

Universidade Estadual de Campinas

**Soluções não homogêneas das equações de
Ginzburg-Landau em antiferromagnetos dopados**

por

Bruno Uchoa

Orientador: Prof. Dr. Guillermo Cabrera

Dissertação submetida ao Instituto de Física “Gleb Wataghin”
para a obtenção do título de Mestre em Física.

Campinas, São Paulo, Brasil

14/04/2000

Agradecimentos

Eu me sinto grato a todas as pessoas que de algum modo contribuíram para o meu trabalho. Alguns de maneira bastante direta, sem os quais eu não saberia muito bem o que fazer sempre que, por exemplo, o meu computador apresentava alguma pane. Outros tiveram grande paciência em discutir longamente comigo assuntos que poderiam trazer idéias novas para o meu problema. Devo lembrar especialmente a todos aqueles que conviveram cotidianamente comigo e que tornaram a minha vida mais confusa e menos monótona.

Agradeço também à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) pelo suporte financeiro concedido através do processo número 98/01289-2, no período de abril de 1998 até agora.

Resumo

Propomos um modelamento fenomenológico baseado na teoria de Landau que descreve o comportamento termodinâmico das ondas de densidade de carga e spin nos planos antiferromagnéticos dos óxidos de alta T_c dopados. Uma das idéias correntes, reforçada por medidas recentes de espalhamento de neutrons, é que o excesso de cargas introduzido pela dopagem se acumula sobre esses planos, levando ao aparecimento de uma superestrutura de carga não homogênea e incomensurável organizada em faixas. Partindo de argumentos de simetria, encontramos uma transição de comensurabilidade que separa a fase incompressível de baixa temperatura, onde as faixas são bem definidas, da fase de alta incomensurabilidade. O modelamento do problema com um parâmetro de ordem sobre magnetização alternada leva a uma distribuição estática de cargas na forma de multi-sólitons fracamente interagentes, no limiar de baixa temperatura e dopagem. Nessa região do diagrama de fase, as cargas se segregam fortemente na parede de Néel entre os domínios antiferromagnéticos, formando picos de concentração de carga cuja densidade é praticamente independente da dopagem. Em seguida, introduzimos um segundo parâmetro de ordem diretamente relacionado à concentração de cargas, na fase de alta temperatura. O aumento da temperatura delocaliza a distribuição de impurezas. A solução, neste caso, adquire o aspecto de uma modulação suave e altamente incomensurável, em acordo com as observações experimentais.

Abstract

We propose a phenomenological model based on the Ginzburg-Landau theory of phase transitions, that describes the thermodynamic behavior of charge and spin density waves present in *high- T_c* doped antiferromagnets. One of the current ideas, supported by recent neutron scattering measurements, is that doping introduces charge excess that accumulates on the antiferromagnetic $Cu - O$ planes, leading to a nonhomogeneous incommensurable phase of charged stripes. The Landau functional is constructed based on symmetry arguments, and we find a stripe commensurability transition that separates the low temperature incompressible phase from the high incommensurable one. Modeling the problem with a single order parameter for the staggered magnetization, leads to a soliton-like static charge distribution in the regime of low doping and temperature. In this region of the phase diagram, the charge strongly segregates into the Néel walls that appear between antiferromagnetic domains, producing charge density peaks whose amplitude is almost independent on doping concentration. Next, we introduce a second order parameter directly related to the charge distribution in the high temperature phase. By raising the temperature one delocalize this distribution. The solution obtained in this case, describes a highly incommensurable soft modulation, in agreement with experimental observations.

Conteúdo

Agradecimentos	3
Resumo	4
Abstract	5
1 Introdução	11
2 A teoria de Landau	14
2.1 Introdução	14
2.1.1 O parâmetro de ordem	16
2.2 O funcional de Landau	17
2.2.1 Aproximação de campo médio	19
2.3 A função de correlação	22
2.4 Os expoentes críticos	24
2.4.1 Leis de escala	25
2.5 O problema da inomogeneidade	27
2.6 Discussão sobre a validade da teoria de Ginzburg-Landau	28
2.6.1 O critério de Ginzburg	30
3 Indicações experimentais sobre a existência das faixas	31
3.1 Introdução	31
3.2 Observações experimentais	33
3.2.1 Espalhamento de neutrons	34
3.2.2 Evidências diretas das faixas de carga	37
3.2.3 Propriedades de transporte e supercondutividade	42

4 Aspectos formais da teoria	45
4.1 Grupos de simetria	45
4.1.1 Espaços polinomiais	47
4.1.2 A condição de Landau	48
4.1.3 Polinômios invariantes de grau n num espaço de dimensão 2	48
4.2 O invariante de Lifshitz	50
5 Fenomenologia das faixas segundo a teoria de Landau	52
5.1 Teoria de campo contínuo	52
5.1.1 Aproximação assintótica com um parâmetro de ordem	54
5.2 Formulação com um segundo parâmetro de ordem	66
5.2.1 Criticalidade das faixas	67
Conclusões	71
Apêndice	76

Lista de Figuras

3.1	À esquerda, picos de espalhamento de neutrons no espaço recíproco de uma amostra de $La_{1.48}Nd_{0.4}Sr_{0.12}CuO_4$. Os círculos sólidos maiores correspondem a picos de Bragg. Os círculos e diamantes correspondem respectivamente aos picos observados na ordem magnética e de carga. Os picos nas direções transversas (quadrados e triângulos) não são observados num mesmo plano [31]. À direita, a representação pictórica das faixas de carga correspondente ao diagrama de espalhamento.	38
3.2	Diagrama de espalhamento de neutrons numa amostra de $La_2NiO_{4.125}$. A posição dos picos é representada com respeito à base $(\sqrt{2}a, \sqrt{2}a, c)$ do espaço real rodada em 45° no plano XY. O aparecimento do pico de carga na posição $(2\epsilon, 0, 0)$ indica que as faixas se orientam diagonalmente no cristal. [32]	39
3.3	Dependência da intensidade e do esplitamento dos picos magnéticos com a temperatura no $La_2NiO_{4.125}$. Os círculos vazios representam a intensidade dos picos e os círculos cheios a intensidade integrada. Observa-se o aparecimento de alguns máximos locais de intensidade em posições comensuráveis com a rede. [33]	40
3.4	Representação pictórica dos domínios antiferromagnéticos sob uma ordem colinear de spins. As regiões mais escuras apresentam uma deficiência de spin que indica a localização das faixas. [10]	41
3.5	Padrão de espalhamento dos picos da ordem magnética (esquerda) e de carga (direita) no $La_{1.48}Nd_{0.4}Sr_{0.12}CuO_4$ sob diferentes regimes de temperatura. A temperatura crítica da ordem de carga é claramente maior que a da ordem magnética, indicando que as faixas resistem à ausência de magnetismo na amostra. Medidas subtraídas do espalhamento de fundo. [34]	41

3.6	Temperatura crítica de transição supercondutora num composto dopado de $La_{2-x-y}Nd_ySr_xCuO_4$; $y = 0.0$ (círculos vazios) e $y = 0.4$ (círculos cheios).[35]	43
5.1	Sóliton da densidade de carga $(1 - \eta)(x)$ (curva sólida) vs. $u = \frac{x}{\lambda}$ calculada para $U\lambda^2 = 1.5$ e $U\lambda^2 = 0.5$, de cima para baixo. A curva tracejada representa a distribuição complementar $\eta(x)$. O alargamento dos picos é provocado pela divergência da escala λ com o aumento da temperatura.	64
5.2	Dependência de $\mu\frac{d}{\lambda}$ (eixo vertical) com o parâmetro $U\lambda^2$.	65

Lista de Tabelas

2.1	Comparação entre os expoentes críticos da teoria de Landau em campo médio e do modelo de Ising. Os valores do modelo $2D$ são calculados exatamente; no modelo $3D$ eles são medidos em experiência. [16]	29
4.1	Características da enésima potência simetrizada de uma representação, com $n = 2, 3$, e 4 . [23]	48

Capítulo 1

Introdução

Durante algum tempo, houve grande controvérsia envolvendo o aparecimento de uma superestrutura totalmente nova nos planos de $Cu - O$ dos cupretos “high- T_c ”, detectadas a partir de intensa atividade experimental. A dependência intrínseca dessa estrutura com a dopagem e o tipo de quebra de simetria translacional que ela induz nos diagramas de espalhamento trouxe a hipótese de que se tratam de faixas de carga, imersas num antiferromagneto bidimensional formado pelos sítios de Cu^{2+} ($3d^9$). Por esse ponto de vista, as cargas representam *clusters* quase-unidimensionais de buracos que quebram ligações antiferromagnéticas entre os spins. A minimização do número total de quebras de singletos privilegia a formação de fases macroscópicas de buracos e spins segregadas. A estabilização das faixas é atribuída à repulsão de longo alcance entre os buracos.

A grande motivação de experimentais e teóricos em compreender a natureza das faixas se deve à expectativa de que elas possam introduzir algum fato novo que leve à coerência de fase supercondutora, observada nesses materiais a temperaturas surpreendentemente altas. Em outras palavras, acredita-se que as faixas sejam a chave do mecanismo supercondutor de alta temperatura.

Entretanto, vários aspectos a respeito das faixas continuam ainda obscuros. Não se tem notícia de um modelamento teórico que descreva o comportamento das modulações de spin e de carga em termos das variáveis termodinâmicas. Um dos motivos, talvez o principal deles, é que nenhuma das teorias microscópicas conhecidas parece ser capaz de abranger a todos os elementos importantes da física desse problema, que envolve ao mesmo tempo fenômenos de troca tipicamente

quânticos, numa escala microscópica, com interações de longo alcance, tratáveis no limite termodinâmico. O intervalo de estabilidade das faixas com a temperatura é também algo surpreendente. Sabe-se que em alguns materiais elas suportam temperaturas da ordem de 1000K sob uma dopagem de 10%, indicando um regime de criticalidade totalmente atípico.

O propósito deste trabalho é buscar uma descrição alternativa baseada numa teoria fenomenológica de fenômenos críticos. Para isso, lançamos mão da teoria de Landau em uma aproximação clássica de campo molecular. Apesar das limitações óbvias de uma teoria de campo macroscópico sobre um sistema de natureza microscópica, ela apresenta algumas vantagens bastante significativas. A primeira delas é a robustez e generalidade dessa teoria, que permite descrever uma variedade surpreendentemente grande de sistemas perto da região crítica. A segunda é o forte apelo intuitivo que ela exerce e que permite uma boa descrição qualitativa da transição de fase.

Esta dissertação foi organizada da seguinte forma: o capítulo 2 é uma introdução à teoria de Landau, onde se discutem os seus pressupostos e limitações como teoria de fenômenos críticos. No capítulo 3, há uma exposição sobre as observações experimentais que fundamentam a hipótese da existência de stripes nos óxidos “high- T_c ”. Os experimentos mais conclusivos são recentes, e se baseiam na interpretação de diagramas de espalhamento de neutrons lentos sobre amostras dopadas.

No capítulo seguinte retomamos o assunto da teoria de Landau, enfocando a importância das simetrias das fases sobre a forma da energia livre do sistema. No capítulo 5, desenvolvemos os cálculos da teoria aplicada ao problema das faixas.

No modelo com um parâmetro de ordem sobre a magnetização alternada, obtivemos uma expressão analítica em aproximação assintótica que descreve a modulação de spin e carga no regime estático. A solução de campo encontrada se aplica muito bem ao regime de baixa incomensurabilidade em materiais do tipo $La_{2-x-y}Nd_ySr_xCuO_2$, cuja dopagem com Nd inibe fortemente o aparecimento de flutuações na fase de Néel. A dependência da distância de separação entre os picos com a dopagem (do tipo $d \sim \frac{1}{\mu}$) concorda perfeitamente com as observações nessa região, onde a temperatura e a dopagem são moderadas ($\mu < 0.12$).

Na segunda parte do capítulo, incorporamos um segundo parâmetro de ordem na teoria visando descrever a criticalidade das faixas (altas temperaturas). O as-

pecto da solução é uma modulação de carga altamente incomensurável, de onde concluímos que o sistema sofre uma transição de comensurabilidade em um regime intermediário de temperatura.

Desenvolvemos as conclusões gerais no último capítulo da dissertação, discutindo os resultados da teoria e as limitações do tratamento de campo molecular no problema das faixas. A teoria de Landau é particularmente muito bem sucedida em materiais que exibem ferromagnetismo macroscópico. A estrutura helicoidal da parede de Bloch, que separa domínios ferromagnéticos vizinhos, é totalmente análoga à parede de Néel do caso antiferromagnético tratado a partir de um campo macroscópico clássico. Por esse motivo, incluímos no apêndice um artigo sobre o comportamento crítico da estrutura de domínios ferromagnéticos em sistemas finitos, ilustrando a aplicação da teoria de Landau num modelo de quarta ordem.

Capítulo 2

A teoria de Landau

2.1 Introdução

Embora seja grande a variedade de sistemas físicos em que se observam comportamentos críticos, todos eles apresentam semelhanças notáveis perto da transição de fase. O longo alcance das flutuações e a divergência da medida de escala (hipótese de *scaling*), típicos da criticalidade, fazem com que a física do problema independa de características microscópicas, mas de propriedades muito fundamentais e talvez por isso universais como a dimensão do sistema e as simetrias das fases.

A descrição macroscópica representa uma simplificação surpreendentemente robusta para todas as classes de sistemas até agora observados. Nesse sentido, o conceito de parâmetro de ordem é absolutamente central na formalização da teoria, uma vez que ele permite distinguir as fases entre si e, portanto, definir de algum modo a transição propriamente dita. A grande maioria dos modelos se serve do ferramental da mecânica estatística para esse fim. O parâmetro de ordem, como o critério da transição, é geralmente definido como uma variável extensível dependente das funções termodinâmicas usuais, como a entropia e a energia livre, mas também implicitamente das variáveis inextensíveis como pressão e temperatura.

Neste trabalho, vamos considerar exclusivamente o efeito da temperatura sobre o diagrama de fase dos sistemas que nos interessam. A transição de fase deve se dar, nesse caso, numa temperatura crítica T_c , na qual o sistema sofre mudanças essenciais e que se refletem muitas vezes na simetria. Ao cruzarmos T_c no sentido crescente da temperatura, o sistema abandona uma simetria qualquer e em geral se

estabiliza termodinamicamente numa fase de simetria mais alta, porém de maior entropia, necessariamente. No caso do ferromagnetismo anisotrópico, por exemplo, a temperatura de Curie delimita a fase ordenada, na qual os spins se alinham em uma direção preferencial, da fase paramagnética desordenada. Na ausência de um campo magnético externo, os spins da fase ordenada têm simetria de inversão I , que pode ser interpretada como uma dupla degenerescência do estado fundamental ferromagnético. Na fase paramagnética, a simetria da Hamiltoniana é o próprio $O(3)$ ($C_{\infty,v}$), o que significa que o estado fundamental agora tem degenerescência infinita. Esta tendência, entretanto, não é completamente geral. A mudança de estado líquido-gás é um exemplo clássico de transição que preserva a simetria das fases.

A ocorrência de degenerescências em mecânica quântica de poucos corpos leva à formação de um estado dado por uma combinação linear de estados degenerados, escritos numa base de auto-estados da Hamiltoniana. No limite termodinâmico, esse pressuposto deixa de fazer sentido, uma vez que o sistema precisaria de um tempo infinito para abandonar espontaneamente um estado de baixa energia e se estabilizar em um outro estado degenerado. Estas degenerescências representam, portanto, uma *quebra espontânea de simetria*, uma vez que o sistema escolhe arbitrariamente um estado degenerado para se estabilizar, adotando uma simetria mais baixa que a da sua Hamiltoniana. Pensando em termos da mecânica estatística, esse comportamento parece contraditório com o princípio da média de ensemble, que deveria ser capaz de prever no limite clássico o estado de mais baixa energia. Existem duas considerações que se podem fazer a respeito. Na verdade, nenhum desses sistemas em que se observa a quebra espontânea de simetria satisfaz a condição de ergodicidade, segundo a qual o intervalo da medida deve ser comparável ao tempo necessário para o sistema percorrer todo o espaço de fase. A evolução no espaço de configuração é muito mais consistente com a descrição de um sistema caótico que propriamente de um ensemble puramente estocástico com pesos estatísticos. O sistema parece restringir o espaço de fase a uma região com um único pólo atrator correspondente ao estado degenerado “escolhido”, tornando a estabilização em uma outra região altamente improvável, no limite termodinâmico. Deste modo, o estado fundamental não carrega consigo o grupo de simetria total da Hamiltoniana, o que na ausência de flutuações gera um estado assimétrico [1].

A importância das simetrias no estudo das transições de fase foi observada ori-

ginalmente por Landau. As transições se dividem basicamente entre dois tipos. Elas são contínuas ou de segunda ordem se as fases correspondentes forem indistinguíveis uma da outra no ponto crítico. Do contrário, a transição é descontínua ou simplesmente de primeira ordem. Uma transição de segunda ordem exige que as variáveis termodinâmicas extensíveis do sistema como entropia, energia e volume se comportem continuamente no ponto crítico. A ausência de calor latente é característica desse tipo de transição, que é frequentemente observada em sistemas *high- T_c* . Por outro lado, Landau aponta para a necessidade de que a transição, neste caso, ocorra entre fases de simetrias distintas. Do contrário, não seria possível caracterizar um parâmetro de ordem e portanto a própria transição em si, uma vez que as fases seriam completamente indistinguíveis.

Há duas consequências importantes da quebra de simetria. A primeira delas é a assinatura da transição dada pelo grupo de simetria do parâmetro de ordem da fase ordenada. Esta característica formaliza o conceito fundamental de que as transições de fase têm uma natureza discreta, no sentido de que não é possível mudar de fase imperceptivelmente, mesmo em transições de segunda ordem. O argumento é um teorema básico da física do estado sólido, que proíbe variações contínuas da simetria [1]. A segunda consequência é o aparecimento de modos de excitação coletivos e flutuações, que quebram a degenerescência da Hamiltoniana.

2.1.1 O parâmetro de ordem

A idéia mais central e genérica da teoria de fenômenos críticos é o conceito de parâmetro de ordem. Essencialmente, ele distingue as fases uma da outra incorporando a simetria do Hamiltoniano, que é caracterizada pela degenerescência do estado fundamental em cada região do diagrama de fase.

Vamos definir uma função extensiva $\Theta \equiv \Theta(T, h)$ dependente da temperatura e de uma variável termodinâmica externa h (no sentido de não constituir uma propriedade do sistema), que será chamada de conjugado termodinâmico de Θ . Esta variável é definida formalmente através da energia livre de Gibbs, como $\Theta = -\frac{\partial G}{\partial h}$. O parâmetro de ordem Θ de um sistema próximo da criticalidade deve satisfazer a duas condições essenciais: a primeira delas é que $\Theta(T, 0) = 0$ para $T > T_c$; a segunda, que $\Theta(T, h)$ possa ser escrito em termos de uma função densidade $\varphi(\mathbf{r}, T, h)$,

$$\Theta = \left\langle \int Dr \varphi(\mathbf{r}) \right\rangle \quad (2.1)$$

cuja média de ensemble descreva a configuração associada ao estado termodinâmico globalmente mais estável para algum funcional $\varphi_o(\mathbf{r}) \equiv \langle \varphi(\mathbf{r}) \rangle$. Dado que o ensemble é um invariante translacional, podemos escrever simplesmente que $\Theta = \int Dr \langle \varphi(\mathbf{r}) \rangle$. A primeira condição exige que o parâmetro de ordem se anule espontaneamente na fase de alta temperatura, enquanto a outra impõe que Θ seja o único grau de liberdade relevante para a descrição do sistema perto da transição de fase. Consequentemente, $\Theta(T, 0)$ tende a zero *continuamente* à medida que $T \rightarrow T_c$, numa transição de segunda ordem.

Para $h \neq 0$, o parâmetro de ordem é não nulo na fase $T > T_c$. A razão disso é que h modifica drasticamente o estado fundamental do sistema. No caso magnético, o conjugado termodinâmico da magnetização é o campo magnético aplicado. Na presença deste campo, a fase paramagnética é ordenada e o parâmetro de ordem tem módulo diferente de zero. O estado fundamental da fase ferromagnética sofre uma quebra de degenerescência que se estende para a fase de alta simetria.

2.2 O funcional de Landau

Vamos admitir um sistema em que $h \sim 0$, de modo que o módulo do parâmetro de ordem possa ser considerado suficientemente pequeno em uma região perto da temperatura crítica. A idéia é construir uma densidade de energia expandida numa série de potências em termos da densidade do parâmetro de ordem. φ no caso é um campo macroscópico que descreve toda a física do problema perto da transição, a menos de flutuações de alcance menor que um certo comprimento ξ . Esta medida define o vetor de onda de corte $\Lambda \sim \frac{1}{\xi}$ para as componentes de Fourier de $\varphi(\mathbf{r})$. Assumindo que as distâncias em que a densidade do parâmetro de ordem varia sejam maiores que ξ , que por sua vez é muito maior que a escala microscópica definida pelo parâmetro de rede, vamos escrever a função de partição do sistema na forma

$$Q(T, h) = e^{-G(T, h)/kT} = C \int D\varphi e^{-E(\varphi, h)} , \quad (2.2)$$

com $G(T, h)$ a energia livre de Gibbs e E a Hamiltoniana efetiva do problema normalizada por kT . A integral em $D\varphi$ varre todo o espaço de configurações do parâmetro de ordem. Escrevendo a energia em termos de uma função densidade

$$E(\varphi, h) = \int Dr f(\varphi, \mathbf{h}) , \quad (2.3)$$

definimos o funcional de Landau f .

Em um campo contínuo, a estabilidade termodinâmica das soluções não homogêneas depende da competição entre um termo “cinético”, em geral na forma de um gradiente quadrático, e a interação de um potencial não local. A forma da “energia livre de Landau” $f(\varphi(\mathbf{r}), \mathbf{h})$ para um campo de n componentes num espaço de dimensão genérica é

$$\int Dr \sum_j^n (\chi(\varphi)(\nabla \varphi_j)^2) + U(\varphi, \mathbf{h}) . \quad (2.4)$$

A idéia é assumir que $U(\varphi)$ possa ser expandido numa série polinomial das n componentes de φ_i , conservando a simetria do parâmetro de ordem.

Uma vez que h é pequeno, podemos restringir a interação do campo conjugado com o sistema a um termo de ordem 1 na expansão de U (resposta linear). Dado isto e a relação geral $\Theta_i = -\frac{\partial G}{\partial h_i}$, pode-se deduzir de (2.2) e (2.3) que:

$$U(\varphi, \mathbf{h}) = U(\varphi) - \frac{1}{kT} \varphi \cdot \mathbf{h} . \quad (2.5)$$

No caso específico de um campo escalar, o funcional pode ser desenvolvido na forma

$$f(\varphi(\mathbf{r}), h(\mathbf{r})) = a_o |\nabla \varphi(\mathbf{r})|^2 - \frac{1}{kT} \varphi(\mathbf{r}) h(\mathbf{r}) + \sum_{i=2}^{\infty} a_i \varphi^i(\mathbf{r}) . \quad (2.6)$$

O termo de primeira ordem da expansão é em geral atribuído à interação do campo com h . Os coeficientes a_n são parâmetros fenomenológicos que dependem exclusivamente da temperatura. Vamos em breve fundamentar esses coeficientes um pouco melhor.

