São 34 de um total de 256.

$$\begin{aligned}
\mathbf{h}_{10,7} &= 2[K(1 - \Delta) - iL], & \mathbf{h}_{10,10} &= -\frac{K}{4}, & \mathbf{h}_{10,13} &= \frac{3}{2}[K(1 - \Delta) + iL], \\
\mathbf{h}_{11,8} &= \sqrt{3}[K(1 - \Delta) - iL], & \mathbf{h}_{11,11} &= \frac{K}{4} - \gamma, & \mathbf{h}_{11,14} &= \sqrt{3}[K(1 - \Delta) + iL], \\
\mathbf{h}_{12,12} &= \frac{3K}{4} - 2\gamma, & \mathbf{h}_{12,15} &= \frac{3}{2}[K(1 - \Delta) + iL], \\
\mathbf{h}_{13,10} &= \frac{3}{2}[K(1 - \Delta) - iL], & \mathbf{h}_{13,13} &= -\frac{9K}{4}, \\
\mathbf{h}_{14,11} &= \sqrt{3}[K(1 - \Delta) - iL], & \mathbf{h}_{14,14} &= -\frac{3K}{4} - \gamma, \\
\mathbf{h}_{15,12} &= \frac{3}{2}[K(1 - \Delta) - iL], & \mathbf{h}_{15,15} &= \frac{3K}{4} - 2\gamma, \\
\mathbf{h}_{16,16} &= \frac{9K}{4} - 3\gamma.
\end{aligned}$$

Conforme definições prévias: $K = \beta J$, $L = \beta D$ e $\gamma = K(q - 1)m$.

4.1.2 Autovalores

Através da diagonalização do hamiltoniano, cujos elementos de matriz não-nulos são apresentados na [subseção 4.1.1](#), torna-se possível a construção da função de partição e, conseqüentemente, a obtenção de todas as demais propriedades termodinâmicas do sistema. Os dezesseis autovalores reais obtidos são listados a seguir:

$$\begin{aligned}
\lambda_1 &= \frac{9K}{4} + 3\gamma, & \lambda_2 &= -\frac{3K}{4} + \gamma, & \lambda_3 &= -\frac{3K}{4} - \gamma, & \lambda_4 &= \frac{9K}{4} - 3\gamma, \\
\lambda_5 &= -\frac{K}{4} + \gamma + \frac{\sqrt{K^2 + 24W^2}}{2}, & \lambda_6 &= -\frac{K}{4} + \gamma - \frac{\sqrt{K^2 + 24W^2}}{2}, \\
\lambda_7 &= -\frac{K}{4} - \gamma + \frac{\sqrt{K^2 + 24W^2}}{2}, & \lambda_8 &= -\frac{K}{4} - \gamma - \frac{\sqrt{K^2 + 24W^2}}{2}, \\
\lambda_9 &= \frac{3K}{4} + 2\gamma + \frac{3W}{2}, & \lambda_{10} &= \frac{3K}{4} + 2\gamma - \frac{3W}{2}, \\
\lambda_{11} &= \frac{3K}{4} - 2\gamma + \frac{3W}{2}, & \lambda_{12} &= \frac{3K}{4} - 2\gamma - \frac{3W}{2}, \\
\lambda_{13} &= -\frac{5K}{4} + W + \frac{\sqrt{4(K + W)^2 + 9W^2}}{2}, & \lambda_{14} &= -\frac{5K}{4} + W - \frac{\sqrt{4(K + W)^2 + 9W^2}}{2}, \\
\lambda_{15} &= -\frac{5K}{4} - W + \frac{\sqrt{4(K - W)^2 + 9W^2}}{2}, & \lambda_{16} &= -\frac{5K}{4} - W - \frac{\sqrt{4(K - W)^2 + 9W^2}}{2}.
\end{aligned}$$

Aqui, temos que: $W = K\sqrt{(1 - \Delta)^2 + (D/J)^2}$.

4.1.3 Função de partição e magnetização

A função de partição, nesse caso, pode ser facilmente calculada através da definição:

$$Z = \text{Tr}[\exp(-\beta\mathcal{H}_{12})] = \sum_{n=1}^{16} e^{\lambda_n} \quad (4.6)$$

Desse modo, aplicando os autovalores mostrados na [subseção 4.1.2](#), Z será dada pela seguinte expressão:

$$\begin{aligned}
 Z &= 2 \exp\left(\frac{9K}{4}\right) \cosh(3\gamma) + 2 \exp\left(-\frac{3K}{4}\right) \cosh(\gamma) \\
 &+ 4 \exp\left(-\frac{K}{4}\right) \cosh(\gamma) \cosh\left(\frac{\sqrt{K^2 + 24W^2}}{2}\right) \\
 &+ 4 \exp\left(\frac{3K}{4}\right) \cosh(2\gamma) \cosh\left(\frac{3W}{2}\right) \\
 &+ 2 \exp\left(-\frac{5K}{4} + W\right) \cosh\left[\frac{\sqrt{4(K+W)^2 + 9W^2}}{2}\right] \\
 &+ 2 \exp\left(-\frac{5K}{4} - W\right) \cosh\left(\frac{\sqrt{4(K-W)^2 + 9W^2}}{2}\right).
 \end{aligned} \tag{4.7}$$

A magnetização, por sua vez, é obtida através da relação:

$$m = \frac{1}{2} \frac{\text{Tr} \left[(S_1^z + S_2^z) \exp(-\beta \mathcal{H}_{12}) \right]}{\text{Tr} \left[\exp(-\beta \mathcal{H}_{12}) \right]} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial \gamma} \right) \tag{4.8}$$

Dessa forma, teremos:

$$m = \frac{A}{Z}, \tag{4.9}$$

sendo que Z é dada pela Eq. (4.7) e o numerador tem a expressão:

$$\begin{aligned}
 A &= 3 \exp\left(\frac{9K}{4}\right) \sinh(3\gamma) + \exp\left(-\frac{3K}{4}\right) \sinh(\gamma) \\
 &+ 2 \exp\left(-\frac{K}{4}\right) \sinh(\gamma) \cosh\left(\frac{\sqrt{K^2 + 24W^2}}{2}\right) \\
 &+ 4 \exp\left(\frac{3K}{4}\right) \sinh(2\gamma) \cosh\left(\frac{3W}{2}\right),
 \end{aligned}$$

com os parâmetros $\gamma = K(q-1)m$, $K = \beta J$ e $W = K\sqrt{(1-\Delta)^2 + (D/J)^2}$.

Com a função de partição descrita, a energia livre por spin é definida como sendo:

$$g(m, K) = K(q-1)m^2 - \beta^{-1} \ln Z(m, K). \tag{4.10}$$

Esta expressão deve ser analisada para se determinar as transições de fase de primeira ordem. Já nas proximidades de uma transição de segunda ordem, $m \ll 1$, de modo que podemos fazer uma expansão do lado direito da Eq. (4.9) para obter:

$$m = A_1 m + A_3 m^3 + A_5 m^5 + O(m^7), \tag{4.11}$$

onde A_n são coeficientes dependentes de J , D e q .

De acordo com a Eq. (4.11), na vizinhança de uma transição crítica contínua:

$$m^2 = \frac{1 - A_1}{A_3}. \quad (4.12)$$

Assim, a linha de transição de segunda ordem é determinada pelas condições $A_1 = 1$ e $A_3 < 0$ e termina em um ponto tricrítico, dado por $A_1 = 1$ e $A_3 = 0$ (com $A_5 < 0$). Se $A_1 = 1$ e $A_3 > 0$, temos uma linha instável e deve-se investigar a solução para uma transição de primeira ordem através da formulação da energia livre do modelo. As temperaturas críticas de uma transição descontínua são obtidas pela comparação da energia livre nos estados ordenado e desordenado, ou seja, $g(m)$ e $g(0)$. As condições que devem ser simultaneamente satisfeitas são $g(m) = g(0)$ e $\partial g / \partial m = 0$.

4.1.4 Resultados

A Figura 17 mostra o comportamento da magnetização como uma função da temperatura para alguns valores de D/J com $\Delta = 1$. Para $D/J = 1, 3$ e $4,7$, a magnetização decresce até zero de forma contínua, caracterizando uma transição de fase de segunda ordem.

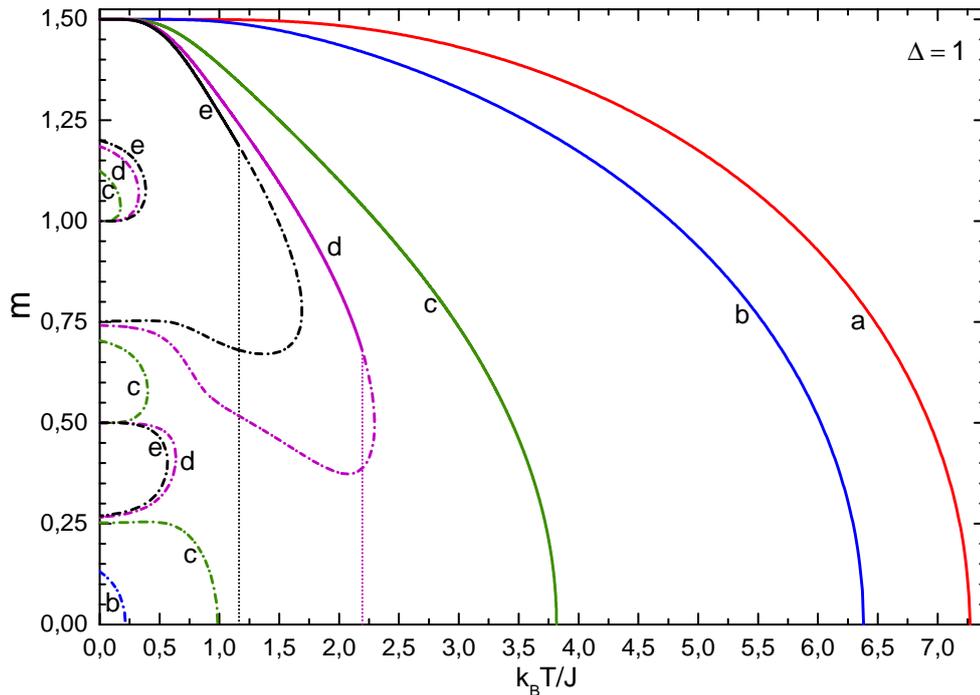


Figura 17 – Variações térmicas da magnetização para $\Delta = 1$ com diferentes valores do parâmetro DM: a) $D/J = 1$, b) $D/J = 3$, c) $D/J = 4,7$, d) $D/J = 4,95$ e e) $D/J = 5$. As linhas cheias e tracejadas correspondem às soluções estáveis e instáveis, respectivamente. As linhas pontilhadas verticais indicam a descontinuidade de m nas temperaturas críticas de primeira ordem para as curvas d) e e).

Nestes casos, quando $D/J = 3$ e $4,7$, são mostradas também soluções fisicamente instáveis, que são dadas pelas linhas tracejadas com as letras correspondentes. Por outro

lado, quando D/J excede o valor D_t no ponto tricrítico, temos a presença de transição de fase de primeira ordem e a magnetização sofre uma descontinuidade de um valor finito a zero na temperatura crítica de primeira ordem. Isso ocorre para $D/J = 4,95$ e $D/J = 5$, com as temperaturas $k_B T_c/J = 2,1949$ e $k_B T_c/J = 1,1638$, respectivamente.

O diagrama de fases do sistema é mostrado na Figura 18. A variação da temperatura de transição é dada em função de D/J . São destacadas algumas curvas para diferentes valores do parâmetro anisotrópico de troca: $\Delta = 0$ (modelo isotrópico), $\Delta = 0,3$ (anisotrópico) e $\Delta = 1$ (modelo de Ising de spin-3/2). De zero até valores intermediários de D/J , nota-se claramente que o sistema exibe as maiores medidas de temperatura crítica no limite do modelo de Ising ($\Delta = 1$). Além disso, quando $\Delta = 1$, na ausência do parâmetro DM, obtém-se a temperaturas críticas $k_B T_c/J = 7,3662$, que é consistente e menor do que o resultado obtido através da aproximação padrão de campo médio ($k_B T_c/J = 7,5$) [105]. Tal valor pode também ser comparado com as Refs. [106] ($k_B T_c/J = 6,6962$) usando teoria de campo efetivo de um sítio (EFT-1), [107] ($k_B T_c/J = 6,6601$) por EFT-2 e $k_B T_c/J = 6,5339$ na rede de Bethe [108] e pelo método de *cluster* variacional [109].

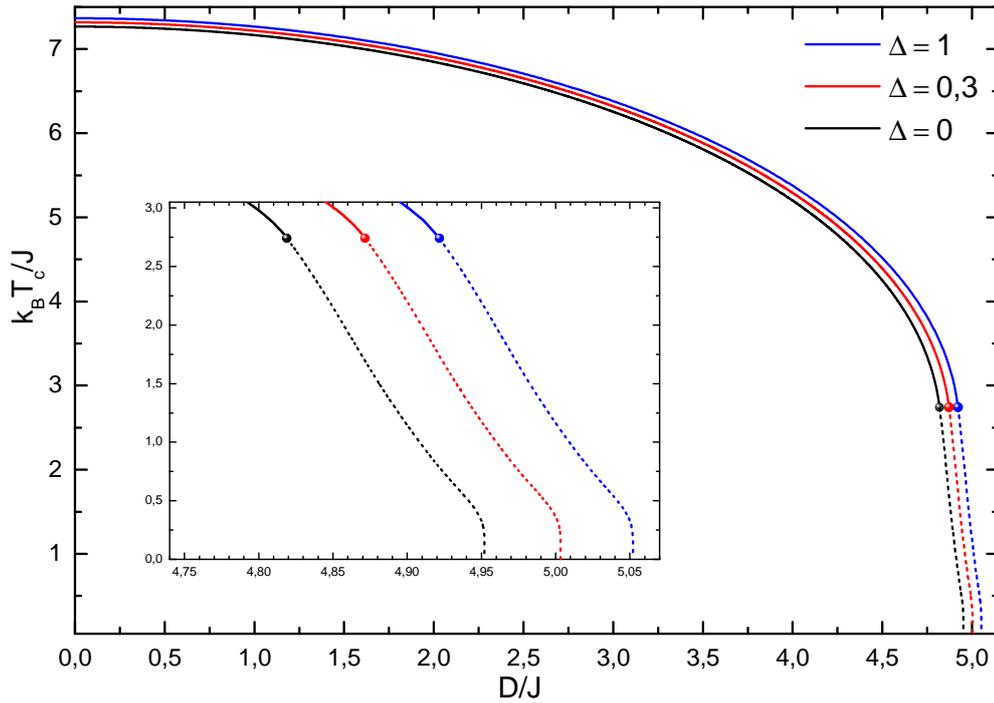


Figura 18 – Diagrama de fases do modelo de Heisenberg com spin-3/2 para valores selecionados de Δ . As linhas cheias e pontilhadas indicam as transições de fase contínuas e descontínuas, respectivamente. Os pontos tricríticos são marcados pelos pontos no gráfico. A inserção mostra em detalhes a região tricrítica e as linhas de transição de primeira ordem.

Conforme pode ser observado, quando D/J aumenta a partir de zero, a temperatura crítica na transição de segunda ordem vai decrescendo até o PTC (T_t, D_t) e a temperatura tricrítica $T_t = 2,7405$ é independente do valor assumido pelo parâmetro Δ . O valor D_t , por

sua vez, é numericamente dado em termos de Δ , de sorte que $D_t = \sqrt{24,2234 - (1 - \Delta)^2}$. As transições de primeira ordem (linhas pontilhadas no diagrama) tendem para zero na escala de temperatura quando D/J aumenta a partir do PTC (D_t) até o valor crítico $D_0 = \sqrt{25,5224 - (1 - \Delta)^2}$.

Energia interna, calor específico e susceptibilidade magnética

A seguir são mostrados os gráficos da energia interna, calor específico e susceptibilidade magnética a campo nulo para o modelo com $S = 3/2$. A energia interna por spin é calculada através da definição

$$u = -\frac{\partial \ln Z}{\partial K} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial K}, \quad (4.13)$$

de modo que o calor específico reduzido pode ser avaliado pela derivada da Eq. (4.13) em relação à temperatura ou diretamente por diferenciação numérica e a susceptibilidade magnética a campo nulo é dada por $\chi = \partial m / \partial H|_{H=0}$, usando-se m da Eq. (4.9) com $\gamma = K[(q - 1)m + H/J]$. Algebricamente, as expressões para a energia interna e a susceptibilidade magnética são relativamente grandes, mas são apresentadas em linguagem Fortran no [Apêndice B](#) para o caso de spin-3/2.

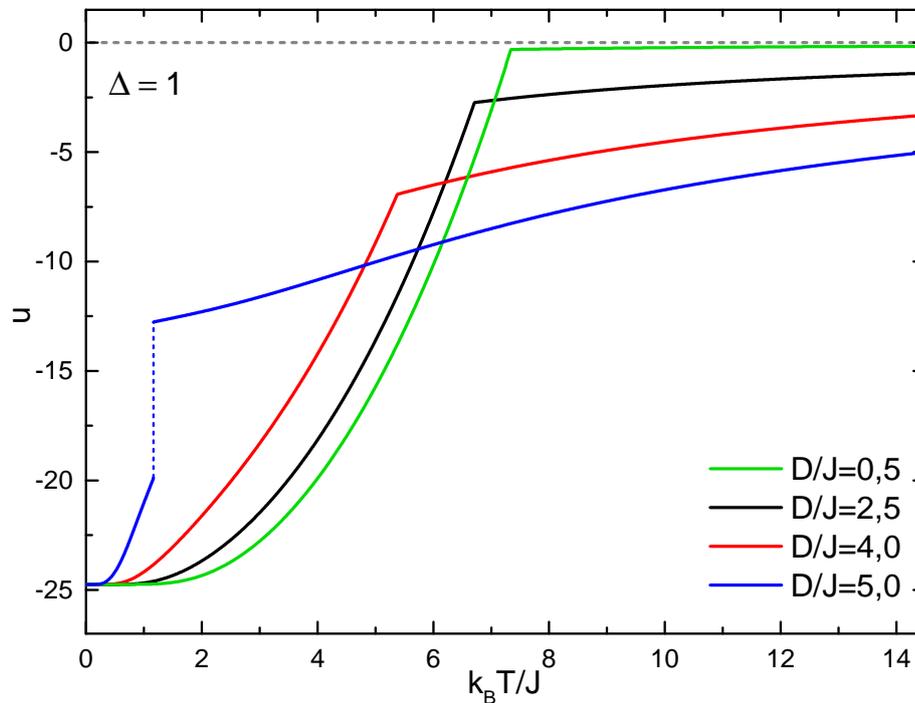


Figura 19 – Energia interna em função da temperatura para valores selecionados de D/J e anisotropia $\Delta = 1$.

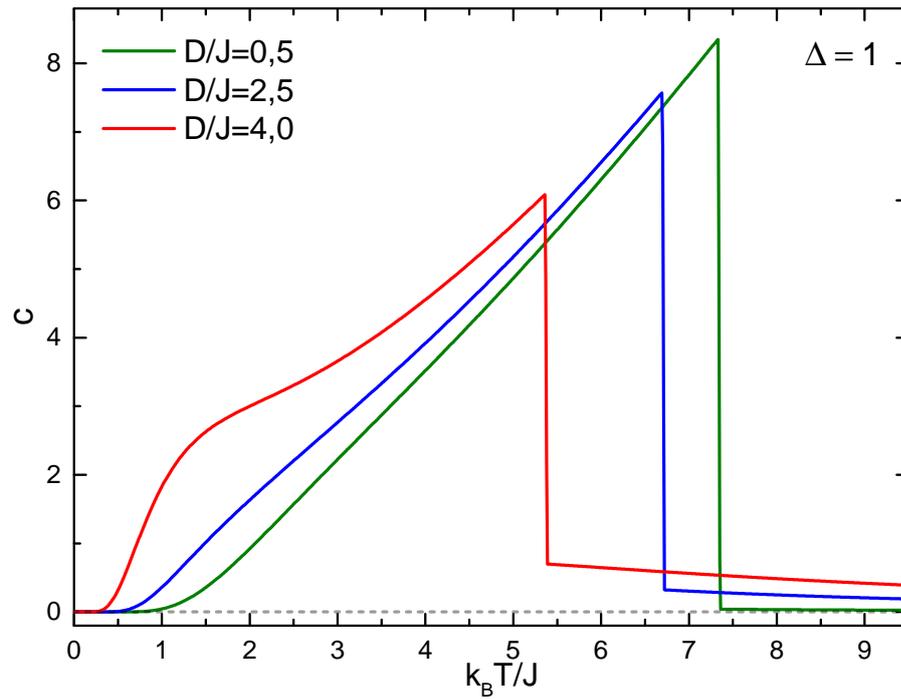


Figura 20 – Calor específico em função da temperatura para valores selecionados de D/J e anisotropia $\Delta = 1$.

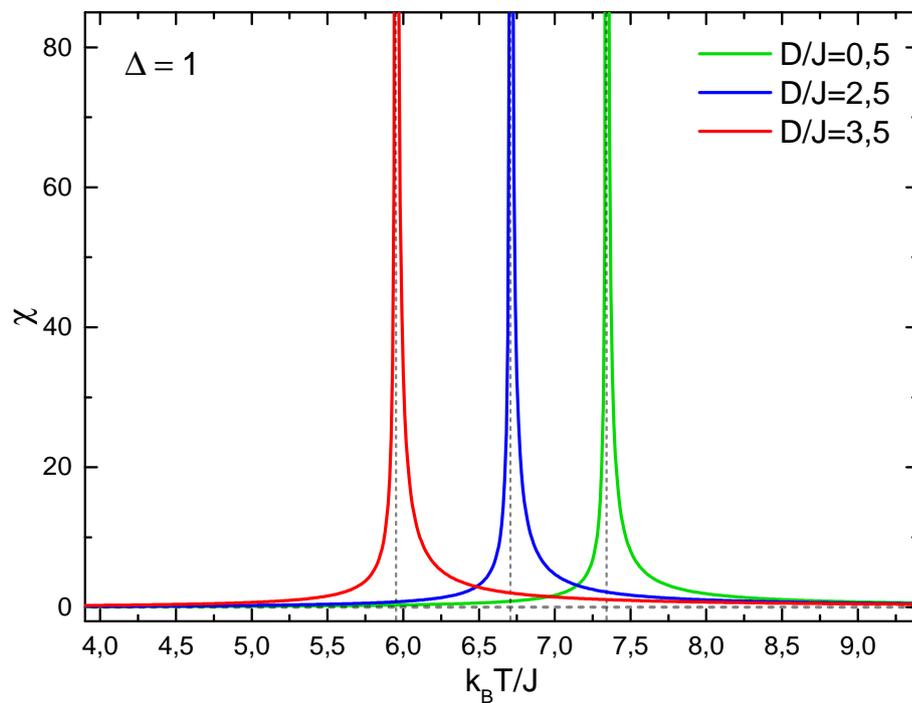


Figura 21 – Susceptibilidade magnética a campo nulo em função da temperatura para valores selecionados de D/J e anisotropia $\Delta = 1$.