Do ponto de vista da simetria, podemos desde já fazer algumas considerações importantes. Pensando num modelo de Ising (campo escalar), a ausência de campos externos provoca uma dupla degenerescência no estado de energia mais baixa. Isto

quer dizer que a densidade de energia do problema é uma função par. Nesse caso, todos os coeficientes de ordem ímpar da expansão do funcional (2.6) são iguais a zero. Em sistemas com simetrias mais complexas e que utilizam dois ou mais parâmetros de ordem com várias componentes cada um, a eliminação dos termos com simetria incompatível não é tão evidente. Este assunto será tratado com mais detalhe no capítulo 4.

2.2.1 Aproximação de campo médio

A grande dificuldade dos modelos estatísticos exatamente solúveis é calcular a função de partição do sistema. No caso da teoria de Landau, a dificuldade não é diferente, uma vez que o problema consiste em encontrar a energia livre de Gibbs a partir da integral no espaço de configurações da densidade do parâmetro de ordem.

Segundo a mecânica estatística, a condição de estabilidade termodinâmica de um sistema genérico depende de que a sua energia livre seja mínima. Perto da região crítica, a energia livre de Gibbs é uma função estritamente de $\boldsymbol{\varphi}$ e \mathbf{h} . Rigorosamente falando, a configuração do sistema mais provável é aquela que minimiza $G(\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{h})$. Isto quer dizer que a solução de campo que descreve o estado fundamental depende do cálculo variacional $\delta \int D\boldsymbol{\varphi} e^{-E(\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{h})/kT} = 0$ com respeito a $\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{r})$, o que envolve um problema de complexidade considerável, não exatamente solúvel na grande maioria dos casos. Este cenário pode ser drasticamente simplificado se utilizarmos uma *aproximação de ponto de sela* para o cálculo. Ela consiste em tomar o valor máximo do integrando e consequentemente o mínimo de $E(\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{h})$. A solução do problema agora passa a ser encontrar uma configuração $\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{r})$ tal que

$$\delta \int D\mathbf{r} f(\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{r}), \mathbf{h}) = 0 . \quad (2.7)$$

Nesta aproximação, o funcional de Landau deverá satisfazer a equação generalizada de Euler-Lagrange, levando-se em conta todos os vínculos do sistema.

Para fins práticos, a aproximação de campo médio significa tomar a expressão da energia livre pela da Hamiltoniana. Vamos considerar um campo escalar com simetria de inversão, livre de vínculos ou condições de contorno. Esse é exatamente o caso de um sistema de spins infinito com parâmetro de ordem M (Ising). Claramente, a configuração mais favorável em energia é uma solução de campo homogênea com $\overline{\varphi} \equiv \langle \varphi(\mathbf{r}) \rangle$ constante. Na ausência de campo magnético externo,

a energia livre é simétrica com respeito à inversão simultânea de todos os spins. Isto quer dizer que $f(\varphi(\mathbf{r}), T, 0)$ é par e pode ser escrita suficientemente perto de T_c como:

$$f(\varphi, T, 0) = \sum_{j=0}^{\infty} a_{2j}(T) \bar{\varphi}^{2j} \quad (2.8)$$

Os coeficientes a_{2j} são funções da temperatura. Eles podem ser expandidos em série de Taylor em torno de $T = T_c$,

$$a_{2j} = \sum_{k=0}^{\infty} a_{2j,k} (T - T_c)^k . \quad (2.9)$$

A energia livre de Helmholtz $A(m, 0) \sim E(m, 0)$ em aproximação de campo médio. No caso homogêneo, esta relação pode ser estendida para as funções densidade correspondentes. Partindo de uma das relações de Maxwell,

$$h = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial A}{\partial \bar{\varphi}} \right)_T = \sum_{j=0}^{\infty} 2j a_{2j}(T) \bar{\varphi}^{2j-1} = 2 a_2(T) \bar{\varphi} + 4 a_4(T) \bar{\varphi}^3 + \dots = 0 . \quad (2.10)$$

Notando que $\left(\frac{\partial h}{\partial \bar{\varphi}} \right)_T = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial^2 A}{\partial \bar{\varphi}^2} \right)_T$, o inverso da susceptibilidade isotérmica pode ser obtido de

$$\frac{1}{\chi_T} = \frac{1}{V^2} \left(\frac{\partial^2 A}{\partial \bar{\varphi}^2} \right)_T = \sum_{j=1}^{\infty} 2j(2j-1) a_{2j}(T) \bar{\varphi}^{2j-2} = 2 a_2(T) + 12 a_4(T) \bar{\varphi}^2 + \dots . \quad (2.11)$$

Espera-se que a susceptibilidade χ_T divirja na temperatura crítica para campo zero ($h = 0$). Uma vez que o parâmetro de ordem $\Theta \rightarrow 0$ quando $T \rightarrow T_c$ (transição de segunda ordem), então $a_{2,0} = 0$. Este resultado quer dizer que o coeficiente do termo de ordem 2 na expansão da energia livre (2.8) pode ser escrito em primeira ordem como:

$$a_2(T) = a(T - T_c) , \quad (2.12)$$

com $a = a_{2,1}$ constante.

Por definição, a densidade do parâmetro de ordem estabiliza a fase desordenada em $\varphi = 0$ ($h = 0$). Ela pode ser redefinida em termos dos parâmetros fenomenológicos da energia livre como um conjunto de graus de liberdade φ_i que requer a positividade para $T > T_c$ de todos os coeficientes $a_j(T)$ não nulos, condição necessária para que $\varphi = 0$ corresponda de fato ao mínimo de $f(\varphi)$ na temperatura crítica. Além disso, é necessário que pelo menos um coeficiente mude de sinal em T_c , para que a fase ordenada tenha φ diferente de zero. Usualmente, considera-se a existência de um único coeficiente ímpar em T na expansão, de modo a evitar o aparecimento de transições singulares, em que pequenas flutuações de pressão geram mudanças na simetria das fases. Uma discussão desse aspecto da teoria pode ser encontrada em Tolédano [37].

Considerando portanto que o termo de segunda ordem seja o único a se anular em T_c , chegamos à conclusão que a constante a da equação (2.12) é positiva e que todos os outros coeficientes a_j de ordem superior são, em primeira aproximação, constantes também positivas.

Vamos restringir a expansão (2.8) até o termo de quarta ordem (modelo φ^4). Voltando à equação (2.9) e substituindo em (2.10), obtemos o valor do módulo de Θ que estabiliza as fases (ou seja, $\left(\frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2}\right)_{\bar{\varphi}} > 0$) em primeira ordem com a temperatura,

$$\Theta = \begin{cases} V \sqrt{\frac{a}{2a_{4,0}}} (T_c - T)^{\frac{1}{2}} & T < T_c \\ 0 & T > T_c . \end{cases} \quad (2.13)$$

Substituindo o resultado acima em (2.11), temos a expressão da susceptibilidade isotérmica,

$$\chi_T^{-1} = \begin{cases} 4a (T_c - T) & T < T_c \\ 2a (T - T_c) & T > T_c . \end{cases} \quad (2.14)$$

Abaixo de T_c , o termo de segunda ordem compete com o termo de ordem quatro, estabilizando Θ . Em $T = T_c$, a_2 muda de sinal e o estado fundamental do sistema recai sobre a solução trivial $\varphi \equiv 0$ na fase adjacente.

A presença de campos externos é equivalente ao efeito de uma força generalizada que modifica as condições de estabilidade e a simetria das fases, quebrando as degenerescências do parâmetro de ordem. Esse efeito é bastante claro, pensando nas consequências de um termo linear na expansão da energia livre sobre os parâmetros fenomenológicos. Sob o aspecto da simetria, ele viabiliza o aparecimento dos termos

de ordem ímpar, reduzindo o grupo de simetria da fase ordenada. Nesse caso, a solução $\varphi \equiv 0$ obviamente não satisfaz ao mínimo de f para $T > T_c$.

O modelo φ^4 é o mais simples a prever um comportamento estável para a fase ordenada. Nos modelos φ^6 e φ^8 , o sistema se desmembra em estados metaestáveis na parafase ($T > T_c$), mas que não oferecem nenhuma informação adicional ao estado fundamental [38].

2.3 A função de correlação

Vamos considerar o efeito das flutuações sobre o parâmetro de ordem na teoria de Landau. A medida dessas flutuações é dada por $\Delta(\mathbf{r}) \equiv \varphi(\mathbf{r}) - \langle \varphi(\mathbf{r}) \rangle$. À temperatura zero, um sistema hipotético qualquer deve repousar no seu estado fundamental quântico. O aumento da temperatura provoca excitações cujo efeito é aumentar a desordem e reduzir o módulo da densidade do parâmetro de ordem, uma vez que ele é dado pelo somatório das contribuições microscópicas calculado numa bola de raio da ordem de ξ (comprimento de correlação). A função de correlação é definida a partir das flutuações como

$$\Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \Delta(\mathbf{r}) \Delta(\mathbf{r}') \rangle . \quad (2.15)$$

Ela mede o grau de interdependência da densidade do parâmetro de ordem nas posições \mathbf{r} e \mathbf{r}' , o que num certo sentido é a medida do grau de influência de uma perturbação localizada num ponto sobre um outro ponto do sistema. Esta interpretação fica bastante clara se reescrevermos (2.15) na forma:

$$\Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \varphi(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}') \rangle - \langle \varphi(\mathbf{r}) \rangle \langle \varphi(\mathbf{r}') \rangle , \quad (2.16)$$

que é análoga ao critério estatístico que avalia a independência entre duas variáveis aleatórias.

O parâmetro de ordem é sempre uma grandeza observável e por isso ele é real. A sua função densidade, no entanto, nem sempre, como no caso supercondutor. Vamos assumir uma teoria clássica, onde $\varphi(\mathbf{r})$ é real. O cálculo da função de correlação pode ser feito, percebendo que uma perturbação sobre o campo conjugado $h(\mathbf{r}) \longrightarrow h(\mathbf{r}) + \delta h(\mathbf{r})$ num sistema com Hamiltoniana $E = E_o(\varphi, T) - \int D\mathbf{r} \varphi(\mathbf{r}) h(\mathbf{r})$

induz uma flutuação sobre $\varphi(\mathbf{r}) \longrightarrow \varphi(\mathbf{r}) + \delta\varphi(\mathbf{r})$, cuja medida é dada em primeira ordem por

$$\delta \langle \varphi(\mathbf{r}) \rangle = \delta \frac{\text{Tr} [\varphi(\mathbf{r}) e^{-E/kT}]}{\text{Tr} [e^{-E/kT}]} = \frac{1}{kT} \int D\mathbf{r}' \Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \delta h(\mathbf{r}') . \quad (2.17)$$

Este resultado é bem conhecido pela física estatística [16]. Introduzindo o funcional de Landau f da teoria φ^4 e tomando o variacional, temos

$$[2a_2 + 12a_4 \langle \varphi(\mathbf{r}) \rangle^2 - 2a_o \nabla^2] \delta \langle \varphi(\mathbf{r}) \rangle = \delta h(\mathbf{r}) + h(\mathbf{r}) \delta \langle \varphi(\mathbf{r}) \rangle . \quad (2.18)$$

Para uma transição de segunda ordem, é preciso tomar o limite de $h(\mathbf{r}) \longrightarrow 0$. Substituindo (2.17) em (2.18),

$$\int D\mathbf{r}' \{ [2a_2 + 12a_4 \langle \varphi(\mathbf{r}) \rangle^2 - 2a_o \nabla^2] \delta \Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - kT \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \} \delta h(\mathbf{r}') = 0 , \quad (2.19)$$

para qualquer incremento $\delta h(\mathbf{r}')$. Isto quer dizer que o integrando entre parênteses vale zero, e portanto

$$[2a_2 + 12a_4 \langle \varphi(\mathbf{r}) \rangle^2 - 2a_o \nabla^2] \delta \Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = kT \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') . \quad (2.20)$$

Basta substituir o valor de $\langle \varphi(\mathbf{r}) \rangle$ e calcular a função de correlação. No caso de sistemas homogêneos ou de sistemas inomogêneos mas que preservam o módulo de φ constante (por exemplo, num ferromagneto organizado em domínios), $\langle \varphi(\mathbf{r}) \rangle = \frac{\Theta}{V}$ é extraído diretamente da equação (2.13). A função de correlação prevista pela teoria de Landau para esses sistemas (dimensão d) é

$$\Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{kT}{8\pi a_0} \frac{e^{-|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^{\frac{1}{\xi}}}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{d-2}} , \quad (2.21)$$

com

$$\xi(T) = \begin{cases} \sqrt{\frac{a_0}{2a}} (T_c - T)^{-\frac{1}{2}} & T < T_c \\ \sqrt{\frac{a_0}{a}} (T_c - T)^{-\frac{1}{2}} & T > T_c . \end{cases}$$

definindo o comprimento de correlação em termos dos parâmetros fenomenológicos. Do ponto de vista físico, esta expressão faz sentido quando as distâncias $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ são maiores que ξ . O campo macroscópico que define a densidade do parâmetro de ordem é construído localmente através de uma média de ensemble numa região onde

o comportamento microscópico do sistema é essencialmente regido pelas flutuações térmicas. O raio dessa região é da ordem do comprimento de correlação. Do ponto de vista de $\varphi(\mathbf{r})$, portanto, ξ define a escala do sistema, à medida em que ele corresponde à menor distância que o campo macroscópico é capaz de “enxergar”. Além disso, ξ diverge na temperatura crítica. A conclusão mais importante que se extrai deste comportamento é que o alcance das flutuações aumenta com a temperatura e no limite $T \rightarrow T_c$ ele se estende sobre todo o sistema com a mesma rapidez com que o módulo do parâmetro de ordem tende a zero. Uma outra interpretação possível, é que o sistema sofre de invariância de escala no ponto crítico (hipótese de *scaling*).

2.4 Os expoentes críticos

O aumento do comprimento de correlação é equivalente a uma renormalização na escala do sistema, uma vez que o parâmetro de ordem é por hipótese o único grau de liberdade relevante na transição de fase e ξ é a menor distância em que φ é capaz de detectar uma interação. Kadanoff *et al* [16] sugere o reescalonamento de modelos de Ising através da idéia de transformação de blocos de spin, em que cada bloco interage com os outros blocos como se fosse um spin cujo módulo é o spin médio do bloco.

Esse procedimento faz bastante sentido perto da região crítica, onde a correlação é regida essencialmente pelas flutuações de comprimento de onda longo ($\lambda > \xi$), e não pelas características microscópicas do sistema. Este argumento justifica em grande parte o caráter universal das transição de fase, que permite agrupar sistemas aparentemente bastante diversos em *classes de universalidade*. O critério que permite classificar as similaridades entre esses sistemas é baseado num conjunto de índices conhecidos como *expoentes críticos*, genericamente definidos através do limite

$$\mu = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\ln g(t)}{\ln |t|} , \quad (2.22)$$

envolvendo uma variável termodinâmica g qualquer e o parâmetro crítico $t \equiv \frac{T-T_c}{T_c}$. A idéia é que dois sistemas físicos com o mesmo conjunto de expoentes críticos pertençam à mesma classe de universalidade, mesmo que as grandezas envolvidas

nos dois sistemas difiram em várias ordens de grandeza, um em relação ao outro. Dentro de uma certa aproximação, o conceito pode ser estendido para uma bola centrada em T_c ($|t| \ll 1$), assumindo que $\mu \sim \frac{\ln g(t)}{\ln |t|}$, ou seja, $g(t) \sim |t|^\mu$.

Os dados experimentais disponíveis nas transições de fase são medidas da dependência da capacidade térmica, do parâmetro de ordem, da susceptibilidade e de outras variáveis extensíveis com t . Dada a magnitude e o alcance das flutuações sobre a amostra, a única informação significativa sobre a transição de fase é a lei de decaimento dessas grandezas com o parâmetro crítico t .

As funções termodinâmicas mensuráveis podem ser parametrizadas dentro da aproximação crítica através desses expoentes. Dentro desse espírito, a capacidade térmica $C = T \frac{\partial^2 G}{\partial T^2}$ tem uma parte singular proporcional a $|t|^{-\alpha}$, a susceptibilidade $\chi = \frac{1}{V} \frac{\partial \langle \varphi \rangle}{\partial h} \sim |t|^{-\gamma}$, e o parâmetro de ordem $\Theta \sim |t|^\beta$ com $h = 0$ e $\Theta \sim |t|^{-\frac{1}{\delta}}$ para $t = 0$. Por sua vez, a função de correlação pode ser escrita como:

$$\Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{r}')_{t \rightarrow 0} \longrightarrow |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-p} e^{-|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{\frac{1}{\xi}}}, \quad (2.23)$$

onde p é definido pela literatura como $d - 2 + \eta$ e $\xi \sim |t|^{-\nu}$. Este conjunto de índices gregos define cada uma das possíveis classes de universalidade entre os sistemas críticos. Ele depende de um modo essencial da dimensão do sistema e do grupo de simetria espacial do parâmetro de ordem.

2.4.1 Leis de escala

Partindo da hipótese de *scaling*, enunciada na seção 2.3, a manifestação do efeito da temperatura sobre um sistema pode ser simplificada a um problema de escala, fixada pelo comprimento de correlação. Uma simples análise dimensional das variáveis termodinâmicas permite relacionar os expoentes críticos entre si e com isso reduzir o número de graus de liberdade de cada conjunto de escalares que define uma classe.

A formalização desta hipótese exige que todas as funções termodinâmicas e equações de estado sejam funções homegêneas, ou seja, que

$$g(b^{D_t} t, b^{D_h} h) = b^{D_g} g(t, h) .$$

Ao invés de partir por este caminho, vamos tomar um atalho. A densidade de energia livre normalizada por kT , $g = \frac{G}{V k T}$, tem dimensão de $[\text{comprimento}]^{-d}$.

Assim, $[g] = L^{-d}$. A função de correlação normalizada conforme a equação (2.23) têm dimensão de $L^{d-2+\eta}$, que por definição é a mesma de $[\langle\varphi\rangle^2]$. Consequentemente, se $L \sim |t|^{-\nu}$, então

$$-\nu(d-2+\eta) = 2\beta . \quad (2.24)$$

Prosseguindo nessa linha, a susceptibilidade pode ser obtida em termos da função de correlação, impondo h constante. Dividindo o incremento $\delta \langle\varphi(\mathbf{r})\rangle$ de (2.17) por δh e tomando o limite,

$$\chi(\mathbf{r}) = \frac{1}{kT} \int D\mathbf{r}' \Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{r}') . \quad (2.25)$$

Este resultado é chamado de *teorema da flutuação dissipação*. A dimensão da susceptibilidade normalizada é $[kT\chi] = L^{\eta-2} \sim |t|^{-\gamma}$, de onde sai a lei de escala

$$\gamma = \nu(2-\eta) . \quad (2.26)$$

Tomando a derivada segunda da energia de Gibbs normalizada, $C \propto \frac{\partial^2 g}{\partial T^2} \sim |t|^{\nu d-2} \sim |t|^{-\alpha}$. Além disso, $[\frac{h}{kT}] = [\frac{g}{\langle\varphi\rangle}] = L^{-d+\beta} \sim |t|^{-\beta\gamma}$. As duas últimas relações são:

$$\nu d = 2 - \alpha , \quad (2.27)$$

conhecida como a lei de Fisher, e

$$2\beta\gamma = \nu(2+d-\eta) . \quad (2.28)$$

Observando que há no total seis expoentes críticos, $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \eta$ e ν , relacionados através de quatro equações L.I., basta calcularmos 2 deles quaisquer para encontrar os demais. Olhando para a expressão do módulo do parâmetro de ordem e da susceptibilidade calculadas numa amostra infinita (equações (2.13) e (2.14)), vemos que $\beta = \frac{1}{2}$ e $\gamma = 1$, de onde obtemos que $\alpha = 0$, $\delta = 3$, $\eta = 0$ e $\nu = \frac{1}{2}$. Estes valores são conhecidos como *expoentes críticos clássicos*, talvez por serem os mais antigos.

2.5 O problema da inomogeneidade

Na grande maioria dos sistemas reais, a densidade do parâmetro de ordem é um funcional que varia localmente com a posição. Esses sistemas são em geral finitos e apresentam algum tipo de anisotropia. Sob o ponto de vista da teoria, o aparecimento das inomogeneidades nas soluções de campo é uma consequência das condições de contorno e da geometria da variedade, possivelmente aliadas a alguma assimetria espacial que se reflete sobre o grupo de simetria do parâmetro de ordem.

Alguns sistemas acabam formando domínios, que são regiões finitas onde $\varphi(\mathbf{r})$ é praticamente uniforme. A inomogeneidade desse tipo de solução aparece concentrada na região de parede entre dois domínios vizinhos (parede de Bloch). No caso ferromagnético (tratado originalmente por Landau e Lifshitz [19]), existe uma competição entre a anisotropia uniaxial que privilegia a orientação dos spins em uma direção, representada no funcional de Landau pelo termo de segunda ordem

$$\alpha (m_x^2 + m_y^2) + \beta (m_z^2) ,$$

e a condição de contorno na interface do sistema (finito) em aproximação de campo fraco, que exige que as linhas de \mathbf{m} fiquem confinadas dentro do corpo. Dada a condição global de fluxo fechado, traduzida localmente por $\nabla \cdot \mathbf{m} = 0$, os spins tendem a se estabilizar termodinamicamente numa configuração que atende à condição de contorno (formação de domínios vizinhos em antifase) mas que minimiza a extensão das regiões de parede, uma vez que a interação de troca entre os spins

$$(\nabla m_x)^2 + (\nabla m_y)^2 + (\nabla m_z)^2 ,$$

aumenta o custo energético das variações da magnetização em todo o sistema. A competição gera uma ordem espiral na parede de Bloch, indicando que a variação do campo $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ entre dois domínios vizinhos é suave. A estabilização do módulo da magnetização espontânea, dentro do contexto da teoria de Landau, requer ainda a presença de um termo de quarta ordem que contenha o grupo de simetria do termo de ordem mais baixa. A análise do comportamento crítico desse sistema foi incluída no apêndice, na forma de um artigo.

Ao que tudo indica, o comportamento dos domínios com a temperatura é um caso a parte ao que se sabe da física de interfaces rígidas em filmes finos, considerando desde já que a contribuição predominante em energia está concentrada na

região de parede e não no interior dos domínios. Um bom indício da importância das regiões de parede é a divergência, no ponto crítico, do calor específico calculado pela teoria de Landau na aproximação de campo médio.