4.2 Caso $S = 2$

Partiremos novamente da aproximação de pares já discutida na seção anterior:

$$-\beta\mathcal{H}_{12} = K[(1 - \Delta)(S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y) + S_1^z S_2^z] + L(S_1^x S_2^y - S_1^y S_2^x) + \gamma(S_1^z + S_2^z), \quad (4.14)$$

com $K = \beta J$, $L = \beta D$, $\gamma = K(q - 1)m$ e vamos agora considerar as matrizes de spin-2 com as definições:

$$S^x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{6} & 0 & \sqrt{6} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.15)$$

$$S^y = \frac{1}{2i} \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{6} & 0 & \sqrt{6} & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{6} & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & -2 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.16)$$

$$S^z = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}. \quad (4.17)$$

4.2.1 Forma matricial do hamiltoniano

Usando as matrizes de spin-2 descritas pelas Eqs. (4.15) a (4.17), a Eq. (4.14) é representada por uma matriz 25×25 . Assim como na [subseção 4.1.1](#) para o caso de spin-3/2, somente os elementos diferentes de zero⁴ são listados a seguir:

$$\begin{aligned} \mathfrak{h}_{1,1} &= 4K + 4\gamma, & \mathfrak{h}_{2,2} &= 2K + 3\gamma, & \mathfrak{h}_{2,6} &= 2[K(1 - \Delta) + iL], \\ \mathfrak{h}_{3,3} &= 2\gamma, & \mathfrak{h}_{3,7} &= \sqrt{6}[K(1 - \Delta) + iL], & \mathfrak{h}_{4,4} &= -2K + \gamma, \\ \mathfrak{h}_{4,8} &= \sqrt{6}[K(1 - \Delta) + iL], & \mathfrak{h}_{5,5} &= -4K, & \mathfrak{h}_{5,9} &= 2[K(1 - \Delta) + iL], \\ \mathfrak{h}_{6,2} &= 2[K(1 - \Delta) - iL], & \mathfrak{h}_{6,6} &= 2K + 3\gamma, \\ \mathfrak{h}_{7,3} &= \sqrt{6}[K(1 - \Delta) - iL], & \mathfrak{h}_{7,7} &= K + 2\gamma, & \mathfrak{h}_{7,11} &= \sqrt{6}[K(1 - \Delta) + iL], \\ \mathfrak{h}_{8,4} &= \sqrt{6}[K(1 - \Delta) - iL], & \mathfrak{h}_{8,8} &= \gamma, & \mathfrak{h}_{8,12} &= 3[K(1 - \Delta) + iL], \end{aligned}$$

⁴ No total, há 56 elementos não-nulos.

$$\begin{aligned}
\mathbf{h}_{9,5} &= 2 \left[K(1 - \Delta) - iL \right], & \mathbf{h}_{9,9} &= -K, & \mathbf{h}_{9,13} &= 3 \left[K(1 - \Delta) + iL \right], \\
\mathbf{h}_{10,10} &= -2K - \gamma, & \mathbf{h}_{10,14} &= \sqrt{6} \left[K(1 - \Delta) + iL \right] \\
\mathbf{h}_{11,7} &= \sqrt{6} \left[K(1 - \Delta) - iL \right], & \mathbf{h}_{11,11} &= 2\gamma, \\
\mathbf{h}_{12,8} &= 3 \left[K(1 - \Delta) - iL \right], & \mathbf{h}_{12,12} &= \gamma, & \mathbf{h}_{12,16} &= \sqrt{6} \left[K(1 - \Delta) + iL \right], \\
\mathbf{h}_{13,9} &= 3 \left[K(1 - \Delta) - iL \right], & \mathbf{h}_{13,17} &= 3 \left[K(1 - \Delta) + iL \right] \\
\mathbf{h}_{14,10} &= \sqrt{6} \left[K(1 - \Delta) - iL \right], & \mathbf{h}_{14,14} &= -\gamma, & \mathbf{h}_{14,18} &= 3 \left[K(1 - \Delta) + iL \right] \\
\mathbf{h}_{15,15} &= -2\gamma, & \mathbf{h}_{15,19} &= \sqrt{6} \left[K(1 - \Delta) + iL \right], \\
\mathbf{h}_{16,12} &= \sqrt{6} \left[K(1 - \Delta) - iL \right], & \mathbf{h}_{16,16} &= -2K + \gamma, \\
\mathbf{h}_{17,13} &= 3 \left[K(1 - \Delta) - iL \right], & \mathbf{h}_{17,17} &= -K, & \mathbf{h}_{17,21} &= 2 \left[K(1 - \Delta) + iL \right], \\
\mathbf{h}_{18,14} &= 3 \left[K(1 - \Delta) - iL \right], & \mathbf{h}_{18,18} &= -\gamma, & \mathbf{h}_{18,22} &= \sqrt{6} \left[K(1 - \Delta) + iL \right], \\
\mathbf{h}_{19,15} &= \sqrt{6} \left[K(1 - \Delta) - iL \right], & \mathbf{h}_{19,19} &= K - 2\gamma, & \mathbf{h}_{19,23} &= \sqrt{6} \left[K(1 - \Delta) + iL \right], \\
\mathbf{h}_{20,20} &= 2K - 3\gamma, & \mathbf{h}_{20,24} &= 2 \left[K(1 - \Delta) + iL \right], \\
\mathbf{h}_{21,17} &= 2 \left[K(1 - \Delta) - iL \right], & \mathbf{h}_{21,21} &= -4K, \\
\mathbf{h}_{22,18} &= \sqrt{6} \left[K(1 - \Delta) - iL \right], & \mathbf{h}_{22,22} &= -2K - \gamma, & \mathbf{h}_{23,19} &= \sqrt{6} \left[K(1 - \Delta) - iL \right], \\
\mathbf{h}_{23,23} &= -2\gamma, & \mathbf{h}_{24,20} &= 2 \left[K(1 - \Delta) - iL \right], & \mathbf{h}_{24,24} &= 2K - 3\gamma, & \mathbf{h}_{25,25} &= 4K - 4\gamma.
\end{aligned}$$

Aqui, mais uma vez, temos: $K = \beta J$, $L = \beta D$ e $\gamma = K(q - 1)m$.

4.2.2 Autovalores

Calculando-se os autovalores da matriz cujos elementos são dados na [subseção 4.2.1](#), é possível construir a expressão da função de partição e, a partir daí, obter as propriedades termodinâmicas do modelo. Neste caso, todos os autovalores reais obtidos são listados a seguir⁵:

$$\begin{aligned}
\lambda_1 &= 2\gamma, & \lambda_2 &= -2\gamma, & \lambda_3 &= 4(K + \gamma), & \lambda_4 &= 4(K - \gamma), \\
\lambda_5 &= 2K + 3\gamma + 2W, & \lambda_6 &= 2K + 3\gamma - 2W, \\
\lambda_7 &= 2K - 3\gamma + 2W, & \lambda_8 &= 2K - 3\gamma - 2W,
\end{aligned}$$

⁵ Diferentemente do caso $S = 3/2$ abordado na [seção 4.1](#), o aumento da dimensão matricial torna o cálculo dos autovalores uma tarefa não trivial. Neste caso, os três últimos autovalores (λ_{23} , λ_{24} e λ_{25}) foram obtidos a partir da análise do polinômio característico, cuja fatoração resulta num produto de vários polinômios, sendo o maior deles de grau 3. Com isso, as soluções de uma equação cúbica (para três raízes reais distintas) foram obtidas com base na Ref. [110].

$$\begin{aligned}
 \lambda_9 &= -\frac{5K}{2} + \frac{\sqrt{9K^2 + 16W^2}}{2}, & \lambda_{10} &= -\frac{5K}{2} - \frac{\sqrt{9K^2 + 16W^2}}{2}, \\
 \lambda_{11} &= \frac{K}{2} + 2\gamma + \frac{\sqrt{K^2 + 48W^2}}{2}, & \lambda_{12} &= \frac{K}{2} + 2\gamma - \frac{\sqrt{K^2 + 48W^2}}{2}, \\
 \lambda_{13} &= \frac{K}{2} - 2\gamma + \frac{\sqrt{K^2 + 48W^2}}{2}, & \lambda_{14} &= \frac{K}{2} - 2\gamma - \frac{\sqrt{K^2 + 48W^2}}{2}, \\
 \lambda_{15} &= -K + \gamma + \frac{3W}{2} + \frac{\Upsilon_1}{2}, & \lambda_{16} &= -K + \gamma - \frac{3W}{2} + \frac{\Upsilon_2}{2}, \\
 \lambda_{17} &= -K + \gamma + \frac{3W}{2} - \frac{\Upsilon_1}{2}, & \lambda_{18} &= -K + \gamma - \frac{3W}{2} - \frac{\Upsilon_2}{2}, \\
 \lambda_{19} &= -K - \gamma + \frac{3W}{2} + \frac{\Upsilon_1}{2}, & \lambda_{20} &= -K - \gamma - \frac{3W}{2} + \frac{\Upsilon_2}{2}, \\
 \lambda_{21} &= -K - \gamma + \frac{3W}{2} - \frac{\Upsilon_1}{2}, & \lambda_{22} &= -K - \gamma - \frac{3W}{2} - \frac{\Upsilon_2}{2}, \\
 \lambda_{23} &= -\frac{5K}{3} + \frac{2}{3}\sqrt{\Omega_1} \operatorname{sen} \left[\frac{\pi}{6} + \frac{1}{3} \arccos \left(\frac{K\Omega_2}{\Omega_1^{3/2}} \right) \right], \\
 \lambda_{24} &= -\frac{5K}{3} + \frac{2}{3}\sqrt{\Omega_1} \operatorname{cos} \left[\frac{\pi}{3} + \frac{1}{3} \arccos \left(\frac{K\Omega_2}{\Omega_1^{3/2}} \right) \right], \\
 \lambda_{25} &= -\frac{5K}{3} - \frac{2}{3}\sqrt{\Omega_1} \operatorname{cos} \left[\frac{1}{3} \arccos \left(\frac{K\Omega_2}{\Omega_1^{3/2}} \right) \right].
 \end{aligned}$$

Aqui, temos $\Upsilon_1 = \sqrt{4K^2 + 12KW + 33W^2}$, $\Upsilon_2 = \sqrt{4K^2 - 12KW + 33W^2}$, $\Omega_1 = 13K^2 + 66W^2$ e $\Omega_2 = 35K^2 - 477W^2$ com $W = K\sqrt{(1 - \Delta)^2 + (D/J)^2}$.

4.2.3 Função de partição e magnetização

Aplicando os autovalores obtidos na [subseção 4.2.2](#), a função de partição Z será dada pela seguinte expressão:

$$\begin{aligned}
 Z &= 2 \cosh(2\gamma) + 2 \exp(4K) \cosh(4\gamma) + 2 \exp\left(-\frac{5K}{2}\right) \cosh\left(\frac{1}{2}\sqrt{9K^2 + 16W^2}\right) \\
 &+ 4 \exp(2K) \cosh(3\gamma) \cosh(2W) + 4 \exp\left(\frac{K}{2}\right) \cosh(2\gamma) \cosh\left(\frac{1}{2}\sqrt{K^2 + 48W^2}\right) \\
 &+ 4 \exp(-K) \cosh(\gamma) \left[\exp\left(\frac{3W}{2}\right) \cosh\left(\frac{\Upsilon_1}{2}\right) + \exp\left(-\frac{3W}{2}\right) \cosh\left(\frac{\Upsilon_2}{2}\right) \right] \\
 &+ \exp\left\{ -\frac{5K}{3} + \frac{2}{3}\sqrt{\Omega_1} \operatorname{sen} \left[\frac{\pi}{6} + \frac{1}{3} \arccos \left(\frac{K\Omega_2}{\Omega_1^{3/2}} \right) \right] \right\} \\
 &+ \exp\left\{ -\frac{5K}{3} + \frac{2}{3}\sqrt{\Omega_1} \operatorname{cos} \left[\frac{\pi}{3} + \frac{1}{3} \arccos \left(\frac{K\Omega_2}{\Omega_1^{3/2}} \right) \right] \right\} \\
 &+ \exp\left\{ -\frac{5K}{3} - \frac{2}{3}\sqrt{\Omega_1} \operatorname{cos} \left[\frac{1}{3} \arccos \left(\frac{K\Omega_2}{\Omega_1^{3/2}} \right) \right] \right\}.
 \end{aligned} \tag{4.18}$$

A magnetização m tem a expressão (como já discutido anteriormente):

$$m = \frac{A}{Z}, \tag{4.19}$$

sendo Z a função de partição dada pela Eq. (4.18) e

$$\begin{aligned}
 A = & 2 \sinh(2\gamma) + 4 \exp(4K) \sinh(4\gamma) + 6 \exp(2K) \sinh(3\gamma) \cosh(2W) \\
 & + 4 \exp\left(\frac{K}{2}\right) \sinh(2\gamma) \cosh\left(\frac{1}{2}\sqrt{K^2 + 48W^2}\right) \\
 & + 2 \exp(-K) \sinh(\gamma) \left[\exp\left(\frac{3W}{2}\right) \cosh\left(\frac{\Upsilon_1}{2}\right) + \exp\left(-\frac{3W}{2}\right) \cosh\left(\frac{\Upsilon_2}{2}\right) \right],
 \end{aligned}$$

com $\gamma = K(q-1)m$, $K = \beta J$, $\Upsilon_1 = \sqrt{4K^2 + 12KW + 33W^2}$, $\Upsilon_2 = \sqrt{4K^2 - 12KW + 33W^2}$ e $W = K\sqrt{(1-\Delta)^2 + (D/J)^2}$.

4.2.4 Resultados

O comportamento da magnetização como função da temperatura é mostrado na Figura 22 para valores seleccionados de D/J com $\Delta = 1$. Para $D/J = 1, 3,5$ e 5 , ocorrem transições de fase de segunda ordem, em que a magnetização decresce continuamente até zero no ponto crítico. Quando $D/J = 3,5$ e 5 as soluções instáveis podem ser vistas pelas curvas tracejadas com as letras correspondentes. Quando $D > D_t$, são apresentadas duas curvas com transição de fase de primeira ordem: $D/J = 5,20$ e $D/J = 5,25$, com temperaturas críticas $k_B T_c/J = 3,4797$ e $k_B T_c/J = 1,4390$, respectivamente.

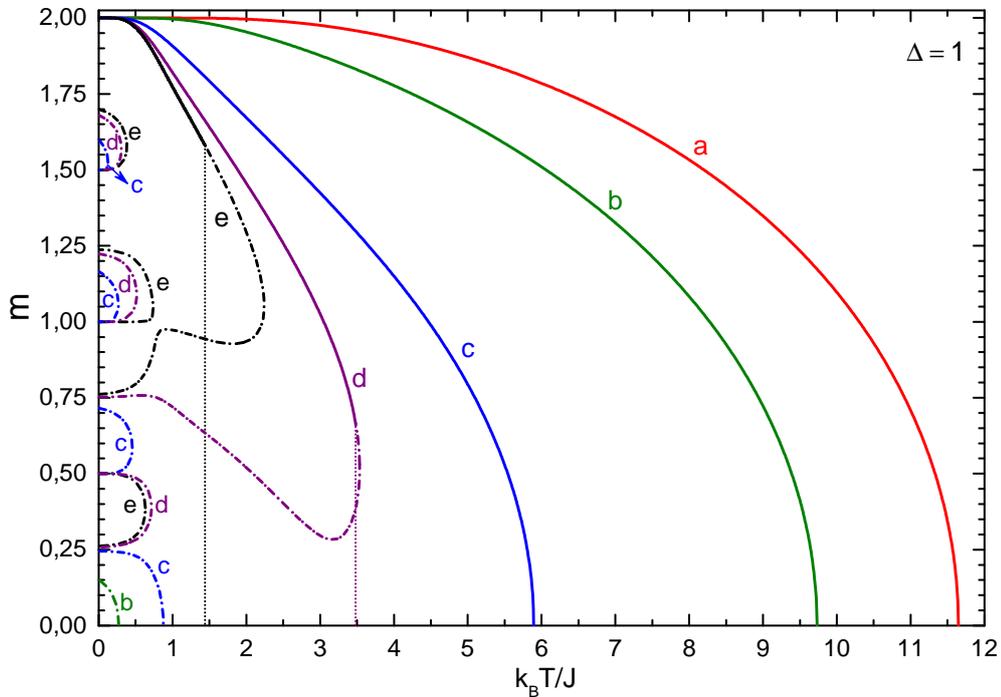


Figura 22 – Variações térmicas da magnetização para $\Delta = 1$ com diferentes valores do parâmetro DM: a) $D/J = 1,0$, b) $D/J = 3,5$, c) $D/J = 5,0$, d) $D/J = 5,20$ e e) $D/J = 5,25$. As linhas cheias e tracejadas correspondem às soluções estáveis e instáveis, respectivamente. As linhas pontilhadas verticais indicam a descontinuidade de m nas temperaturas críticas de primeira ordem para as curvas d) e e).

A Figura 23 mostra o diagrama de fases do sistema para o caso $S = 2$, em que a temperatura crítica varia em função de D/J . As representações gráficas de algumas curvas para diferentes valores de Δ são indicadas na legenda. O comportamento é qualitativamente similar ao caso $S = 3/2$, já discutido anteriormente. Em relação às medidas dos parâmetros, quando $\Delta = 1$ e $D = 0$, por exemplo, obtém-se o valor $k_B T_c/J = 11,7948$, que pode ser comparado com a aproximação de campo médio: $k_B T_c/J = 12$ [105]. É também comparável com os resultados das Refs. [106] ($k_B T_c/J = 10,769$) usando EFT-1, $k_B T_c/J = 10,6916$, por meio de EFT-2 [107] e $k_B T_c/J = 10,514$ na rede de Bethe [108].

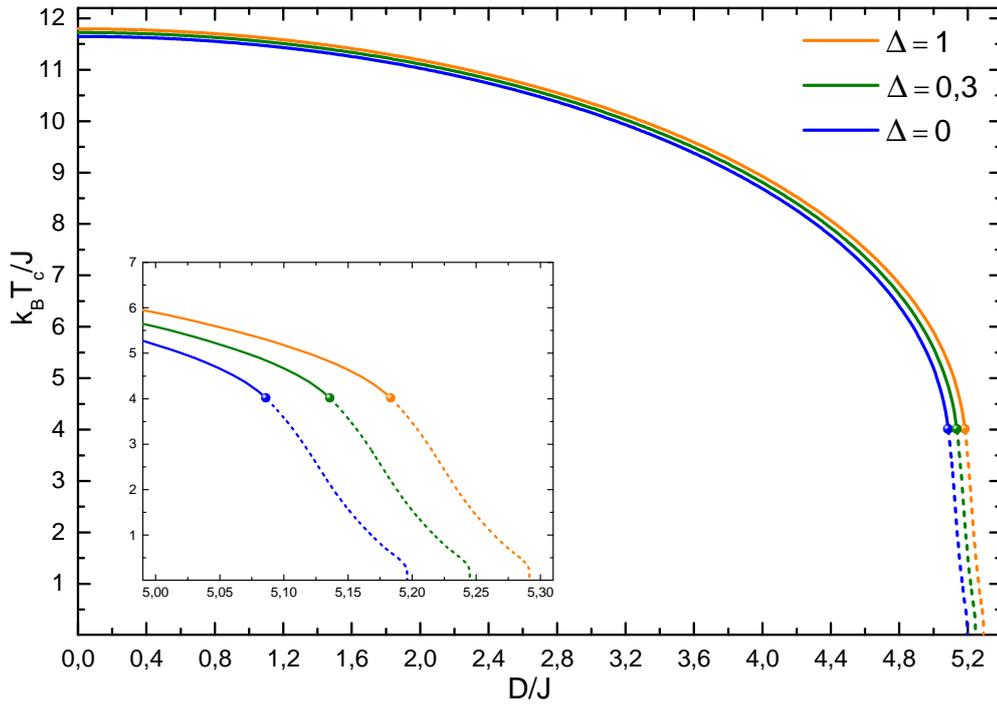


Figura 23 – Temperatura crítica do modelo de Heisenberg spin-2 como função da interação DM para valores selecionados de Δ . As linhas cheias e pontilhadas indicam as transições de fase contínuas e descontínuas, respectivamente. Os pontos tricríticos são marcados pelos pontos no gráfico. A inserção mostra em detalhes a região tricrítica e as linhas de transição de primeira ordem.

Além disso, nesse caso a temperatura tricrítica vale $T_t = 4,0146$ e independe do valor assumido pelo parâmetro anisotrópico de troca Δ . O valor de D_t , por outro lado, é numericamente dado em termos de Δ , de tal forma que $D_t = \sqrt{26,8667 - (1 - \Delta)^2}$. Já para as transições de primeira ordem (linhas pontilhadas), no limite $k_B T_c/J \rightarrow 0$, temos o valor crítico $D_0 = \sqrt{28 - (1 - \Delta)^2}$.

Energia interna, calor específico e susceptibilidade magnética

A seguir são mostrados os gráficos da energia interna, calor específico e susceptibilidade magnética a campo nulo para o modelo com $S = 2$.

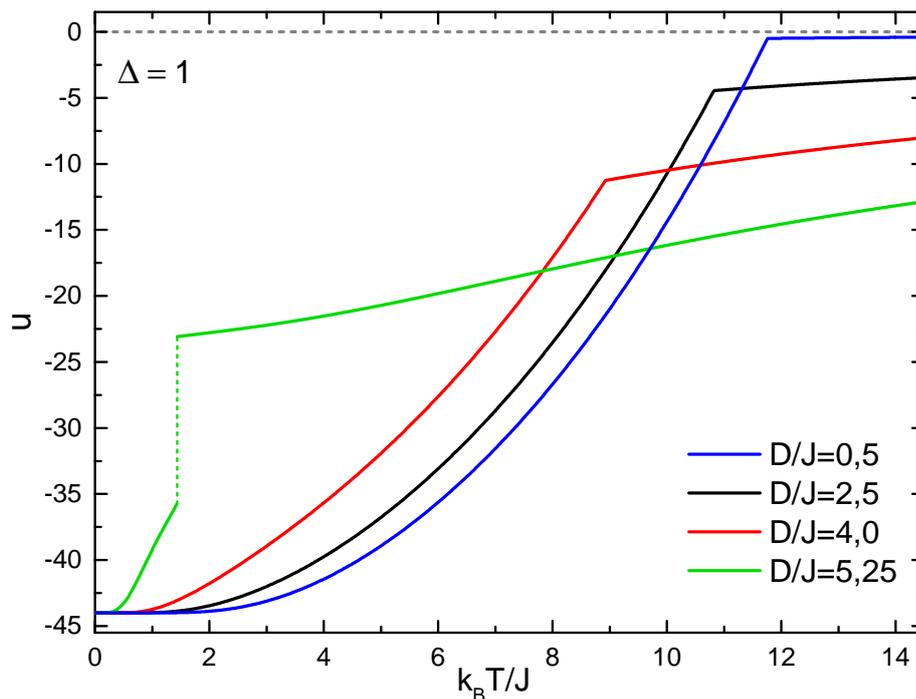


Figura 24 – Energia interna em função da temperatura para valores seleccionados de D/J e anisotropia $\Delta = 1$.

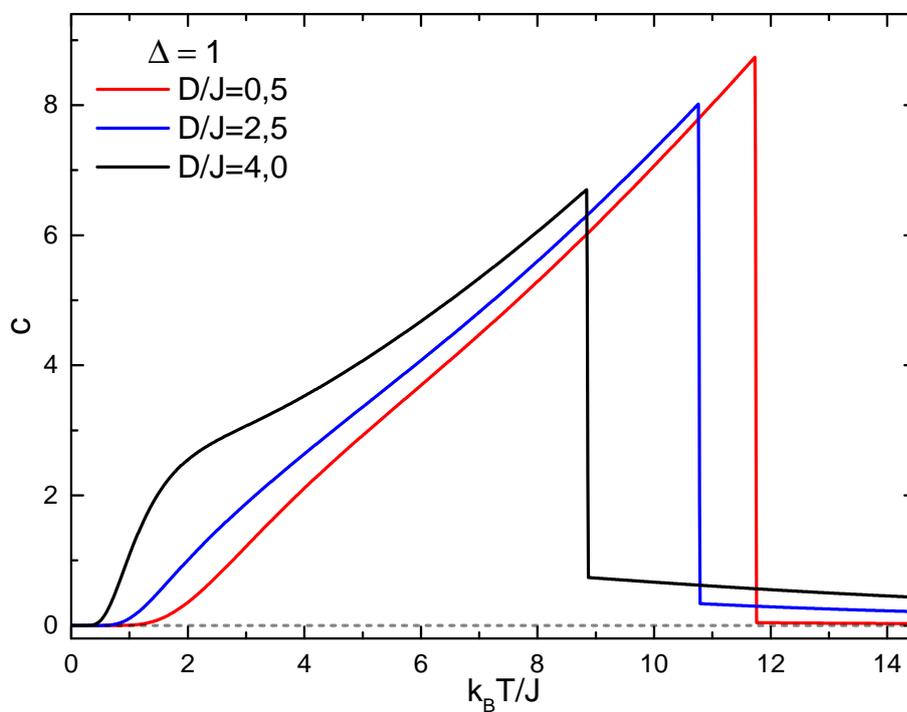


Figura 25 – Calor específico em função da temperatura para valores seleccionados de D/J e anisotropia $\Delta = 1$.

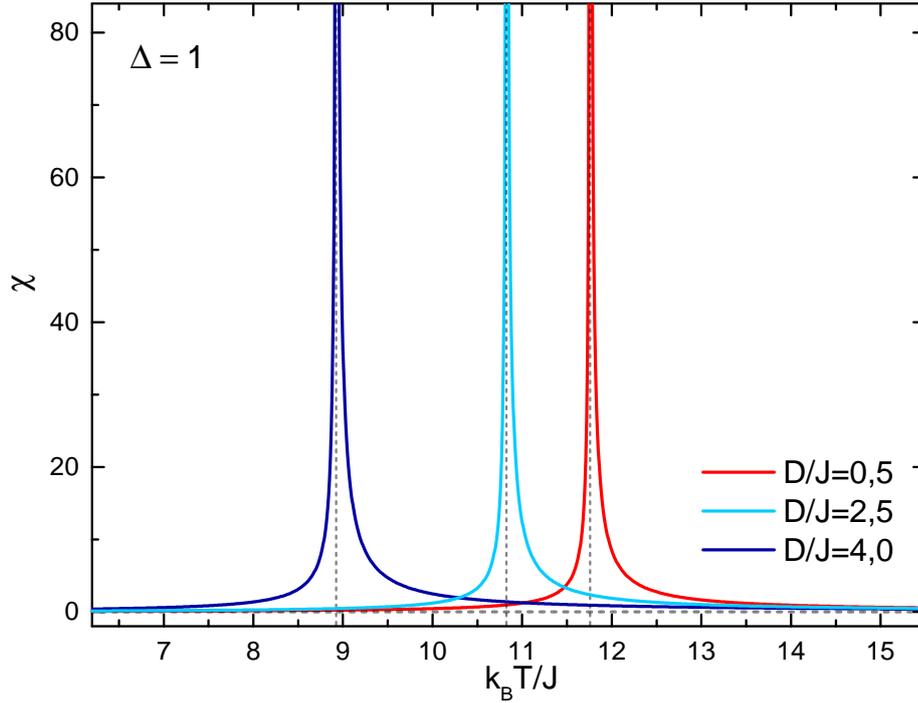


Figura 26 – Susceptibilidade magnética a campo nulo em função da temperatura para valores selecionados de D/J e anisotropia $\Delta = 1$.

Nas seções iniciais deste Capítulo foram apresentados os diagramas de fases e propriedades termodinâmicas do modelo anisotrópico de Heisenberg com interação DM através de uma aproximação de pares para os casos $S = 3/2$ e $S = 2$. Foi mostrado que a interação DM induz um comportamento tricrítico no sistema, sendo que o valor de D/J no ponto tricrítico é dado em termos do parâmetro anisotrópico Δ . Contudo, destaca-se a independência da temperatura tricrítica com relação a Δ . Em termos gerais, o comportamento crítico mostrado pode ser explicado como resultado de uma competição da interação DM com a interação de troca J . Enquanto esta tende a produzir um estado ferromagnético colinear, a presença da interação DM contribui para a desordem do sistema. Ou seja, à medida que o parâmetro DM aumenta, o sistema tende à fase paramagnética mais rapidamente. Dessa forma, uma menor temperatura é suficiente para provocar uma quebra do alinhamento entre os spins. Este comportamento é evidente quando se observa as curvas de magnetização.

4.3 Comparação com os casos $S \leq 1$

No trabalho desenvolvido por Sun e Kong [17] para o modelo com $S = 1$, relatou-se que por comparação com resultados já conhecidos para $S = 1/2$, as temperaturas tricríticas eram inferiores, ao passo que os valores de D no ponto tricrítico eram maiores. Uma checagem dos cálculos de ambos os casos previamente reportados é capaz de mostrar a razão de tal comportamento: nos estudos do modelo com spin-1/2 [13, 15, 16], os operadores

de spin S_i^α ($\alpha = x, y, z$) foram considerados como sendo as matrizes de Pauli (sem incluir o fator $\frac{1}{2}$). Ou seja, pelo menos para efeitos de comparação, é conveniente considerar os operadores de spins com as constantes apropriadas⁶. Posto isto, na Figura 27 são produzidas as curvas dos diagramas de fases com $\Delta = 0,3$ (Heisenberg anisotrópico) para os quatro tipos de spins, incluindo os casos discutidos previamente na literatura.

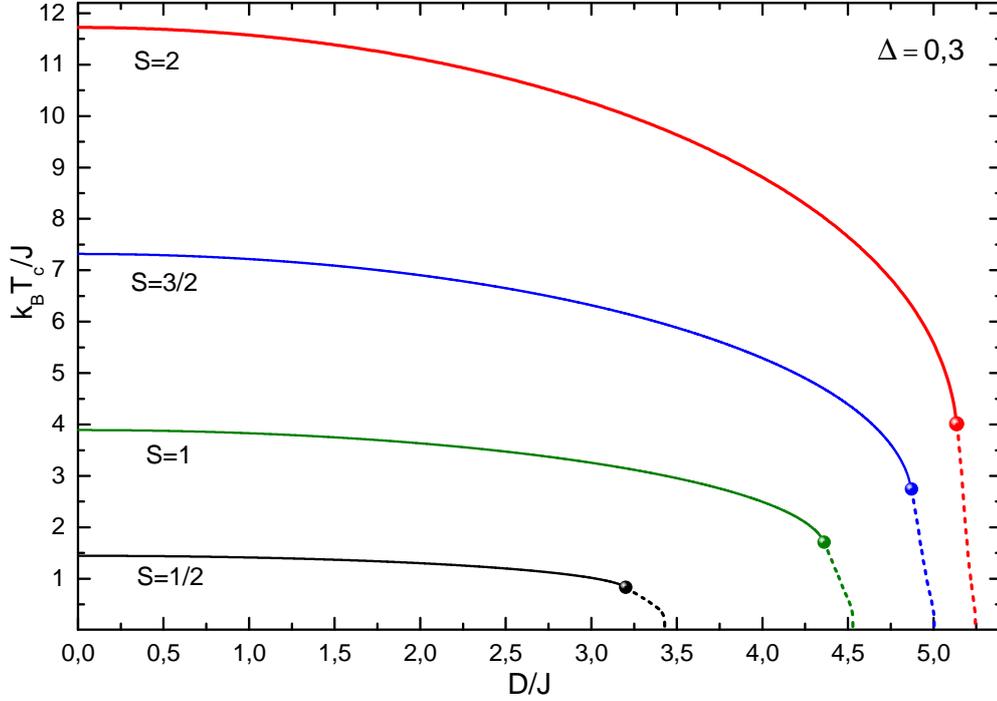


Figura 27 – Diagrama de fases $k_B T_c / J - D / J$ com $\Delta = 0,3$ para $S = 1/2$, $S = 1$, $S = 3/2$ e $S = 2$ na rede cúbica simples.

Conforme pode ser visto da comparação entre os diferentes casos, as temperaturas críticas (e tricríticas) são maiores conforme se aumenta o valor do spin. É evidente que um comportamento similar também ocorre em relação a D no ponto tricrítico.

Semelhante ao obtido por Sousa *et al.* [13] para o caso $S = 1/2$, a solução analítica para o ponto tricrítico é dada pelas equações:

$$T_t = \frac{q-1}{6} \quad \text{e} \quad D_t = \sqrt{\frac{(q-1)^2}{9} \operatorname{argcosh}^2 \left[2 \exp \left(\frac{3}{q-1} \right) \right] - (1-\Delta)^2}. \quad (4.20)$$

Os resultados de (4.20) são obtidos das condições $A_1 = 1$, $A_3 = 0$ na expansão da magnetização. Dessa forma, fica claro que o valor da temperatura é dependente apenas do tipo de estrutura considerada (número de vizinhos q), enquanto o parâmetro DM depende também da anisotropia do modelo. Isto implica que para a rede cúbica simples ($q = 6$): $T_t = 5/6$ e $D_t = \sqrt{10,7465 - (1-\Delta)^2}$. Por outro lado, para $S = 1$, temos as soluções numéricas $T_t = 1,7084$ e $D_t = \sqrt{19,5016 - (1-\Delta)^2}$. Na Tabela 6 são listados

⁶ Isso vale especialmente para os casos de spins semi-inteiros.

numericamente os parâmetros críticos do modelo para os diferentes tipos de spins estudados. São usadas as seguintes notações: $D_t = D/J$ e $T_t = k_B T_c/J$ no ponto tricrítico, $D_0 = D/J$ quando $k_B T_c/J \rightarrow 0$ e $T_0 = k_B T_c/J$ quando $D/J = 0$.

Tabela 6 – Localização dos pontos tricríticos, valores críticos da interação DM ($k_B T_c/J \rightarrow 0$) e temperaturas críticas com $D = 0$ para $S = 1/2$, $S = 1$, $S = 3/2$ e $S = 2$ na rede cúbica simples.

	$S = 1/2$ [13, 16]			$S = 1$ [17]		
	$\Delta = 0$	$\Delta = 0,3$	$\Delta = 1$	$\Delta = 0$	$\Delta = 0,3$	$\Delta = 1$
D_t	3,1219	3,2029	3,2782	4,3014	4,3602	4,4161
T_t	0,8333	0,8333	0,8333	1,7084	1,7084	1,7084
D_0	3,3541	3,4293	3,5000	4,4721	4,5288	4,5826
T_0	1,4298	1,4463	1,4617	3,8608	3,8921	3,9218
	$S = 3/2$ [111]			$S = 2$		
	$\Delta = 0$	$\Delta = 0,3$	$\Delta = 1$	$\Delta = 0$	$\Delta = 0,3$	$\Delta = 1$
D_t	4,8191	4,8717	4,9217	5,0859	5,1358	5,1833
T_t	2,7405	2,7405	2,7405	4,0146	4,0146	4,0146
D_0	4,9520	5,0032	5,0520	5,1962	5,2450	5,2915
T_0	7,2673	7,3180	7,3662	11,6478	11,7232	11,7948

As demais propriedades termodinâmicas, comparadas em relação aos diferentes tipos de spins, são mostradas a seguir. São considerados os parâmetros fixos $\Delta = 1$ e $D/J = 0,5$, para os quais há ocorrência apenas de transições de segunda ordem.

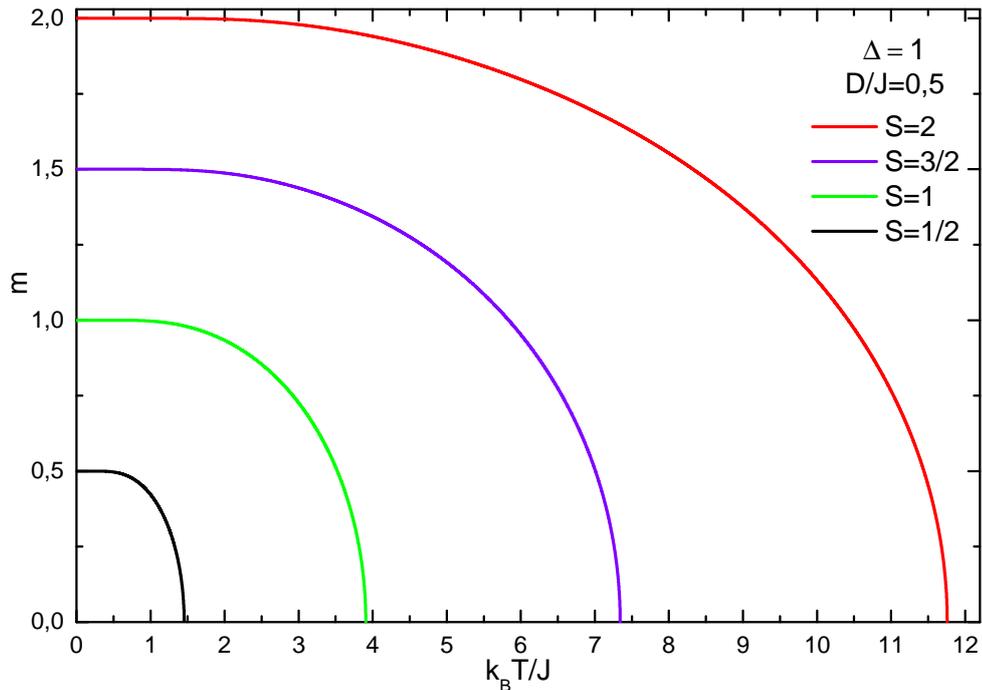


Figura 28 – Magnetização em função da temperatura com $D/J = 0,5$ e $\Delta = 1$ para os casos de $S = 1/2$ a $S = 2$.

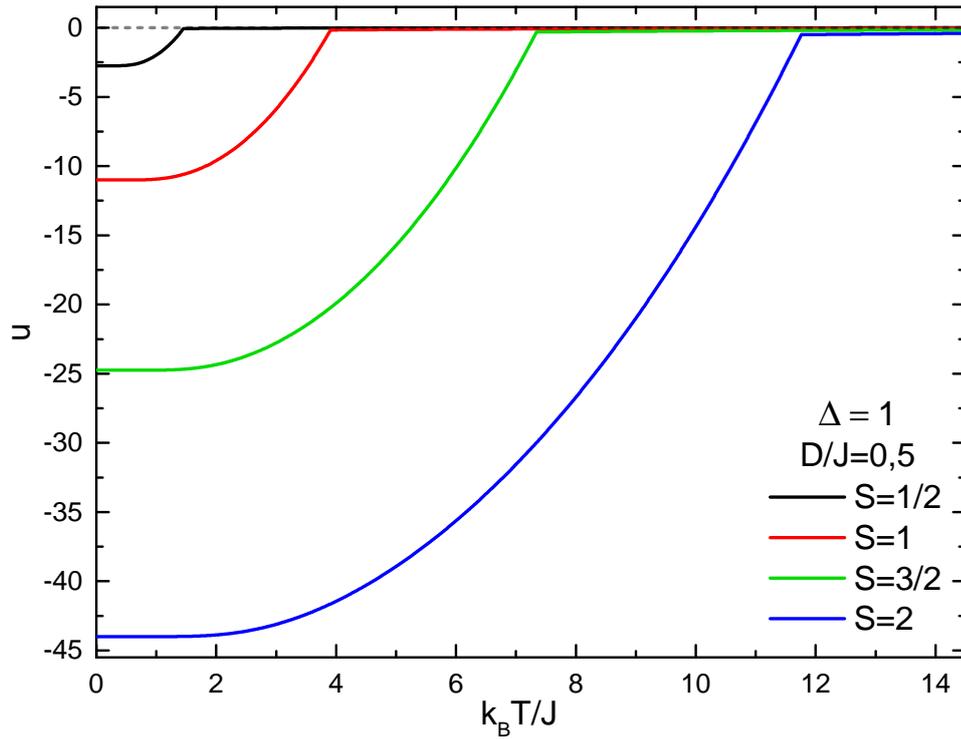


Figura 29 – Energia interna em função da temperatura para diferentes tipos de spin e valores fixos $\Delta = 1$ e $D/J = 0,5$.

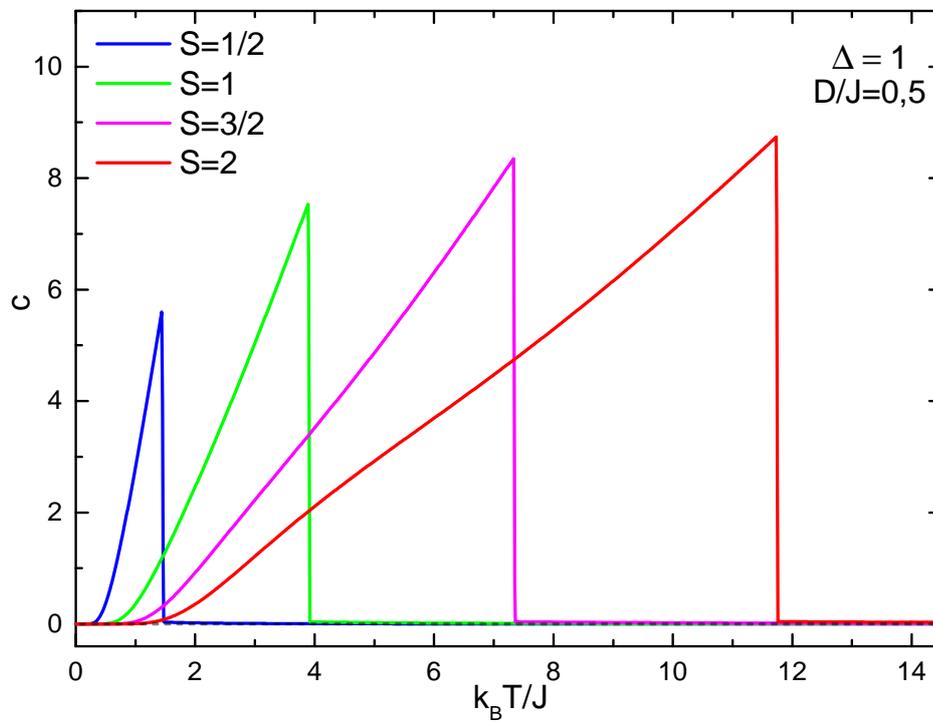


Figura 30 – Calor específico em função da temperatura para diferentes tipos de spin e valores fixos $\Delta = 1$ e $D/J = 0,5$.

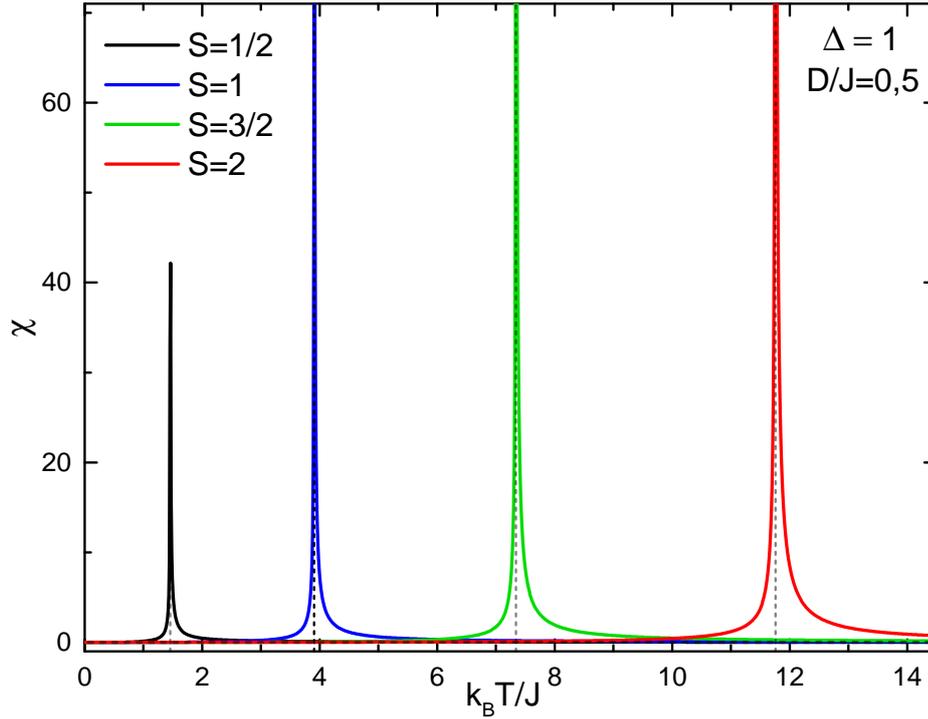


Figura 31 – Susceptibilidade magnética a campo nulo em função da temperatura para diferentes tipos de spin e valores fixos $\Delta = 1$ e $D/J = 0,5$.

4.4 Abordagem a outras versões do modelo

4.4.1 Modelo isotrópico com interação DM e campo aleatório

Os efeitos de campo aleatório nos modelos magnéticos têm sido um tópico de crescente interesse ao longo dos anos [6, 8–10, 19, 112–114]. Respostas para várias questões tais como existência ou ausência de pontos tricríticos [115–117] ainda não foram obtidas de forma definitiva. Neste contexto, a escolha da distribuição do campo, bem como o tipo de aproximação utilizada desempenham um papel relevante. O modelo de Ising de campo aleatório (RFIM) foi inicialmente introduzido por Larkin [118] para supercondutores e depois generalizado por Imry e Ma [119]. Uma das maiores motivações para investigação de campos aleatórios é o fato de que antiferromagnetos diluídos na presença de campo homogêneo se comportam como ferromagnetos em campo aleatório uniaxial. Alguns exemplos de aplicações são os compostos $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$ [120] e $\text{Rb}_2\text{Co}_x\text{Mg}_{1-x}\text{F}_4$ [121].

Do ponto de vista teórico, a maioria dos estudos considerando a inclusão de campo aleatório nos modelos tais como Ising e Heisenberg lidam com o caso de spin-1/2. Albuquerque e Arruda [122] estudaram as características da transição de fases com campo distribuído de forma bimodal através da teoria de campo efetivo (EFT-2), onde foi encontrado um ponto tricrítico. Posteriormente, Albuquerque *et al.* [123] trataram o mesmo sistema para o caso amorfo. Com a abordagem EFT, Sousa *et al.* [18] estudaram os efeitos de campo aleatório numa distribuição bimodal no modelo de Heisenberg clássico

e quântico e também obtiveram um comportamento tricrítico. O caso de uma distribuição trimodal de campo aleatório foi tratado por Akinci [113] no modelo de Heisenberg quântico anisotrópico, com resultados para as redes cúbica simples e cúbica de corpo centrado, também via formalismo EFT. O comportamento crítico do modelo de Heisenberg clássico com campo aleatório numa distribuição trimodal foi ainda investigado por Santos-Filho *et al.* [8]. Alguns estudos têm abordado modelos com presença de campo cristalino e campo aleatório simultaneamente, como na Ref. [124] para o modelo Blume-Capel spin-3/2.

Dessa forma, além da interação DM, já é conhecido o fato de que a presença de campo magnético aleatório em alguns modelos podem induzir um ponto tricrítico no diagrama de fases [8, 113]. Nesta seção, analisaremos o modelo de Heisenberg spin-1 com interação DM e campo magnético aleatório, mostrando que em algumas situações há ocorrência de fenômenos multicríticos, como a presença de pontos críticos de quarta ordem [125–128], os quais podem também ser obtidos em outros sistemas, tais como no modelo de Ising misto com diferentes anisotropias de íon-único [129].

A seguir, serão discutidos o formalismo e alguns resultados do modelo, com aplicação para a rede cúbica simples⁷. Nesse caso, o hamiltoniano é descrito através da relação:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{D}_{ij} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j) - \sum_i \mathbf{H}_i \cdot \mathbf{S}_i, \quad (4.21)$$

em que as modificações em relação aos casos discutidos nas seções prévias consistem na ausência de anisotropia de troca ($\Delta = 0$) e inclusão do termo de campo externo, para o qual será aplicada uma distribuição de probabilidades trimodal:

$$P(H_i) = p\delta(H_i) + \frac{1-p}{2} \left[\delta(H_i - H) + \delta(H_i + H) \right]. \quad (4.22)$$

Na Eq. (4.22), p é um número real ($p \in [0, 1]$), e $\delta(X) [X \equiv H_i, H_i \pm H]$ é a função delta de Dirac. Para $p = 1$ ou $H = 0$, o sistema se reduz ao modelo de Heisenberg com interação DM, enquanto para o intervalo $0 < p < 1$, há uma contribuição $\pm H$, com probabilidades $(1-p)/2$. Já quando $p = 0$, retoma-se o caso de uma distribuição bimodal, com probabilidades iguais a $1/2$ para $+H$ e $-H$.