O aspecto mais intrigante, no entanto, são os valores dos expoentes críticos que definem a classe de universalidade dos sistemas ferromagnéticos finitos (baixa anisotropia). Os valores calculados no apêndice são: $\alpha = \frac{1}{4}$, $\beta = \frac{1}{2}$, $\gamma = \frac{3}{4}$, $\nu = \frac{7}{12}$, $\delta = \frac{5}{2}$ e $\eta = \frac{5}{7}$. A diferença em relação ao comportamento típico do calor específico em interfaces ($\alpha = \frac{1}{2}$) pode ser explicada pela dependência da largura dos domínios com a temperatura. A física do problema, entretanto, é regida pelo comportamento crítico da largura das paredes λ . Ela representa a escala do sistema para esse tipo de inhomogeneidade, fazendo um papel análogo ao do comprimento de correlação. É por esse motivo que a criticalidade dos sistemas organizados em domínios é dominada pelas contribuições em energia dos termos de superfície e interface, quando $\lambda \rightarrow \infty$ à medida em que t vai a zero.

2.6 Discussão sobre a validade da teoria de Ginzburg-Landau

A teoria introduzida neste capítulo é uma ferramenta poderosa para a compreensão do comportamento crítico. Uma das vantagens óbvias sobre as demais teorias é que ela permite descrever as principais propriedades físicas do sistema perto da transição de fase sem mencionar nenhum modelo microscópico. Além de geral, ela é também bastante robusta, uma vez que é fundamentada por argumentos gerais de simetria e pelo conceito de parâmetro de ordem, que permite em última análise uma descrição qualitativa bastante satisfatória.

Por outro lado, a aplicabilidade da teoria fora da aproximação de campo médio é bastante limitada, já que o cálculo da função de partição do sistema em uma aproximação não gaussiana é uma tarefa de complexidade considerável.

A própria aproximação de campo médio apresenta problemas. Em particular, ela invalida a expansão (2.6) em sistemas cujo calor específico $C = T \frac{\partial^2 A}{\partial T^2}$ diverge em T_c , como é o caso do modelo de Ising bidimensional [28]. Um outro problema é o grau de concordância dos expoentes críticos previstos pela teoria com os valores experimentais.

Os resultados teóricos da teoria clássica representam uma aproximação grosseira da realidade. A razão disso pode ser encontrada facilmente. Ao postularmos que a física do problema pode ser escrita através de um campo macroscópico calculado por uma média local numa região onde as distâncias são menores que o comprimento de correlação, ignoramos todas as flutuações microscópicas, que na criticalidade adquirem uma importância fundamental.

Esta limitação restringe o uso da teoria de Landau a uma região do diagrama de fase. Há portanto uma temperatura limite, acima da qual as flutuações se tornam excessivamente importantes para serem ignoradas, invalidando as soluções de campo para a densidade do parâmetro de ordem.

Existem indicações experimentais de que a teoria molecular (campo médio) é correta em sistemas ferromagnéticos até valores pequenos de t , da ordem de 10^{-2} . No antiferromagnetismo, o alcance da interação de troca é sensivelmente menor, o que deve implicar num intervalo de validade mais restrito, com t maior que algo da ordem de 10^{-1} . Em materiais cujas interações são ao contrário de longo alcance, como por exemplo em ferroelétricos, esse intervalo pode se estender até $|t| \sim 10^{-3}$ [16].

	Landau	Ising- 2D	Ising- 3D
α	0	0	0.0 - 0.25
β	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$	0.313 ± 0.004
γ	1	$\frac{7}{4}$	1.250 ± 0.001
η	0	$\frac{1}{4}$	0.056 ± 0.008
δ	3	15	5.2 ± 0.15
ν	$\frac{1}{2}$	1	0.643 ± 0.0025

Tabela 2.1: Comparação entre os expoentes críticos da teoria de Landau em campo médio e do modelo de Ising. Os valores do modelo 2D são calculados exatamente; no modelo 3D eles são medidos em experiência. [16]

2.6.1 O critério de Ginzburg

Uma maneira de avaliar quantitativamente a importância das flutuações sobre a densidade do parâmetro de ordem consiste em comparar a magnitude delas ao longo de uma distância ξ com o valor do módulo de $\langle \varphi(\mathbf{r}) \rangle$ neste intervalo. Podemos aferir $|\langle \varphi(\mathbf{r}) \rangle|$ pela média a partir da relação (2.13), com $T < T_c$. A validade da teoria exige que a medida das flutuações seja pequena em comparação com a magnitude do parâmetro de ordem, isto é

$$\frac{\Gamma(\xi)}{\bar{\varphi}^2} \sim \frac{\xi^{2-d}}{-a_2/a_4} \ll 1. \quad (2.29)$$

Dado que $\xi = \left(-\frac{2a_2}{a_0}\right)^{-1/2}$ e $a_2 = at$, temos o *critério de Ginzburg* em campo médio,

$$\frac{a_4}{a_0} \left[\frac{a}{a_0} |t| \right]^{\frac{d-4}{2}} \ll 1. \quad (2.30)$$

É extremamente interessante notar que para $d \geq 4$ essa condição pode ser satisfeita para qualquer t , incluindo o limite $t \rightarrow 0$. De acordo com o diagnóstico que demos na seção anterior para a causa das discrepâncias entre as previsões da teoria de campo médio e as experiências, deveríamos esperar que os expoentes críticos concordassem entre eles num sistema hipotético de dimensão 4. Este parece ser o caso. A determinação desses expoentes através do cálculo da função de partição, em aproximação Gaussiana, mostra que eles coincidem exatamente com os expoentes críticos clássicos para $d = 4$. Os detalhes desse cálculo podem ser encontrados em Huang [14].

O aumento do número de coordenação diminui a importância efetiva das flutuações sobre $\varphi(\mathbf{r})$. A falha da aproximação de campo médio nos sistemas reais, que consiste em negligenciar flutuações de pequeno comprimento de onda, pode ser contornada com o aumento da dimensionalidade do sistema. Pode-se observar um bom indício desta tendência, notando que a concordância do modelo de Ising-3D com a teoria de Landau é substancialmente maior que no modelo de Ising de dimensão 2. Apesar de “tosca”, a aproximação não deve ser subestimada, pois ela ainda assim oferece uma valiosa descrição qualitativa do comportamento crítico do sistema.

Capítulo 3

Indicações experimentais sobre a existência das faixas

3.1 Introdução

A supercondutividade de altas temperaturas é um fenômeno bastante intrigante e ainda não explicado conclusivamente por nenhuma teoria microscópica. A forte dependência do caráter supercondutor desses materiais com o nível de dopagem, incluindo a temperatura de transição supercondutora T_c , acima da qual o material exhibe comportamento isolante, indica um mecanismo de supercondutividade diferente da teoria BCS usual. Uma hipótese para o mecanismo alternativo consiste na formação de estruturas de carga topológicas provocadas pela dopagem (doping topológico) nos planos de $Cu-O$, levando ao aparecimento de linhas de carga orientadas numa direção de maior anisotropia. No regime não dopado, os sítios de Cu^{2+} têm spin $1/2$ ($3d^9$) e se correlacionam antiferromagneticamente ao longo dos planos numa ordem de longo alcance, na presença de uma direção anisotrópica [24]. A introdução de íons dopantes do tipo Sr^{2+} e Ce^{4+} no sistema cria um reservatório de cargas nos planos de CuO_2 . Os elétrons excedentes tendem a se localizar nos sítios de cobre, o que gera uma competição entre a correlação antiferromagnética atrativa dos spins e a repulsão coulombiana dos sítios com um buraco (Cu^+). Se, por um lado, o comportamento não homogêneo da distribuição de cargas no plano pode ser heurísticamente justificado deste modo, a natureza topológica dessas estruturas é bastante questionável, uma vez que as linhas de carga são objetos

unidimensionais e não apresentam correlação de longo alcance que possa justificar a supercondutividade nesses materiais [6]. A alternativa mais aceita atualmente é que não se tratam de linhas de carga, mas de faixas [31]. A formação de faixas nos planos dos óxidos *high-T_c* foi prevista teoricamente por Zaanen e Gusnnarsson [42] a partir da hamiltoniana de Hubbard de uma banda em aproximação de campo médio numa rede finita de 10×10 sítios, usando como parâmetros a interação coulombiana local no sítio dos elétrons da banda d , a energia de hibridização entre orbitais p e d e o custo energético de uma flutuação $d^9 \rightarrow d^{10} + p$ -buraco.

Indícios de segregação são também encontrados em outras famílias de óxidos. Nos compostos de Ni , o comportamento dos buracos introduzidos via doping é bastante similar aos de Cu . Estudos de espalhamento de neutrons têm demonstrado que as correlações de spins e carga assumem padrões de dependência com a dopagem bastante parecidos [30]. No entanto, as propriedades de transporte parecem ser bastante distintas. Todos esses compostos são isolantes no estado normal não dopado (o gap isolante se mantém mesmo acima da temperatura de Néel, indicando que não se tratam de isolantes de Slater, regidos pelas *spin density waves*). Se por um lado os cupretos adquirem comportamento metálico, que se transforma em supercondutor a altas temperaturas e sob uma dopagem relativamente baixa de 0.05 íons por sítio de Cu ($La_{2-x}Sr_xCuO_4$), os niqueletos permanecem isolantes quando submetidos a uma dopagem dez vezes maior ($La_{2-x}Sr_xNiO_4$). Acredita-se que a supercondutividade esteja ligada às flutuações das faixas de carga, que possibilitariam teoricamente a formação da coerência de fase de longo alcance e a estabilização termodinâmica das stripes na ausência de ordem magnética.

Em particular, os óxidos de Cr têm um comportamento à parte dos compostos de Cu e Ni . O padrão de espalhamento das faixas nesses materiais é inteiramente análogo ao padrão do La_2NiO_4 dopado, na fase magneticamente ordenada. Experimentos de espalhamento totalmente inelástico, no entanto, verificam que as ordens de spin e carga desaparecem juntas na temperatura de Néel, indicando possivelmente a ausência de dinâmica. O estudo desses materiais pode ser uma boa indicação do comportamento das faixas nos cupretos e niqueletos no regime de baixa temperatura e dopagem.

3.2 Observações experimentais

Os óxidos *high- T_c* de cobre e níquel têm sido alvo de intensa investigação experimental. A intenção é observar como esses sistemas se comportam em diferentes tipos e níveis de dopagem, verificando algumas hipóteses sobre a distribuição das cargas nos planos. O diagrama de fase com a dopagem ainda não é bem conhecido.

No caso específico do composto La_2CuO_4 , não dopado, observa-se uma transição de segunda ordem da fase tetragonal altamente simétrica para a ortorrômbica em $T_{O/T} = 530$ K. Os íons de Cu^{2+} exibem propriedades magnéticas nesse material, cuja temperatura crítica de transição antiferro-paramagnética é $T_N = 300$ K. Introduzindo uma dopagem de cargas nos oxigênios dos planos de CuO_2 , o composto dopado $La_2CuO_{4+\delta}$ exibe um comportamento bastante diverso. Para $\delta \sim 0.03$, o material tem uma separação macroscópica de fase abaixo de $T_S \sim 260 - 320$ K entre uma fase fortemente dopada ($\delta' \sim 0.08$), supercondutora abaixo de $T_c = 35$ K e uma fase isolante não dopada ($\delta'' \sim 0.00, T_N \sim 250$ K).

Alternativamente, dopando o composto $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ com íons Sr^{2+} no lugar do La^{3+} , não se observa nenhum tipo de segregação macroscópica das cargas. No entanto, a dependência das transições de fase com a dopagem se torna bastante dramática. Para $x \sim 0.02$ e 0.2 respectivamente, a amostra não exibe antiferromagnetismo e se conserva na fase tetragonal sob qualquer regime de temperatura [8]. Isso significa que as temperaturas de transição podem ser escritas como funções da dopagem e que para esses valores críticos de x T_N e $T_{O/T}$ são respectivamente zero. Cho, Chu e Johnston [8] propuseram uma lei de decaimento da temperatura de Néel com x ,

$$1 - \frac{T_N(x)}{T_N} = \left(\frac{x}{x_c} \right)^n \quad (3.1)$$

e encontraram experimentalmente o valor de $n \sim 2$, independente da dopagem δ sobre os oxigênios.

O mecanismo de segregação das cargas tem uma dependência intrínseca com o tipo de dopagem no composto. A dopagem dos oxigênios no $La_{2-x}Sr_xCuO_{4+\delta}$ induz o aparecimento de fases macroscópicas de spin e carga separadas. A razão disso está ligada ao encurtamento do alcance do potencial efetivo de interação entre as cargas, o que se reflete na pouca mobilidade dos elétrons introduzidos pelos oxigênios. Em função disso, o termo de potencial é insuficiente para frustrar

a tendência à condensação dos spins, responsável pela formação das fases.

Os estudos mais importantes que descrevem propriamente as estruturas de carga nos óxidos *high-T_c* são baseados em experimentos de difração de neutrons. A vantagem do uso de neutrons lentos reside na boa sensibilidade do método à geometria de estruturas magnéticas em cristais. Mais especificamente, ela permite determinar a intensidade e orientação do momento magnético do cobre e medir o aparecimento de modulações de spin e carga ao longo de uma direção.

3.2.1 Espalhamento de neutrons

Apesar dos neutrons não apresentarem o termo de monopolo elétrico, possuem outros termos de multipolo [2] que conferem a eles um raio giromagnético e, portanto, um spin. A seção de choque dos neutrons é formada pela contribuição de espalhamento nuclear, onde os neutrons interagem com um potencial local do tipo

$$V_N(\mathbf{R}) = b\delta(\mathbf{r}_n - \mathbf{R}) \quad (3.2)$$

e por uma parte de espalhamento magnético causada pela interação do neutron com o momento angular orbital e com o spin dos elétrons desemparelhados. O potencial espalhador dessa interação pode ser escrito como [15]:

$$\hat{V}_m(\mathbf{r}) = \sum_l \frac{1}{c} \left(\hat{\mathbf{A}}_n(\mathbf{r}_l), \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}_l) \right) \quad (3.3)$$

onde

$$\hat{\mathbf{A}}_n(\mathbf{r}_l) = 2u_n \frac{\left(\hat{\mathbf{S}}_n, \mathbf{r}_n - \mathbf{r}_l \right)}{|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_l|^3},$$

é o potencial vetor do n -ésimo neutron calculado em relação à posição do l -ésimo elétron e $\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r})$ o operador de corrente dos elétrons desemparelhados escrito na representação de posição. O elemento de matriz de $\hat{\mathbf{j}}$ na base de auto-estados $\langle \mathbf{r} | a \rangle$ do centro espalhador é

$$\frac{1}{c} \psi_a^* \hat{\mathbf{j}} \psi_a = i\mu_o (\psi_a \nabla_l \psi_a^* - \psi_a^* \nabla_l \psi_a) + 2\mu_o \nabla_l \times \left(\psi_a^* \hat{\mathbf{S}}_l \psi_a \right). \quad (3.4)$$

O primeiro termo corresponde à contribuição orbital e a segunda ao termo de spin.

A seção de choque diferencial em teoria de espalhamento é derivada diretamente a partir da regra de ouro de Fermi, como uma contribuição do módulo quadrado dos elementos de matriz do potencial espalhador, que no caso é dado pela soma $\hat{\mathbf{V}}_N + \hat{\mathbf{V}}_m$. O cálculo é feito numa base de estados do sistema que inclui os auto-estados da Hamiltoniana do centro espalhador $|a\rangle$. Além deles, ela deve incluir uma base de ondas planas de momento \mathbf{k} e uma base completa de spin $|\sigma\rangle$ associadas diretamente à função de onda do neutron espalhado. A seção de choque diferencial é

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega dE} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{k'}{k} \overline{\langle a\sigma | \left(\hat{\mathbf{V}}_{N\mathbf{k}\mathbf{k}'}^* + \hat{\mathbf{V}}_{m\mathbf{k}\mathbf{k}'}^* \right) \left(\hat{\mathbf{V}}_{N\mathbf{k}\mathbf{k}'} + \hat{\mathbf{V}}_{m\mathbf{k}\mathbf{k}'} \right) | a\sigma \rangle} \quad (3.5)$$

O traço sobre a expressão indica média de ensemble sobre os estados $|a\sigma\rangle$. Admitindo que os neutrons não são polarizados, os termos de interferência da parte nuclear e magnética se anulam. Como consequência, a seção de choque diferencial da amostra sujeita ao bombardeio de um feixe de neutrons com spins orientados ao acaso é simplesmente a soma dos termos de espalhamento nuclear e magnético:

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega dE} = \frac{d^2\sigma_N}{d\omega dE} + \frac{d^2\sigma_m}{d\omega dE} \quad (3.6)$$

Este resultado é particularmente importante, uma vez que ele permite distinguir as duas contribuições. Alguns termos adicionais devidos ao espalhamento incoerente provocado pela presença de isótopos no cristal, ou causados pelo espalhamento magnético do spin do núcleo serão ignorados.

A menos de alguns fatores de extinção, o tipo do padrão de difração produzido por espalhamento magnético é bastante semelhante ao do espalhamento nuclear, que pode ser entendido através dos planos de Bragg. Os picos de difração de neutrons são construídos no espaço recíproco à rede, gerado por vetores normais aos planos de Bragg e que são definidos pela variação do momento do neutron antes e depois de ser espalhado, $\mathbf{Q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$. Na fase magnética plenamente ordenada, o padrão de difração é coerente. Efeitos de flutuação térmica sobre a orientação relativa entre os spins, no entanto, provocam um espalhamento de fundo altamente incoerente, cuja distribuição de intensidade espalhada com o ângulo de saída da amostra é um patamar homogêneo que atenua a amplitude dos picos da parte coerente. Este efeito indesejável pode ser facilmente eliminado, bastando para isso medir o espalhamento de fundo na fase desordenada e subtrair do padrão obtido

na fase ordenada.

Observando os picos de espalhamento nuclear da amostra no espaço $\mathbf{Q} = (h, k, l)$ em unidades de $(\frac{2\pi}{a}, \frac{2\pi}{b}, \frac{2\pi}{c})$, vamos fixar uma base de modo que $(0, 0, 0)$, $(1, 0, 0)$ e $(0, 1, 0)$ correspondam a pontos da rede recíproca com a , b e c os parâmetros de rede do cristal nas direções x , y e z respectivamente. A presença de anti-ferromagnetismo em uma direção tem como efeito duplicar o volume da célula unitária no espaço real, o que consequentemente dobra a periodicidade dos picos de espalhamento magnético na mesma direção, no espaço recíproco. Assim, supondo que os spins fiquem alinhados anti-paralelamente nas direções x e y de um plano, deve-se esperar o surgimento de picos de difração magnéticos nas posições $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$, $(\frac{1}{2}, 0, 0)$, $(0, \frac{1}{2}, 0)$ e simétricas na zona de Brillouin. Na verdade, não é necessário que todos eles apareçam no diagrama de espalhamento. No caso em que as duas subredes magnéticas apresentam fatores de forma iguais e spins de mesma magnitude, porém alinhados em sentidos opostos, o fator de estrutura é máximo na posição central $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ e zero nas demais. Isto significa que a ordem magnética é detectada no diagrama de espalhamento através do pico $\mathbf{Q}_m = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$

No caso do aparecimento de estruturas na rede que multipliquem n vezes o comprimento da célula unitária original, o padrão de difração deve registrar novos picos com espaçamento de $\frac{2\pi}{nd}$, onde d é a distância de separação entre os planos de Bragg, naquela direção. A presença de domínios na ordem antiferromagnética de um cristal, por exemplo, constitui uma redução da simetria translacional magnética na direção \mathbf{t} transversa à interface entre os domínios. O volume da célula unitária agora tem o volume $\frac{n}{2}$ vezes maior que o da configuração magnética original, com os spins alinhados antiferromagneticamente. Admitindo por hipótese que $\mathbf{t} = (1, 0, 0)$ e que o antiferromagnetismo se dê no plano XY , é de se esperar que apareçam picos nas posições $\mathbf{Q}_m \pm (\frac{p}{n}, 0, 0)$, com p natural $< n/2$.

O cálculo dos fatores de estrutura, no entanto, impõe algumas restrições sobre a existência e detectabilidade desses picos. As “leis de extinção” decorrentes desses fatores proíbem a existência de picos de ordem p par. Além disso, a intensidade dos fatores decai muito rapidamente com a ordem dos picos [15]. Na prática, os experimentos geralmente detectam apenas os picos “satélite”, que correspondem aos de primeira ordem. Desse modo, o efeito de uma superestrutura cristalina de periodicidade n ao longo de uma direção \mathbf{t} no diagrama de espalhamento consiste no aparecimento de um par de picos simétricos em relação aos pontos da rede

recíproca, situados nos pontos $\mathbf{Q}_c \pm \frac{1}{n}\mathbf{t}$ da zona de Brillouin, conquanto que exista o pico de Bragg na posição \mathbf{Q}_c correspondente. No caso de uma superestrutura magnética, o que ocorre é o esplitamento do pico \mathbf{Q}_m nos picos $\mathbf{Q}_m \pm \frac{1}{n}\mathbf{t}$.

3.2.2 Evidências diretas das faixas de carga

A análise do padrão de difração de neutrons de uma amostra de $La_{1.48}Nd_{0.4}Sr_{0.12}CuO_4$ (Tranquada *et al.* [34]) foi um dos primeiros estudos que permitiram entender a geometria das faixas de carga de maneira mais conclusiva. Nesse composto, a dopagem com Nd introduz um momento magnético da ordem de dez vezes o momento do Cu^{2+} , estabelecendo uma fraca correlação entre os planos de CuO_2 . A razão da dopagem com o Nd advém de uma dificuldade experimental que consiste em medir os picos de difração em sistemas com fortes correlações dinâmicas. O momento do Nd se acopla à ordem magnética dos planos e provoca uma distorção anisotrópica na estrutura do cristal, mantendo as faixas praticamente estáticas [10].

Além dos picos de Bragg, o diagrama da zona $(h, k, 0)$ no espaço recíproco mostra o esplitamento do vetor $\mathbf{Q}_m = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ que caracteriza a ordem antiferromagnética dos planos de CuO_2 em $(\pm\epsilon, 0, 0)$, o que indica a possível ocorrência de domínios antiferromagnéticos. A interpretação desse esplitamento foi o objeto de controvérsias durante algum tempo. Alguns autores atribuíram essa evidência ao efeito de “nesting” na superfície de Fermi [31]. Essa última hipótese tem sido rejeitada após a observação de picos atribuídos a uma superestrutura de carga comensurável com os picos magnéticos na posição $(\pm 2\epsilon, 0, 0)$ da zona, na vizinhança dos picos de Bragg. Apesar das cargas não interagirem diretamente com os neutrons, a condensação dos elétrons em faixas cria uma distorção periódica na estrutura do cristal que é detectável através do esplitamento dos picos de Bragg. Pode-se entender desse fato que os spins sofrem uma modulação ao longo da direção x com período duas vezes maior que o da modulação de carga, indicando uma ordem de domínios antiferromagnéticos em anti-fase. Os picos de spin e carga $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \pm \epsilon, 0)$ e $(0, 0 \pm \epsilon, 0)$, respectivamente, não são observados no mesmo plano dos outros picos. Isso quer dizer que as modulações de carga acopladas aos domínios são faixas (ou linhas) e não uma rede em duas direções delimitando “lagos de spin”. A disposição dessas faixas é transversa entre planos vizinhos, em função da correlação causada pelos momentos magnéticos do Nd . Nos compostos de Ni , em particular, as faixas

correm diagonalmente na rede. Rodando a base do plano em 45 graus, observa-se o aparecimento de picos de spin e carga alinhados nas posições $(\frac{1}{2} + \epsilon, 0, 0)$ e $(2\epsilon, 0, 0)$, respectivamente (figura 3.2).