Formalismo

Considerando $J > 0$, $\mathbf{D} = D\mathbf{z}$ e o campo externo longitudinal $\mathbf{H} = H\mathbf{z}$, o hamiltoniano (4.21) na aproximação de pares será descrito por:

$$-\beta\mathcal{H}_{12} = K (S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y + S_1^z S_2^z) + L(S_1^x S_2^y - S_1^y S_2^x) + xS_1^z + yS_2^z, \quad (4.23)$$

⁷ Um estudo inicial desse modelo foi desenvolvido na dissertação de mestrado [130]. Contudo, não foram devidamente discutidos alguns aspectos do modelo, tais como a estabilidade dos pontos tricríticos nos diagramas de fases.

com $K = \beta J$, $L = \beta D$, $\beta = 1/k_B T$, $x = K[(q-1)m + H_1/J]$, $y = K[(q-1)m + H_2/J]$, sendo m a magnetização por sítio e q o número de coordenação da rede.

Na representação do produto direto de S_1^z e S_2^z , o hamiltoniano efetivo (4.23) é escrito pela matriz hermitiana:

$$-\beta\mathcal{H}_{12} = \begin{pmatrix} \mathbf{h}_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & x & 0 & \gamma & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{h}_{33} & 0 & \gamma & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \gamma^* & 0 & y & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma^* & 0 & 0 & 0 & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -y & 0 & \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma^* & 0 & \mathbf{h}_{77} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma^* & 0 & -x & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{h}_{99} \end{pmatrix}, \quad (4.24)$$

com elementos $\mathbf{h}_{11} = K + x + y$, $\mathbf{h}_{33} = -K + x - y$, $\mathbf{h}_{77} = -K - (x - y)$, $\mathbf{h}_{99} = K - (x + y)$, $\gamma = K + iL$ e, conseqüentemente, $\gamma^* = K - iL$ é o complexo conjugado.

Através da diagonalização do hamiltoniano (4.24), os autovalores calculados são listados a seguir:

$$\lambda_1 = K + x + y, \quad \lambda_2 = K - (x + y), \quad (4.25)$$

$$\lambda_3 = \frac{x + y + \Omega_1}{2}, \quad \lambda_4 = \frac{x + y - \Omega_1}{2}, \quad (4.26)$$

$$\lambda_5 = \frac{-(x + y) + \Omega_1}{2}, \quad \lambda_6 = \frac{-(x + y) - \Omega_1}{2}, \quad (4.27)$$

$$\lambda_7 = -\frac{2K}{3} + \frac{2\sqrt{3}}{3}\sqrt{\Omega_2} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \left(\frac{\Omega_3}{(\Omega_2)^{3/2}} \right) \right], \quad (4.28)$$

$$\lambda_8 = -\frac{2K}{3} - \frac{2\sqrt{3}}{3}\sqrt{\Omega_2} \sin \left[\frac{\pi}{6} - \frac{1}{3} \arccos \left(\frac{\Omega_3}{(\Omega_2)^{3/2}} \right) \right], \quad (4.29)$$

$$\lambda_9 = -\frac{2K}{3} - \frac{2\sqrt{3}}{3}\sqrt{\Omega_2} \cos \left[\frac{\pi}{3} - \frac{1}{3} \arccos \left(\frac{\Omega_3}{(\Omega_2)^{3/2}} \right) \right]. \quad (4.30)$$

Aqui, temos as variáveis: $\Omega_1 = \sqrt{(x-y)^2 + 4w}$, $\Omega_2 = |K^2/3 + (x-y)^2 + 2w|$ e $\Omega_3 = K\sqrt{3} [(K/3)^2 - (x-y)^2 - w]$ com $w = K^2 [1 + (D/J)^2]$.

Aplicando os autovalores obtidos (Eqs. (4.25) a (4.30)), a função de partição será dada pela seguinte expressão:

$$Z = 2e^K \cosh(x + y) + 4 \cosh \left(\frac{x + y}{2} \right) \cosh \left(\frac{\Omega_1}{2} \right) + \exp \left\{ -\frac{2K}{3} + \frac{2\sqrt{3}}{3}\sqrt{\Omega_2} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \left(\frac{\Omega_3}{(\Omega_2)^{3/2}} \right) \right] \right\}$$

$$\begin{aligned}
& + \exp \left\{ -\frac{2K}{3} - \frac{2\sqrt{3}}{3} \sqrt{\Omega_2} \sin \left[\frac{\pi}{6} - \frac{1}{3} \arccos \left(\frac{\Omega_3}{(\Omega_2)^{3/2}} \right) \right] \right\} \\
& + \exp \left\{ -\frac{2K}{3} - \frac{2\sqrt{3}}{3} \sqrt{\Omega_2} \cos \left[\frac{\pi}{3} - \frac{1}{3} \arccos \left(\frac{\Omega_3}{(\Omega_2)^{3/2}} \right) \right] \right\}.
\end{aligned} \tag{4.31}$$

Desse modo, temos que a magnetização será:

$$m = \frac{1}{Z} \left[2e^K \cosh(x+y) + 2 \cosh \left(\frac{x+y}{2} \right) \cosh \left(\frac{\Omega_1}{2} \right) \right], \tag{4.32}$$

sendo que Z é dada pela Eq. (4.31) e $x = K[(q-1)m + H_1/J]$, $y = K[(q-1)m + H_2/J]$ e $w = K^2 [1 + (D/J)^2]$.

Para se levar em conta a influência do campo aleatório no modelo, deve-se ainda realizar o cálculo da média configuracional:

$$\langle m \rangle_c = \iint dH_1 dH_2 P(H_1) P(H_2) m(x, y), \tag{4.33}$$

em que $P(H_i)$ ($i = 1, 2$) é a distribuição trimodal (4.22). Note que m depende também dos demais parâmetros: J , D e q . Na vizinhança de uma transição contínua, expandindo a magnetização em série de potências, temos⁸:

$$m = A_1 m + A_3 m^3 + A_5 m^5 + A_7 m^7 + O(m^9), \tag{4.34}$$

sendo A_n os coeficientes dependentes de J , D , H e p .

Conforme já discutido anteriormente, a linha de transição de segunda ordem é determinada pelas condições $A_1 = 1$ e $A_3 < 0$ e termina em um ponto tricrítico, dado por $A_1 = 1$ e $A_3 = 0$ (com $A_5 < 0$). Se $A_1 = 1$ e $A_3 > 0$, a transição é de primeira ordem (ou descontínua) e deve ser analisada através da energia livre. Nesse casos, em alguns diagramas há também a possibilidade de um ponto crítico de quarta ordem (demarca o fim de uma linha de pontos tricríticos [131–134]), que é determinado pelas condições $A_1 = 1$, $A_3 = 0$, $A_5 = 0$ e $A_7 < 0$ na expansão (4.34).

Resultados

A Figura 32 mostra os diagramas de fases tridimensionais que mapeiam o comportamento crítico do sistema para $p = 1$ e $p = 0$. Estes diagramas fornecem uma visão geral das regiões críticas. Pode-se notar através dos gráficos que há uma linha tricrítica (vermelha) separando duas superfícies de transições de fase de segunda ordem (acima) e de primeira ordem (abaixo).

⁸ Por simplicidade, será mantida a notação $m \equiv \langle m \rangle_c$.

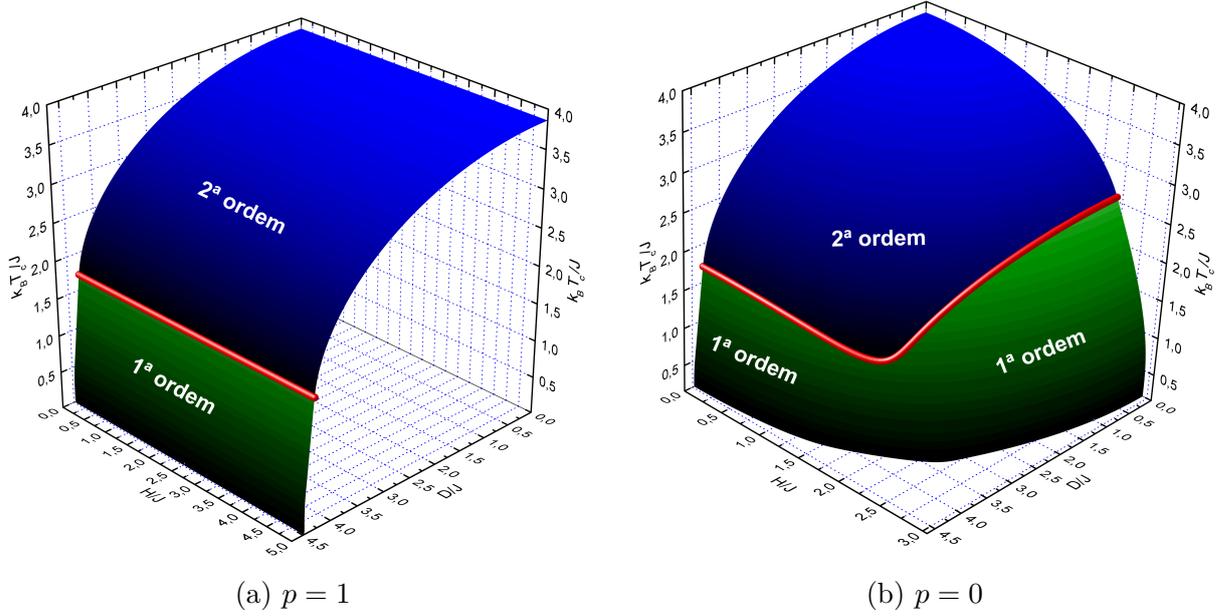


Figura 32 – Diagramas de fases $k_B T_c / J - D/J - H/J$ mostrando as superfícies de transições para (a) $p = 1$ e (b) $p = 0$. As curvas em vermelho separando as superfícies, para ambos os casos, correspondem às soluções dos pontos tricríticos.

Conforme esperado, as temperaturas críticas decrescem à medida que os valores de D/J ou H/J aumentam. Quando $p = 1$, o modelo não tem dependência com o campo H e somente D contribui para a variação da temperatura, enquanto que para $p = 0$, a variação de H também influencia o comportamento crítico do sistema. É facilmente notável que as maiores temperaturas tricríticas correspondem ao limite $D/J \rightarrow 0$ com uma distribuição bimodal do campo (Figura 32(b)). Quando ambos os parâmetros D e H são nulos, é obtida uma única solução para a temperatura crítica de segunda ordem: $k_B T_c / J(H/J = 0, D/J = 0) = 3,8608$. Para o caso $H = 0$ com $D > 0$, por outro lado, nós temos o modelo dependendo apenas do parâmetro DM. Neste caso, a temperatura tricrítica é $T_t = 1,7084$. O valor D_t , por sua vez, é numericamente dado por $D_t = 4,3014$. Estes resultados estão em concordância com a Ref. [17].

Para ambos os casos mostrados na Figura 32, as linhas tricríticas são estáveis. Entretanto, isso não ocorre em todo o intervalo de p ($0 \leq p \leq 1$). Para alguns outros valores de p , temos também a presença de pontos críticos de quarta ordem. Dessa forma, os diagramas de fases $H/J - D/J$ e $k_B T_c / J - D/J$ (projeções planares) podem ser vistos na Figura 33, detalhando o comportamento das linhas tricríticas e suas fronteiras para os demais valores de p . Linhas cheias e pontilhadas correspondem às soluções tricríticas e críticas de quarta ordem, respectivamente. Na Figura 33(b), no limite $p = 1$ as curvas coincidem no ponto $k_B T_c / J = 1,7084$ e $D/J = 4,3014$. Por outro lado, à medida que p decresce, a temperatura passa a depender simultaneamente da variação de ambos, D e H .

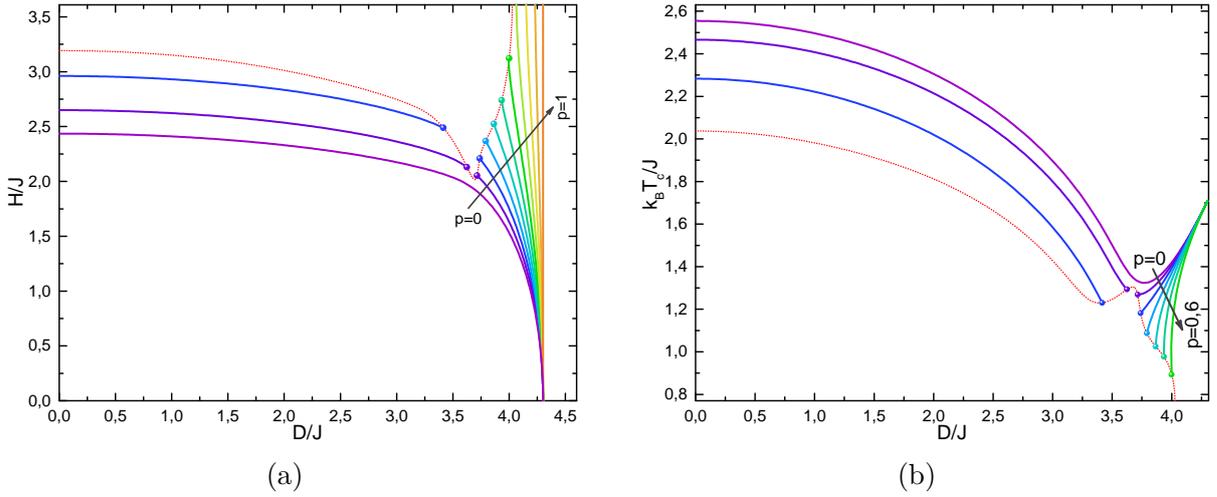


Figura 33 – (a) Plano $H/J - D/J$ com p variando de 0 a 1 com incremento 0,1; (b) Plano $k_B T_c/J - D/J$ com p variando de 0 a 0,6 com um incremento de 0,1. Em ambos os diagramas, as linhas cheias demarcam soluções tricríticas. Para casos com $0,1 \leq p \leq 0,6$, a presença dos pontos críticos de quarta ordem é indicada. A linha pontilhada vermelha indica a projeção dos pontos críticos de quarta ordem para todos os valores de p .

Nos gráficos seguintes, é analisado especialmente o caso para D relativamente pequeno, de modo que o comportamento tricrítico aparece apenas devido ao campo aleatório. Neste caso, uma visão geral das regiões críticas pode ser vista na Figura 34(a).

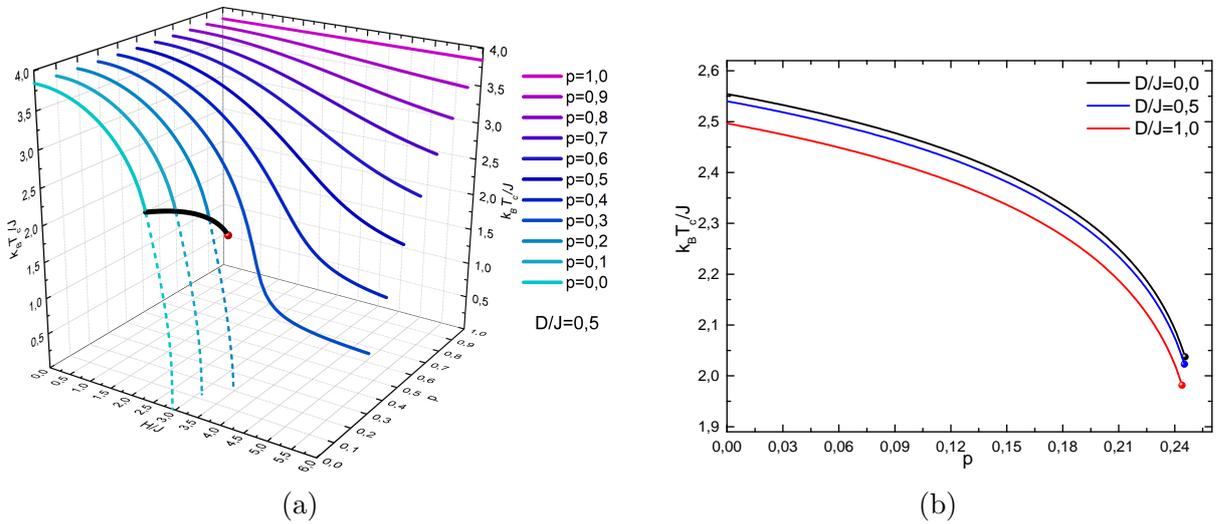


Figura 34 – Diagrama de fases: (a) $k_B T_c/J - H/J - p$ com $D/J = 0,5$. As curvas cheias e tracejadas representam as soluções de transições de segunda e de primeira ordem, respectivamente. A linha preta determina a solução dos pontos tricríticos, terminando em um ponto crítico de quarta ordem (vermelho). (b) $k_B T_c/J - p$ mostrando o comportamento das curvas tricríticas para diferentes valores de D/J .

As curvas de transições de segunda e primeira ordens para diferentes valores de p são mostradas, bem como a linha tricrítica com p variando de zero até o ponto crítico de quarta ordem (em vermelho). A curva tricrítica (preta) demarca a fronteira das transições

de fase de primeira e de segunda ordem. A partir do valor de p no ponto crítico de quarta ordem, há ocorrência apenas de transições contínuas. As linhas de transições descontínuas são para $p = 0, 0,1$ e $0,2$. Para mais detalhes de como se dá a variação das temperaturas tricríticas em relação a p , as projeções das curvas no plano $k_B T_c/J - p$ são mostradas na [Figura 34\(b\)](#). À medida que se considera maiores valores de D/J , visivelmente há um decréscimo das temperaturas críticas e tricríticas. Esse é um comportamento esperado, uma vez que pode ser associado ao aumento da desordem do sistema.

Os diagramas apresentados nesta seção mostram que a escolha de p pequeno garante um comportamento tricrítico mesmo para um D próximo de zero. Por outro lado, quando p tende ao limite máximo, as curvas tricríticas ficam restritas à região com D grande, uma vez que H age fracamente no sistema. Os diagramas de fases espaciais $k_B T_c/J - D/J - H/J$ e $k_B T_c/J - H/J - p$ fornecem uma visão geral do comportamento crítico, mostrando os diferentes tipos de transições, as linhas tricríticas e os pontos críticos de quarta ordem. Assim, a análise detalhada do efeito combinado tanto do campo aleatório quanto da interação DM mostra que ambos competem com a interação de troca, contribuindo para levar o sistema à região paramagnética mais rapidamente.

4.4.2 Abordagem EFT-2 ao modelo ferromagnético de spin-1

Na literatura, a maioria dos trabalhos utilizando a abordagem EFT a modelos com $S > 1/2$ é para *clusters* de um sítio. [Jurčišin et al. \[107\]](#) foram aparentemente os primeiros a levar em conta uma aproximação com dois sítios nesse formalismo, onde foi considerado o modelo Blume-Capel. Seguindo essa abordagem, mas considerando a aproximação usada por [Freitas \[82\]⁹](#), a seguir são apresentados alguns resultados para a rede cúbica simples no modelo ferromagnético spin-1 com interação DM. O formalismo é bastante similar ao já apresentado nas seções anteriores¹⁰. O diagrama de fases obtido pela teoria de campo efetivo através desta abordagem não prevê presença de ponto tricrítico e só é fisicamente “consistente” para o intervalo de D/J mostrado no gráfico, pois não há decréscimo significativo da temperatura crítica a partir daí.

⁹ Nesta referência, foi considerada uma aplicação ao modelo de Ising spin-2.

¹⁰ É considerado o mesmo hamiltoniano da Ref. [14], mas aplicando a identidade de van der Waerden generalizada exata para $S = 1$ discutida na [subseção 3.2.3](#).

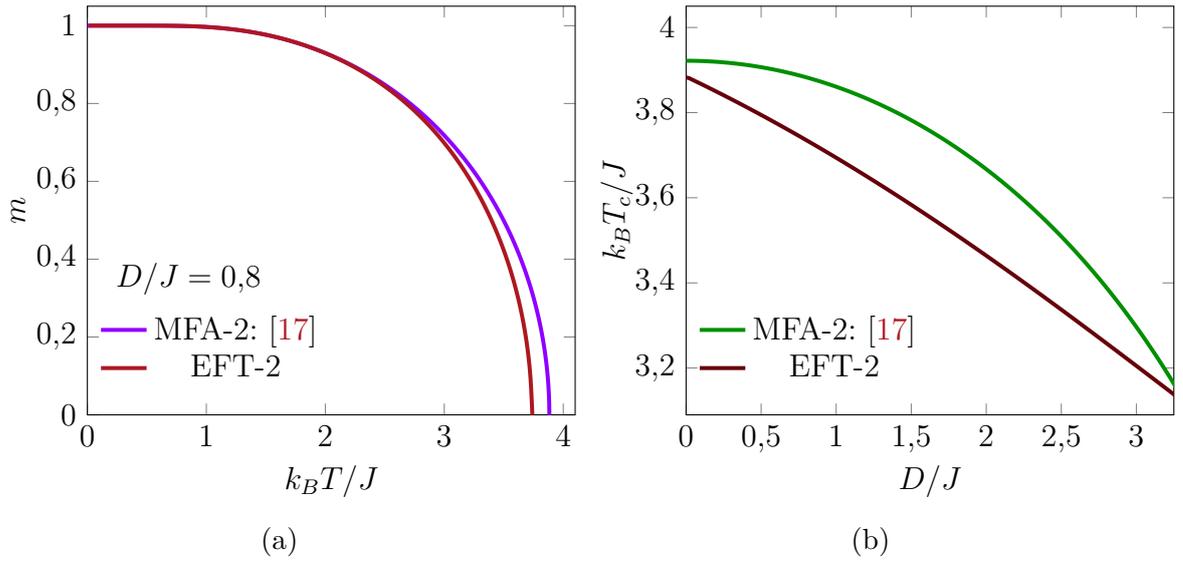


Figura 35 – Modelo de Heisenberg no limite Ising ($\Delta = 1$) com interação DM: (a) Magnetização em função da temperatura para o valor reduzido $D/J = 0,8$; (b) Diagrama de fases $k_B T_c/J - D/J$. Os resultados são comparados com a aproximação de pares desenvolvida na Ref. [17].

Na Figura 36, são mostrados no mesmo diagrama os resultados para $S = 1/2$ e $S = 1$ na rede cúbica simples. O resultado com spin-1/2, estudado por Lacerda *et al.* [14] foi adaptado para comparação. Nesse caso, se $D = 0$, $k_B T_c/J = 1,2598$, o que está de acordo com a Tab. 6 da Ref. [79].

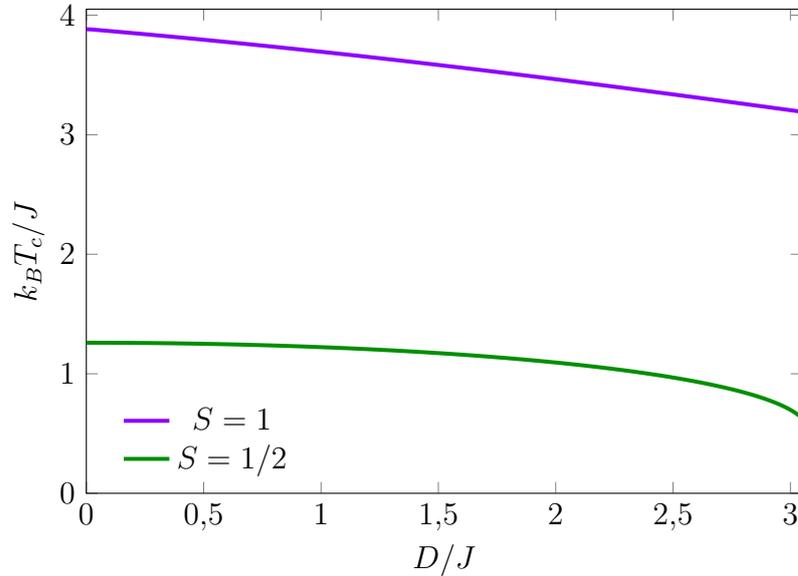


Figura 36 – Diagramas de fases do modelo de Heisenberg via EFT-2 no limite Ising ($\Delta = 1$). As curvas determinam as transições de fase de segunda ordem para os modelos de spin-1/2 [14] e spin-1.