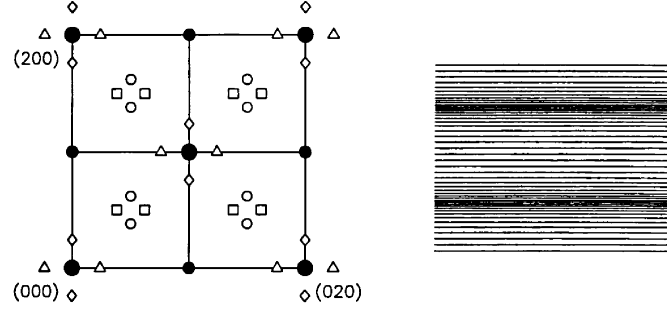


Figura 3.1: À esquerda, picos de espalhamento de neutrons no espaço recíproco de uma amostra de $La_{1.48}Nd_{0.4}Sr_{0.12}CuO_4$. Os círculos sólidos maiores correspondem a picos de Bragg. Os círculos e diamantes correspondem respectivamente aos picos observados na ordem magnética e de carga. Os picos nas direções transversas (quadrados e triângulos) não são observados num mesmo plano [31]. À direita, a representação pictórica das faixas de carga correspondente ao diagrama de espalhamento.

A natureza dessas faixas precisa ser ainda investigada. Questionamentos sobre o caráter topológico dessas estruturas foram respondidos através de alguns experimentos que buscavam saber qual é a comensurabilidade delas com a rede. Medindo o grau de dependência de ϵ com a temperatura num cristal de $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ dopado com $x = 0.225$, Tranquada, Buttrey e Sachan [32] obtiveram uma curva experimental claramente ascendente na região acima de 50 K. Esse comportamento com a temperatura havia sido observado anteriormente em cristais de $La_2NiO_{4.125}$ [33]. A semelhança entre niqueletos e os cupretos é notável e implica num alto grau de generalidade desses resultados para as duas famílias de compostos. Medidas recentes da dependência de ϵ com a dopagem no $La_{1.6-x}Nd_{0.4}Sr_xCuO_4$ [35] mostram que $x \sim \epsilon$ para $x < 0.12 \sim \frac{1}{8}$. A incomensurabilidade das faixas com a rede demonstra ser uma característica tão geral quanto a própria existência das faixas de carga nesses materiais. A física de condensação local das cargas é bastante robusta em isolantes correlacionados submetidos à dopagem, de modo que ela deve ser observada em outros sistemas similares [10].

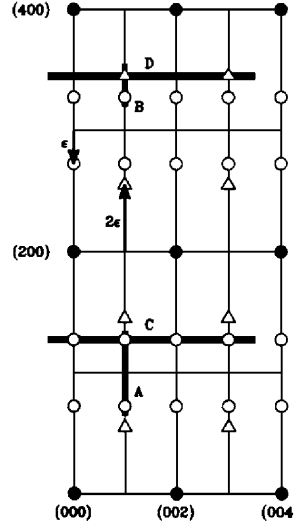


Figura 3.2: Diagrama de espalhamento de neutrons numa amostra de $La_2NiO_{4.125}$. A posição dos picos é representada com respeito à base $(\sqrt{2}a, \sqrt{2}a, c)$ do espaço real rodada em 45° no plano XY. O aparecimento do pico de carga na posição $(2\epsilon, 0, 0)$ indica que as faixas se orientam diagonalmente no cristal. [32]

Ainda sobre o caráter das faixas de carga, não se sabe exatamente qual é o tipo de modulação que elas apresentam. É de comum acordo que deve existir uma modulação da concentração de cargas e consequentemente da intensidade da magnetização na direção transversa às faixas. O problema é identificar a ordem dos spins na interface entre os domínios e saber se eles formam uma parede de Néel de 180° (ordem espiral) ou uma linha de Néel (ordem colinear). No primeiro caso, a magnetização sofre uma dupla modulação em intensidade e orientação, enquanto que no segundo os spins se mantêm alinhados, o que exige uma descontinuidade do campo para manter a anti-fase entre os domínios. Os dois casos são compatíveis com os dados experimentais disponíveis atualmente [35].

O comportamento crítico desse sistema é outro aspecto ainda não muito bem entendido. Medidas de resistividade do $La_{1.48}Nd_{0.4}Sr_{0.12}CuO_4$ indicam uma abrupta mudança de comportamento em torno de 70 K, atribuída a uma mudança estrutural entre a fase ortorrômbica e a tetragonal, de simetria mais alta ($T_{O/T} = 70K$). Ainda na fase ortorrômbica, a transição de fase magnética é detectada experimen-

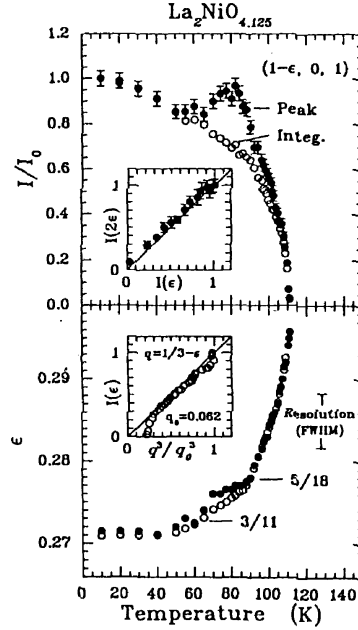


Figura 3.3: Dependência da intensidade e do esplitamento dos picos magnéticos com a temperatura no $La_2NiO_{4.125}$. Os círculos vazios representam a intensidade dos picos e os círculos cheios a intensidade integrada. Observa-se o aparecimento de alguns máximos locais de intensidade em posições comensuráveis com a rede. [33]

talmente pelo evanescimento da intensidade dos picos correspondentes. A temperatura de Néel depende explicitamente da dopagem. No caso dos cupretos de lântano, $T_N \sim 50K$ em baixa dopagem e decai a zero muito rapidamente, com $x \sim 0.2$. Os niqueletos de lântano exibem antiferromagnetismo até $\sim 100K$. O que há de mais surpreendente e geral em todos os compostos analisados até agora é a verificação de que os picos da ordem de carga resistem a temperaturas mais altas que os picos da ordem magnética. No $La_{1.775}Sr_{0.225}NiO_{4.00}$, a transição de fase das cargas ocorre em $T_t \sim 150K$ enquanto que no $La_{1.6-x}Nd_{0.4}Sr_xCuO_4$ ela acontece em torno de $60K$, acima da temperatura de Néel. Isso quer dizer que as faixas surpreendentemente sobrevivem à ausência de magnetismo num intervalo de temperatura considerável. Alguns autores interpretaram este comportamento atribuindo a criticalidade das faixas às cargas e não aos spins, como se acreditava. Isto é correto num sentido muito restrito. Ao que tudo indica, a estabilidade das faixas

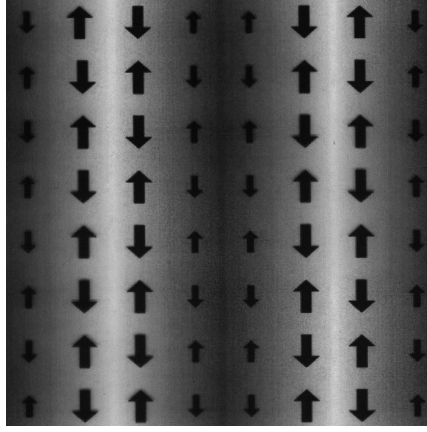


Figura 3.4: Representação pictórica dos domínios antiferromagnéticos sob uma ordem colinear de spins. As regiões mais escuras apresentam uma deficiência de spin que indica a localização das faixas. [10]

na ausência de ordem magnética é mantida pelas flutuações térmicas, através de um efeito dinâmico via mecanismo de hopping.

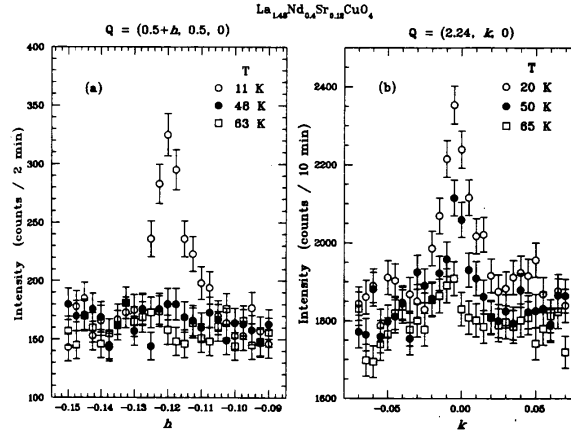


Figura 3.5: Padrão de espalhamento dos picos da ordem magnética (esquerda) e de carga (direita) no $La_{1.48}Nd_{0.4}Sr_{0.12}CuO_4$ sob diferentes regimes de temperatura. A temperatura crítica da ordem de carga é claramente maior que a da ordem magnética, indicando que as faixas resistem à ausência de magnetismo na amostra. Medidas subtraídas do espalhamento de fundo. [34]

3.2.3 Propriedades de transporte e supercondutividade

Os óxidos *high- T_c* são ‘maus metais’ no sentido de que apresentam caráter metálico na dependência da resistividade na fase tetragonal, porém o livre caminho médio dos elétrons é menor que λ_F , o comprimento de onda na superfície de Fermi [10]. A temperaturas mais baixas (fase ortorrômbica) o comportamento é isolante e fortemente correlacionado.

A teoria de supercondutividade tradicional não se aplica a esses materiais. Nelas, a física das propriedades de transporte parece não privilegiar nem a energia cinética dos elétrons, como nas teorias metálicas que são usualmente escritas na formulação de espaço de momentos, nem a interação de potencial de longo alcance entre as cargas, que é responsável pela criticalidade na transição de fase. As duas abordagens precisam ser levadas em conta juntas num tratamento em primeira ordem. A topologia do problema é a grande chave para o mecanismo de transporte dos pares de elétrons supercondutores. De uma certa forma, as faixas representam uma redução da dimensionalidade do sistema, dentro das quais a dinâmica eletrônica se assemelha a uma rede metálica quase unidimensional.

Acredita-se que o mecanismo de supercondutividade esteja intimamente ligado à dinâmica das faixas. O estudo de espalhamento inelástico da estrutura do $La_2NiO_{4+\delta}$ (Tranquada, Wochner e Buttrey [36]) mediu as curvas de dispersão da energia $\hbar\omega$ com a rede na vizinhança dos picos de Bragg, usando três amostras com $\delta = 0.00, 0.105$ e 0.133 . Apesar do aumento da dopagem reduzir sensivelmente a correlação da ordem magnética no estado fundamental, o que se observou é que acima de um certo $\delta \sim 0.1$ as correlações dinâmicas tornaram-se, na verdade, bastante intensas. Esse fato foi extraído das medidas da velocidade de propagação das ondas de spin na direção das faixas e da temperatura crítica da ordem magnética. No regime não dopado, $T_N = 335$ K e $\hbar c = 340$ meV Å. Para $\delta = 0.105$, as duas grandezas decaem para 55 K e 70 ± 8 meV Å e depois aumentam significativamente para 110.5 K e 200 ± 20 meV Å em $\delta = 0.133$.

A velocidade de propagação das ondas de spin numa Hamiltoniana de Heisenberg é proporcional à constante de acoplamento J e ao número de vizinhos de cada sítio com spin. O aumento da dopagem diminui a interação entre os spins até um certo ponto, em que as flutuações das cargas reestabelecem a correlação magnética num caráter essencialmente dinâmico. Esses resultados são bastante similares aos

obtidos com $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ em uma amostra de $La_{1.86}Sr_{0.14}CuO_4$ [11].

A ligação experimental desses fatos com a supercondutividade propriamente dita é sugerida por um trabalho recente (Tranquada *et al.* [35]), que investiga a relação entre a supercondutividade e as faixas de carga no $La_{1.6-x}Nd_{0.4}Sr_xCuO_4$. A dopagem com Nd , como já se comentou antes, introduz uma distorção na estrutura do cristal cujo efeito é coibir a dinâmica do sistema e amplificar a ordem dos íons Cu^{2+} . Medidas da susceptibilidade magnética da amostra demonstram que a supercondutividade é totalmente suprimida num regime intermediário de dopagem ($x \sim 0.12$) no composto com Nd . Nesse grau de dopagem, a ordem estática é relativamente fraca. Na ausência de Nd , o que se observa é que a temperatura crítica de supercondutividade é, ao contrário, máxima com $T_c = 38K$. Por esse motivo, a configuração mais propícia para a supercondutividade aparenta ser aquela em que a dopagem é moderada e as faixas de carga não são estáticas, porém flutuam pouco. Abaixo de um certo grau de condensação, elas coexistem e estimulam a supercondutividade. Acima de uma concentração crítica, porém, existe uma competição entre a segregação das cargas e o caráter supercondutor.

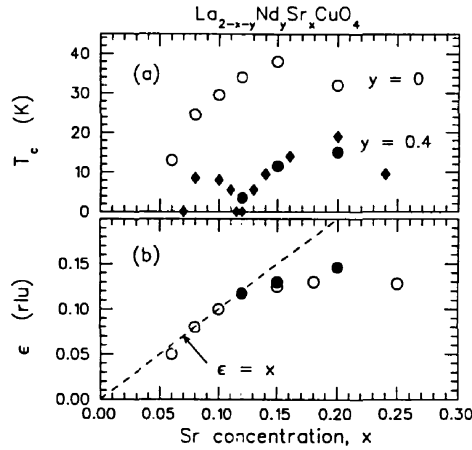


Figura 3.6: Temperatura crítica de transição supercondutora num composto dopado de $La_{2-x-y}Nd_ySr_xCuO_4$; $y = 0.0$ (círculos vazios) e $y = 0.4$ (círculos cheios).[35]

No regime de baixa temperatura e dopagem, as stripes introduzem uma topologia quase-unidimensional sob a forma de 'strings metálicas', que foram consideradas por alguns autores como um líquido de Luttinger unidimensional imerso num

antiferromagneto isolante [7]. O aumento da concentração de buracos (cargas) enfraquece a ordem magnética, aumentando a influência das flutuações térmicas sobre os spins e desacoplando as faixas. Uma das idéias correntes sobre o modo como os spins se acoplam aos buracos foi sugerida originalmente por Anderson [13]. A dinâmica dos buracos seria descrita por uma hamiltoniana de Heisenberg através de um termo de hopping. Essas cargas geram excitações sobre o estado fundamental antiferromagnético, quebrando singletos e criando pares de spins desacoplados com o resto da rede. O pareamento desses spins (spinons) abre um pseudogap no espectro de excitações do sistema spin-buraco e criaria condições para a estabilização dos pares de Cooper, abaixo de T_c [41].

Capítulo 4

Aspectos formais da teoria

4.1 Grupos de simetria

O parâmetro de ordem de uma transição de segunda ordem em T_c pode ser definido como um conjunto de quantidades escalares Θ_i que carrega consigo uma representação irredutível do grupo G_0 da fase de alta simetria e cuja função densidade pode ser associada a uma expansão em série de Taylor da energia livre contendo um coeficiente $a_j(T)$ não nulo que satisfaz $a_j(T_c) = 0$ [37]. O grupo da fase de baixa simetria é um subgrupo não totalmente simétrico de G_0 , denotado por G , que atua diretamente no espaço do parâmetro de ordem na fase ordenada, mantendo-o invariante.

A importância de conhecer o grupo de simetria das fases é que isto nos permite encontrar a forma do funcional de Landau que preserva a simetria do parâmetro de ordem, ou seja, que satisfaz a $f(g_i\varphi) \equiv f(\varphi)$, com $g_i \in G_0$. Para isso, vamos definir um homomorfismo $\alpha_k : G_0 \longrightarrow \Gamma_k$ que leva os elementos do grupo G_0 numa representação *irredutível* Γ_k , de forma que $\Gamma_k(gf) = \alpha_k(gf) = \alpha_k(g)\alpha_k(f) = \Gamma_k(g)\Gamma_k(f)$. Uma representação Γ_k é irredutível com respeito a um espaço ϵ se não existir nenhum subespaço de ϵ invariante com respeito aos elementos de Γ_k . Assim, os elementos da representação formam um grupo.

Um modo conveniente de definir uma partição de Γ_k consiste em dividir os elementos de G_0 em classes H_i sob a operação de conjugação $g^{-1}hg$, de modo que $g^{-1}H_i g = H_i, \forall g \in G_0$. Cada um desses conjuntos representa uma *classe conjugada* de G_0 , cuja propriedade é que dadas duas classes distintas quaisquer H_i e

H_j , $H_i \cap H_j = \emptyset$. O conjunto dessas classes forma portanto uma partição de G_0 . Estendendo a partição sobre as representações definidas por α_k , é imediato verificar que $\Gamma_k(g^{-1})\Gamma_k(h)\Gamma_k(g)$ também define uma partição em $\Gamma_k \forall g \in G_0$. No fundo, cada classe contém os elementos de uma dada representação Γ_k que são equivalentes entre si a menos de uma operação canônica de mudança de base. Por isso, todos os elementos $\Gamma_k(g)$ de uma dada classe apresentam a mesma característica $\chi_k(g)$. O número de representações irredutíveis distintas é igual ao número total dessas classes em G_0 [29]. Para o nosso interesse, a aplicação das representações no contexto da teoria de Landau depende basicamente do mapeamento da característica dos elementos de cada representação em classes.

O espaço ε gerado pelas componentes de φ_i pode ser decomposto em subespaços $\varepsilon_{k(m)}$ que são invariantes pela ação das representações irredutíveis Γ_k . O índice m denota os subespaços que carregam a mesma representação irredutível. O número desses espaços é igual ao número de representações do tipo Γ_k contidas na representação Γ gerada por ε :[29]

$$n_k = \frac{1}{d(G_0)} \sum_{g_i} \chi^*(g_i) \chi_k(g_i) , \quad (4.1)$$

onde χ_k é a característica de Γ_k , χ a de Γ e $d(G_0)$ a ordem do grupo G_0 .

A dimensão de cada um desses subespaços é dada pela característica da identidade $\chi_k(e)$. Em particular, a representação Γ_1 corresponde a uma matriz de dimensão 1 cuja característica vale $\chi_1(g_1) = 1$ para todos os elementos do grupo. O espaço associado a ela é chamado de *espaço totalmente simétrico* que, no caso, corresponde a todo o espaço da densidade do parâmetro de ordem. Obviamente, qualquer grupo admite uma representação deste tipo.

Dada uma base qualquer de ε , os vetores que compõem as bases de cada um dos subespaços irredutíveis podem ser escolhidas de infinitas maneiras. Um modo de encontrá-las é definir um projetor, por exemplo,

$$P_k = \sum_{g_i} \chi_k^*(g_i) g_i , \quad (4.2)$$

que opera sobre os vetores φ_i , levando no espaço $\bigcup_m \varepsilon_{k(m)}$.

4.1.1 Espaços polinomiais

Vamos agora definir uma representação baseada no produto tensorial $\boldsymbol{\varepsilon}^n = \prod_i^n \otimes \boldsymbol{\varepsilon}$ do espaço de coordenadas do parâmetro de ordem. Esta representação será chamada de *enésima potência* de Γ , e denotada por Γ^n .

Um vetor é *simétrico* se ele é invariante sob a permutação dos índices das coordenadas, $(\varphi_1, \dots, \varphi_m) = (\varphi_{P1}, \dots, \varphi_{Pm})$. A enésima potência simetrizada de $\boldsymbol{\varepsilon}$ é um subespaço de $\boldsymbol{\varepsilon}^n$, denotado por $[\boldsymbol{\varepsilon}^n]$, gerado por todos os vetores simétricos de $\boldsymbol{\varepsilon}^n$. Este espaço continua sendo invariante com respeito a uma representação de G_0 $[\Gamma^n]$.

A ligação destas idéias com o propósito original do capítulo, que é determinar a forma do funcional de Landau, advém da constatação de que uma base polinomial formada por C_n^{n+m-1} monômios nas componentes de $\boldsymbol{\varphi}$ também gera a enésima potência simetrizada de $\boldsymbol{\varepsilon} = (\varphi_1, \dots, \varphi_m)$. O argumento é o seguinte: a base de $[\boldsymbol{\varepsilon}^n]$ é formada por vetores na forma $\boldsymbol{\phi} = \sum_P (\eta_{P1}, \dots, \eta_{Pm})$, somando sobre todas as permutações das coordenadas η_i . Vamos agora associar (η_1, \dots, η_m) a um produtório das coordenadas em que η_1 aparece ν_1 vezes, η_2 aparece ν_2 e assim por diante, de forma que a m -upla (ν_1, \dots, ν_m) forme uma partição de n , $\sum_i^m \nu_i = n$. Bem, cada partição (ν_1, \dots, ν_m) define univocamente cada vetor $\boldsymbol{\phi}$ da base. Reciprocamente, partições diferentes levam a vetores de base diferentes e portanto cada $\boldsymbol{\phi}$ pode ser associado biunivocamente a um monômio $\prod_i \eta_i^{\nu_i}$, com $\sum_i^m \nu_i = n$.

Um dos fundamentos da teoria de Landau consiste em encontrar uma expansão polinomial de ordem n do potencial que satisfaz à simetria da Hamiltoniana na fase considerada. O cálculo dos projetores (4.2) sobre esse espaço leva numa base polinomial escrita nas componentes da densidade do parâmetro de ordem que é invariante com respeito a G_0 . Para isso, é preciso conhecer somente a característica da enésima representação simetrizada $[\chi^n(g_i)]$, que é dada pela literatura em termos de uma soma em p dos monômios $\chi^p(g_i^{n-p}) \cdot \chi^{n-p}(g_i^p)$, conforme a tabela 4.1.1.

A formulação da teoria com dois ou mais parâmetros de ordem não muda em nada a generalidade da dedução acima. Nesse caso, o espaço $\boldsymbol{\varepsilon}$ em questão é dado pelo produto dos espaços das coordenadas de cada parâmetro de ordem $\boldsymbol{\varepsilon}_1 \otimes \boldsymbol{\varepsilon}_2$. Por construção, o espaço polinomial correspondente é isomorfo a $[(\boldsymbol{\varepsilon}_1 \otimes \boldsymbol{\varepsilon}_2)^n]$.

4.1.2 A condição de Landau

Foi dito no capítulo 1 que a presença de termos de ordem ímpar na expansão da energia livre é incompatível com a assinatura das transições de segunda ordem, que é caracterizada pelo evanescimento espontâneo do parâmetro de ordem na temperatura crítica ($\Theta(T_c, 0) = 0$). No modelo φ^4 , essa exigência pode ser traduzida pela ausência de polinômios invariantes de ordem 3 em $f(\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{h})$. Para que isto aconteça, do ponto de vista da teoria, é suficiente que a representação simetrizada de ordem 3 $[\Gamma^3]$ de G_0 não contenha nenhum subespaço totalmente simétrico, o que garante que o espaço associado a $[\Gamma^3]$ tem dimensão zero e portanto não admite nenhum polinômio irredutível de ordem 3. Em outras palavras, a condição para a ausência de termos antisimétricos na expressão da energia é

$$n_1 = \frac{1}{d(G_0)} \sum_{g_i} [\chi_1^3(g_i)]^* = 0 , \quad (4.3)$$

onde $[\chi^3]$ é a característica de $[\Gamma^3]$. Esta restrição é a *condição de Landau*, que pode ser escrita equivalentemente como:

$$[\Gamma^3] \not\supseteq \Gamma_1 . \quad (4.4)$$

4.1.3 Polinômios invariantes de grau n num espaço de dimensão 2

O grupo mais geral das operações pontuais de simetria que atua no plano é o grupo $O(2)$, formado por uma quantidade infinita de rotações e reflexões. O grupo que representa a fase de baixa simetria é um subgrupo de $O(2)$ de ordem finita que

$\begin{aligned} [\chi^2(g)] &= \frac{1}{2}(\chi(g^2) + \chi^2(g)) \\ [\chi^3(g)] &= \frac{1}{3}\chi(g^3) + \frac{1}{2}\chi(g)^2\chi(g) + \frac{1}{6}\chi^3(g) \\ [\chi^4(g)] &= \frac{1}{4}\chi(g^4) + \frac{1}{3}\chi(g)^3\chi(g) + \frac{1}{8}\chi^2(g^2)\frac{1}{4}\chi(g^2)\chi(g)^2 + \frac{1}{24}\chi^4(g) \end{aligned}$
--

Tabela 4.1: Características da n ésima potência simetrizada de uma representação, com $n = 2, 3$, e 4. [23]

pode ser classificado entre dois tipos: os abelianos C_m , gerados por rotações de $\frac{2\pi}{m}$ contidas no $SO(2)$ e os grupos $C_{mv} = C_m + \sigma C_m$ que compreendem rotações e reflexões.

Dado um espaço parametrizado nas coordenadas polares (ρ, θ) , uma rotação em ϕ pode ser escrita na forma

$$R_\phi = \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi \\ -\sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

e uma reflexão qualquer como um produto de

$$\sigma = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

por R_ϕ , isto é, $\sigma' = R_\phi^{-1} \sigma R_\phi$. Assim, C_m e $R_\phi^{-1} \sigma R_\phi$ formam as classes conjugadas de $O(2)$. Nesta representação, é imediato observar que $\chi(\phi) = 2 \cos \phi$ e $\chi(\sigma) = 0$.

Usando a tabela 2, as características da enésima potência simetrizada de Γ , $[\chi^n(g_i)]$ para $n = 3$ e 4 , são

$$\begin{aligned} [\chi^3(\phi)] &= 2(\cos \phi + \cos 3\phi) & [\chi^3(\sigma)] &= 0 \\ [\chi^4(\phi)] &= 1 + 2 \cos 2\phi + 2 \cos 4\phi & [\chi^4(\sigma)] &= 1. \end{aligned}$$

Partindo de $\phi = \frac{2\pi}{m}q$, $q = 1, \dots, m$ e da identidade $\sum_q \cos\left(\frac{2\pi q}{m}l\right) = m\delta_{m,l}$, podemos calcular o número de polinômios invariantes de ordem p , respectivamente para os grupos C_m e C_{mv} (eq 4.1). Vamos considerar os dois casos que se aplicam ao modelo φ^4 da teoria de Landau que são $p = 3$ e 4 . Calculando primeiro para C_m , $p = 3$, temos:

$$\frac{2}{m} \sum_{q=1}^m \left(\cos \frac{2\pi q}{m} + \cos \frac{6\pi q}{m} \right) = \begin{cases} 0 & m \neq 1, 3 \\ 2 & m = 1, 3. \end{cases} \quad (4.7)$$

Da mesma forma, para $p = 4$,

$$\frac{1}{m} \sum_{q=1}^m \left(1 + 2 \cos 2\frac{2\pi q}{m} + 2 \cos 4\frac{2\pi q}{m} \right) = \begin{cases} 1 & m \neq 2, 4 \\ 3 & m = 2, 4. \end{cases} \quad (4.8)$$

O grupo C_{mv} tem $2m$ elementos. Repetindo o cálculo acima, agora incluindo os elementos de reflexão, vamos encontrar que o número de polinômios irreduzíveis de grau três é 0 para $m \neq 1, 3$ e 1 para $m = 1, 3$; para $p = 4$, há um único subespaço

totalmente simétrico em relação aos grupos com $m \neq 2, 4$ e dois para o C_{2v} e C_{4v} . Os únicos grupos compatíveis com a condição de Landau, isto é, que admitem polinômios irredutíveis de ordem 3 são, portanto, os grupos C_1 , C_{1v} , C_3 e C_{3v} .

A base de polinômios invariantes pode ser obtida de uma série de potências de uma quantidade limitada de polinômios invariantes elementares que geram a *base de integridade* do grupo. Os polinômios que geram a base dos subgrupos irredutíveis de $O(2)$, C_m e C_{mv} são [37]:

C_m	:	ρ^2 ,	$\rho^m \cos(m\phi)$,	$\rho^m \sin(m\phi)$
C_{mv}	:	ρ^2 ,	$\rho^m \cos(m\phi)$	

Este resultado será útil mais tarde na proposição da forma de $f(\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{h})$ aplicada ao problema das faixas.

4.2 O invariante de Lifshitz

A discussão anterior mostrou como obter a expansão do termo de potencial em função das coordenadas da densidade do parâmetro de ordem, partindo estritamente do grupo de simetria das fases. Em um sistema homogêneo, isto é suficiente para determinar a forma de $f(\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{h})$. No caso mais geral, é necessário estender a análise das simetrias para os termos com dependência no gradiente, que vamos chamar de $f_1(\boldsymbol{\varphi})$.

A função f_1 pode ser escrita como uma série completamente geral até termos de segunda ordem em φ_i ,

$$f_1(\boldsymbol{\varphi}) = \sum_{ij} a_{ij} \frac{\partial \varphi_i}{\partial x_j} + \sum_{ijk} b_{ijk} \varphi_k \frac{\partial \varphi_i}{\partial x_j} + \sum_{ijkl} c_{ijkl} \frac{\partial \varphi_i}{\partial x_j} \frac{\partial \varphi_k}{\partial x_l} . \quad (4.9)$$

Esta expressão deve resultar numa quantidade extensiva quando integrada no volume do espaço real. Os termos que apresentam a forma de uma derivada total, no entanto, introduzem uma contribuição de medida zero na energia total do sistema. Isto fica bastante claro integrando o primeiro termo da expressão acima,

$$\sum_{ij} a_{ij} \int_{\Omega} \frac{\partial \varphi_i}{\partial x_j} d^D x = \sum_{ij} a_{ij} (\Delta \varphi_i)_j \int_{\partial \Omega} d^{D-1} x , \quad (4.10)$$

com $(\Delta\varphi_i)_j$ significando a variação de φ_i na direção j . Da mesma forma, o segundo termo pode ser desmembrado em dois outros,

$$\sum_{ijk} b_{ijk} \varphi_k \frac{\partial \varphi_i}{\partial x_j} = \sum_{ji < k} \frac{1}{2} (b_{ijk} - b_{kji}) \left(\varphi_k \frac{\partial \varphi_i}{\partial x_j} - \varphi_i \frac{\partial \varphi_k}{\partial x_j} \right) + \sum_{ijk} \frac{1}{2} (b_{ijk} + b_{kji}) \frac{\partial(\varphi_i \varphi_k)}{\partial x_j} \quad (4.11)$$

o primeiro dos quais é extensivo e o segundo inextensivo. A forma geral da densidade de energia $f_1(\boldsymbol{\varphi})$ portanto se resume basicamente a dois termos,

$$f_1(\boldsymbol{\varphi}) = \sum_j \sum_{i < k} b'_{ijk} \left(\varphi_k \frac{\partial \varphi_i}{\partial x_j} - \varphi_i \frac{\partial \varphi_k}{\partial x_j} \right) + \sum_{ijkl} c_{ijkl} \frac{\partial \varphi_i}{\partial x_j} \frac{\partial \varphi_k}{\partial x_l}, \quad (4.12)$$

com $b'_{ijk} = \frac{1}{2}(b_{ijk} - b_{kji})$.

A ocorrência de uma derivada primeira antisimetrizada entre as componentes do parâmetro de ordem em f_1 deve satisfazer antes de mais nada ao *critério de Lifshitz*. O conceito é que o produto do quadrado antisimetrizado da representação do parâmetro de ordem, $\{\Gamma^2\}$ com a representação vetorial T gerada pelas coordenadas de posição x_j apresente pelo menos um subgrupo simétrico, ou seja,

$$\Gamma^2 \otimes T \supset \Gamma_1. \quad (4.13)$$

A representação $\{\Gamma^2\}$ é gerada pela base $(\varphi_k, \varphi_i) - (\varphi_i, \varphi_k)$. T corresponde a uma representação do grupo de simetria translacional. Em sistemas que sofrem de invariância de translação, o espaço real das coordenadas x_j é o próprio subespaço totalmente simétrico com T igual a Γ_1 .

Capítulo 5

Fenomenologia das faixas segundo a teoria de Landau

5.1 Teoria de campo contínuo

Vários modelos foram sugeridos para tentar explicar a condensação das cargas nos planos antiferromagnéticos dos óxidos *high-T_c*. Nesses sistemas, os elétrons *3d* são muito bem localizados nos sítios. A forte interação repulsiva entre eles poderia aproximar o problema de um isolante de Mott, descrito por um modelo de Hubbard altamente correlacionado (*U* grande). Em particular, o modelo $t - J$ se mostrou satisfatório para descrever a segregação macroscópica entre a fase dopada e a fase magnética isolante [9] em compostos do tipo $La_2CuO_{4+\delta}$ [8].

O problema é que os modelos microscópicos tradicionais não se aplicam muito bem aos sistemas cuja interação de potencial é de longo alcance, o que parece ser o caso dos óxidos *high-T_c*. No limiar de baixa dopagem, a distância entre os buracos favorece a interação de troca que tende a condensá-los numa fase macroscópica dopada. Na verdade, a estabilização das faixas depende da concorrência entre esta tendência e o alcance da repulsão das cargas, somada aos efeitos de tamanho do sistema.

Alguns autores argumentam que as faixas são termodinamicamente instáveis no limite de baixa dopagem. Priadko *et al* [27] demonstram que num antiferromagneto dopado, rotacionalmente simétrico no spin, as impurezas se atraem no limite assintótico com uma lei de decaimento na forma de uma potência. Esse efeito seria

atribuído às ondas de spin e compensaria a repulsão das cargas, que decai exponencialmente sob blindagem fraca (screening), levando à condensação dos buracos em uma única fase macroscópica. Entretanto, o efeito da blindagem é bastante pequeno no limite assintótico de separação das impurezas, que corresponde ao limite de baixa dopagem. Além disso, a tendência à condensação é suficientemente fraca ao ponto de ser totalmente frustrada pela anisotropia magnética, sem a qual um sistema de dimensão 2 não pode apresentar magnetização espontânea (teorema de Mermin-Wagner [24]).

A influência do tamanho do sistema sobre o aparecimento de inhomogeneidades do campo está condicionada à existência de algum vínculo relacionado à carga total nos planos de CuO_2 , por exemplo

$$\int d^D x \rho(\phi) = Q,$$

já que o campo da magnetização alternada (antiferromagnetismo) não requer condições globais de fluxo fechado como no caso ferromagnético. No limite termodinâmico, é sempre possível minimizar a energia livre de Landau com uma solução inhomogênea formada por fases macroscopicamente segregadas [27]. A ocorrência de faixas só é possível fora desse limite, em sistemas finitos com restrições à quantidade total de cargas.

Em teorias de campo médio, a estabilidade termodinâmica das soluções inhomogêneas depende em geral de um termo “cinético” na forma (4.12) (mais derivadas superiores) e de um potencial genérico não local. A forma da energia livre para um campo de n componentes num espaço de dimensão D é

$$\int d^D x \sum_{ij}^n \chi(\varphi_i \nabla \varphi_j, (\nabla \varphi_i)^2) + U(\varphi). \quad (5.1)$$

Na vizinhança da transição de fase de segunda ordem, como já se argumentou antes, $U(\phi)$ é uma série polinomial que conserva a simetria do parâmetro de ordem.

A anti-fase entre dois domínios antiferromagnéticos vizinhos traz algumas dificuldades teóricas quanto à estabilidade termodinâmica num sistema cujos spins são tratados como um campo contínuo e suave. Pode-se demonstrar na forma de um teorema que o estado fundamental é representado por uma configuração em que as componentes da magnetização conservam globalmente o sinal, caso o potencial de interação, em primeira ordem, dependa estritamente do quadrado de cada

componente [27]. Isto quer dizer que a solução antisimétrica não é globalmente estável e portanto não pode representar o estado fundamental. Assumindo como correta a forma de uma Hamiltoniana de Heisenberg clássica para o termo de interação da parte magnética, a estabilização dos domínios em anti-fase dependeria da frustração do termo de gradiente ao quadrado através de um termo de derivada superior na forma $\omega(\nabla^2 \phi_i^2)$.

5.1.1 Aproximação assintótica com um parâmetro de ordem

Anderson sugeriu que o antiferromagnetismo dos planos de $Cu-O$ poderia ser estabilizado sob um potencial repulsivo U de alcance suficientemente longo. U grande o bastante força os elétrons a se localizarem nos sítios. O termo de hopping entre sítios metálicos diminui perturbativamente a energia cinética, o que pelo princípio de exclusão de Pauli leva ao alinhamento antiparalelo do spin entre primeiros vizinhos [31]. Outra possível consequência deste tipo de potencial é a segregação das impurezas em faixas. A menos de uma dificuldade quanto à estabilização da anti-fase entre os domínios (que continua ainda obscura em modelos tipo Heisenberg), a simples competição entre a interação de troca atrativa dos spins e a repulsão entre os buracos localizados na rede é suficiente para estabilizar as faixas de carga no regime quase estático, com temperatura e dopagem moderadas. É exatamente isto o que vamos mostrar nesta seção.

A energia livre total de cada plano deve levar em conta a interação de troca entre os spins por intermédio de uma Hamiltoniana anisotrópica e de um potencial de longo alcance entre as cargas. A Hamiltoniana total de uma rede de N sítios com parâmetro de rede a é

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i,\delta}^N \frac{e^2}{\epsilon_\delta} (1 - n_i)(1 - n_{i+\delta}) + \sum_{i,\delta}^N J_{i,\delta} n_i n_{i+\delta} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+\delta}, \quad (5.2)$$

com ϵ a distância entre dois sítios e $n = 0,1$ o número de ocupação. A idéia é fazer uma aproximação de campo médio. Para isso, é preciso primeiro construir um campo macroscópico não nulo para o antiferromagnetismo. Particionando a rede em duas subredes com parâmetro $2a$ cada uma, o campo pode ser pensado como uma interação de duas redes ferromagnéticas com magnetizações distintas.

Isto é equivalente a definir dois campos macroscópicos,

$$\mathbf{M}_{\uparrow\downarrow} = \langle n_i \mathbf{S}_i \rangle_{B(\xi)} , \quad (5.3)$$

calculados numa média de ensemble de segundos vizinhos dentro de um bloco de spins de comprimento $\sim \xi$. Tomando o limite contínuo de (5.2),

$$\begin{aligned} H = & \int_A d^2r \int_{B(\zeta)} d^2\epsilon \frac{e^2}{2\epsilon} a^4 (1 - \eta(\mathbf{r}))(1 - \eta(\mathbf{r} + \boldsymbol{\epsilon})) \\ & - \int_A d^2r \int_{B(\varepsilon)} d^2\epsilon J \sum_{j=1} \alpha_j [(M_{j\uparrow} - M_{j\downarrow})(\mathbf{r})(M_{j\uparrow} - M_{j\downarrow})(\mathbf{r} + \boldsymbol{\epsilon})], \end{aligned} \quad (5.4)$$

onde η é a densidade de número de ocupação de spin vezes a^2 e B é a bola cujo raio define a região de interação. Podemos agora definir o campo médio (staggered magnetization):

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) \equiv (\mathbf{M}_{\uparrow} - \mathbf{M}_{\downarrow})(\mathbf{r}).$$

O próximo passo é expandir $\eta(\mathbf{r} + \boldsymbol{\epsilon})$ e $\mathbf{M}(\mathbf{r} + \boldsymbol{\epsilon})$ até a segunda ordem, como abaixo

$$\psi(\mathbf{r} + \boldsymbol{\epsilon}) = \psi(\mathbf{r}) + \nabla\psi(\mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\epsilon} + \left[\frac{1}{2} \sum_i \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_i^2} \epsilon_i^2 + \sum_{i < j} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_i \partial x_j} \epsilon_i \epsilon_j \right].$$

Explorando a antisimetria dos termos ímpares na integral sobre o volume da bola $B(\zeta)$, a substituição em (5.4) leva a uma expressão para a densidade de energia,

$$\begin{aligned} f(\mathbf{r}) = & a_o \left(\frac{1}{2} \nabla^2 (1 - \eta)^2 - (\nabla \eta)^2 \right) + a_2 (1 - \eta)^2 \\ & - \sum_{j=1} \alpha_j \left[b_o \left(\frac{1}{2} \nabla^2 m_j^2 - (\nabla m_j)^2 \right) + b_2 m_j^2 \right], \end{aligned} \quad (5.5)$$

em termos de η e da magnetização normalizada $\mathbf{m} = \frac{a^2}{2s} \mathbf{M}$. Os coeficientes da expressão acima são

$$\begin{aligned} a_o &= \frac{\pi e^2}{12 a^4} \zeta^3 \\ a_2 &= \frac{\pi e^2}{a^4} \zeta \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
b_o &= \frac{2\pi s^2}{a^4} \int_0^\epsilon d\epsilon J \epsilon^3 \\
b_2 &= \frac{8\pi s^2}{a^4} \int_0^\epsilon d\epsilon J \epsilon
\end{aligned} \tag{5.6}$$

O valor exato deles não é importante, já que não temos a pretensão de construir uma teoria microscópica. É suficiente que eles sejam parâmetros positivos, dentro do espírito de uma teoria fenomenológica, com algum tipo de dependência implícita com a temperatura.

Na ausência de dinâmica, a energia de interação de troca é mínima quando spins vizinhos estão alinhados anti-paralelamente ($J > 0$). Neste caso, \mathbf{M}_\uparrow e \mathbf{M}_\downarrow estão sempre defasados em π de modo que a magnitude do campo alternado na saturação é $2s$. A passagem para o contínuo da equação (5.4) tem um vínculo implícito entre η e o módulo da magnetização à temperatura zero

$$\eta(\mathbf{r}) = m(\mathbf{r}) t^{-\beta}, \tag{5.7}$$

com $t \equiv \frac{T_N - T}{T_N}$ o parâmetro da temperatura em relação à temperatura de Néel e β o expoente crítico da magnetização. Esta dependência com a temperatura é obviamente uma aproximação. Ela é, porém, bastante razoável perto da região crítica.

A estabilidade do módulo do parâmetro de ordem em (5.5) depende da existência de termos de ordem superior (> 2) na expansão em série do potencial, conforme a discussão apresentada no capítulo 2. Poderíamos começar tentando introduzir termos de terceira ordem na energia. Entretanto, nenhum polinômio de grau 3 nas componentes de m_j satisfaz a simetria de inversão da magnetização no cristal. Com respeito à ordem de carga, o sistema deve permanecer invariante com respeito à troca do sinal da carga do elétron, na ausência de campos elétricos e magnéticos externos. Esta simetria fundamental proíbe a presença de termos de ordem ímpar em $e(1 - \eta)$. A estabilização depende, portanto, dos termos de quarta ordem. O primeiro deles é uma contribuição de quadrupolo elétrico, proporcional a

$$\frac{1}{4!} \sum_{i, \delta, \delta', \delta''} e^4 \frac{(1 - n_i)(1 - n_{i+\delta})(1 - n_{i+\delta'})(1 - n_{i+\delta''})}{\epsilon_\delta \epsilon_{\delta'} \epsilon_{\delta''}},$$

que pode ser escrita no limite contínuo como

$$\frac{1}{4!} \int d^2 r \int d^2 \epsilon \int d^2 \epsilon' \int d^2 \epsilon'' e^4 \frac{(1 - \eta(\mathbf{r}))(1 - \eta(\mathbf{r} + \boldsymbol{\epsilon}))(1 - \eta(\mathbf{r} + \boldsymbol{\epsilon}'))(1 - \eta(\mathbf{r} + \boldsymbol{\epsilon}''))}{\epsilon \epsilon' \epsilon''}.$$

Expandindo em ϵ, ϵ' e ϵ'' , a única contribuição de quarta ordem vem do termo de ordem zero da expansão

$$a_4 (1 - \eta)^4. \quad (5.8)$$

De maneira análoga, pode-se introduzir heurísticamente um termo do tipo

$$b_4 \left[\sum_{j=1} \alpha_j m_j^2 \right]^2, \quad (5.9)$$

correspondente ao termo de quadrupolo magnético. Uma expressão mais geral da energia livre deve permitir por simetria a presença de um termo de acoplamento entre o módulo da ordem de carga e spin, algo do tipo:

$$c (1 - \eta)^2 \eta^2 t^{2\beta}, \quad (5.10)$$

preservando as simetrias dos termos de segunda ordem. A densidade de energia pode ser generalizada agora para:

$$\begin{aligned} f(\mathbf{r}) = & a_o \left\{ \frac{1}{2} \nabla^2 (1 - \eta)^2 - (\nabla \eta)^2 \right\} + a_2 (1 - \eta)^2 + a_4 (1 - \eta)^4 + c (1 - \eta)^2 \eta^2 t^{2\beta} \\ & - \sum_{j=1} \alpha_j \left\{ b_o \left[\frac{1}{2} \nabla^2 m_j^2 - (\nabla m_j)^2 \right] + b_2 m_j^2 \right\} - b_4 \left[\sum_{j=1} \alpha_j m_j^2 \right]^2. \end{aligned} \quad (5.11)$$

Considerando o vínculo sobre o módulo na equação (5.7), é mais conveniente reparametrizar a magnetização na forma:

$$m_x = m \sin \theta, \quad m_y = m \cos \theta. \quad (5.12)$$

Vamos fixar em y a direção de magnetização preferencial correspondente a $\theta = 0, \pi$, de modo que $\alpha_1 = \alpha < \alpha_2 = \gamma$. Substituindo o vínculo da equação (5.7) em (5.11), a densidade de energia pode ser escrita na forma paramétrica

$$\begin{aligned} & (t^{2\beta} b_o - a_o) (\nabla \eta)^2 - (2a_2 + 4a_4) \eta \\ & + \left\{ a_2 + 6a_4 + ct^{2\beta} - t^{2\beta} b_1 (\gamma + (\alpha - \gamma) \sin^2 \theta) + t^{2\beta} b_o (\nabla \theta)^2 \right\} \eta^2 \\ & - (2ct^{2\beta} + 4a_4) n^3 + \left\{ a_4 + ct^{2\beta} - t^{2\beta} b_4 (\gamma + (\alpha - \gamma) \sin^2 \theta) \right\} \eta^4. \end{aligned} \quad (5.13)$$

Um exame mais atento verificará que o termo do laplaciano foi ignorado. A razão dessa aproximação será comentada em breve.