4.4.3 Modelo spin-1 antiferromagnético

O modelo de Heisenberg com $J < 0$ e interação DM foi estudado inicialmente por Gil e Sousa [135] na ausência de campo e, posteriormente, reabordado com $H \neq 0$ por Parente *et al.* [136], ambos tratando o caso spin-1/2. Através da mesma metodologia, são obtidos alguns resultados para o caso $S = 1$, a princípio na ausência de campo magnético externo. Os resultados são comparados com a Ref. [135]. Os diagramas de fase são apresentados na Figura 37(a). Nesse caso, temos valores críticos de temperatura $k_B T_N/|J| = 1,4427$, quando $D = 0$ e $D(T_N \rightarrow 0) = 4,8990$ para $S = 1/2$. Já para $S = 1$, os mesmos limites são: $k_B T_N/|J| = 3,8782$ e $D(T_N \rightarrow 0) = 7,6744$.

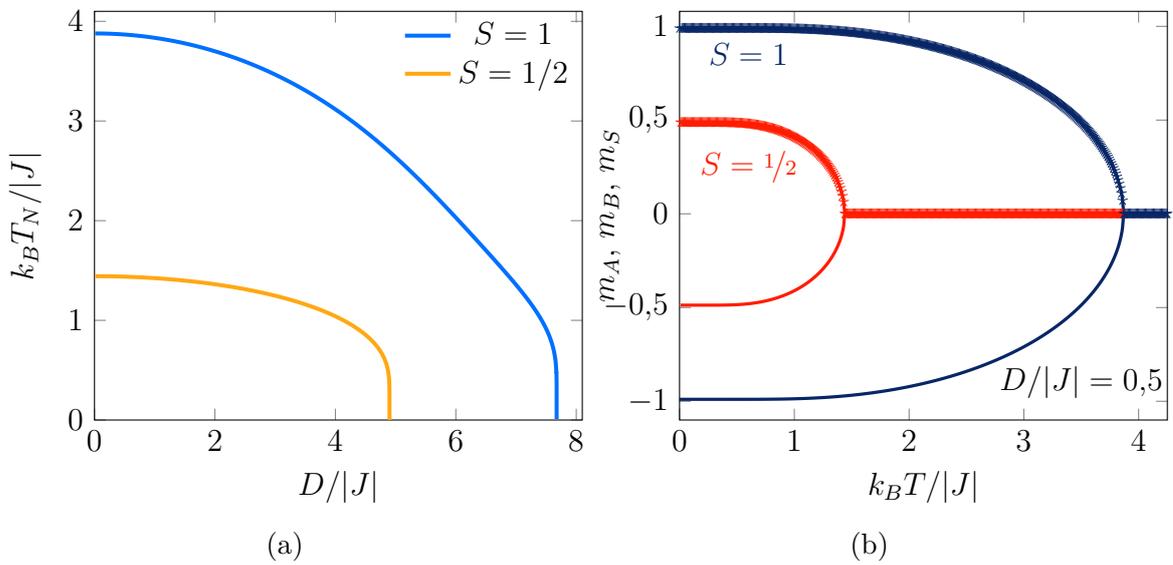


Figura 37 – Resultados no modelo de Heisenberg isotrópico antiferromagnético para rede cúbica simples: (a) Diagrama de fases no plano $k_B T_N/|J| - D/|J|$; (b) Magnetizações de sub-redes e alternada em função da temperatura para $D/|J| = 0,5$. Os resultados são comparados com $S = 1/2$. Nesse caso, como não há campo magnético aplicado, as curvas da magnetização alternada m_S coincidem com a magnetização de sub-red m_A .

Na Figura 38 também são mostradas curvas do parâmetro de ordem antiferromagnético em função da temperatura para alguns valores fixos de D/J . Na ausência de campo aplicado, não há previsão de transições de primeira ordem, mesmo para o caso spin-1. Com inclusão de campo no modelo, os resultados são discutíveis quanto à presença ou não de ponto tricrítico nos diagramas de fase. É possível que essa metodologia não seja suficiente para a determinação de tais fenômenos, uma vez que o caso antiferromagnético possui um formalismo muito mais complicado do que o ferromagnético. Um estudo equivalente ao da Ref. [136] com presença de campo magnético, mas para o caso $S = 1$ ainda está em andamento.

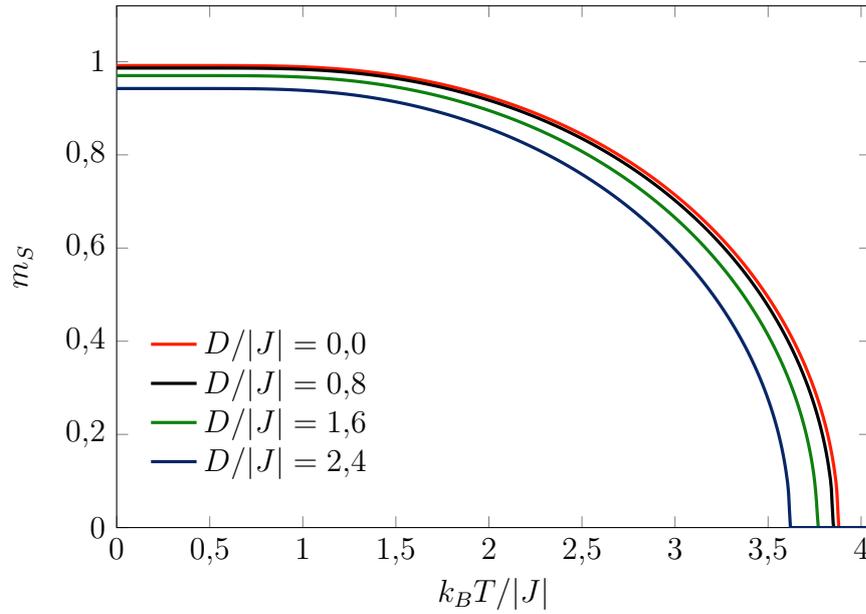


Figura 38 – Curvas da magnetização alternada em função da temperatura para alguns valores fixos de $D/|J|$ no modelo isotrópico antiferromagnético com $S = 1$.

O modelo de spin-1/2 antiferromagnético foi investigado através da aproximação de pares no âmbito das teorias de campo médio e campo efetivo nas Refs. [136–138]. Recentemente, o problema com spin-1 foi abordado por Albayrak [139], incluindo um campo magnético em três dimensões, através de uma aproximação de campo médio de um sítio. Nesse trabalho foi relatada a presença de comportamento multicrítico (pontos tricríticos e bicríticos, por exemplo). Com o formalismo já elaborado, será possível, em breve, investigar tais resultados também na aproximação de dois sítios.

5 Considerações finais

Nesta tese, foi realizado um estudo a respeito das propriedades termodinâmicas do modelo de Heisenberg anisotrópico com interação DM para os casos de spin-3/2 e spin-2. Para tanto, foi empregado o formalismo de uma aproximação de pares discutido no [Capítulo 3](#). As discussões dos resultados aplicados à rede cúbica simples foram apresentadas no [Capítulo 4](#).

A partir da análise dos diagramas de fases, fica evidente que a interação DM é responsável por induzir um comportamento tricrítico no sistema, sendo que o valor de D no ponto tricrítico é dado em termos do parâmetro anisotrópico Δ . Mas, por outro lado, foi observado que a temperatura tricrítica independe da anisotropia do modelo. É provável que estes resultados sejam oriundos do tipo de aproximação utilizada, embora [Lacerda et al. \[14\]](#) já tenham mostrado o mesmo comportamento por meio da abordagem EFT no modelo spin-1/2.

Uma abordagem EFT para spin-1 foi também desenvolvida, mostrando um resultado qualitativamente similar à aproximação de pares de campo médio. Contudo, apesar dessa técnica fornecer bons resultados para o estudo de ligas diluídas [82], não parece ser eficiente para aplicação no modelo aqui considerado. Por isso, a elaboração de um formalismo levando em consideração a expressão do momento quadrupolar está em andamento, o que dará maior confiabilidade aos resultados.

Levando-se em conta os efeitos de campo aleatório, pode ser visto que para alguns valores de p na distribuição trimodal, temos também a presença de pontos críticos de quarta ordem. Desse modo, os resultados indicam que com o aumento da complexidade do sistema, novos fenômenos podem emergir. Além da interação DM, a presença da aleatoriedade do campo induz a um rico diagrama de fases. Para os casos particulares $p = 1$ e $p = 0$, os diagramas de fases $k_B T_c / J - D / J - H / J$ foram construídos para o mapeamento do comportamento do sistema, de modo a fornecerem uma visão geral das regiões críticas.

Em termos gerais, a criticalidade estudada pode ser explicada como resultado de uma competição entre a interação de troca e a interação DM. A presença desta última contribui para a desordem do sistema. O comportamento é basicamente de tendência à região paramagnética, à medida em que se aumenta a contribuição do parâmetro D / J . Os resultados são estendidos ainda à descrição do comportamento das propriedades termodinâmicas do sistema no limite do modelo de Ising ($\Delta = 1$), onde são caracterizadas especialmente as transições de fase contínuas. O formalismo desenvolvido aqui pode ser utilizado para o tratamento de outros modelos e/ou redes distintas.

Em relação às perspectivas, os resultados apresentados na [subseção 4.2.4](#) estão em

preparação para submissão de novo artigo. Para $S \geq 1$, o modelo antiferromagnético deverá ser estudado com a inclusão de campo magnético, com o objetivo de investigar a ocorrência de comportamento tricrítico, o que não é reportado no caso $S = 1/2$ [136]. Não obstante o custo computacional, o aumento do número de spins nos *clusters* deve ser considerado, com o intuito de se obter resultados melhores. Além disso, pretende-se investigar os resultados recentemente discutidos na Ref. [139], mas através de uma aproximação de dois sítios. Outra possibilidade diz respeito ao tratamento de sistemas envolvendo spins mistos com interação DM [28], algo ainda pouco explorado na literatura teórica.

Referências

- 1 ASHCROFT, N.; MERMIN, N. *Solid State Physics*. [S.l.]: Holt, Rinehart and Winston, 1976. (HRW international editions). ISBN 9780030839931. Citado na página 14.
- 2 SMART, J. S. *Effective field theories of magnetism*. Philadelphia: Saunders, 1966. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 31.
- 3 SACHDEV, S. *Quantum Phase Transitions*. 2. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2011. doi: [10.1017/CBO9780511973765](https://doi.org/10.1017/CBO9780511973765). Citado na página 14.
- 4 HEYL, M. Dynamical quantum phase transitions: a review. *Rep. Prog. Phys*, IOP Publishing, v. 81, n. 5, p. 054001, apr 2018. doi: [10.1088/1361-6633/aaaf9a](https://doi.org/10.1088/1361-6633/aaaf9a). Citado na página 14.
- 5 ZINN-JUSTIN, J. *Phase Transitions and Renormalization Group*. Oxford: Oxford University Press, 2007. Citado na página 14.
- 6 NUNES, M. E. S.; de Mello Silva Érica; MARTINS, P. H.; FLORENCIO, J.; PLASCAK, J. Dynamics of the one-dimensional isotropic Heisenberg model with Dzyaloshinskii–Moriya interaction in a random transverse field. *Phys. A: Stat. Mech. Appl.*, v. 541, p. 123683, 2020. ISSN 0378-4371. doi: [10.1016/j.physa.2019.123683](https://doi.org/10.1016/j.physa.2019.123683). Citado 2 vezes nas páginas 14 e 66.
- 7 VATANSEVER, E.; AKINCI, Ü. Isotropic and anisotropic quantum Heisenberg models under bond randomness: An effective-field theory study. *Phys. A: Stat. Mech. Appl.*, v. 512, p. 818–823, 2018. ISSN 0378-4371. doi: [10.1016/j.physa.2018.08.118](https://doi.org/10.1016/j.physa.2018.08.118). Citado na página 14.
- 8 SANTOS-FILHO, A.; ALBUQUERQUE, D. de; SANTOS-FILHO, J.; BATISTA, T. A. Phase diagram of the classical Heisenberg model in a trimodal random field distribution. *Phys. A: Stat. Mech. Appl.*, v. 461, p. 133–139, 2016. doi: [10.1016/j.physa.2016.05.047](https://doi.org/10.1016/j.physa.2016.05.047). Citado 3 vezes nas páginas 14, 66 e 67.
- 9 SANTOS, P.; COSTA, F. da; ARAÚJO, J. de. The random field Blume-Capel model revisited. *J. Magn. Magn. Mater.*, v. 451, p. 737–740, 2018. ISSN 0304-8853. doi: [10.1016/j.jmmm.2017.12.008](https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2017.12.008). Citado 2 vezes nas páginas 14 e 66.
- 10 KARAKOYUN, G.; AKINCI Ümit. Effect of the Gaussian random field distribution on the hysteresis and thermodynamic properties of the binary alloy. *Phys. A: Stat. Mech. Appl.*, v. 569, p. 125793, 2021. ISSN 0378-4371. doi: [10.1016/j.physa.2021.125793](https://doi.org/10.1016/j.physa.2021.125793). Citado 2 vezes nas páginas 14 e 66.
- 11 HAM, W. S.; PRADIPTO, A.-M.; YAKUSHIJI, K.; KIM, K.; RHIM, S. H.; NAKAMURA, K.; SHIOTA, Y.; KIM, S.; ONO, T. Dzyaloshinskii-Moriya interaction in noncentrosymmetric superlattices. *npj Comput. Mater.*, Nature Publishing Group, v. 7, n. 1, p. 1–7, 2021. doi: [10.1038/s41524-021-00592-8](https://doi.org/10.1038/s41524-021-00592-8). Citado na página 14.
- 12 CORDEIRO, C. E.; MELLO, E. de; CONTINENTINO, M. Heisenberg ferromagnet with Dzyaloshinsky-Moriya interactions: A real space renormalization group

- approach. *Z. Phys., B, Condens. matter*, Springer, v. 85, n. 2, p. 307–310, 1991. doi: [10.1007/BF01313233](https://doi.org/10.1007/BF01313233). Citado na página 14.
- 13 SOUSA, J. R. de; ALBUQUERQUE, D. F. de; FITTIPALDI, I. Tricritical behavior of a Heisenberg model with Dzyaloshinski-Moriya interaction. *Phys. Lett. A*, Elsevier, v. 191, n. 3-4, p. 275–278, 1994. doi: [10.1016/0375-9601\(94\)90139-2](https://doi.org/10.1016/0375-9601(94)90139-2). Citado 4 vezes nas páginas 14, 62, 63 e 64.
- 14 LACERDA, F.; SOUSA, J. Ricardo de; FITTIPALDI, I. Thermodynamical properties of a Heisenberg model with Dzyaloshinski-Moriya interactions. *J. Appl. Phys.*, AIP, v. 75, n. 10, p. 5829–5831, 1994. doi: [10.1063/1.355582](https://doi.org/10.1063/1.355582). Citado 4 vezes nas páginas 14, 72, 73 e 76.
- 15 SOUSA, J. R. de; LACERDA, F.; FITTIPALDI, I. Thermal behavior of a Heisenberg model with DM interaction. *J. Magn. Magn. Mater.*, Elsevier, v. 140, p. 1501–1502, 1995. doi: [10.1016/0304-8853\(94\)00911-2](https://doi.org/10.1016/0304-8853(94)00911-2). Citado 2 vezes nas páginas 14 e 62.
- 16 SOUSA, J. R.; LACERDA, F.; FITTIPALDI, I. P. Thermodynamic properties of the anisotropic Heisenberg model with Dzyaloshinsky-Moriya interaction. *Phys. A: Stat. Mech. Appl.*, Elsevier, v. 258, n. 1, p. 221–229, 1998. doi: [10.1016/S0378-4371\(97\)00537-2](https://doi.org/10.1016/S0378-4371(97)00537-2). Citado 3 vezes nas páginas 14, 62 e 64.
- 17 SUN, G.-H.; KONG, X.-M. Phase diagram and tricritical behavior of the spin-1 Heisenberg model with Dzyaloshinskii-Moriya interactions. *Phys. A: Stat. Mech. Appl.*, Elsevier, v. 370, n. 2, p. 585–590, 2006. doi: [10.1016/j.physa.2006.03.025](https://doi.org/10.1016/j.physa.2006.03.025). Citado 5 vezes nas páginas 14, 62, 64, 70 e 73.
- 18 SOUSA, J. R.; ALBUQUERQUE, D. F. de; ARRUDA, A. S. de. Study of the first-order phase transition in the classical and quantum random field Heisenberg model on a simple cubic lattice. *Phys. A: Stat. Mech. Appl.*, v. 391, n. 12, p. 3361–3365, 2012. doi: [10.1016/j.physa.2012.01.049](https://doi.org/10.1016/j.physa.2012.01.049). Citado 2 vezes nas páginas 14 e 66.
- 19 OUBELKACEM, A.; HTOUTOU, K.; AINANE, A.; SABER, M. Phase diagram and tricritical behavior in the three dimensional Heisenberg model with a random field. *Chin. J. Phys.*, v. 42, n. 6, p. 717–722, 2004. Disponível em: [10.6122/CJP](https://doi.org/10.6122/CJP). Citado 2 vezes nas páginas 14 e 66.
- 20 SHEKAARI, A.; JAFARI, M. Theory and Simulation of the Ising Model. *arXiv e-prints*, p. 2105.00841, 2021. doi: [10.48550/arXiv.2105.00841](https://doi.org/10.48550/arXiv.2105.00841). Citado na página 14.
- 21 WHITE, R. M. *Quantum Theory of Magnetism: Magnetic properties of materials*. Germany: Springer Berlin, Heidelberg, 2007. v. 32. doi: [10.1007/978-3-540-69025-2](https://doi.org/10.1007/978-3-540-69025-2). Citado na página 14.
- 22 DZYALOSHINSKY, I. A thermodynamic theory of “weak” ferromagnetism of antiferromagnetics. *J. Phys. Chem. Solids*, v. 4, n. 4, p. 241–255, 1958. ISSN 0022-3697. doi: [10.1016/0022-3697\(58\)90076-3](https://doi.org/10.1016/0022-3697(58)90076-3). Citado na página 14.
- 23 MORIYA, T. Anisotropic superexchange interaction and weak ferromagnetism. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 120, p. 91–98, Oct 1960. doi: [10.1103/PhysRev.120.91](https://doi.org/10.1103/PhysRev.120.91). Citado na página 14.

- 24 MEYER, S.; DUPÉ, B.; FERRIANI, P.; HEINZE, S. Dzyaloshinskii-Moriya interaction at an antiferromagnetic interface: First-principles study of Fe/Ir bilayers on Rh (001). *Phys. Rev. B*, APS, v. 96, n. 9, p. 094408, 2017. doi: [10.1103/PhysRevB.96.094408](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.094408). Citado na página 14.
- 25 FREITAS, A. S.; ALBUQUERQUE, D. F. de. Existence of a tricritical point in the antiferromagnet $\text{KFe}_3(\text{OH})_6(\text{SO}_4)_2$ on a kagome lattice. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 91, p. 012117, Jan 2015. doi: [10.1103/PhysRevE.91.012117](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.91.012117). Citado na página 14.
- 26 BLUNDELL, S. *Magnetism in Condensed Matter*. [S.l.]: OUP Oxford, 2001. (Oxford Master Series in Condensed Matter Physics). ISBN 9780198505914. Citado na página 14.
- 27 THIO, T.; AHARONY, A. Weak ferromagnetism and tricriticality in pure La_2CuO_4 . *Phys. Rev. Lett.*, APS, v. 73, n. 6, p. 894, 1994. doi: [10.1103/PhysRevLett.73.894](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.73.894). Citado na página 14.
- 28 MOSKVIN, A. Dzyaloshinskii–Moriya Coupling in 3d Insulators. *Condens. Matter*, v. 4, n. 4, 2019. ISSN 2410-3896. doi: [10.3390/condmat4040084](https://doi.org/10.3390/condmat4040084). Citado 2 vezes nas páginas 14 e 77.
- 29 PEREZ, N.; MARTINEZ, E.; TORRES, L.; WOO, S.-H.; EMORI, S.; BEACH, G. Chiral magnetization textures stabilized by the Dzyaloshinskii-Moriya interaction during spin-orbit torque switching. *Appl. Phys. Lett.*, AIP, v. 104, n. 9, p. 092403, 2014. doi: [10.1063/1.4867199](https://doi.org/10.1063/1.4867199). Citado na página 14.
- 30 GROHOL, D.; MATAN, K.; CHO, J.-H.; LEE, S.-H.; LYNN, J. W.; NOCERA, D. G.; LEE, Y. S. Spin chirality on a two-dimensional frustrated lattice. *Nat. Mater.*, Nature Publishing Group, v. 4, n. 4, p. 323, 2005. doi: [10.1038/nmat1353](https://doi.org/10.1038/nmat1353). Citado na página 14.
- 31 DIJK, B. van. *Skyrmions and the Dzyaloshinskii-Moriya interaction: Computing the Dzyaloshinskii-Moriya interaction for small and large spin-orbit couplings*. Dissertação (Mestrado) — Utrecht University, Netherlands, 2014. Citado na página 14.
- 32 ROESSLER, U. K.; BOGDANOV, A.; PFLEIDERER, C. Spontaneous skyrmion ground states in magnetic metals. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 442, n. 7104, p. 797, 2006. doi: [10.1038/nature05056](https://doi.org/10.1038/nature05056). Citado na página 14.
- 33 GARANIN, D. A.; CHUDNOVSKY, E. M.; ZHANG, S.; ZHANG, X. Thermal creation of skyrmions in ferromagnetic films with perpendicular anisotropy and Dzyaloshinskii-Moriya interaction. *J. Magn. Magn. Mater.*, v. 493, p. 165724, 2019. ISSN 0304-8853. doi: [10.1016/j.jmmm.2019.165724](https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2019.165724). Citado na página 14.
- 34 HOG, S. E.; BAILLY-REYRE, A.; DIEP, H. Stability and phase transition of skyrmion crystals generated by Dzyaloshinskii-Moriya interaction. *J. Magn. Magn. Mater.*, v. 455, p. 32–38, 2018. ISSN 0304-8853. doi: [10.1016/j.jmmm.2017.10.031](https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2017.10.031). Citado na página 14.
- 35 FAN, J.; XIE, Y.; ZHU, Y.; QIAN, F.; JI, Y.; HU, D.; TONG, W.; ZHANG, L.; LING, L.; WANG, C.; MA, C.; YANG, H. Emergent phenomena of magnetic skyrmion and large DM interaction in perovskite manganite $\text{La}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{MnO}_3$. *J. Magn. Magn. Mater.*, v. 483, p. 42–47, 2019. ISSN 0304-8853. doi: [10.1016/j.jmmm.2019.03.086](https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2019.03.086). Citado na página 14.