A interação de troca da densidade do parâmetro de ordem é simétrica com respeito à inversão dos spins. Além disso, ela admite ainda reflexões em relação aos planos que passam pelas duas direções de magnetização principal. O grupo pontual de simetria da fase ordenada da magnetização é o subgrupo de $O(2)$, C_{2v} . De acordo com o resultado final da seção 4.1.3, os termos irredutíveis sob a ação deste grupo que formam a base da expansão do potencial são do tipo m^2 e $m^2 \cos(2\theta)$. O termo de ordem 2 pode ser decomposto nessa base como

$$\frac{1}{2}b_2 \{(\alpha + \gamma)m^2 + (\gamma - \alpha)m^2 \cos(2\theta)\}$$

caracterizando uma competição entre o termo totalmente simétrico e o termo com a simetria do C_{2v} . Portanto, a anisotropia do sistema pode ser definida a partir dos parâmetros α e γ como

$$\sigma \equiv \frac{\gamma - \alpha}{\gamma + \alpha} . \quad (5.14)$$

Observando a forma original do termo de segunda ordem, $(\alpha \sin^2 \theta + \gamma \cos^2 \theta) m^2$, tanto α como γ devem ser números não negativos, de modo a evitar problemas como o aparecimento de magnetização espontânea na fase paramagnética. O valor mínimo de anisotropia corresponde a $(\gamma - \alpha) = 0$, onde prevalece o termo totalmente simétrico. O caso particular $\gamma = 0$ corresponde a um sistema totalmente isotrópico na fase de alta simetria ($m = 0$). O limite oposto (altamente anisotrópico) equivale a $\alpha = 0$, quando σ é máximo. O intervalo da anisotropia portanto é $0 \leq \sigma \leq 1$.

É preciso agora minimizar a expressão (5.13) nos dois graus de liberdade da densidade do parâmetro de ordem, θ e η . Ela pode ser reescrita de dois modos equivalentes,

$$b_o(\nabla\theta)^2 - b_1 (\gamma + (\alpha - \gamma) \sin^2 \theta) - b_2 (\gamma + (\alpha - \gamma) \sin^2 \theta)^2 \eta^2 t^{2\beta} + f(\eta) \quad (5.15)$$

e

$$A(\nabla\eta)^2 - B\eta + C(\theta)\eta^2 - D\eta^3 + E(\theta)\eta^4 , \quad (5.16)$$

com A , B e D constantes.

As faixas se orientam ao longo de uma direção muito bem definida no cristal. A ordem de spin deve se acoplar às faixas de modo a favorecer a concentração de carga nas regiões de parede entre domínios. Isto minimizaria o custo energético da ordem espiral, estabilizando a fase não homogênea. Além disso, a condição de continuidade da componente normal do campo magnético na “interface” de uma faixa com o ambiente antiferromagnético exige que $\mathbf{M} \cdot \mathbf{n} = 0$ (\mathbf{n} a direção normal às faixas no plano), ou seja, que a direção de modulação das faixas seja a mesma da espiral de spin. Dado que y foi escolhida como a direção de alinhamento preferencial dos spins (anisotropia), a modulação tem que se dar ao longo de x , ou seja, $\theta \equiv \theta(x)$ e $\eta \equiv \eta(x)$. O resultado da minimização variacional em θ é

$$(\theta')^2 + \frac{b_2}{b_o} (\gamma + (\alpha - \gamma) \sin^2 \theta) + \frac{b_4}{b_o} (\gamma - (\alpha - \gamma) \sin^2 \theta)^2 t^{2\beta} \eta^2 = \text{const.} \quad (5.17)$$

Para solucionar essa equação é preciso impor as condições de contorno apropriadamente. Foi dito na seção anterior que a estabilização da anti-fase entre os domínios depende da competição entre o termo de gradiente ao quadrado e o termo com o laplaciano. Matematicamente, essa condição pode ser reproduzida dentro de uma certa aproximação, simplesmente impondo a condição de contorno

$$\theta = \begin{cases} 0 & , x \longrightarrow -\infty \\ \pi & , x \longrightarrow +\infty \end{cases}$$

$$\theta' = 0, x \longrightarrow \pm\infty$$

ao longo da direção de modulação renormalizada. A solução de (5.17) é (vide artigo no apêndice):

$$\frac{\sqrt{1 + \Delta} \cos \theta}{\sqrt{1 + \Delta \cos^2 \theta}} = -\tanh \left[\frac{x}{\lambda} \right], \quad (5.18)$$

onde

$$\begin{aligned} \Delta &= -\frac{\frac{b_4}{b_2}(\alpha - \gamma)}{1 + \gamma \frac{b_4}{b_2}(\alpha + \gamma)m^2} \\ \lambda^{-1} &= \sqrt{-\frac{b_2}{b_o}(\alpha - \gamma)(1 + 2\gamma \frac{b_4}{b_2}m^2)}. \end{aligned}$$

O parâmetro λ é o comprimento característico do sistema, equivamente à largura da parede de Néel. No limite de baixa anisotropia $\sigma \ll 1$, que corresponde ao observado nos planos de $Cu - O$, esta solução pode ser simplificada na forma:

$$\left(1 + \frac{\Delta}{2}\right) \cos \theta = -\tanh \left[\frac{x}{\lambda}\right] . \quad (5.19)$$

Voltando em (5.15), a segunda equação agora pode ser desacoplada. Substituindo (5.19) na densidade de energia, temos

$$\begin{aligned} & (t^{2\beta} b_o - a_o)(\eta')^2 - (2a_2 + 4a_4) \eta + \\ & \left[a_2 + c t^{2\beta} + 6a_4 - t^{2\beta} b_2 (\gamma + 2(\alpha - \gamma)(1 - \Delta) \operatorname{sech}^2(\lambda^{-1} x)) \right] \eta^2 \\ & - (2c t^{2\beta} + 4a_4) n^3 \\ & + \left\{ a_4 + c t^{2\beta} - t^{2\beta} b_4 (\gamma + (\alpha - \gamma)(1 - \Delta) \operatorname{sech}^2(\lambda^{-1} x)) \right\} \eta^4 . \end{aligned} \quad (5.20)$$

Para simplificar a notação, vamos escrever a densidade de energia $f(\eta', \eta, x)$ na forma:

$$A(\eta')^2 - B\eta + A[S - U(1 - \Delta) \operatorname{sech}^2(\lambda^{-1} x)] \eta^2 - D\eta^3 + E\eta^4 , \quad (5.21)$$

onde

$$\begin{aligned} A &= t^{2\beta} b_0 - a_0 \\ B &= 2a_2 + 4a_4 \\ S &= \frac{a_2 + 6a_4 - t^{2\beta} b_2 \gamma + c t^{2\beta}}{A} \\ U &= 2 \frac{(\alpha - \gamma)}{A} b_2 t^{2\beta} (1 - \Delta) \\ D &= 2c t^{2\beta} + 4a_4 \\ E &\sim a_4 + c t^{2\beta} - t^{2\beta} b_4 \gamma^2 , \end{aligned}$$

com $E(\theta)$ aproximada assintoticamente por uma constante.

É preciso lembrar que a minimização da expressão (5.20) está condicionada ao vínculo da conservação da carga total

$$K \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx (1 - \eta(x)) = \text{constante} . \quad (5.22)$$

As condições de contorno se aplicam à largura d dos domínios renormalizada no infinito. Isso significa que a constante do vínculo acima é proporcional a uma densidade linear de carga Q/l_y dividida pelo número de domínios l_x/d ao longo da direção de modulação x , ou seja,

$$\text{const} = \frac{Q a^2}{e l_x l_y} d = \mu d ,$$

onde Q é a carga total das impurezas e μ é a dopagem no caso dos cupretos ($\frac{\mu}{2}$ para niqueletos). A condição de contorno é que as cargas tendem a se concentrar na região da parede entre dois domínios, o que é equivalente a escrever

$$\eta(x) = 1 , \quad \eta'(x) = 0 \quad \text{para } x \longrightarrow \pm\infty . \quad (5.23)$$

Uma vez que:

$$N \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx f(\eta, x)$$

é a energia total de cada domínio, cuja densidade de energia é um funcional da forma (5.21), sujeita ao vínculo K , então a configuração de mínimo é aquela em que

$$\delta(N + \Lambda K) = \delta \int dh(\eta', \eta, x) = \delta \int dx (f(\eta', \eta, x) - \Lambda \eta) = 0,$$

onde Λ é um multiplicador de Lagrange. Aplicando a equação de Euler sobre $h(\eta', \eta, x)$, a equação diferencial resultante é

$$\eta''(x) - (S - U \text{sech}^2(\lambda^{-1} x)) \eta + 3 \frac{D}{2A} \eta^2 - 2 \frac{E}{A} \eta^3 + \frac{B - \Lambda}{2A} = 0 \quad (5.24)$$

Resolver esta equação analiticamente é uma tarefa bastante complicada. Ao invés disso, vamos resolver a equação linear, que contém toda a informação necessária para encontrarmos a forma correta da solução, a menos de uma correção perturbativa dos termos de ordem superior. A equação em aproximação de ordem 2 na energia fica:

$$\eta''(x) - (S - U \text{sech}^2(\lambda^{-1} x)) \eta + \frac{B - \Lambda}{2A} = 0 \quad (5.25)$$

Substituindo a condição de contorno em (5.25), vemos que $\frac{B-\Lambda}{2A} = S$. A solução desta equação não é trivial mas, é factível de ser explicitada analiticamente. Se η_1 e η_2 são as duas soluções da equação homogênea, então a solução geral do problema é da forma [4]

$$\eta(x) = \eta_1 (c_1 + \nu_1) + \eta_2 (c_2 + \nu_2) \quad (5.26)$$

onde as funções ν_1 e ν_2 são dadas por

$$\begin{aligned} \nu_1 &= -\frac{1}{N} \int_0^x dx \eta_2 S \\ \nu_2 &= \frac{1}{N} \int_0^x dx \eta_1 S, \end{aligned}$$

N , c_1 e c_2 constantes.

As soluções do problema homogêneo η_1 e η_2 podem ser calculadas em série de Frobenius, resultando no produto de funções hiperbólicas e hipergeométricas. Temos:

$$\begin{aligned} \eta_1(x) = F \left[\frac{1}{4} + \frac{\lambda}{2} \sqrt{S} - \frac{\sqrt{1+4U\lambda^2}}{4}, \frac{1}{4} + \frac{\lambda}{2} \sqrt{S} + \frac{\sqrt{1+4U\lambda^2}}{4}, 1 + \lambda \sqrt{S}, \operatorname{sech}^2(\lambda^{-1} x) \right] \cdot \\ \cdot \left(v \operatorname{sech}^2(\lambda^{-1} x) \right)^{\frac{\lambda}{2} \sqrt{S}} \end{aligned} \quad (5.27)$$

$$\begin{aligned} \eta_2(x) = F \left[\frac{1}{4} - \frac{\lambda}{2} \sqrt{S} - \frac{\sqrt{1+4U\lambda^2}}{4}, \frac{1}{4} - \frac{\lambda}{2} \sqrt{S} + \frac{\sqrt{1+4U\lambda^2}}{4}, 1 - \lambda \sqrt{S}, \operatorname{sech}^2(\lambda^{-1} x) \right] \cdot \\ \cdot \left(v \operatorname{sech}^2(\lambda^{-1} x) \right)^{-\frac{\lambda}{2} \sqrt{S}}. \end{aligned} \quad (5.28)$$

A função hipergeométrica é usualmente definida por

$$F[a, b, c, z] = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+k)\Gamma(b+k)}{\Gamma(c+k)\Gamma(k)} z^k.$$

A ordem espiral favorece a condensação dos buracos na região de parede entre os domínios em antifase, frustrando o efeito do potencial repulsivo. A estabilidade das faixas depende do efeito de condensação que as paredes de Néel exercem sobre as cargas, significando que ela não é possível sob uma ordem colinear de spins

em qualquer teoria de campo contínuo. Estreitando a largura das paredes no limite de $\lambda \rightarrow 0$, isto é equivalente a desprezar a interação de troca $b_o(\nabla \mathbf{m})^2$ da Hamiltoniana tomando o limite de $b_0 \rightarrow 0$. A equação (5.25) assume a forma

$$\eta'' - S\eta + S = 0 .$$

Pelo argumento acima, a solução desta equação é uma constante $\eta = 1 - \mu$ (conservação da carga), implicando que $S = 0$ para $\mu \neq 0$. Esta condição estabelece uma relação entre os parâmetros fenomenológicos que regem o comportamento do sistema, que são a_2 , b_2 e o parâmetro de acoplamento entre as duas ordens c . No fundo, ela é uma consequência direta da conservação da carga no sistema. Do contrário, para $S \neq 0$, pode-se mostrar que não é matematicamente possível encontrar coeficientes c_1 e c_2 não nulos em (5.26) que satisfaçam a condição de contorno assintótica do problema. A solução procurada é portanto:

$$\eta(x) = F \left[\frac{1}{4} - \frac{\sqrt{1+4U\lambda^2}}{4}, \frac{1}{4} + \frac{\sqrt{1+4U\lambda^2}}{4}, 1, \text{sech}^2(\lambda^{-1}x) \right] \quad (5.29)$$

Queremos mostrar que esta solução descreve o problema a menos de correções dos termos de ordem superior. Em princípio, poderíamos tentar linearizar a equação (5.24), argumentando que a solução desta equação pode ser escrita como uma combinação linear da solução geral de (5.25), $\eta_L(x)$, com uma correção perturbativa que vamos chamar de $\psi(x)$. O problema é que lidamos com condições de contorno extremamente delicadas, por causa da aproximação assintótica. Pode-se facilmente verificar que não é possível aplicar a condição de contorno da equação (5.24)

$$\frac{B - \Lambda}{2A} + 3\frac{D}{2A} - 2\frac{E}{A} = 0$$

sobre (5.25) sem provocar uma divergência na solução .

Ao invés disso, usaremos uma estratégia diferente. Vamos mostrar que o erro introduzido pela aproximação de ordem 2 é assintoticamente bem comportado, e portanto a forma da solução (5.29) é basicamente correta. Substituindo $\eta(x) + \psi(x)$ em (5.24), a equação de ψ em primeira ordem fica

$$(\psi'') - \left[\frac{6E - 3D}{A} - U \text{sech}^2(\lambda^{-1}x) \right] \psi + 3\frac{D}{2A} (\eta^2 - 1) - 2\frac{E}{A} (\eta^3 - 1) = 0 .$$

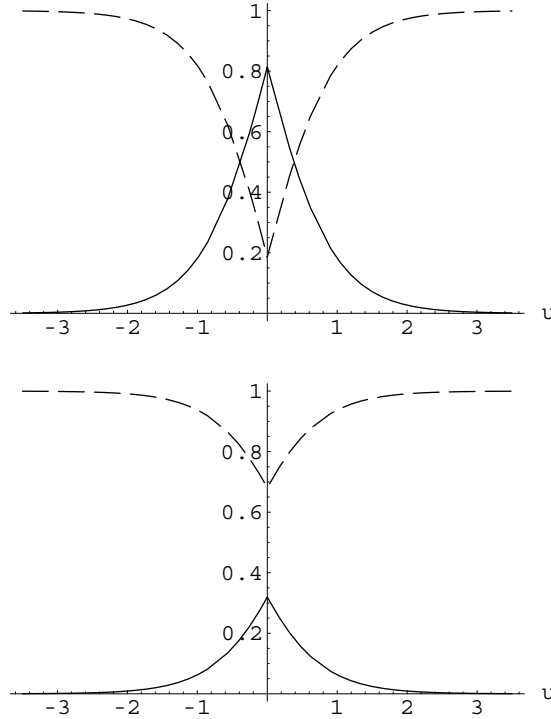


Figura 5.1: Sóliton da densidade de carga $(1-\eta)(x)$ (curva sólida) vs. $u = \frac{x}{\lambda}$ calculada para $U\lambda^2 = 1.5$ e $U\lambda^2 = 0.5$, de cima para baixo. A curva tracejada representa a distribuição complementar $\eta(x)$. O alargamento dos picos é provocado pela divergência da escala λ com o aumento da temperatura.

Aproximando $\eta \sim 1$, a solução desta equação tem a forma da solução (5.27), que é \sim proporcional uma potência de $\text{sech}^2(\lambda^{-1}x)$. Portanto, $\psi(x)$ converge rapidamente para zero no limite $x \rightarrow \pm\infty$. Isto assegura a estabilidade assintótica da distribuição, que tem a forma de um sóliton no sistema com a escala renormalizada ao longo da direção de modulação das faixas.

Agora que conhecemos a forma da distribuição de carga, podemos calcular a distância de separação entre os picos. Graficando a dependência de $\int du(1-\eta(u)) = \mu \frac{d}{\lambda}$ com $U\lambda^2$ (u adimensional), a curva encontrada é uma reta que sai da origem (correlação praticamente 1) com coeficiente angular 0.814. Para $U\lambda^2 = 0$, a solução η é uma constante igual a 1 e para $U\lambda^2 = 2$, o sóliton de carga atinge a amplitude máxima $1 - \eta(0) = 1$. O intervalo de variação é portanto compreendido em $[0, 2]$. Com isto, podemos escrever,

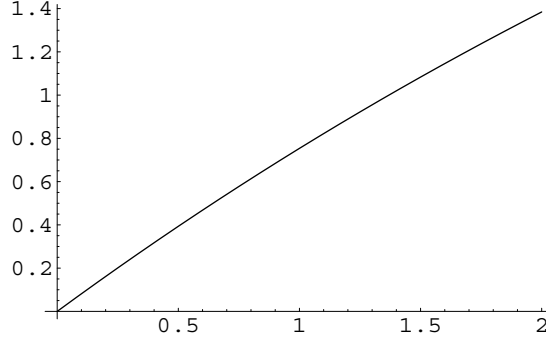


Figura 5.2: Dependência de $\mu \frac{d}{\lambda}$ (eixo vertical) com o parâmetro $U\lambda^2$.

$$\frac{d}{\lambda} \mu \sim \frac{4}{5} U \lambda^2 = -\frac{8}{5} \frac{(\alpha - \gamma) b_2 t^{2\beta}}{a_0 - b_0 t^{2\beta}} \lambda^2 \sim \frac{8}{5} \frac{b_0 t^{2\beta}}{a_0 - b_0 t^{2\beta}} . \quad (5.30)$$

Fazendo o limite de $t \rightarrow 0$, $\frac{d}{\lambda} \mu \sim |t|^{2\beta}$, desde que $a_0 - b_0 > 0$. A interpretação deste comportamento é que apesar da escala do sistema λ divergir na temperatura crítica, a distância entre os picos vai se estreitando até as duas grandezas se confundirem em $d \sim \lambda$ na fase de alta incomensurabilidade, perto da região crítica. Concomitantemente, a amplitude dos picos vai diminuindo (conservação da carga) até que a distribuição adquire o aspecto de uma modulação tipo senoidal muito suave. Em outras palavras, a distribuição evolui com a temperatura do regime de multi-sólitons pouco interagentes (baixa incomensurabilidade), perto da saturação, para uma distribuição altamente incomensurável na vizinhança da fase de alta simetria. Este resultado concorda amplamente com as observações experimentais nesses sistemas, incluindo a dependência da distância entre os picos com a dopagem, que é do tipo $d \sim \frac{1}{\mu}$ no intervalo $0 < \mu \lesssim \frac{1}{8}$ [35].

Considerando o intervalo máximo de variação do parâmetro $\frac{\mu d}{\lambda}$, $[0, \frac{8}{5}]$, o tamanho máximo permitido para a largura dos domínios no regime de saturação da temperatura ($t \sim 1$) é $d = \frac{8\lambda}{5\mu}$. Pensando numa dopagem de 10%, isto é equivalente a $d = 16\lambda$.

A Hamiltoniana (5.2) modela o problema com um único parâmetro de ordem, a magnetização alternada. Isso quer dizer que a transição das estruturas de carga para o regime homogêneo deve depender estritamente da temperatura de Néel, que é quando cessa a ordem antiferromagnética e a única interação válida passa

a ser o potencial entre as cargas. Esta abordagem não é criticamente correta nos compostos de Cu e Ni , nos quais a ordem das faixas resiste até duas vezes a temperatura de transição magnética. A causa desse comportamento, como já se argumentou antes, é atribuída à dinâmica provocada pelas flutuações térmicas do antiferromagneto sobre as faixas, encurtando o alcance de interação entre elas. Acredito que este tipo de descrição possa ser aplicado à transição de fase dos óxidos de Cr , nos quais as duas ordens coincidem exatamente [26].

5.2 Formulação com um segundo parâmetro de ordem

Uma possibilidade que permitiria teoricamente estabilizar as faixas na fase magneticamente desordenada consiste em admitir a competição entre dois parâmetros de ordem independentes, porém acoplados. Vamos propor agora um modelamento fenomenológico estático baseado na incorporação de um segundo parâmetro de ordem na teoria, com a intenção de descrever as faixas perto da criticalidade. Para isso, vamos construir uma nova Hamiltoniana para o problema, desta vez partindo dos argumentos de simetria desenvolvidos no capítulo anterior.

O novo parâmetro de ordem procurado é um incremento de carga na forma $\delta\rho = (\rho - \rho_0)(x)$, com $\rho_0(x)$ a densidade de carga normalizada da fase altamente simétrica. A distribuição das cargas deve se estabilizar em fases macroscopicamente segregadas nesta fase, e portanto ρ_0 é uma constante igual à densidade média de impurezas $\frac{Q}{V}$ tomada no “volume” do espaço associado, que são no caso os planos antiferromagnéticos.

A concentração de cargas pode ser descrita através de uma teoria de transições de comensurabilidade. Na transição de fase, $\delta\rho \rightarrow 0$, transformando a solução em um patamar homogêneo acima de T_I , que denotaremos como o ponto crítico da ordem das faixas. Abaixo de T_I , a solução é modulada. A idéia é escrever $\delta\rho(x)$ na forma $\delta\rho e^{i\phi}$, explicitando a simetria do problema através das coordenadas do parâmetro de ordem no plano complexo, definidas pela amplitude das modulações $\delta\rho$ e pela fase ϕ . O grupo de baixa simetria associado a este parâmetro de ordem é o C_{1v} , que admite uma única reflexão com respeito a um plano que corta o plano complexo no eixo real. Desse modo, o parâmetro de ordem perde a identificação

restrita com o conceito de “concentração de buracos” e se torna uma medida da modulação das ondas de densidade de carga. Esta simetria fica bastante evidente a partir do vínculo entre a modulação da carga e do spin, que é tal que

$$\eta + \delta\rho \cos \phi = 1 - \mu . \quad (5.31)$$

A base de polinômios que gera a forma do potencial é formada pelos monômios irreduzíveis $\delta\rho^2$ e $\delta\rho \cos \phi$. A função de Landau que procuramos tem a forma

$$f = a_2(\delta\rho)^2 + a_1\delta\rho \cos \phi + a_4(\delta\rho)^4 + a_{01}\delta\rho^2\phi' + a_0 [(\delta\rho')^2 + (\delta\rho)^2(\phi')^2] + c(\delta\rho)^2m^2 + f_m , \quad (5.32)$$

onde f_m é a densidade de energia da parte magnética, que é totalmente análoga à da seção 5.1.1. A expressão mais geral possível deveria conter termos de ordem 2 e 3 em $\cos \phi$. Optamos por omiti-los de forma a simplificar o cálculo. A descrição ainda assim é qualitativamente satisfatória, porque preserva os termos de ordem mais baixa, que contém o grupo de simetria total do problema.

É importante observar que a presença de um termo linear em $\delta\rho$ não constitui um problema de quebra da simetria elétron-buraco, uma vez que ele vem acompanhado de uma fase. Assim, pensando num sistema hipotético de cargas positivas, bastaria somar uma fase de π a ϕ para manter a Hamiltoniana simétrica.

5.2.1 Criticalidade das faixas

Acima da temperatura de Néel ($T > T_N$) as faixas nos compostos de *Cu* e *Ni* se mantêm estáveis na ausência de magnetismo macroscópico. Nesta fase, que será chamada de fase de carga, as faixas avançam em direção à criticalidade definida por uma temperatura T_I , acima da qual a modulação é zero ($\delta\rho = 0$). Vamos assumir a aproximação em que $\delta\rho$ varia muito lentamente com a posição (ou seja $(\delta\rho)' \sim 0$), o que faz bastante sentido na fase altamente incomensurável. Observando o vínculo de conservação da carga da equação (5.31), a equação de Euler-Lagrange de f em ϕ , é:

$$\phi'' + \frac{1}{2\delta\rho} \sin \phi \left(\frac{a_1 + \Lambda}{a_0} \right) = 0 \quad (5.33)$$

Esta equação pode ser resolvida, notando que $2\phi'\phi'' = [(\phi')^2]'$. Multiplicando a equação acima por ϕ' e integrando,

$$(\phi')^2 = \frac{1}{2\delta\rho} \cos(\phi) \left(\frac{a_1 + \Lambda}{a_0} \right) + C \quad (5.34)$$

e que pode ser escrita na forma

$$\left(\frac{\phi'}{2} \right)^2 = \frac{u^2}{v} \left(1 + u^2 \cos^2 \frac{\phi}{2} \right) \quad (5.35)$$

onde

$$v = \left(\frac{a_1 + \Lambda}{a_0} \right) ,$$

e

$$u = \frac{v}{C - \frac{v}{2}} .$$

A solução desta equação é uma função elíptica de segundo tipo [25],

$$\phi(x) = 2K \left(\frac{\sqrt{v}}{u} x | u^2 \right) . \quad (5.36)$$

Para $u^2 \ll 1$, isto é, $v \ll C$,

$$\phi(x) \sim 2 \frac{\sqrt{v}}{u} x \quad (5.37)$$

Nesta aproximação, $\cos(\phi(x)) \sim \cos(k_0 x)$ com $\frac{1}{k_0}$ definindo o comprimento de onda da solução. Voltando à expressão (5.32), a energia total do sistema é,

$$F = l_y \int_0^{l_x} dx \{ a_1 \delta\rho \cos(k_0 x) + a_{01} (\delta\rho)^2 k_0 + a_0 k_0^2 + g(\delta\rho) \} . \quad (5.38)$$

A frequência k_0 que estabiliza termodinamicamente o sistema deve ser encontrada minimizando F $\left(\frac{\partial F}{\partial k_0} = 0 \right)$. No limite de $L_x \gg \frac{2\pi}{k_0}$, a integral sobre $\cos(k_0 x)$ é desprezível em comparação com os outros termos. Assim,

$$(\delta\rho)^2 k_0 [a_{01} + 2a_0 k_0] = 0 , \quad (5.39)$$

e portanto

$$k_0 = -\frac{a_{01}}{2a_0} . \quad (5.40)$$

O módulo da amplitude $\delta\rho$ das modulações pode ser encontrado de modo análogo, agora minimizando a energia com respeito a $\delta\rho$. O resultado é:

$$\delta\rho = \left(\frac{\frac{a_{01}^2}{4a_0} - a_2}{2a_4} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (5.41)$$

Espera-se que $\delta\rho \rightarrow 0$ quando $T \rightarrow T_I$. Para que isto aconteça, é necessário que $a_2 = a \frac{(T-T_0)}{T_0}$, onde T_0 é tal que

$$T_I = T_0 \left(1 + \frac{a_{01}^2}{4a_0 a} \right) . \quad (5.42)$$

Substituindo estas duas relações em (5.41), vamos encontrar que

$$\delta\rho = \sqrt{\frac{a + \frac{a_{01}^2}{4a_0}}{2a_4}} \left(\frac{T_I - T}{T_I} \right)^{\frac{1}{2}} . \quad (5.43)$$

A temperatura T_0 indica uma transição de fase associada à mudança de sinal do coeficiente a_2 , dentro do espírito fenomenológico da teoria de Landau. Esta temperatura deve ser interpretada como uma transição de comensurabilidade do sistema spin-carga. Abaixo de T_0 , o termo de ordem 2 em $\delta\rho$ compete com o termo $a_1\delta\rho \cos\phi$, cuja importância é grande em comparação com o invariante de Lifshitz na fase de baixa incomensurabilidade. Isto é bastante claro se pensarmos que, nessa fase, a solução que descreve o problema envolve modulações de fase abruptas e fortemente localizadas na região de parede entre os domínios, indicando que o termo $a_{01}\delta\rho^2\phi'$ não tem importância alguma nessa região e portanto não compete com o termo de segunda ordem. Acima de T_0 , a_2 passa a competir com o invariante de Lifshitz, que estabiliza a fase altamente incomensurável. No limite de altas temperaturas, o termo dependente do cosseno da fase introduz uma contribuição não extensível na energia do sistema e pode ser ignorado.

Esta interpretação de transição de comensurabilidade parece ser bastante adequada frente às observações experimentais. Sabe-se que o aumento da dopagem no $La_{1.6-x}Nd_{0.4}Sr_xCuO_4$ gera algum tipo de transição de fase em torno de $x \sim \frac{1}{8}$. Abaixo desse limiar, a dependência da dopagem com o esplitamento dos picos ϵ ($\sim \frac{1}{d}$) é linear, indicando que as faixas são totalmente incompressíveis. Acima do valor crítico, o comportamento muda significativamente de padrão, como se as

faixas perdessem a identidade e adquirissem o aspecto de uma modulação suave altamente incomensurável.

O efeito da temperatura neste sistema é bastante análogo ao do aumento da dopagem, reforçando a idéia de transição de comensurabilidade em uma temperatura T_0 , possivelmente abaixo da temperatura de Néel, na fase de spin.

Conclusões

A grande dificuldade que teóricos em geral vêm encontrando frente às faixas de carga é que aparentemente não existe um ferramental apropriado para tratá-las. Se por um lado tentamos cobrir o aspecto das flutuações microscópicas de spin, que possibilita teoricamente estabilizar as faixas mesmo na ausência de ordem espiral, inevitavelmente perdemos a informação sobre o efeito do potencial de longo alcance, que frustra a tendência à condensação dos singletos antiferromagnéticos. Por outro lado, o termo de potencial pode ser facilmente descrito no limite termodinâmico através de variáveis macroscópicas. Infelizmente, o tratamento de campo molecular despreza uma parte relevante da física do problema, que corresponde às interações de curto alcance que provocam as flutuações.

No caso do antiferromagnetismo, isto é particularmente problemático, uma vez que mesmo flutuações infinitesimais podem produzir efeitos fisicamente mensuráveis, como por exemplo caracterizar a anti-fase entre dois domínios. Um campo macroscópico não é capaz de “enxergar” estas flutuações, o que significa dizer que ele é sensível apenas ao aparecimento de inomogeneidades macroscópicas, indicadas pela curvatura das linhas de campo. Por isso, a magnetização alternada $\mathbf{M} = \mathbf{M}_\uparrow - \mathbf{M}_\downarrow$ definida no capítulo 5 depende de um modo essencial da helicidade da solução, que está associada à largura das paredes de Néel.

Apesar destas limitações, ao que parece a teoria de Landau é capaz de indicar corretamente o tipo de comportamento termodinâmico das ondas de densidade de spin e carga nos óxidos *high- T_c* dopados. Um dos motivos é a grande robustez da teoria, que permite em última instância extrair o comportamento qualitativo do sistema. A descrição de sólitons fracamente interagentes se aplica muito bem ao caso dos cupretos fortemente dopados com Nd , que suprime as flutuações das faixas num bom intervalo de temperatura e dopagem. O aumento da temperatura faz com que as faixas se alarguem ao mesmo tempo em que a amplitude dos

picos diminui. Durante o processo de delocalização das cargas, o sistema sofre uma transição de comensurabilidade e se estabiliza na fase de alta temperatura, vizinha à fase altamente simétrica onde as faixas desaparecem. Em particular, o modelo com o segundo parâmetro de ordem, escrito em termos da modulação de carga, prevê explicitamente a temperatura de transição entre as ordens de baixa e alta incomensurabilidade, indicando que esta interpretação é consistente com os elementos físicos envolvidos nos planos de $Cu - O$.

Apresentamos nesta dissertação a teoria geral de fenômenos críticos de Landau, ressaltando a importância do estudo das simetrias das fases para a construção da energia livre do problema. O capítulo 3 em particular descreve o cenário da intensa atividade experimental que envolve atualmente o estudo das faixas de carga. A intenção foi conhecer as motivações dos físicos experimentais a respeito do problema e, principalmente, saber até que ponto o modelo das faixas é confiável do ponto de vista experimental. É preciso lembrar que os trabalhos em espalhamento de neutrons foram fundamentais para a consolidação desta imagem de faixas de carga imersas num antiferromagneto isolante. Uma dentre as conclusões que esses experimentos trouxeram, é a comprovação da incomensurabilidade dos picos de espalhamento magnético com a rede e a verificação de uma quebra de simetria translacional cristalina comensurável com a ordem magnética, dando suporte à hipótese de segregação microscópica das cargas ao longo de uma direção. Atualmente, acredita-se que elas tenham um papel crucial no mecanismo de formação dos pares de Cooper, que levaria à coerência de fase supercondutora de alta temperatura.

Bibliografia

- [1] P. W. Anderson, *Basic notions of condensed matter physics*, (Benjamin-Cummings Publishing Company Inc., 1984)
- [2] G. E. Bacon, *Neutron diffraction*, (Clarendon Press, Oxford, 1975)
- [3] G. Burns, *High temperature superconductivity: an introduction*, (Academic Press, San Diego, 1992)
- [4] E. Butkov, *Mathematical physics*, (Addison-Wesley Publishing Company, 1968)
- [5] A. H. Castro Neto e D. Hone, Phys. Rev. Lett. **76**, 2165 (1996)
- [6] A. H. Castro Neto, Phys. Rev. Lett. **20**, 3931 (1997)
- [7] E. W. Carlson, D. Orgad, S. A. Kivelson e V. J. Emery, cond-mat/0001058
- [8] J. H. Cho, F. C. Chou e D. C. Johnston, Phys. Rev. Lett. **70**, 222 (1993)
- [9] V. J. Emery, S. A. Kivelson e H. Q. Lin, Phys. Rev. Lett. **64**, 475 (1990)
- [10] V. J. Emery, S. A. Kivelson e J. M. Tranquada, cond-mat/9907228
- [11] S. M. Hayden *et al.*, Phys. Rev. Lett. **76**, 1374 (1996)
- [12] M. Hamermesh, *The group theory and its applications to physical problems*, (Dover Publications Inc., New York, 1962)

- [13] M. Havelio e A. Auerbach, Phys. Rev. Lett. **83**, 4848 (1999)
- [14] K. Huang, *Statistical Mechanics*, (John Willey & Sons, Reading, 1987)
- [15] Y. A. Izyumov e R. P. Ozerov *Magnetic Neutron Diffraction*, (Plenum Press, New York, 1970)
- [16] L. P. Kadanoff *et al*, Rev. Mod. Phys. **30**, 395 (1967)
- [17] C. Kittel, *Introduction to solid state physics*, (John Willey & Sons, 1996)
- [18] J. Kocinski, *Theory of symmetry changes at continuous phase transitions*, (Elsevier, Amsterdam, 1983)
- [19] L. D. Landau e E. M. Lifshitz, Phys. Z. Soviet Union, **8**, 153 (1935)
- [20] L. D. Landau e E. M. Lifshitz, *Electrodynamics of continuous media*, (Pergamon Press, Reading, 1960)
- [21] L. D. Landau e E. M. Lifshitz, *Statistical Physics*, (Pergamon Press, Oxford, 1969)
- [22] S. W. Lovesey, *Theory of neutron scattering from condensed matter*, v. 1 & 2, (Clarendon press, Oxford, 1984)
- [23] G. Y. Lyubarskii, *The application of group theory in physics*, (Pergamon Press, London, 1960)
- [24] N. D. Mermin e H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966)
- [25] P. M. Morse e M. Feshbach, *Methods of theoretical physics*, (Mc Graw Hill Book Co., 1953)
- [26] R. Pynn, W. Press, S. M. Shapiro e S. A. Werner, Phys. Rev **B 13**, 295 (1976)
- [27] L. P. Priadko *et al*, cond-mat/9905146

- [28] H. E. Stanley, *Introduction to phase transition and critical phenomena*, (Oxford University Press, New York and Oxford, 1971)
- [29] M. Tinkham, *Group theory and quantum mechanics*, (Mc Gaw-Hill, New York, 1964)
- [30] J. M. Tranquada, J. Chem. Solids **59**, 2150-2154 (1998)
- [31] J. M. Tranquada, Phys.**B** 241-243 (1998) 745-750
- [32] J. M. Tranquada, D. J. Buttrey e V. Sachan, Phys. Rev. **B 54**, 12318 (1996)
- [33] J. M. Tranquada *et al.*, Phys. Rev. Lett. **73**, 1003 (1994)
- [34] J. M. Tranquada *et al.*, Phys. Rev. **B 54**, 7489 (1996)
- [35] J. M. Tranquada *et al.*, Phys. Rev. lett **78**, 338 (1997)
- [36] J. M. Tranquada, P. Wochner e D. J. Buttrey, Phys. Rev. Lett. **79**, 2133 (1997)
- [37] J. Tolédano e P. Tolédano, *The Landau theory of phase transitions*, (World Scientific Inc., 1987)
- [38] D. I. Uzunov, *Theory of critical phenomena*, (World Scientific Inc., 1983)
- [39] J. Zaanen, J. Phys. Chem. Solids **59**, 1769-1773 (1998)
- [40] J. Zaanen e W. van Saarloos, Physica **C** 282-287 (1997) 178-181
- [41] J. Zaanen e O. Gusnnarsson, Phys. Rev. **B 40**, 7391 (1989)
- [42] O. Zachar, S. A. Kivelson e V. J. Emery, Phys. Rev. **B 57**, 1422 (1998)

Apêndice

Criticality of Domains in Ferromagnets described by the Landau Functional

B. Uchoa and G. G. Cabrera

Instituto de Física “*Gleb Wataghin*”, Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP),
C. P. 6165, Campinas, SP 13083-970, Brazil

April 10, 2000

Abstract

The distribution of magnetic moments in finite ferromagnetic bodies was first investigated by Landau and Lifshitz in a famous paper, where they obtained the domain structure of a ferromagnetic crystal at low temperatures, in the regime of saturated magnetization. We propose a generalization of the above approach, using from the start the Landau theory of phase transitions, where the free energy of the system is written as a functional with the magnetic permeability as the order-parameter density. We obtain more general field solutions, allowing non-homogeneous regimes, which are used to describe the ferromagnetic phase transition at T_c . We find that domain sizes and walls are enlarged when the temperature is increased in direction of T_c . Very close to T_c however, the walls tend to suppress the layers, leading to a continuous vanishing of the domain structure. We discuss the validity of the model in the critical region.

1 Introduction

The distribution of the magnetization inside a general ferromagnetic body follows a closed flux configuration which leads to the appearance of magnetic domains. For the stripe domain structure, which is common in whiskers, magnetizations of neighboring domains are oppositely oriented, separated by 180° Bloch walls. In a pioneering work, Landau and Lifshitz proposed for the first time a theory that quantitatively predicted the above configuration, relating domain sizes and wall width with the dimensions of the body and some phenomenological parameters associated with the crystal structure[1]. In their analysis, the magnetic energy of the crystal is built as consisting of two terms: one is the exchange interaction of the spins, proportional to

$$[(\nabla m_x)^2 + (\nabla m_y)^2 + (\nabla m_z)^2] , \quad (1)$$

where $\mathbf{m} = (m_x, m_y, m_z)$ is the magnetic moment, whose absolute value is considered constant and equal to the saturation value; the other gives the contribution of the magnetic

anisotropy of the crystal, that competes with the exchange interaction. Assuming an easy direction of magnetization along the z -axis, the latter was written as

$$\beta[m_x^2 + m_y^2],$$

with $\beta > 0$. To find the distribution of the magnetization inside the material, one solves a variational equation that minimizes the sum of these two contributions for the particular geometry and size of the sample, with proper boundary conditions. For the stripe geometry and the closed flux configuration, boundary conditions induce the formation of stripe domains. The solution of the problem leads to a soliton-like pattern for the magnetization near domain walls[1], forming a non-homogeneous phase where the order parameter (magnetization) changes sign alternately from one domain to the next. Due to the ferromagnetic interactions, the spins locally tend to be aligned, and one sees that the exchange energy is small everywhere, except in the intermediate region between domains, where the magnetic moment smoothly changes its orientation to satisfy the anisotropic energy and the boundary conditions. The overall energy is minimized, since there are no field lines outside the sample. The main assumption of this treatment is that the system is ferromagnetically ordered and close to saturation, in the low temperature phase.

In this paper we propose an extension of the Landau-Lifshitz approach in order to study the criticality of the non-homogeneous phase (magnetic domains) within the Landau theory of phase transitions. The *Landau free energy* of a ferromagnetic system is written as a series of the magnetic moment density $\mathbf{m} = (m_x, m_y, m_z)$, which is considered as the *order parameter*. In the neighborhood of the critical temperature T_c , $|\mathbf{m}|$ is assumed to be small. This power series introduces phenomenological coefficients for the exchange and anisotropy contributions, and is written following the general Landau prescription . If one writes the Landau free energy density as a function of the magnetization density \mathbf{m} and the magnetic field \mathbf{H} , *i.e.* $f = f(\mathbf{m}, \mathbf{H})$, the thermodynamics is obtained through the partition function

$$Z = \exp\left(\frac{-G(\mathbf{H}, T)}{kT}\right),$$

which is written above in terms of the Gibbs free energy $G(\mathbf{H}, T)$, and is proportional to

$$\int (D\mathbf{m}) \exp\left(-\frac{E(\mathbf{m}, \mathbf{H})}{kT}\right), \quad (2)$$

where the symbol $D\mathbf{m}$ means integration over all possible configurations of \mathbf{m} , with $E(\mathbf{m}, \mathbf{H})$ being the effective Hamiltonian

$$E(\mathbf{m}, \mathbf{H}) = \int d^d r f(\mathbf{m}, \mathbf{H}). \quad (3)$$

The latter integration is carried for a d -dimensional system. The expression (2) yields the partition function as a functional integral of the field.

Assuming that the dimensions of the stripe domains are large in comparison with the lattice constant (continuous approximation), variations of the magnetization lines inside the material are considered smooth and the term that measures the inhomogeneity contribution can be treated in first order as a gradient. In other words, we are assuming that the field $\mathbf{m} = (m_x, m_y, m_z)$ and its derivatives are continuous.

2 The Model

The exchange term (1) considered by Landau and Lifshitz can be obtained from the classical Heisenberg model in the continuous approximation, replacing discrete spin variables by a spin density order parameter (magnetization density) $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ [4]

$$[(\nabla m_x)^2 + (\nabla m_y)^2 + (\nabla m_z)^2] \ .$$

Such an expression is valid for an isotropic medium or for a crystal with a cubic point group. Anisotropies in the exchange are usually small, and (1) is a good approximation, even for axial symmetry. The dominant anisotropy effects in the spin Hamiltonian come from the admixture of the spin-orbit coupling into the crystal field. For a crystal with one easy magnetization direction, we will take this contribution to be

$$[\alpha(m_x^2 + m_y^2) + \gamma m_z^2] \ ,$$

with α and γ positive constants. In the bulk, far from the domain wall, we have

$$m_x = m_y = 0, \ m_z = \pm m_0, \quad \nabla m_z = 0 \ .$$

To study the interface criticality, we write the excess free energy relative to a bulk system in the following form:

$$\begin{aligned} f(\mathbf{r}, T) = & a(T) [\alpha(m_x^2 + m_y^2) + \gamma(m_z^2 - m_0^2)] + \\ & + b [\gamma^2(m_z^4 - m_0^4) + 2\alpha\gamma(m_x^2 + m_y^2)m_z^2 + \alpha^2(m_x^2 + m_y^2)^2] + \\ & + c [|\nabla m_x|^2 + |\nabla m_y|^2 + |\nabla m_z|^2] \ . \end{aligned} \quad (4)$$

As usual, the phenomenological coefficient $a(T)$ for the quadratic term changes sign at the critical temperature and is taken as a linear function of T , in the form

$$a(T) = \left(\frac{T - T_c}{T_c} \right) a_0 \equiv a_0 t, \quad (5)$$

with $a_0 > 0$ and $t = \frac{T - T_c}{T_c}$, so $a(T)$ is negative in the low temperature phase. We then assume $\alpha < \gamma$, since the z -axis is taken as the easy axis of magnetization. Additionally, we will assume $\mathbf{H} \equiv 0$, which implies that coefficients of odd order in the series vanish identically, since $f(\mathbf{m}, \mathbf{H} = \mathbf{0})$ must be symmetric under inversion of the spins.

The above Landau free energy (4) is a simple generalization of the commonly used expression to study phase transitions (see for instance Ref.[2], p. 417), with quadratic and quartic terms in the order parameter. Due to the magnetic anisotropy, the elementary invariants of the axial symmetry group are now $(m_x^2 + m_y^2)$ and m_z^2 , and the free energy is built from them[3]. The fourth order term in the free energy can be interpreted as the contribution of the spin quadrupole interaction. To minimize the number of parameters, the quartic term is written as the square of the quadratic one. So we are left with the set $(a(T), b, c, \alpha, \gamma)$ of free parameters, where α and γ are determined by the crystal field of the ferromagnet. The others are usual Landau parameters, with b and c slowly varying

with temperature, even at the critical point. We are assuming that they are constant. The behavior at large $|\mathbf{m}|$ is dominated by the quartic term in (4). This requires the constant b to be positive, in order to have minima of the free energy at $\mathbf{m} \neq 0$, for the low temperature phase (where $a < 0$). The constant c is also positive, since it costs some energy to create an interface.

The original treatment of Landau and Lifshitz argues that the minimization of the energy has to be done in two different regions of the crystal: *i*) in the intermediate region between domains (interface), where the contribution of the inhomogeneity cannot be neglected; and *ii*) in the region close to the surfaces, where the closed flux configuration of the field requires appropriate boundary conditions. We will use here the same argument, but for the more general free energy given by (4).