- 36 ZHAO, H. J.; CHEN, P.; PROSANDEEV, S.; ARTYUKHIN, S.; BELLAICHE, L. Dzyaloshinskii–Moriya-like interaction in ferroelectrics and antiferroelectrics. *Nat. Mater.*, v. 20, p. 341–345, 2021. doi: [10.1038/s41563-020-00821-3](https://doi.org/10.1038/s41563-020-00821-3). Citado na página 14.
- 37 CHEN, D.; SUN, W.; LI, H.; WANG, J.; WANG, Y. Tunable magnetic anisotropy and Dzyaloshinskii–Moriya interaction in an ultrathin van der waals $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2/\text{In}_2\text{Se}_3$ heterostructure. *Front. Phys.*, v. 8, 2020. ISSN 2296-424X. doi: [10.3389/fphy.2020.587419](https://doi.org/10.3389/fphy.2020.587419). Citado na página 14.
- 38 HUANG, K.; SHAO, D.-F.; TSYMBAL, E. Y. Ferroelectric control of magnetic skyrmions in two-dimensional van der Waals heterostructures. *Nano Lett.*, ACS Publications, v. 22, n. 8, p. 3349–3355, 2022. doi: [10.1021/acs.nanolett.2c00564](https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.2c00564). Citado na página 14.
- 39 SERGIENKO, I. A.; DAGOTTO, E. Role of the Dzyaloshinskii–Moriya interaction in multiferroic perovskites. *Phys. Rev. B*, APS, v. 73, n. 9, p. 094434, 2006. doi: [10.1103/PhysRevB.73.094434](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.094434). Citado na página 14.
- 40 KIMURA, T.; LASHLEY, J. C.; RAMIREZ, A. P. Inversion-symmetry breaking in the noncollinear magnetic phase of the triangular-lattice antiferromagnet CuFeO_2 . *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 73, p. 220401, Jun 2006. doi: [10.1103/PhysRevB.73.220401](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.220401). Citado na página 14.
- 41 KENZELMANN, M.; HARRIS, A. B.; AHARONY, A.; ENTIN-WOHLMAN, O.; YILDIRIM, T.; HUANG, Q.; PARK, S.; LAWES, G.; BROHOLM, C.; ROGADO, N.; CAVA, R. J.; KIM, K. H.; JORGE, G.; RAMIREZ, A. P. Field dependence of magnetic ordering in Kagomé-staircase compound $\text{Ni}_3\text{V}_2\text{O}_8$. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 74, p. 014429, Jul 2006. doi: [10.1103/PhysRevB.74.014429](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.74.014429). Citado na página 14.
- 42 LI, S.-S.; REN, T.-Q.; KONG, X.-M.; LIU, K. Thermal entanglement in the Heisenberg XXZ model with Dzyaloshinskii–Moriya interaction. *Phys. A: Stat. Mech. Appl.*, v. 391, n. 1, p. 35 – 41, 2012. ISSN 0378-4371. doi: [10.1016/j.physa.2011.06.035](https://doi.org/10.1016/j.physa.2011.06.035). Citado na página 15.
- 43 ALBAYRAK, E. Thermal entanglement in the anisotropic Heisenberg model with Dzyaloshinskii–Moriya interaction in an inhomogeneous magnetic field. *Eur. Phys. J. B*, Springer, v. 72, n. 4, p. 491, 2009. doi: [10.1140/epjb/e2009-00387-8](https://doi.org/10.1140/epjb/e2009-00387-8). Citado na página 15.
- 44 KARGARIAN, M.; JAFARI, R.; LANGARI, A. Dzyaloshinskii–Moriya interaction and anisotropy effects on the entanglement of the Heisenberg model. *Phys. Rev. A*, APS, v. 79, n. 4, p. 042319, 2009. doi: [10.1103/PhysRevA.79.042319](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.79.042319). Citado na página 15.
- 45 LIMA, L. S. Influence of Dzyaloshinskii–Moriya interaction and external fields on quantum entanglement in half-integer spin one-dimensional antiferromagnets. *Eur. Phys. J. D*, v. 73, p. 242, 2019. doi: [10.1140/epjd/e2019-100167-7](https://doi.org/10.1140/epjd/e2019-100167-7). Citado na página 15.
- 46 THAKUR, P.; DURGANANDINI, P. Factorization, coherence, and asymmetry in the Heisenberg spin- $\frac{1}{2}$ XXZ chain with Dzyaloshinskii–Moriya interaction in transverse magnetic field. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 102, p. 064409, Aug 2020. doi: [10.1103/PhysRevB.102.064409](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.102.064409). Citado na página 15.

- 47 ZHANG, Y.; KONG, X.; XU, G.; JIN, Y.; JIANG, C.; CHAI, G. Direct observation of the temperature dependence of the Dzyaloshinskii–Moriya interaction. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, IOP Publishing, v. 55, n. 19, p. 195304, feb 2022. doi: [10.1088/1361-6463/ac50cd](https://doi.org/10.1088/1361-6463/ac50cd). Citado na página 15.
- 48 HELTON, J. S.; BUTCH, N. P.; PAJEROWSKI, D. M.; BARILO, S. N.; LYNN, J. W. Three-dimensional magnetism and the Dzyaloshinskii–Moriya interaction in $S = 3/2$ kagome staircase $\text{Co}_3\text{V}_2\text{O}_8$. *Sci. Adv.*, American Association for the Advancement of Science, v. 6, n. 18, 2020. doi: [10.1126/sciadv.aay9709](https://doi.org/10.1126/sciadv.aay9709). Citado na página 15.
- 49 GONSER, U.; MEECHAN, C.; MUIR, A.; WIEDERSICH, H. Determination of néel temperatures in fcc iron. *J. Appl. Phys.*, American Institute of Physics, v. 34, n. 8, p. 2373–2378, 1963. doi: [10.1063/1.1702749](https://doi.org/10.1063/1.1702749). Citado na página 16.
- 50 DAKHAMA, A.; BENAYAD, N. On the existence of compensation temperature in 2d mixed-spin Ising ferrimagnets: an exactly solvable model. *J. Magn. Magn. Mater.*, v. 213, n. 1, p. 117–125, 2000. ISSN 0304-8853. doi: [10.1016/S0304-8853\(99\)00606-X](https://doi.org/10.1016/S0304-8853(99)00606-X). Citado na página 16.
- 51 GODOY, M.; LEITE, V. S.; FIGUEIREDO, W. Mixed-spin Ising model and compensation temperature. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 69, p. 054428, Feb 2004. doi: [10.1103/PhysRevB.69.054428](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.054428). Citado na página 16.
- 52 GHARAIBEH, M.; ALMAHMOUD, A.; OBEIDAT, A. Compensation and transition order temperature behavior of mixed spin-1 and spin-1/2 ising model on a centered honeycomb-hexagonal structure: two points of compensation. *SN Appl. Sci.*, Springer, v. 4, n. 8, p. 211, 2022. doi: [10.1007/s42452-022-05090-0](https://doi.org/10.1007/s42452-022-05090-0). Citado na página 17.
- 53 BLUME, M. Theory of the first-order magnetic phase change in UO_2 . *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 141, p. 517–524, 1966. doi: [10.1103/PhysRev.141.517](https://doi.org/10.1103/PhysRev.141.517). Citado na página 18.
- 54 CAPEL, H. On the possibility of first-order phase transitions in Ising systems of triplet ions with zero-field splitting. *Physica*, v. 32, n. 5, p. 966 – 988, 1966. ISSN 0031-8914. doi: [10.1016/0031-8914\(66\)90027-9](https://doi.org/10.1016/0031-8914(66)90027-9). Citado na página 18.
- 55 BLUME, M.; EMERY, V. J.; GRIFFITHS, R. B. Ising model for the λ transition and phase separation in He^3 - He^4 mixtures. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 4, p. 1071–1077, 1971. doi: [10.1103/PhysRevA.4.1071](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.4.1071). Citado na página 18.
- 56 SIVARDIÈRE, J.; BLUME, M. Dipolar and quadrupolar ordering in $S = \frac{3}{2}$ Ising systems. *Phys. Rev. B*, v. 5, n. 3, p. 1126–1134, fev. 1972. doi: [10.1103/PhysRevB.5.1126](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.5.1126). Citado na página 18.
- 57 KRINSKY, S.; MUKAMEL, D. Spin- $\frac{3}{2}$ Ising model for tricritical points in ternary fluid mixtures. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 11, p. 399–410, Jan 1975. doi: [10.1103/PhysRevB.11.399](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.11.399). Citado na página 18.
- 58 LENZ, W. *Z. Phys.*, v. 21, p. 613–615, 1920. Citado na página 18.
- 59 ISING, E. *Z. Phys.*, v. 31, p. 253–258, 1925. doi: [10.1007/BF02980577](https://doi.org/10.1007/BF02980577). Citado na página 18.

- 60 WANG, W.; DÍAZ-MÉNDEZ, R.; CAPDEVILA, R. Solving the one-dimensional Ising chain via mathematical induction: an intuitive approach to the transfer matrix. *Eur. J. Phys.*, IOP Publishing, v. 40, n. 6, p. 065102, sep 2019. doi: [10.1088/1361-6404/ab330c](https://doi.org/10.1088/1361-6404/ab330c). Citado na página 19.
- 61 PEIERLS, R. On Ising's model of ferromagnetism. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, Cambridge University Press, v. 32, n. 3, p. 477–481, 1936. doi: [10.1017/S0305004100019174](https://doi.org/10.1017/S0305004100019174). Citado na página 19.
- 62 KRAMERS, H. A.; WANNIER, G. H. Statistics of the two-dimensional ferromagnet. Part I. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 60, p. 252–262, 1941. doi: [10.1103/PhysRev.60.252](https://doi.org/10.1103/PhysRev.60.252). Citado na página 19.
- 63 ONSAGER, L. Crystal Statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 65, p. 117–149, 1944. doi: [10.1103/PhysRev.65.117](https://doi.org/10.1103/PhysRev.65.117). Citado na página 19.
- 64 GOULD, H.; TOBOCHNIK, J. *Statistical and Thermal Physics: With Computer Applications*. Princeton: Princeton University Press, 2010. doi: [10.1515/9781400837038](https://doi.org/10.1515/9781400837038). ISBN 9781400837038. Citado na página 19.
- 65 BENETTIN, G.; GALLAVOTTI, G.; JONA-LASINIO, G.; STELLA, A. On the Onsager-Yang-Value of the spontaneous magnetization. *Commun.Math. Phys.*, Springer, v. 30, n. 1, p. 45–54, 1973. doi: [10.1007/BF01646687](https://doi.org/10.1007/BF01646687). Citado na página 19.
- 66 YANG, C. N. The spontaneous magnetization of a two-dimensional Ising model. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 85, p. 808–816, Mar 1952. doi: [10.1103/PhysRev.85.808](https://doi.org/10.1103/PhysRev.85.808). Citado na página 19.
- 67 BAXTER, R. J. *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*. Academic Press, 1982. Disponível em: https://physics.anu.edu.au/research/ftp/mpg/baxter_book.php. Citado na página 20.
- 68 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 (extended abstract). In: *Proc. of the 32nd Annu. ACM Sym. on Theory of Comput.* New York, USA: Association for Computing Machinery, 2000. (STOC '00), p. 87–96. doi: [10.1145/335305.335316](https://doi.org/10.1145/335305.335316). Citado na página 20.
- 69 ZHANG, Z. D. Conjectures on the exact solution of three-dimensional (3D) simple orthorhombic Ising lattices. *Philos. Mag.*, v. 87, n. 34, p. 5309–5419, 2007. doi: [10.1080/14786430701646325](https://doi.org/10.1080/14786430701646325). Citado na página 20.
- 70 ZHANG, Z. D.; SUZUKI, O.; MARCH, N. H. Clifford algebra approach of 3D Ising model. *Adv. Appl. Clifford Algebras*, v. 29, n. 1, p. 1–28, 2019. doi: [10.1007/s00006-018-0923-2](https://doi.org/10.1007/s00006-018-0923-2). Citado na página 20.
- 71 ZHANG, D. Exact solution for three-dimensional Ising model. *Symmetry*, v. 13, n. 10, 2021. doi: [10.3390/sym13101837](https://doi.org/10.3390/sym13101837). Citado na página 20.
- 72 FISHER, M. E.; PERK, J. H. H. Comments concerning the Ising model and two letters by N. H. March. *Phys. Lett. A*, v. 380, n. 13, p. 1339–1340, 2016. doi: [10.1016/j.physleta.2015.09.055](https://doi.org/10.1016/j.physleta.2015.09.055). Citado na página 20.

- 73 PERK, J. H. H. Comment on ‘mathematical structure of the three-dimensional (3D) Ising model’. *Chin. Phys. B*, IOP Publishing, v. 22, n. 8, p. 080508, aug 2013. doi: [10.1088/1674-1056/22/8/080508](https://doi.org/10.1088/1674-1056/22/8/080508). Disponível em: <https://doi.org/10.1088/1674-1056/22/8/080508>. Citado na página 20.
- 74 PERK, J. H. H. Comment on "Exact solution for three-dimensional Ising model" by Degang Zhang. arXiv, 2022. doi: [10.48550/arXiv.2202.03136](https://arxiv.org/abs/10.48550/arXiv.2202.03136). Citado na página 20.
- 75 FERRENBURG, A. M.; XU, J.; LANDAU, D. P. Pushing the limits of Monte Carlo simulations for the three-dimensional Ising model. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 97, p. 043301, 2018. doi: [10.1103/PhysRevE.97.043301](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.97.043301). Citado 2 vezes nas páginas 20 e 21.
- 76 BEEKMAN, A. J.; RADEMAKER, L.; WEZEL, J. van. An Introduction to Spontaneous Symmetry Breaking. *SciPost Phys. Lect. Notes*, SciPost, p. 11, 2019. doi: [10.21468/SciPostPhysLectNotes.11](https://doi.org/10.21468/SciPostPhysLectNotes.11). Citado na página 22.
- 77 REICHL, L. The thermodynamics of phase transitions. In: _____. *A Modern Course in Statistical Physics*. [S.l.: s.n.], 2016. cap. 4, p. 87–134. ISBN 9783527690497. doi: [10.1002/9783527690497.ch4](https://doi.org/10.1002/9783527690497.ch4). Citado na página 24.
- 78 SCHWABL, F. *Statistical Mechanics*. Germany: Springer Berlin, Heidelberg, 2006. doi: [10.1007/3-540-36217-7](https://doi.org/10.1007/3-540-36217-7). Citado na página 26.
- 79 STREČKA, J.; JAŠČUR, M. A brief account of the Ising and Ising-like models: Mean-field, effective-field and exact results. *Acta Phys. Slovaca*, v. 65, n. 4, p. 235–367, 2015. Disponível em: <http://www.physics.sk/aps/pubs/2015/aps-15-04/aps-15-04.pdf>. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 73.
- 80 CORLESS, R. M.; GONNET, G. H.; HARE, D. E.; JEFFREY, D. J.; KNUTH, D. E. On the Lambert W function. *Adv. Comput. Math.*, Springer, v. 5, n. 1, p. 329–359, 1996. doi: [10.1007/BF02124750](https://doi.org/10.1007/BF02124750). Citado na página 32.
- 81 BEARDON, A. F. The principal branch of the Lambert W function. *Comput. Methods Funct. Theory*, v. 21, p. 307–316, 2021. doi: [10.1007/s40315-020-00329-6](https://doi.org/10.1007/s40315-020-00329-6). Citado na página 32.
- 82 FREITAS, A. S. *Estudo de sistemas magnéticos desordenados via modelos clássicos de spins por meio de técnicas analíticas*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Sergipe, São Cristóvão, 2014. Disponível em: <https://ri.ufs.br/jspui/handle/riufs/5250>. Citado 3 vezes nas páginas 36, 72 e 76.
- 83 DEVIREN, B.; BATI, M.; KESKIN, M. The effective-field study of a mixed spin-1 and spin-5/2 Ising ferrimagnetic system. *Physica Scripta*, IOP Publishing, v. 79, n. 6, p. 065006, 2009. doi: [10.1088/0031-8949/79/06/065006](https://doi.org/10.1088/0031-8949/79/06/065006). Citado na página 36.
- 84 DEVIREN, B.; ERTAŞ, M.; KESKIN, M. The effective-field theory studies of critical phenomena in a mixed spin-1 and spin-2 Ising model on honeycomb and square lattices. *Phys. A: Stat. Mech. Appl.*, v. 389, n. 10, p. 2036–2047, 2010. ISSN 0378-4371. doi: [10.1016/j.physa.2010.01.038](https://doi.org/10.1016/j.physa.2010.01.038). Citado na página 36.

- 85 ERTAŞ, M.; KESKIN, M.; DEVIREN, B. Dynamic phase transitions and dynamic phase diagrams in the kinetic spin-5/2 Blume–Capel model in an oscillating external magnetic field: Effective-field theory and the Glauber-type stochastic dynamics approach. *J. Magn. Magn. Mater.*, v. 324, n. 8, p. 1503–1511, 2012. ISSN 0304-8853. doi: [10.1016/j.jmmm.2011.11.043](https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2011.11.043). Citado na página 36.
- 86 ERTAŞ, M.; DEVIREN, B.; KESKIN, M. Dynamic phase transitions and dynamic phase diagrams of the spin-2 Blume–Capel model under an oscillating magnetic field within the effective-field theory. *J. Magn. Magn. Mater.*, v. 324, n. 5, p. 704–710, 2012. ISSN 0304-8853. doi: [10.1016/j.jmmm.2011.08.057](https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2011.08.057). Citado na página 36.
- 87 CALLEN, H. A note on Green functions and the Ising model. *Phys. Lett.*, v. 4, n. 3, p. 161, 1963. ISSN 0031-9163. doi: [10.1016/0031-9163\(63\)90344-5](https://doi.org/10.1016/0031-9163(63)90344-5). Citado na página 40.
- 88 SUZUKI, M. Generalized exact formula for the correlations of the Ising model and other classical systems. *Phys. Lett.*, v. 19, n. 4, p. 267–268, 1965. ISSN 0031-9163. doi: [10.1016/0031-9163\(65\)90978-9](https://doi.org/10.1016/0031-9163(65)90978-9). Citado na página 40.
- 89 HONMURA, R.; KANEYOSHI, T. Contribution to the new type of effective-field theory of the Ising model. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, IOP Publishing, v. 12, n. 19, p. 3979–3992, 1979. doi: [10.1088/0022-3719/12/19/016](https://doi.org/10.1088/0022-3719/12/19/016). Citado na página 42.
- 90 MOUJAES, E. A.; AGUIAR, L.; GHANTOUS, M. A. Magnetization of ultrathin $[\text{Fe}_{1-c}\text{Ni}_c]_n$ alloy nanojunctions between Fe or Co leads using an Ising EFT–MFT model. *J. Magn. Magn. Mater.*, v. 423, p. 359–372, 2017. ISSN 0304-8853. doi: [10.1016/j.jmmm.2016.09.085](https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2016.09.085). Citado na página 42.
- 91 SAATÇI, B.; ŞARLI, N.; ÖZDEMİR, E. G.; MERDAN, Z. Bridge constant and atom between theoretical and experimental magnetism in Ni_2MnSb Heusler alloy: DFT and EFT studies. *Philos. Mag.*, v. 101, n. 4, p. 501–516, 2021. doi: [10.1080/14786435.2020.1844330](https://doi.org/10.1080/14786435.2020.1844330). Citado na página 42.
- 92 KESKIN, M.; ŞARLI, N. Superconducting phase diagram of the Yttrium, Barium, and YBa-core in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ by an Ising model. *J. Exp. Theor. Phys.*, Springer, v. 127, n. 3, p. 516–524, 2018. doi: [10.1134/S1063776118090157](https://doi.org/10.1134/S1063776118090157). Citado na página 42.
- 93 HAI, T.; LI, Z. Critical behavior in the amorphous Ising ferromagnet with a random field. *J. Magn. Magn. Mater.*, v. 80, n. 2, p. 173–177, 1989. ISSN 0304-8853. doi: [10.1016/0304-8853\(89\)90113-3](https://doi.org/10.1016/0304-8853(89)90113-3). Citado na página 42.
- 94 JIANG, W.; YANG, Y.-Y.; GUO, A.-B. Study on magnetic properties of a nano-graphene bilayer. *Carbon*, v. 95, p. 190–198, 2015. ISSN 0008-6223. doi: [10.1016/j.carbon.2015.07.097](https://doi.org/10.1016/j.carbon.2015.07.097). Citado na página 42.
- 95 ŞARLI, N. Artificial magnetism in a carbon diamond nanolattice with the spin orientation effect. *Diam. Relat. Mater.*, v. 64, p. 103–109, 2016. ISSN 0925-9635. doi: [10.1016/j.diamond.2016.01.027](https://doi.org/10.1016/j.diamond.2016.01.027). Citado na página 42.
- 96 KANEYOSHI, T. Unconventional phase diagrams in an ultra-thin spin-1 Ising film with site (or bond) dilution at the surfaces. *Phys. B: Condens. Matter*, v. 454, p. 204–209, 2014. ISSN 0921-4526. doi: [10.1016/j.physb.2014.07.065](https://doi.org/10.1016/j.physb.2014.07.065). Citado na página 42.

- 97 ŞARLI, N.; KESKIN, M. Two distinct magnetic susceptibility peaks and magnetic reversal events in a cylindrical core/shell spin-1 Ising nanowire. *Solid State Commun.*, v. 152, n. 5, p. 354–359, 2012. ISSN 0038-1098. doi: [10.1016/j.ssc.2011.12.015](https://doi.org/10.1016/j.ssc.2011.12.015). Citado na página 42.
- 98 ELMADDAHI, Z.; HAFIDI, M. Y. E.; HAFIDI, M. E. Magnetic properties of six-legged spin-1 nanotube in presence of a longitudinal applied field. *Sci. Rep.*, Nature Publishing Group, v. 9, n. 1, p. 1–11, 2019. doi: [10.1038/s41598-019-48833-7](https://doi.org/10.1038/s41598-019-48833-7). Citado na página 42.
- 99 KANEYOSHI, T. Comments on molecular-field theory with correlations. *Phys. Lett. A*, v. 76, n. 1, p. 67–68, 1980. ISSN 0375-9601. doi: [10.1016/0375-9601\(80\)90149-8](https://doi.org/10.1016/0375-9601(80)90149-8). Citado na página 44.
- 100 BALCERZAK, T. Cluster identities in localized spin systems. *J. Magn. Magn. Mater.*, v. 97, n. 1, p. 152–168, 1991. ISSN 0304-8853. doi: [10.1016/0304-8853\(91\)90175-A](https://doi.org/10.1016/0304-8853(91)90175-A). Citado na página 44.
- 101 MIELNICKI, J.; WIATROWSKI, G.; BALCERZAK, T. The magnetization curve calculations of the Ising ferromagnet with $S = 1$. *J. Magn. Magn. Mater.*, v. 67, n. 3, p. 387–394, 1987. ISSN 0304-8853. doi: [10.1016/0304-8853\(87\)90199-5](https://doi.org/10.1016/0304-8853(87)90199-5). Citado na página 44.
- 102 MIELNICKI, J.; BALCERZAK, T.; TRUONG, V.; WIATROWSKI, G. A simple method of magnetization curve calculations in the Heisenberg model ($S = 12$). *J. Magn. Magn. Mater.*, v. 51, n. 1, p. 151–159, 1985. ISSN 0304-8853. doi: [10.1016/0304-8853\(85\)90012-5](https://doi.org/10.1016/0304-8853(85)90012-5). Citado na página 46.
- 103 STEEB, W.-H.; HARDY, Y. *Matrix Calculus and Kronecker Product: A Practical Approach to Linear and Multilinear Algebra*. 2nd. ed. River Edge, NJ, USA: World Scientific, 2011. doi: [10.1142/8030](https://doi.org/10.1142/8030). Citado na página 49.
- 104 ZHANG, H.; DING, F. On the Kronecker products and their applications. *J. Appl. Math.*, Hindawi Publishing Corporation, v. 2013, 2013. doi: [10.1155/2013/296185](https://doi.org/10.1155/2013/296185). Citado na página 49.
- 105 PLASCAK, J.; MOREIRA, J.; SÁBARRETO, F. Mean field solution of the general spin Blume-Capel model. *Phys. Lett. A*, v. 173, n. 4, p. 360 – 364, 1993. ISSN 0375-9601. doi: [10.1016/0375-9601\(93\)90250-4](https://doi.org/10.1016/0375-9601(93)90250-4). Citado 2 vezes nas páginas 53 e 60.
- 106 KANEYOSHI, T.; TUCKER, J.; JAŠČUR, M. Differential operator technique for higher spin problems. *Phys. A: Stat. Mech. Appl.*, v. 186, n. 3, p. 495 – 512, 1992. ISSN 0378-4371. doi: [10.1016/0378-4371\(92\)90212-9](https://doi.org/10.1016/0378-4371(92)90212-9). Citado 2 vezes nas páginas 53 e 60.
- 107 JURČIŠIN, M.; BOBÁK, A.; JAŠČUR, M. Two-spin cluster theory for the Blume-Capel model with arbitrary spin. *Phys. A: Stat. Mech. Appl.*, Elsevier, v. 224, n. 3-4, p. 684–696, 1996. doi: [10.1016/0378-4371\(95\)00306-1](https://doi.org/10.1016/0378-4371(95)00306-1). Citado 3 vezes nas páginas 53, 60 e 72.
- 108 TANAKA, Y.; URYŪ, N. Ising model with general spin and planar rotator model on the Bethe lattice. *J. Phys. Soc. Japan*, J. Phys. Soc. Japan, v. 50, n. 4, p. 1140–1148, 1981. doi: [10.1143/JPSJ.50.1140](https://doi.org/10.1143/JPSJ.50.1140). Citado 2 vezes nas páginas 53 e 60.

- 109 TUCKER, J. Cluster variational theory of spin $\frac{3}{2}$ Ising models. *J. Magn. Magn. Mater.*, v. 214, n. 1, p. 121 – 129, 2000. ISSN 0304-8853. doi: [10.1016/S0304-8853\(00\)00038-X](https://doi.org/10.1016/S0304-8853(00)00038-X). Citado na página 53.
- 110 WOAN, G. Mathematics. In: _____. *The Cambridge Handbook of Physics Formulas*. Cambridge: Cambridge University Press, 2000. p. 19–62. doi: [10.1017/CBO9780511755828.004](https://doi.org/10.1017/CBO9780511755828.004). Citado na página 57.
- 111 SILVA, J. B.; ALBUQUERQUE, D. F. de. Tricritical behavior of the spin-3/2 anisotropic Heisenberg model with Dzyaloshinskii–Moriya interaction. *Phys. A: Stat. Mech. Appl.*, v. 585, p. 126384, 2022. ISSN 0378-4371. doi: [10.1016/j.physa.2021.126384](https://doi.org/10.1016/j.physa.2021.126384). Citado na página 64.
- 112 AKINCI, Ü. Random field effects on the anisotropic quantum Heisenberg model with Gaussian random magnetic field distribution. *Phys. A: Stat. Mech. Appl.*, v. 392, n. 19, p. 4380–4387, 2013. ISSN 0378-4371. doi: [10.1016/j.physa.2013.05.040](https://doi.org/10.1016/j.physa.2013.05.040). Citado na página 66.
- 113 AKINCI, Ü. Critical behavior of the 3D anisotropic quantum Heisenberg model in a trimodal random field distribution. *J. Magn. Magn. Mater.*, Elsevier, v. 333, p. 156–161, 2013. doi: [10.1016/j.jmmm.2013.01.001](https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2013.01.001). Citado 2 vezes nas páginas 66 e 67.
- 114 FYTAS, N. G.; MARTÍN-MAYOR, V. Universality in the three-dimensional random-field Ising model. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 110, p. 227201, May 2013. doi: [10.1103/PhysRevLett.110.227201](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.110.227201). Citado na página 66.
- 115 LIANG, Y.-Q.; WEI, G.-Z.; XU, X.-J.; SONG, G.-L. Phase diagram and tricritical behavior of an metamagnet in uniform and random fields. *J. Magn. Magn. Mater.*, v. 322, p. 2219–2222, 08 2010. doi: [10.1016/j.jmmm.2010.02.013](https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2010.02.013). Citado na página 66.
- 116 YÜKSEL, Y.; AKINCI, Ü.; POLAT, H. Random field effects on the phase diagrams of spin-1/2 Ising model on a honeycomb lattice. *Phys. A: Stat. Mech. Appl.*, v. 391, p. 415–422, 2012. doi: [10.1016/j.physa.2011.09.009](https://doi.org/10.1016/j.physa.2011.09.009). Citado na página 66.
- 117 ALBUQUERQUE, D. F. de; FITTIPALDI, I. P.; SOUSA, J. R. de. Absence of the tricritical behavior of the random field Ising model in a honeycomb lattice. *J. Magn. Magn. Mater.*, v. 306, p. 92, 2006. doi: [10.1016/j.jmmm.2006.01.249](https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2006.01.249). Citado na página 66.
- 118 LARKIN, A. *Sov. Phys. JETP*, v. 31, p. 784, 1970. Citado na página 66.
- 119 IMRY, Y.; MA, S. Random-field instability of the ordered state of continuous symmetry. *Phys. Rev. Lett.*, APS, v. 35, n. 21, p. 1399, 1975. doi: [10.1103/PhysRevLett.35.1399](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.35.1399). Citado na página 66.
- 120 BELANGER, D. P.; KING, A. R.; JACCARINO, V. Random-field critical behavior of a d=3 Ising system: Neutron scattering studies of $\text{Fe}_{0.6}\text{Zn}_{0.4}\text{F}_2$. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 31, p. 4538–4547, Apr 1985. doi: [10.1103/PhysRevB.31.4538](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.31.4538). Citado na página 66.
- 121 FERREIRA, I. B.; KING, A. R.; JACCARINO, V.; CARDY, J. L.; GUGGENHEIM, H. J. Random-field-induced destruction of the phase transition of a diluted two-dimensional Ising antiferromagnet: $\text{Rb}_2\text{Co}_{0.85}\text{Mg}_{0.15}\text{F}_4$. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 28, p. 5192–5198, Nov 1983. doi: [10.1103/PhysRevB.28.5192](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.28.5192). Citado na página 66.

- 122 ALBUQUERQUE, D. F.; ARRUDA, A. S. Heisenberg model in a random field: phase diagram and tricritical behavior. *Phys. A: Stat. Mech. Appl.*, Elsevier, v. 316, n. 1, p. 13–18, 2002. doi: [10.1016/S0378-4371\(02\)01204-9](https://doi.org/10.1016/S0378-4371(02)01204-9). Citado na página 66.
- 123 ALBUQUERQUE, D. F.; ALVES, S. R. L.; ARRUDA, A. S. de. Critical behavior in a random field classical Heisenberg model for amorphous systems. *Phys. Lett. A*, v. 346, n. 1, p. 128–132, 2005. doi: [10.1016/j.physleta.2005.07.060](https://doi.org/10.1016/j.physleta.2005.07.060). Citado na página 66.
- 124 SILVA, W. da; ARRUDA, P. de; TUNES, T.; GODOY, M.; ARRUDA, A. de. Effects of the random single-ion anisotropy and random magnetic field in the spin-3/2 Blume-Capel model. *J. Magn. Magn. Mater.*, Elsevier, v. 422, p. 367–375, 2017. doi: [10.1016/j.jmmm.2016.08.094](https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2016.08.094). Citado na página 67.
- 125 WEI, G.; LIU, J.; MIAO, H.; DU, A. Multicritical behavior of the Ising metamagnet in both external longitudinal and transverse fields. *Phys. Rev. B*, v. 76, p. 054402, Aug 2007. doi: [10.1103/PhysRevB.76.054402](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.054402). Citado na página 67.
- 126 GENG, J.; WEI, G. Magnetic properties of Ising metamagnet in both external longitudinal and transverse fields. *J. Magn. Magn. Mater.*, v. 321, n. 13, p. 1964–1970, 2009. ISSN 0304-8853. doi: [10.1016/j.jmmm.2008.12.020](https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2008.12.020). Citado na página 67.
- 127 SALMON, O. D. R.; TAPIA, J. R. Multicriticality in the Blume-Capel model under a continuous-field probability distribution. *J. Phys. A: Math. Theor.*, IOP Publishing, v. 43, n. 12, p. 125003, mar 2010. doi: [10.1088/1751-8113/43/12/125003](https://doi.org/10.1088/1751-8113/43/12/125003). Citado na página 67.
- 128 WANG, Y.-L.; KIMEL, J. D. Multicritical behavior in the antiferromagnetic Blume-Capel model. *J. Appl. Phys.*, v. 69, n. 8, p. 6176–6178, 1991. doi: [10.1063/1.348797](https://doi.org/10.1063/1.348797). Citado na página 67.
- 129 BOBÁK, A. Multicritical points in the mixed spin-1 and spin-3/2 Ising system on a square lattice with different single-ion anisotropies. *Phys. A: Stat. Mech. Appl.*, v. 286, n. 3, p. 531–540, 2000. ISSN 0378-4371. doi: [10.1016/S0378-4371\(00\)00404-0](https://doi.org/10.1016/S0378-4371(00)00404-0). Citado na página 67.
- 130 SILVA, J. B. *Modelo de Heisenberg com campo aleatório e interação Dzyaloshinskii-Moriya*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Sergipe, São Cristóvão, 2018. Disponível em: <https://ri.ufs.br/handle/riufs/10739>. Citado na página 67.
- 131 MILMAN, F.; HAUSER, P.; FIGUEIREDO, W. Phase diagram of the transverse Ising model in a random field. *Phys. Rev. B*, APS, v. 43, n. 16, p. 13641, 1991. doi: [10.1103/PhysRevB.43.13641](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.43.13641). Citado na página 69.
- 132 SEBASTIANES, R.; FIGUEIREDO, W. Phase diagram of a trimodal random-field spin-S Ising model. *Phys. Rev. B*, APS, v. 42, n. 4, p. 2594, 1990. doi: [10.1103/PhysRevB.42.2594](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.42.2594). Citado na página 69.
- 133 SALMON, O. R.; CROKIDAKIS, N.; NOBRE, F. D. Multicritical behavior in a random-field Ising model under a continuous-field probability distribution. *J. Phys.: Condens. Matter*, IOP Publishing, v. 21, n. 5, p. 056005, 2009. doi: [10.1088/0953-8984/21/5/056005](https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/5/056005). Citado na página 69.

- 134 BENYOUSSEF, A.; EZ-ZAHRAOUY, H.; SABER, M. Magnetic properties of a transverse spin-1 Ising model with random longitudinal field. *Phys. A: Stat. Mech. Appl.*, v. 198, n. 3, p. 593–605, 1993. doi: [10.1016/0378-4371\(93\)90242-V](https://doi.org/10.1016/0378-4371(93)90242-V). Citado na página 69.
- 135 GIL, A.; SOUSA, J. de. Phase diagram of the antiferromagnet Heisenberg model with Dzyaloshinski-Moriya interaction. *Phys. Status Solidi B*, v. 213, n. 2, p. r5–r6, 1999. doi: [10.1002/\(SICI\)1521-3951\(199906\)213:2<R5::AID-PSSB99995>3.0.CO;2-%23](https://doi.org/10.1002/(SICI)1521-3951(199906)213:2<R5::AID-PSSB99995>3.0.CO;2-%23). Citado na página 74.
- 136 PARENTE, W. E.; PACOBAHYBA, J.; NETO, M. A.; ARAÚJO, I. G.; PLASCAK, J. Spin-1/2 anisotropic Heisenberg antiferromagnet model with Dzyaloshinskii-Moriya interaction via mean-field approximation. *J. Magn. Magn. Mater.*, Elsevier, v. 462, p. 8–12, 2018. doi: [10.1016/j.jmmm.2018.04.054](https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2018.04.054). Citado 3 vezes nas páginas 74, 75 e 77.
- 137 PARENTE, W. E.; PACOBAHYBA, J.; ARAÚJO, I. G.; NETO, M. A.; Ricardo de Sousa, J.; AKINCI Ümit. Critical and reentrant behavior of the spin quantum 1/2 anisotropic Heisenberg antiferromagnet model with Dzyaloshinskii–Moriya interaction in a longitudinal magnetic field. *J. Magn. Magn. Mater.*, v. 355, p. 235–239, 2014. ISSN 0304-8853. doi: [10.1016/j.jmmm.2013.12.041](https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2013.12.041). Citado na página 75.
- 138 PARENTE, W. E.; PACOBAHYBA, J.; ARAÚJO, I. G.; NETO, M. A.; Ricardo de Sousa, J. Anomaly in the phase diagram of the spin quantum 1/2 anisotropic Heisenberg antiferromagnet model with Dzyaloshinskii–Moriya interaction: A low temperature analysis. *Phys. E: Low-Dimens. Syst. Nanostructures*, v. 74, p. 287–291, 2015. ISSN 1386-9477. doi: [10.1016/j.physe.2015.07.009](https://doi.org/10.1016/j.physe.2015.07.009). Citado na página 75.
- 139 ALBAYRAK, E. Antiferromagnetic spin-1 XYZ model with the Dzyaloshinskii–Moriya interaction. *Eur. Phys. J. Plus*, v. 137, n. 618, p. 1–9, 2022. doi: [10.1140/epjp/s13360-022-02830-4](https://doi.org/10.1140/epjp/s13360-022-02830-4). Citado 2 vezes nas páginas 75 e 77.
- 140 TAKOU, D. S.; KARIMOU, M.; HONTINFINDE, F.; ALBAYRAK, E. Anisotropic Heisenberg model for the mixed spin-3/2 and spin-1/2 under random crystal field. *Condens. Matter Phys.*, Institute for Condensed Matter Physics, v. 24, n. 1, p. 13704, 2021. doi: [10.5488/cmp.24.13704](https://doi.org/10.5488/cmp.24.13704). Citado na página 93.

Apêndices

APÊNDICE A – Produto de Kronecker

Considerando que A e B sejam duas matrizes genéricas de dimensões $m \times n$ e $p \times q$, respectivamente, o produto de Kronecker de A e B será a matriz C de dimensão $mp \times nq$ definida por:

$$C \equiv A \otimes B = \begin{pmatrix} a_{11}B & a_{12}B & \cdots & a_{1n}B \\ a_{21}B & a_{22}B & \cdots & a_{2n}B \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}B & a_{m2}B & \cdots & a_{mn}B \end{pmatrix}, \quad (\text{A.1})$$

em que a_{mn} denota o elemento de A na linha m e coluna n . No caso mais simples possível, se A e B forem ambas matrizes quadradas 2×2 , então:

$$\begin{aligned} A \otimes B &= \begin{pmatrix} a_{11}B & a_{12}B \\ a_{21}B & a_{22}B \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} a_{11}b_{11} & a_{11}b_{12} & a_{12}b_{11} & a_{12}b_{12} \\ a_{11}b_{21} & a_{11}b_{22} & a_{12}b_{21} & a_{12}b_{22} \\ a_{21}b_{11} & a_{21}b_{12} & a_{22}b_{11} & a_{22}b_{12} \\ a_{21}b_{21} & a_{21}b_{22} & a_{22}b_{21} & a_{22}b_{22} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Nota-se facilmente que o produto de Kronecker de duas matrizes de modo geral resulta numa outra matriz de maior dimensão. Esta operação, na literatura, pode ser também denominada de produto tensorial ou produto direto entre matrizes.

Algumas propriedades básicas (considerando as matrizes A , B e C) são:

(i) Bilinearidade:

$$A \otimes (\kappa B) = \kappa(A \otimes B) = (\kappa A) \otimes B, \quad (\text{A.3})$$

sendo κ um escalar.

(ii) Distributividade e associatividade:

$$(A + B) \otimes C = (A \otimes C) + (B \otimes C) \quad (\text{A.4})$$

$$A \otimes (B + C) = (A \otimes B) + (A \otimes C) \quad (\text{A.5})$$

$$(A \otimes B) \otimes C = A \otimes (B \otimes C) \quad (\text{A.6})$$

(iii) Não-comutatividade:

$$A \otimes B \neq B \otimes A \quad (\text{A.7})$$

(iv) Assumindo que o número de colunas de A seja igual ao de linhas de C e similarmente para B e D , então:

$$(A \otimes B)(C \otimes D) = AC \otimes BD \quad (\text{A.8})$$

(v) Se A e B são matrizes quadradas e inversíveis, vale:

$$(A \otimes B)^{-1} = A^{-1} \otimes B^{-1} \quad (\text{A.9})$$

Para o tratamento de sistemas com múltiplos spins interagentes, é essencial levar em conta a seguinte definição:

$$S_j^\alpha = \overbrace{I \otimes \cdots \otimes I \otimes S^\alpha \otimes I \otimes \cdots \otimes I}^{N \text{ fatores}}, \quad (\text{A.10})$$

\Downarrow
 j -ésima posição

em que I é a matriz identidade de ordem equivalente a S^α , sendo S^α a matriz de spin (com $\alpha = x, y$ ou z) na j -ésima posição ($j = 1, 2, \dots, N$). N diz respeito ao número de sítios em um *cluster*.

Outra propriedade relevante diz respeito à soma de Kronecker de A e B definida por:

$$A \oplus B = A \otimes I_b + I_a \otimes B, \quad (\text{A.11})$$

em que A e B são matrizes quadradas de ordem a e b , respectivamente, e I_n é a matriz identidade de ordem n . A seguir são mostrados exemplos de aplicações.

Exemplo 1: Das definições (A.1) e (A.10), considerando o caso de spin- $\frac{1}{2}$ aplicado a um *cluster* de três spins, o termo $S_1^y S_3^y$ será representado matricialmente da seguinte forma:

$$S_1^y S_3^y = S^y \otimes I_2 \otimes S^y \quad (\text{A.12})$$

$$= \frac{1}{2i} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \frac{1}{2i} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.13})$$

$$= -\frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.14})$$

Note que em (A.13) vale a aplicação das propriedades (A.3) e (A.6).

Para o termo S_3^z , por sua vez, teremos:

$$S_3^z = I_2 \otimes I_2 \otimes S^z \quad (\text{A.15})$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.16})$$

$$= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.17})$$

Exemplo 2: No tratamento do modelo de Heisenberg ferrimagnético de spins mistos com spin- $3/2$ e spin- $1/2$ (como é o caso da Ref. [140]), alguns dos termos do hamiltoniano serão explicitados a seguir (será adotada a notação $S_i^\alpha \equiv S_{i,3/2}^\alpha$ e $S_j^\alpha \equiv S_{j,1/2}^\alpha$, com $\alpha = x, y$ ou z).

$$S_i^x S_j^x = S_i^x \otimes S_j^x \quad (\text{A.18})$$

$$= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix} \otimes \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.19})$$

$$= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.20})$$

$$S_i^z + S_j^z = S_i^z \oplus S_j^z \quad (\text{A.21})$$

$$= S_i^z \otimes I_2 + I_4 \otimes S_j^z \quad (\text{A.22})$$

$$= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -3 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.23})$$

E, finalmente, realizando as operações em (A.23), temos:

$$S_i^z + S_j^z = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.24})$$

APÊNDICE B – Códigos em Fortran

Neste apêndice são apresentados dois programas simples em linguagem Fortran para a obtenção dos resultados da energia interna e da susceptibilidade magnética. Essa é uma das formas possíveis de se obter os dados para essas grandezas. As expressões mostradas são para o caso de spin-3/2 (subseção 4.1.4).

- **Energia interna**

```

program int_energy
implicit none
real*8 :: t, m, u, a, del
integer:: q, nlinhas

q=6 ! rede cubica simples

del=1.0D0 ! del=Delta (anisotropia)

a=0.5D0 ! a=d (parametro DM)

! Ler arquivo de dados da magnetizacao
open(unit=1, file='mT_Delta1_d05.dat')

open(unit=2, file='U_t[d05].dat')

nlinhas=0
do
  read(1,*, end=1111)t, m

! Expressao da energia interna:
u=- (0.9D1/0.2D1*exp(0.9D1/0.4D1/t)*cosh(0.3D1/t*dbble(q-1)*m)
+0.6D1*exp(0.9D1/0.4D1/t)*sinh(0.3D1/t*dbble(q-1)*m)*dbble(q-1)
)*m-0.3D1/0.2D1*exp(-0.3D1/0.4D1/t)*cosh(0.10D1/t*dbble(q-1)*
m)+0.2D1*exp(-0.3D1/0.4D1/t)*sinh(0.10D1/t*dbble(q-1)*m)*dbble
(q-1)*m-exp(-0.10D1/t/0.4D1)*cosh(0.10D1/t*dbble(q-1)*m)*cosh
(sqrt(0.10D1/t**2+0.24D2/t**2*dbble((1-del)**2+a**2)))/0.2D1)+
0.4D1*exp(-0.10D1/t/0.4D1)*sinh(0.10D1/t*dbble(q-1)*m)*dbble(q

```

```

-1)*m*cosh(sqrt(0.10D1/t**2+0.24D2/t**2*double((1-del)**2+a**2
))/0.2D1)+exp(-0.10D1/t/0.4D1)*cosh(0.10D1/t*double(q-1)*m)*sinh
(sqrt(0.10D1/t**2+0.24D2/t**2*double((1-del)**2+a**2))/0.2D1)*
(0.10D1/t**2+0.24D2/t**2*double((1-del)**2+a**2))*(-0.1D1/0.2
D1)*(0.2D1/t+0.48D2/t*double((1-del)**2+a**2))+0.3D1*exp(0.3D1
/0.4D1/t)*cosh(0.2D1/t*double(q-1)*m)*cosh(0.3D1/0.2D1/t*sqrt(
double((1-del)**2+a**2)))+0.8D1*exp(0.3D1/0.4D1/t)*sinh(0.2D1/
t*double(q-1)*m)*double(q-1)*m*cosh(0.3D1/0.2D1/t*sqrt(double((1-
del)**2+a**2)))+0.6D1*exp(0.3D1/0.4D1/t)*cosh(0.2D1/t*double(q
-1)*m)*sinh(0.3D1/0.2D1/t*sqrt(double((1-del)**2+a**2)))*sqrt(
double((1-del)**2+a**2))+0.2D1*(-0.5D1/0.4D1+sqrt(double((1-del)
**2+a**2)))*exp(-0.5D1/0.4D1/t+0.10D1/t*sqrt(double((1-del)**2
+a**2)))*cosh(sqrt(0.4D1*(0.10D1/t+0.10D1/t*sqrt(double((1-del)
)**2+a**2)))***2+0.9D1/t**2*double((1-del)**2+a**2))/0.2D1)+exp
(-0.5D1/0.4D1/t+0.10D1/t*sqrt(double((1-del)**2+a**2)))*sinh(
sqrt(0.4D1*(0.10D1/t+0.10D1/t*sqrt(double((1-del)**2+a**2)))***
2+0.9D1/t**2*double((1-del)**2+a**2))/0.2D1)*(0.4D1*(0.10D1/t+
0.10D1/t*sqrt(double((1-del)**2+a**2)))***2+0.9D1/t**2*double((1-
del)**2+a**2))*(-0.1D1/0.2D1)*(0.8D1*(0.10D1/t+0.10D1/t*sqrt
(double((1-del)**2+a**2)))*(0.1D1+sqrt(double((1-del)**2+a**2)))
+0.18D2/t*double((1-del)**2+a**2))/0.2D1+0.2D1*(-0.5D1/0.4D1-
sqrt(double((1-del)**2+a**2)))*exp(-0.5D1/0.4D1/t-0.10D1/t*sqrt
(double((1-del)**2+a**2)))*cosh(sqrt(0.4D1*(0.10D1/t-0.10D1/t*
sqrt(double((1-del)**2+a**2)))***2+0.9D1/t**2*double((1-del)**2+a
**2))/0.2D1)+exp(-0.5D1/0.4D1/t-0.10D1/t*sqrt(double((1-del)**
2+a**2)))*sinh(sqrt(0.4D1*(0.10D1/t-0.10D1/t*sqrt(double((1-del)
)**2+a**2)))***2+0.9D1/t**2*double((1-del)**2+a**2))/0.2D1)*(0.
4D1*(0.10D1/t-0.10D1/t*sqrt(double((1-del)**2+a**2)))***2+0.9D1
/t**2*double((1-del)**2+a**2))*(-0.1D1/0.2D1)*(0.8D1*(0.10D1/
t-0.10D1/t*sqrt(double((1-del)**2+a**2)))*(0.1D1-sqrt(double((1-
del)**2+a**2)))+0.18D2/t*double((1-del)**2+a**2))/0.2D1)/(0.2D
1*exp(0.9D1/0.4D1/t)*cosh(0.3D1/t*double(q-1)*m)+0.2D1*exp(-0.
3D1/0.4D1/t)*cosh(0.10D1/t*double(q-1)*m)+0.4D1*exp(-0.10D1/t/
0.4D1)*cosh(0.10D1/t*double(q-1)*m)*cosh(sqrt(0.10D1/t**2+0.24
D2/t**2*double((1-del)**2+a**2))/0.2D1)+0.4D1*exp(0.3D1/0.4D1/
t)*cosh(0.2D1/t*double(q-1)*m)*cosh(0.3D1/0.2D1/t*sqrt(double((1
-del)**2+a**2)))+0.2D1*exp(-0.5D1/0.4D1/t+0.10D1/t*sqrt(double
((1-del)**2+a**2)))*cosh(sqrt(0.4D1*(0.10D1/t+0.10D1/t*sqrt(
double((1-del)**2+a**2)))***2+0.9D1/t**2*double((1-del)**2+a**2))