We shall concentrate first on the interface region. Without loss of generality, we assume that the crystal is infinite and the interface between domains is in the YZ -plane. In the absence of a magnetic field, due to symmetry, the spins are all in the YZ -plane. Far from the wall, they are aligned with the z -axis (parallel or antiparallel). Close to the walls, we assume that they are deflected by an angle θ from the z -axis, with components:

$$m_x = 0, \quad m_y = m_0 \sin \theta, \quad m_z = m_0 \cos \theta, \quad (6)$$

where $\theta \equiv \theta(x)$ is a function of x only. Note that $m_0 = |\mathbf{m}|$ is temperature dependent, but considered uniform in space[5]. The substitution of (6) into (4) leads to

$$\begin{aligned} f[\theta(x), \theta'(x); T] = & cm_0^2(\theta')^2 + a(T)[\alpha + (\gamma - \alpha) \cos^2 \theta]m_0^2 - a(T)\gamma m_0^2 + \\ & + b[\gamma^2 \cos^4 \theta + 2\gamma\alpha \sin^2 \theta \cos^2 \theta + \alpha^2 \sin^4 \theta]m_0^4 - b\gamma^2 m_0^4. \end{aligned} \quad (7)$$

In order to apply the Euler variational principle to the action (3), one notes that the 'lagrangian' $f[\theta(x), \theta'(x); T]$ does not explicitly depend on the variable x . In this case, the Euler-Lagrange equation can be written as

$$\frac{d}{dx} \left[\theta'(x) \frac{\partial f}{\partial \theta'} - f \right] = 0,$$

which reduces to

$$\begin{aligned} cm_0^2(\theta')^2 = & K + a(T)[\alpha + (\gamma - \alpha) \cos^2 \theta]m_0^2 - a(T)\gamma m_0^2 + \\ & + b[\gamma^2 \cos^4 \theta + 2\gamma\alpha \sin^2 \theta \cos^2 \theta + \alpha^2 \sin^4 \theta]m_0^4 - b\gamma^2 m_0^4. \end{aligned} \quad (8)$$

where K is a constant to be evaluated using the boundary conditions (BC). Far from the interface between domains, we set the spins asymptotically aligned with the z -axis, remembering that z is our easy magnetization direction. To satisfy the closure configuration, we impose

$$\theta = \begin{cases} 0, & x \rightarrow -\infty, \\ \pi, & x \rightarrow \infty, \end{cases} \quad (9)$$

and

$$\theta' = 0, \rightarrow \pm\infty, \quad (10)$$

which result in $K = 0$. The equation to be solved now is

$$cm_0^2(\theta')^2 = a(T)[(\alpha - \gamma)\sin^2\theta]m_0^2 + bm_0^4[2\gamma\alpha\sin^2\theta\cos^2\theta + \alpha^2\sin^4\theta + \gamma^2(\cos^4\theta - 1)] , \quad (11)$$

which means that the free energy is minimized when the exchange energy density is equal to the anisotropy one. Equation (11) can be written in the form

$$(\theta')^2 = \sin^2\theta (A + B\cos^2\theta) , \quad (12)$$

whose solution can be given as

$$\frac{\sqrt{1 + \frac{B}{A}\cos\theta}}{\sqrt{1 + \frac{B}{A}\cos^2\theta}} = -\tanh[x\sqrt{A+B}] , \quad (13)$$

where A and B are

$$\begin{aligned} A &= \frac{a(T)}{c}(\alpha - \gamma) \left[1 + \frac{b}{a(T)}m^2(\alpha + \gamma) \right] \\ B &= \frac{a(T)}{c}(\alpha - \gamma) \left[-\frac{b}{a(T)}m^2(\alpha - \gamma) \right] . \end{aligned} \quad (14)$$

The above equations give the distribution of the magnetic moment density in a general crystal between two neighboring layers. There are two equivalent solutions with opposite helicities. The width of the interface (Bloch wall) is given by

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{A+B}}. \quad (15)$$

To check the consistency of (13), we remind the reader that $a(T)$ is a negative scalar function for $T < T_c$. Noting that $\alpha < \gamma$ (easy z -direction), the condition $(A + B) > 0$, will impose limitations for the lower bound of α . In our discussion, we are considering the limit of small anisotropy, for which $\alpha \lesssim \gamma$. As we will show below, mean field implies that $bm_0^2/a(T)$ is finite at the critical point, which determines the critical exponent of the magnetization. We will discuss those points later on.

Assuming small anisotropy,

$$0 < \varepsilon \equiv \frac{\gamma - \alpha}{\gamma + \alpha} \ll 1 ,$$

the ratio $\frac{B}{A}$ is also small provided that $(A + B) > 0$,

$$\frac{B}{A} \approx \frac{2\alpha bm_0^2}{a(T)} \cdot \frac{\varepsilon}{\left[1 + \frac{2\alpha bm_0^2}{a(T)} \right]} ,$$

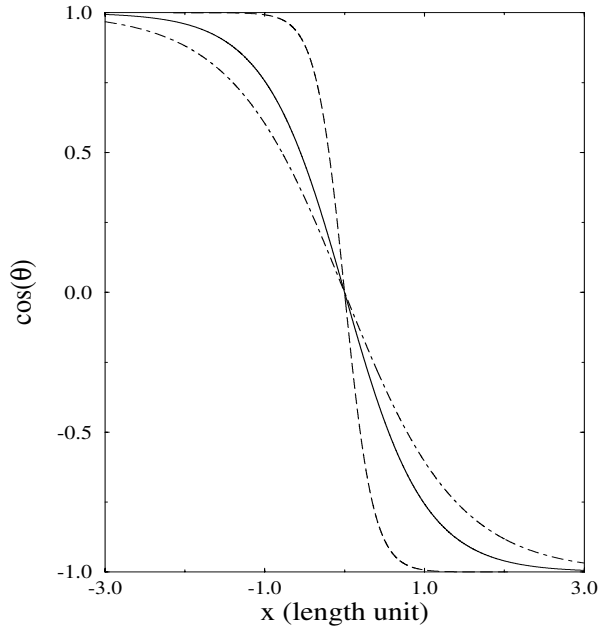


Figure 1: Magnetization profile in the vicinity of a domain wall. The dashed curve represents the Landau solution in the saturated regime at low temperature (asymptotic case for $B \rightarrow 0$ and $A = 8$, now normalized to adimensional parameters). The solid and dot-dashed curves were obtained solving (16), keeping the anisotropy fixed and varying the temperature in direction to T_c , where both, A and B vanish (solid for $B = 0.1$, $A = 1$ and dot-dashed for $B = 0.05$, $A = 0.5$, respectively). The wall width λ , which diverges at the critical point, plays the role of the correlation length.

and the solution can be expanded in terms of $\frac{B}{A}$

$$\left(1 + \frac{B}{2A}\right) \cos \theta \left[1 - \frac{B}{2A} \cos^2 \theta\right] = -\tanh[\sqrt{A} \left(1 + \frac{B}{2A}\right) x] . \quad (16)$$

Fig. 1 shows the distribution of the magnetization angle θ through the interface. The quantity $(A + B)$ vanishes at the critical point yielding the limit $\lambda \rightarrow \infty$ and the solutions $\theta = \pm \frac{\pi}{2}$ everywhere. At first sight, this solution may seem inconsistent with the boundary condition imposed. However, we observe that the magnetization intensity goes to zero at T_c . In any case, this behavior is signaling that something odd is happening at the critical point and questions the validity of mean field solutions there. The limit $\lambda \rightarrow \infty$ means that magnetic fluctuations are paramount at T_c .

Next we consider a finite crystal, where the domain structure is organized in layers, as shown in Fig.2. We already know the spin distribution through the Bloch wall, and want to calculate the width of magnetic domains in a finite volume. This is done in a variational way, as in the original contribution by Landau and Lifshitz[1]. We note that the flux closure condition induces the formation of small domains near the surfaces, where the magnetization points perpendicular to the easy direction.

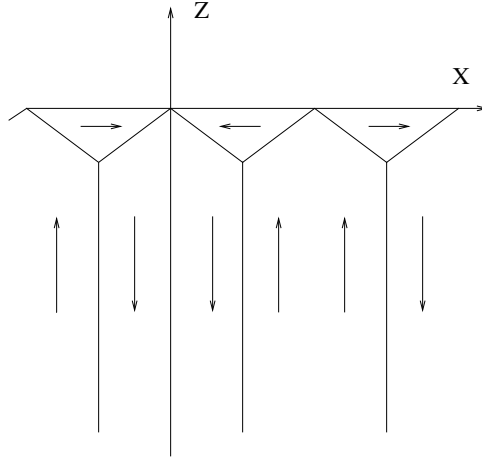


Figure 2: Magnetic permeability distribution in the crystal for flux closure. We have assumed, in the case of small anisotropy, that the magnetization intensity is the same in stripe and surface domains (the figure displays a more general example).

We proceed to the calculation of the wall energy. If l , l_x and l_y are the dimensions of the crystal in the z , x and y directions respectively, the energy associated with one interface (wall) between two domains is

$$\begin{aligned} E_{wall} &= l_y \int_{-\infty}^{\infty} dx f(\mathbf{m}, \mathbf{T}) = \\ &= l_y \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[c m_0^2 (\theta')^2 + a(T) [\alpha + (\gamma - \alpha) \cos^2 \theta] m_0^2 - a(T) \gamma m_0^2 + \right. \\ &\quad \left. + b [\gamma^2 \cos^4 \theta + 2\gamma\alpha \sin^2 \theta \cos^2 \theta + \alpha^2 \sin^4 \theta] m_0^4 - b\gamma^2 m_0^4 \right] \end{aligned} \quad (17)$$

where the limits of integration have been extended to $]-\infty, \infty[$, considering that the layer width is much larger than the wall region. The dominant contribution to this integral is concentrated inside domain walls, where θ is close to $\pi/2$. This way, we may neglect the cubic term in $\cos(\theta)$ in equation (16). Substituting expressions (11) into (17) yields an expression only in terms of the anisotropy

$$E_{wall} = 2ll_y(\alpha - \gamma) \int_{-\infty}^{\infty} dx \sin^2 \theta [a(T)m_0^2 + b[(\alpha + \gamma) - (\alpha - \gamma)\cos^2 \theta]m_0^4] ,$$

where we have used the form given by (12). To lowest order in the anisotropy ε we get the result

$$\begin{aligned} E_{wall} &= -4ll_y\alpha m_0^2 \varepsilon [a(T) + 2b\alpha m_0^2] \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\cosh^2(x\sqrt{A})} \\ &= 4ll_y m_0^2 c \sqrt{A} . \end{aligned}$$

It then follows that the total energy of (l_x/d) walls is

$$E_1 = 4 \frac{ll_x l_y}{d} c m_0^2 \sqrt{A} ,$$

where d is the layer width.

Now, we turn to the surfaces for the flux closure configuration. In that case, we note that the magnetization distribution satisfies the boundary condition $\mathbf{m} \cdot \mathbf{n} = 0$, with \mathbf{n} normal to the surface. This way, surface poles are avoided and the global spin field inside the crystal has no singular points as shown in Fig.2[7]. For surface domains, the main contribution to the energy density comes from the anisotropy. At the surface, we get

$$m_x = \pm m_0, \quad m_y = 0, \quad m_z = 0 ,$$

and going back to (4) we get the energy density

$$f_{surface} = a(T)m_0^2(\alpha - \gamma) \left[1 + \frac{bm_0^2}{a(T)}(\alpha + \gamma) \right] ,$$

which is again proportional to the anisotropy ε . For a finite sample, we have two opposite surfaces at $z = 0$ and $z = -l$. Associating the volume $(l_y d^2/4)$ to a single surface domain, and summing over $(2l_x/d)$ of such domains, the total surface energy is given by

$$E_2 = \frac{1}{2} l_x l_y d m_0^2 c A .$$

We then minimize the total energy $E = E_1 + E_2$ simultaneously in relation to d and m_0

$$\begin{cases} \frac{\partial E}{\partial d} = 0 , \\ \frac{\partial E}{\partial m_0} = 0 , \end{cases}$$

yielding the results

$$\begin{cases} d = 2\sqrt{2l} \sqrt[4]{\frac{1}{A}} , \\ \frac{b m_0^2}{a(T)} = -\frac{4}{7} \frac{1}{(\alpha+\gamma)} . \end{cases} \quad (18)$$

The quantity A , defined in (14), vanishes at the critical point, thus causing the divergence of the domain width at T_c . The associated critical exponent is different from the one that gives the divergence of the wall width λ in (15)

$$\lambda^{-1} = \sqrt{A+B} = \sqrt{\left(\frac{\alpha-\gamma}{c}\right) a(T) \left[1 + \frac{2\gamma b m_0^2}{a(T)}\right]} .$$

In the expression above we encounter the quantity

$$D \equiv 1 + \frac{2\gamma b m_0^2}{a(T)} ,$$

that has to be positive in order to get real solutions. From (18), we see that this is the case for $\gamma/7 < \alpha < \gamma$. So, we are on safe grounds for small anisotropy, $\alpha \lesssim \gamma$. We note that the critical exponent for the magnetization is the same as in the homogeneous case ($\beta = 1/2$), but the full expression is different from the one obtained in conventional mean field theory. It is worth to note that the isotropic, homogeneous case, satisfies $D = 0$, *i.e.* no domains are present. From (18), we get the result

$$m_0 = \begin{cases} 0 & , T > T_c \\ \sqrt{-\frac{4a(T)}{7b(\alpha+\gamma)}} & , T < T_c . \end{cases}$$

The two scales, d and λ , diverge at the critical point, but the divergence of the wall width is faster (exponent $-1/2$) than the one for the domain width (exponent $-1/4$), thus showing that the critical point marks the onset of strong magnetic fluctuations.

3 Quasi 2-dimensional ferromagnet

The fact that the magnetization is distributed in layers and not in threadlike regions [1] restricts the dependence of the field lines to one single degree of freedom inside the crystal, along a well defined direction. In our approach, the field solutions depend just on position x and are parameterized in terms of an azimuthal angle θ in the YZ -plane. No more parameters are needed, since the magnetization intensity m_0 is assumed to be only a function of temperature and does not depend on position. It is very interesting to note that if we shrink one of the dimensions of the body, making it a quasi-two dimensional object similar to an anisotropic finite plane of magnetization, we shall not change appreciably the field solutions already obtained, requiring only a new geometrical interpretation of the angle θ .

Let us consider the ferromagnetic regime of an anisotropic thin film, for example, where the magnetization is contained in the XY -plane and makes an angle δ with the easiest magnetization direction (say the y -axis). In this case, the layers must be necessarily disposed along the x -direction. As a consequence, the field in the intermediate region of the two layers is a function of x only and we obtain an equation identical to (8), replacing θ by a polar angle δ . Since the boundary conditions are not different, we (surprisingly!) get exactly the same solutions for δ along the x -direction, except that the deflection of the field now is confined to be in the plane of the layer. By construction, we reobtain the same values found for the layers and wall width, using the variational method to minimize the global energy in the magnetization plane. The spin distribution is schematically shown in Fig. 3.

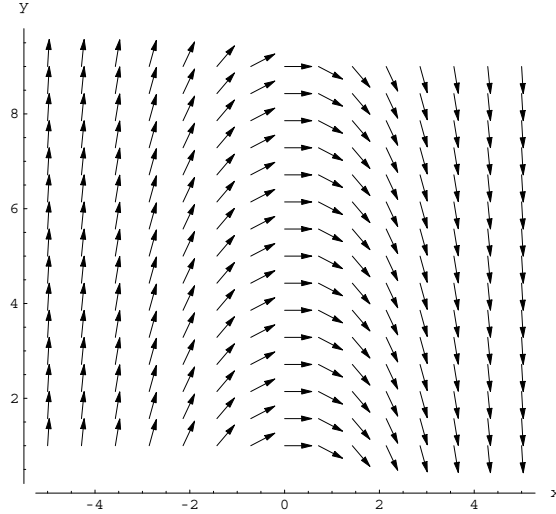


Figure 3: Orientation of magnetization in the wall region of a 2-dimensional ferromagnetic system with anisotropy. Axes in length units.

4 Conclusions

When temperature approaches T_c from below, $a(T)$ as defined in (5), goes to zero linearly, and the entire system is affected by long range fluctuations. At T_c , the correlation length diverges and the system is scale invariant[2]. In our model, this is signaled by the divergence of the wall width λ , which plays the role of the length scale and goes to infinity under the power law $\lambda \propto |t|^{-\frac{1}{2}}$. Since the domain width behaves as $d \propto |t|^{-\frac{1}{4}}$, we find that the wall region enlarges and ‘compresses’ the domains as temperature raises in direction to T_c , meaning that domains firstly lose their identity and finally disappear at the critical point. We observe that all the critical exponents in our treatment refer to behaviors below T_c (in critical phenomena, one distinguishes the behaviors above and below T_c).

A comment is in order here concerning our mean field critical solution. It is well known that Landau theory badly fails at the critical point for systems whose specific heat

diverges at the phase transition [6]. However, the theory is also known for making remarkable qualitative predictions, with deep insights on the physics of critical phenomena, even in situations that extrapolate its region of validity[8]. In particular, the theory provides its own criterion of failure and suggests new procedures to correctly describe the physics at the critical point[9].

In what follows, we advance conclusions derived from our calculation. To calculate the heat capacity, we compute the total internal energy of the system as

$$E = 2c\sqrt{2l}l_xl_y m_0^2 A^{\frac{3}{4}},$$

once the minimization process (18) is done. Note that this is the excess energy relative to the bulk system, associated with surfaces and interfaces. From this, we calculate the specific heat $C = T \frac{\partial^2 E}{\partial T^2}$, and find that $C \propto |t|^{-\alpha}$ diverges at $t = 0$, with the critical exponent $\alpha = 1/4$, which is different from the standard mean field approximation $\alpha = 0$ for homogeneous systems and also different from standard mean field results for interfaces ($\alpha = 1/2$)[10]. The different critical behavior comes here from the criticality of the domain width d .

We also know from experiments that the static magnetic susceptibility diverges at the critical point. In our calculation we get

$$\chi = \left(\frac{\partial^2 E}{\partial m_0^2} \right)^{-1} \propto |t|^{-\frac{3}{4}}, \text{ for } t \ll 1 ,$$

and therefore $\gamma = \frac{3}{4}$, which also disagrees with the standard mean field value $\gamma = 1$.

The finite size of the system and the boundary conditions imposed, which lead to the formation of Bloch walls between magnetic domains, are responsible for the different exponents and the singularities in the heat capacity and susceptibility. To test this statement, we remove the closed flux boundary conditions and take the thermodynamic limit. In this case, we obtain a single domain with the dimension of the whole crystal, that is $d \sim l_x$, independently of temperature. In such a limit, we regain all the standard mean field exponents.

This work is an illustrative application of the Landau mean field theory for phase transitions. The advantage of this procedure resides in the phenomenological nature of the free energy parameters, allowing us to calculate equations of state without stating a specific microscopic model. The classical Landau approach can then be extended to describe non-homogeneous solutions (formation of domains), with the corresponding change of the critical behavior, still within the mean field approximation.

5 Acknowledgments

The authors acknowledge partial support from *Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo* (FAPESP, Brazil) through the project 98/01289-2 and *Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico* (CNPq, Brazil), project 301221/77-4/FA.

References

- [1] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, “On the Theory of the Dispersion of Magnetic Permeability in Ferromagnetic Bodies”, *Phys. Z. Soviet Union*, **8**, 153 (1935), reprinted in *Men of Physics: L. D. Landau* by D. ter Haar (Pergamon Press, Oxford, 1965), pp. 178-194.
- [2] K. Huang, *Statistical Mechanics* (John Wiley and Sons, New York, 1987), 2nd. ed., pp. 392-467.
- [3] J. C. Tolédano and P. Tolédano, *The Landau Theory of Phase Transitions* (World Scientific, Singapore, 1987), pp. 1-80.
- [4] C. Herring and C. Kittel, “ On the Theory of Spin Waves in Ferromagnetic Media”, *Phys. Rev.* **81**(5), 869-880 (1951); C. Kittel and J. K. Galt, “Ferromagnetic Domains”, in *Solid State Physics*, Vol. 3, F. Seitz and D. Turnbull, Eds.(Academic Press, New York, 1956), pp. 439-564.
- [5] We are assuming that m_0 is constant in space, even through the Bloch wall. If this is not the case, we get two coupled Euler equations for the variables (θ, m_0) . For general anisotropy, this system is cumbersome to treat analytically. As a curious fact, we note that for the isotropic case $\gamma = \alpha$, the equation satisfied by m_0 is decoupled and given by

$$-c \frac{d^2 m_0}{dx^2} + \gamma a(T) m_0 + 2b\gamma^2 m_0^3 = 0 , \quad (19)$$

which has a trivial uniform solution given by

$$m_0^2 = \bar{m}^2 = -\frac{a(T)}{2\gamma b}.$$

If we are looking for non-homogeneous solution and fix the scale in relation to \bar{m} given above, we define a reduced variable

$$\psi = \frac{m_0}{\bar{m}},$$

which replaced in (19) yields

$$-\xi^2 \frac{d^2 \psi}{dx^2} - \psi + \psi^3 = 0 ,$$

with

$$\xi^2 = -\frac{c}{\gamma a(T)}$$

as the square of the correlation length. This is the same equation found in the Landau-Ginzburg theory of superconductivity for a normal-superconductor interface, with solution

$$\psi^2 = \tanh^2 \left(\frac{x}{\sqrt{2}\xi} \right) .$$

- [6] H. E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena* (Oxford University Press, New York and Oxford, 1971), pp. 167-174.
- [7] The ferromagnetic phase of the body produces some amount of field given by the Maxwell equation $\nabla \cdot (\mathbf{H} + 4\pi\mathbf{m}) = 0$ inside the sample, and $\nabla \cdot \mathbf{H} = 0$ outside. Near the surface and far from domain walls, the exchange contribution to the energy is zero. The closed flux configuration, with no field lines outside the sample, is favored when the anisotropy is small. Under the above conditions, we get

$$\mathbf{H} = \mathbf{0}, \quad \text{and} \quad \nabla \cdot \mathbf{m} = 0 ,$$
 what means that the spin distribution satisfies the boundary condition $\mathbf{m} \cdot \mathbf{n} = 0$, with \mathbf{n} normal to the surface.
- [8] Leo P. Kadanoff *et al.*, “Static Phenomena Near Critical Points: Theory and Experiment”, *Rev. Mod. Phys.* **39**(2), 395-431 (1967).
- [9] J. Als-Nielsen and R. J. Birgenau, “Mean field theory, the Ginzburg criterion, and marginal dimensionality of phase transitions”, *Am. J. Phys.* **45**(6), 554-560 (1977).
- [10] K. Binder, “Critical Behavior at Surfaces”, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, C. Domb and J. L. Lebowitz, Eds., Vol. 8 (Academic Press, London, 1983), pp. 1-144.
- [11] P. G. de Gennes, *Superconductivity of Metals and Alloys* (Addison-Wesley, Reading, 1966), p. 177.