```

```

/0.2D1)+0.2D1*exp(-0.5D1/0.4D1/t-0.10D1/t*sqrt(dble((1-del)*
*2+a**2)))*cosh(sqrt(0.4D1*(0.10D1/t-0.10D1/t*sqrt(dble((1-
del)**2+a**2)))*2+0.9D1/t**2*dble((1-del)**2+a**2))/0.2D1))

    write(2,*) t, u

    nlinhas=nlinhas+1
enddo
1111 continue
close(unit=1)
close(unit=2)

end program int_energy

```

- Susceptibilidade magnética

```

program suscept
implicit none
real*8 :: t, m, chi, a, del
integer::nlinhas

del=1.0D0 ! del=Delta (anisotropia)

a=0.5D0 ! a=d (parametro DM)

! Ler arquivo de dados da magnetizacao
open(unit=1,file='mT_Delta1_d05.dat')

open(unit=2,file='chiT_d05.dat')

nlinhas=0
do
    read(1,*,end=1111)t,m

! Expressao da susceptibilidade:
chi=(0.2D1*exp(0.10D1/t*(-0.1D1+0.2D1*sqrt(dble(1-2*del+del*
*2+a**2)))/0.2D1)*cosh(0.5D1/t*m)*cosh(sqrt(0.10D1/t**2*dble
(25-48*del+24*del**2+24*a**2))/0.2D1)*cosh(sqrt(0.10D1/t**2*
(0.17D2+0.8D1*sqrt(dble(1-2*del+del**2+a**2))-dble(26*del)+

```

```

double(13*del**2)+double(13*a**2))/0.2D1)+exp(0.10D1/t*(-0.1D1+
sqrt(double(1-2*del+del**2+a**2))))*cosh(0.5D1/t*m)*cosh(sqrt(
0.10D1/t**2*(0.17D2+0.8D1*sqrt(double(1-2*del+del**2+a**2))-
double(26*del)+double(13*del**2)+double(13*a**2)))/0.2D1)-0.16D2*
exp(0.3D1/0.2D1/t)*sinh(0.5D1/t*m)*cosh(sqrt(0.10D1/t**2*double
(25-48*del+24*del**2+24*a**2)))/0.2D1)*sinh(0.10D2/t*m)*cosh(
0.3D1/0.2D1/t*sqrt(double(1-2*del+del**2+a**2)))-0.12D2*exp(0.
3D1/t)*sinh(0.15D2/t*m)*sinh(0.5D1/t*m)*cosh(sqrt(0.10D1/t**
2*double(25-48*del+24*del**2+24*a**2)))/0.2D1)+0.20D2*exp(0.3D1
/t)*cosh(0.15D2/t*m)*cosh(0.5D1/t*m)*cosh(sqrt(0.10D1/t**2*
double(25-48*del+24*del**2+24*a**2)))/0.2D1)+0.26D2*exp(0.4D1/t
)*cosh(0.15D2/t*m)*cosh(0.10D2/t*m)*cosh(0.3D1/0.2D1/t*sqrt(
double(1-2*del+del**2+a**2)))+exp(-0.10D1/t*(0.1D1+sqrt(double(1
-2*del+del**2+a**2))))*cosh(0.5D1/t*m)*cosh(sqrt(0.10D1/t**2
*(0.17D2-0.8D1*sqrt(double(1-2*del+del**2+a**2))-double(26*del)+
double(13*del**2)+double(13*a**2)))/0.2D1)+0.2D1*exp(-0.10D1/t*(
0.1D1+0.2D1*sqrt(double(1-2*del+del**2+a**2)))/0.2D1)*cosh(0.5
D1/t*m)*cosh(sqrt(0.10D1/t**2*double(25-48*del+24*del**2+24*a
**2)))/0.2D1)*cosh(sqrt(0.10D1/t**2*(0.17D2-0.8D1*sqrt(double(1-
2*del+del**2+a**2))-double(26*del)+double(13*del**2)+double(13*a**
2)))/0.2D1)-0.6D1*exp(0.5D1/0.2D1/t)*sinh(0.15D2/t*m)*sinh(0
.5D1/t*m)+0.8D1*exp(0.10D1/t*(0.1D1+0.2D1*sqrt(double(1-2*del+
del**2+a**2)))/0.2D1)*cosh(0.10D2/t*m)*cosh(0.3D1/0.2D1/t*sqrt
(double(1-2*del+del**2+a**2)))*cosh(sqrt(0.10D1/t**2*(0.17D2+0
.8D1*sqrt(double(1-2*del+del**2+a**2))-double(26*del)+double(13*del
**2)+double(13*a**2)))/0.2D1)-0.8D1*sinh(0.5D1/t*m)*sinh(0.10D2
/t*m)*cosh(0.3D1/0.2D1/t*sqrt(double(1-2*del+del**2+a**2)))*exp
(0.10D1/t)+0.10D2*exp(0.5D1/0.2D1/t)*cosh(0.15D2/t*m)*cosh(0
.5D1/t*m)+0.9D1*exp(0.10D1/t*(0.2D1+sqrt(double(1-2*del+del**2
+a**2))))*cosh(0.15D2/t*m)*cosh(sqrt(0.10D1/t**2*(0.17D2+0.8
D1*sqrt(double(1-2*del+del**2+a**2))-double(26*del)+double(13*del*
**2)+double(13*a**2)))/0.2D1)+0.9D1*exp(-0.10D1/t*(-0.2D1+sqrt(
double(1-2*del+del**2+a**2)))*cosh(0.15D2/t*m)*cosh(sqrt(0.10
D1/t**2*(0.17D2-0.8D1*sqrt(double(1-2*del+del**2+a**2))-double(2
6*del)+double(13*del**2)+double(13*d**2)))/0.2D1)+0.10D2*cosh(0.
5D1/t*m)*cosh(0.10D2/t*m)*cosh(0.3D1/0.2D1/t*sqrt(double(1-2*
del+del**2+d**2)))*exp(0.10D1/t)+0.20D2*exp(0.3D1/0.2D1/t)*
cosh(0.5D1/t*m)*cosh(sqrt(0.10D1/t**2*double(25-48*del+24*del*
**2+24*a**2)))/0.2D1)*cosh(0.10D2/t*m)*cosh(0.3D1/0.2D1/t*sqrt

```

```

(dble(1-2*del+del**2+a**2)))+0.8D1*exp(-0.10D1/t*(-0.1D1+0.2
D1*sqrt(dble(1-2*del+del**2+a**2)))/0.2D1)*cosh(0.10D2/t*m)*
cosh(0.3D1/0.2D1/t*sqrt(dble(1-2*del+del**2+a**2)))*cosh(sqrt
(0.10D1/t**2*(0.17D2-0.8D1*sqrt(dble(1-2*del+del**2+a**2))-
dble(26*del)+dble(13*del**2)+dble(13*a**2)))/0.2D1)-0.24D2*
exp(0.4D1/t)*sinh(0.15D2/t*m)*sinh(0.10D2/t*m)*cosh(0.3D1/0.
2D1/t*sqrt(dble(1-2*del+del**2+a**2)))+0.9D1*exp(0.11D2/0.2D
1/t)+0.4D1*cosh(sqrt(0.10D1/t**2*dble(25-48*del+24*del**2+24
*a**2)))/0.2D1)+0.4D1*exp(0.10D1/t/0.2D1)*cosh(sqrt(0.10D1/t*
**2*dble(25-48*del+24*del**2+24*a**2)))/0.2D1)**2+0.16D2*exp(0
.5D1/0.2D1/t)*cosh(0.3D1/0.2D1/t*sqrt(dble(1-2*del+del**2+a*
*2)))**2+exp(-0.10D1/t/0.2D1))/(0.2D1*t*exp(-0.10D1/t/0.2D1)
*cosh(0.5D1/t*m)**2+0.2D1*t*exp(0.11D2/0.2D1/t)*cosh(0.15D2/
t*m)**2+0.30D2*exp(0.5D1/0.2D1/t)*sinh(0.15D2/t*m)*sinh(0.5D
1/t*m)-0.50D2*exp(0.5D1/0.2D1/t)*cosh(0.15D2/t*m)*cosh(0.5D1
/t*m)-0.45D2*exp(0.11D2/0.2D1/t)+0.4D1*t*exp(0.5D1/0.2D1/t)*
cosh(0.15D2/t*m)*cosh(0.5D1/t*m)-0.10D2*exp(0.10D1/t*(-0.1D1
+0.2D1*sqrt(dble(1-2*del+del**2+a**2)))/0.2D1)*cosh(0.5D1/t*m)
*cosh(sqrt(0.10D1/t**2*dble(25-48*del+24*del**2+24*a**2)))/
0.2D1)*cosh(sqrt(0.10D1/t**2*(0.17D2+0.8D1*sqrt(dble(1-2*del
+del**2+a**2))-dble(26*del)+dble(13*del**2)+dble(13*a**2)))/
0.2D1)+0.60D2*exp(0.3D1/t)*sinh(0.15D2/t*m)*sinh(0.5D1/t*m)*
cosh(sqrt(0.10D1/t**2*dble(25-48*del+24*del**2+24*a**2)))/0.2
D1)-0.20D2*cosh(sqrt(0.10D1/t**2*dble(25-48*del+24*del**2+24
*a**2)))/0.2D1)-0.5D1*exp(0.10D1/t*(-0.1D1+sqrt(dble(1-2*del+
del**2+a**2))))*cosh(0.5D1/t*m)*cosh(sqrt(0.10D1/t**2*(0.17D
2+0.8D1*sqrt(dble(1-2*del+del**2+a**2))-dble(26*del)+dble(13
*del**2)+dble(13*a**2)))/0.2D1)-0.5D1*exp(-0.10D1/t*(0.1D1+
sqrt(dble(1-2*del+del**2+a**2))))*cosh(0.5D1/t*m)*cosh(sqrt(
0.10D1/t**2*(0.17D2-0.8D1*sqrt(dble(1-2*del+del**2+a**2))-dble
(26*del)+dble(13*del**2)+dble(13*a**2)))/0.2D1)-0.100D3*exp(
0.3D1/t)*cosh(0.15D2/t*m)*cosh(0.5D1/t*m)*cosh(sqrt(0.10D1/t
**2*dble(25-48*del+24*del**2+24*a**2)))/0.2D1)-0.130D3*exp(0.
4D1/t)*cosh(0.15D2/t*m)*cosh(0.10D2/t*m)*cosh(0.3D1/0.2D1/t*
sqrt(dble(1-2*del+del**2+a**2)))+0.80D2*exp(0.3D1/0.2D1/t)*
sinh(0.5D1/t*m)*cosh(sqrt(0.10D1/t**2*dble(25-48*del+24*del*
*2+24*a**2)))/0.2D1)*sinh(0.10D2/t*m)*cosh(0.3D1/0.2D1/t*sqrt
(dble(1-2*del+del**2+a**2)))-0.45D2*exp(0.10D1/t*(0.2D1+sqrt
(dble(1-2*del+del**2+a**2))))*cosh(0.15D2/t*m)*cosh(sqrt(0.1

```

```

0D1/t**2*(0.17D2+0.8D1*sqrt(dble(1-2*del+del**2+d**2))-dble(
26*del)+dble(13*del**2)+dble(13*a**2)))/0.2D1)+0.120D3*exp(0
.4D1/t)*sinh(0.15D2/t*m)*sinh(0.10D2/t*m)*cosh(0.3D1/0.2D1/t
*sqrt(dble(1-2*del+del**2+a**2)))+0.2D1*t*exp(-(0.3D1+0.4D1*
sqrt(dble(1-2*del+del**2+a**2)))/t/0.2D1)*cosh(sqrt(0.10D1/t
**2*(0.17D2-0.8D1*sqrt(dble(1-2*del+del**2+a**2))-dble(26*del
)+dble(13*del**2)+dble(13*a**2)))/0.2D1)**2+0.2D1*t*exp((-0.
3D1+0.4D1*sqrt(dble(1-2*del+del**2+a**2)))/t/0.2D1)*cosh(sqrt
(0.10D1/t**2*(0.17D2+0.8D1*sqrt(dble(1-2*del+del**2+a**2))-
dble(26*del)+dble(13*del**2)+dble(13*a**2)))/0.2D1)**2-0.20D
2*exp(0.10D1/t/0.2D1)*cosh(sqrt(0.10D1/t**2*dble(25-48*del+2
4*del**2+24*a**2)))/0.2D1)**2-0.80D2*exp(0.5D1/0.2D1/t)*cosh(
0.3D1/0.2D1/t*sqrt(dble(1-2*del+del**2+a**2)))**2-0.100D3*exp
(0.3D1/0.2D1/t)*cosh(0.5D1/t*m)*cosh(sqrt(0.10D1/t**2*dble(2
5-48*del+24*del**2+24*a**2)))/0.2D1)*cosh(0.10D2/t*m)*cosh(0.
3D1/0.2D1/t*sqrt(dble(1-2*del+del**2+a**2)))-0.50D2*cosh(0.5
D1/t*m)*cosh(0.10D2/t*m)*cosh(0.3D1/0.2D1/t*sqrt(dble(1-2*del
+del**2+a**2)))*exp(0.10D1/t)-0.40D2*exp(-0.10D1/t*(-0.1D1+0
.2D1*sqrt(dble(1-2*del+del**2+a**2)))/0.2D1)*cosh(0.10D2/t*m
)*cosh(0.3D1/0.2D1/t*sqrt(dble(1-2*del+del**2+a**2)))*cosh(sqrt
(0.10D1/t**2*(0.17D2-0.8D1*sqrt(dble(1-2*del+del**2+a**2))-dble
(26*del)+dble(13*del**2)+dble(13*a**2)))/0.2D1)-0.45D2*exp(-
0.10D1/t*(-0.2D1+sqrt(dble(1-2*del+del**2+a**2)))*cosh(0.15
D2/t*m)*cosh(sqrt(0.10D1/t**2*(0.17D2-0.8D1*sqrt(dble(1-2*del
+del**2+a**2))-dble(26*del)+dble(13*del**2)+dble(13*a**2)))/
0.2D1)-0.40D2*exp(0.10D1/t*(0.1D1+0.2D1*sqrt(dble(1-2*del+del
**2+a**2)))/0.2D1)*cosh(0.10D2/t*m)*cosh(0.3D1/0.2D1/t*sqrt(
dble(1-2*del+del**2+a**2)))*cosh(sqrt(0.10D1/t**2*(0.17D2+0.
8D1*sqrt(dble(1-2*del+del**2+d**2))-dble(26*del)+dble(13*del
**2)+dble(13*a**2)))/0.2D1)+0.40D2*sinh(0.5D1/t*m)*sinh(0.10
D2/t*m)*cosh(0.3D1/0.2D1/t*sqrt(dble(1-2*del+del**2+a**2)))*
exp(0.10D1/t)-0.10D2*exp(-0.10D1/t*(0.1D1+0.2D1*sqrt(dble(1-
2*del+del**2+a**2)))/0.2D1)*cosh(0.5D1/t*m)*cosh(sqrt(0.10D1
/t**2*dble(25-48*del+24*del**2+24*a**2)))/0.2D1)*cosh(sqrt(0.
10D1/t**2*(0.17D2-0.8D1*sqrt(dble(1-2*del+del**2+a**2))-dble
(26*del)+dble(13*del**2)+dble(13*a**2)))/0.2D1)+0.8D1*t*exp(
0.5D1/0.2D1/t)*cosh(0.10D2/t*m)**2*cosh(0.3D1/0.2D1/t*sqrt(
dble(1-2*del+del**2+a**2)))**2-0.5D1*exp(-0.10D1/t/0.2D1)+0.
4D1*t*exp(-0.10D1/t*(-0.2D1+sqrt(dble(1-2*del+del**2+a**2)))

```

```

) * cosh(0.15D2/t*m) * cosh(sqrt(0.10D1/t**2*(0.17D2-0.8D1*sqrt(
dble(1-2*del+del**2+a**2))-dble(26*del)+dble(13*del**2)+dble
(13*a**2))))/0.2D1)+0.4D1*t*exp(-0.10D1/t*(0.1D1+sqrt(dble(1-
2*del+del**2+a**2)))) * cosh(0.5D1/t*m) * cosh(sqrt(0.10D1/t**2*
(0.17D2-0.8D1*sqrt(dble(1-2*del+del**2+a**2))-dble(26*del)+
dble(13*del**2)+dble(13*a**2))))/0.2D1)+0.8D1*t*exp(0.3D1/t)*
cosh(0.15D2/t*m) * cosh(0.5D1/t*m) * cosh(sqrt(0.10D1/t**2*dble(
25-48*del+24*del**2+24*a**2))/0.2D1)+0.4D1*t*exp(-0.3D1/0.2D
1/t) * cosh(sqrt(0.10D1/t**2*(0.17D2+0.8D1*sqrt(dble(1-2*del+d
el**2+a**2))-dble(26*del)+dble(13*del**2)+dble(13*a**2))))/0.
2D1) * cosh(sqrt(0.10D1/t**2*(0.17D2-0.8D1*sqrt(dble(1-2*del+d
el**2+a**2))-dble(26*del)+dble(13*del**2)+dble(13*a**2))))/0.
2D1)+0.8D1*t * cosh(0.5D1/t*m) **2 * cosh(sqrt(0.10D1/t**2*dble(2
5-48*del+24*del**2+24*a**2))/0.2D1)+0.8D1*t*exp(0.4D1/t) * cosh
(0.15D2/t*m) * cosh(0.10D2/t*m) * cosh(0.3D1/0.2D1/t*sqrt(dble(1
-2*del+del**2+a**2))))+0.8D1*t*exp(-0.10D1/t*(0.1D1+0.2D1*sqrt
(dble(1-2*del+del**2+a**2))))/0.2D1) * cosh(0.5D1/t*m) * cosh(sqrt
(0.10D1/t**2*dble(25-48*del+24*del**2+24*a**2))/0.2D1) * cosh(
sqrt(0.10D1/t**2*(0.17D2-0.8D1*sqrt(dble(1-2*del+del**2+a**2
))-dble(26*del)+dble(13*del**2)+dble(13*a**2))))/0.2D1)+0.8D1
*t*exp(0.10D1/t/0.2D1) * cosh(0.5D1/t*m) **2 * cosh(sqrt(0.10D1/t
**2*dble(25-48*del+24*del**2+24*a**2))/0.2D1) **2+0.4D1*t*exp
(0.10D1/t*(-0.1D1+sqrt(dble(1-2*del+del**2+a**2)))) * cosh(0.5
D1/t*m) * cosh(sqrt(0.10D1/t**2*(0.17D2+0.8D1*sqrt(dble(1-2*de
l+del**2+a**2))-dble(26*del)+dble(13*del**2)+dble(13*a**2))))
/0.2D1)+0.8D1*t*exp(0.10D1/t) * cosh(0.5D1/t*m) * cosh(0.10D2/t*
m) * cosh(0.3D1/0.2D1/t*sqrt(dble(1-2*del+del**2+a**2))))+0.16D
2*t*exp(0.3D1/0.2D1/t) * cosh(0.5D1/t*m) * cosh(sqrt(0.10D1/t**2
*dble(25-48*del+24*del**2+24*a**2))/0.2D1) * cosh(0.10D2/t*m) *
cosh(0.3D1/0.2D1/t*sqrt(dble(1-2*del+del**2+a**2))))+0.4D1*t*
exp(0.10D1/t*(0.2D1+sqrt(dble(1-2*del+del**2+a**2)))) * cosh(0
.15D2/t*m) * cosh(sqrt(0.10D1/t**2*(0.17D2+0.8D1*sqrt(dble(1-2
*del+del**2+a**2))-dble(26*del)+dble(13*del**2)+dble(13*a**2
))))/0.2D1)+0.8D1*t*exp(0.10D1/t*(0.1D1+0.2D1*sqrt(dble(1-2*d
el+del**2+a**2))))/0.2D1) * cosh(0.10D2/t*m) * cosh(0.3D1/0.2D1/t
*sqrt(dble(1-2*del+del**2+a**2)))) * cosh(sqrt(0.10D1/t**2*(0.1
7D2+0.8D1*sqrt(dble(1-2*del+del**2+a**2))-dble(26*del)+dble(
13*del**2)+dble(13*a**2))))/0.2D1)+0.8D1*t*exp(0.10D1/t*(-0.1
D1+0.2D1*sqrt(dble(1-2*del+del**2+a**2))))/0.2D1) * cosh(0.5D1/

```

```

t*m)*cosh(sqrt(0.10D1/t**2*double(25-48*del+24*del**2+24*a**2)
)/0.2D1)*cosh(sqrt(0.10D1/t**2*(0.17D2+0.8D1*sqrt(double(1-2*d
el+del**2+a**2))-double(26*del)+double(13*del**2)+double(13*a**2)
)/0.2D1)+0.8D1*t*exp(-0.10D1/t*(-0.1D1+0.2D1*sqrt(double(1-2*d
el+del**2+a**2))))/0.2D1)*cosh(0.10D2/t*m)*cosh(0.3D1/0.2D1/t
*sqrt(double(1-2*del+del**2+a**2)))*cosh(sqrt(0.10D1/t**2*(0.1
7D2-0.8D1*sqrt(double(1-2*del+del**2+a**2))-double(26*del)+double(
13*del**2)+double(13*a**2)))/0.2D1))

    write(2,*) t, chi

    nlinhas=nlinhas+1
enddo
1111 continue
close(unit=1)
close(unit=2)

end program suscept

```

Para $S = 2$ ou qualquer outro tipo de spin, o procedimento é análogo, bastando trocar as expressões de u e χ e usar sempre o arquivo de dados de entrada com os valores reduzidos D/J equivalentes aos do programa.

APÊNDICE C – Artigos publicados

- SILVA, J. B.; ALBUQUERQUE, D. F. Tricritical behavior of the spin-3/2 anisotropic Heisenberg model with Dzyaloshinskii–Moriya interaction. *Phys. A: Stat. Mech. Appl.*, v. 585, p. 12384, 2022. doi: [10.1016/j.physa.2021.126384](https://doi.org/10.1016/j.physa.2021.126384)
- SILVA, J. B.; ALBUQUERQUE, D. F. Critical properties of the spin-1 Heisenberg model with random magnetic field and Dzyaloshinskii–Moriya interaction. *Phys. B: Condens. Matter.*, v. 646, p. 414296, 2022. doi: [10.1016/j.physb.2022.414296](https://doi.org/10.1016/j.physb.2022.414296)