

REVISÃO DO MODELO BLUME-CAPEL COM ÊNFASE NA ANÁLISE DA ENERGIA LIVRE

EDUARDO FERREIRA DA SILVA¹; PROF. DR. CARLOS ALBERTO VAZ DE MORAIS JUNIOR²;

¹Universidade Federal de Pelotas (UFPel) – edu.ferreira056@gmail.com

²Universidade Federal de Pelotas (UFPel) – carlosavjr@gmail.com

1. INTRODUÇÃO

Uma das áreas de grande interesse para a física é a de matéria condensada, que procura compreender a natureza dos diferentes estados da matéria. A partir desta área, novas tecnologias são desenvolvidas e aprimoradas, como por exemplo os dispositivos de armazenamento (CALLISTER, 2002). Do ponto de vista teórico, a termodinâmica e a mecânica estatística têm sido utilizadas, dentro da matéria condensada, de diversos materiais. Em particular, a matéria condensada trata também de comportamentos magnéticos. Tais comportamentos podem ser analisados por meio de equações de estado, que fazem relação das principais grandezas macroscópicas do sistema. Para sistemas magnéticos, estas grandezas são a magnetização e a temperatura.

A compreensão de sistemas magnéticos do ponto de vista teórico é realizada a partir de modelagem. Nesse sentido, o modelo Blume-Capel com aproximação de campo-médio, resolvido dentro da mecânica estatística. Essencialmente, este é um modelo de spin-1 o qual é adicionado um campo anisotrópico (BUTERA, 2018), que favorece estados não interagentes. Portanto, o modelo permite a compreensão do comportamento da magnetização (m) em função da temperatura (T) na presença de sítios com estados interagentes e não interagentes. Nesse sentido, o objetivo do presente trabalho consiste de uma revisão do modelo mencionado, focando atenção no cálculo numérico das quantidades físicas, magnetização e energia livre obtidas a partir das técnicas analíticas.

2. METODOLOGIA

O modelo Blume-Capel trata de um modelo de spin-1 do tipo Ising com interações de longo alcance entre pares de sítios. Neste modelo os sítios interagem mediante a uma variável de interação J . O diferencial do modelo Blume-Capel é a presença de um campo de cristal (D) que atua sobre todos os sítios magnéticos, favorecendo os estados magnéticos.

Assim, o modelo Blume-Capel apresenta o seguinte Hamiltoniano

$$-H/T = \frac{J}{2N} \sum_{ij} S_i S_j - JD \sum_i S_i^2, \quad (1)$$

os spins podem assumir os valores $S = \pm 1, 0$. J é a interação ferromagnética e D o campo cristalino. A função de partição será dada por

$$Z = Tr \exp\left(\frac{\beta J}{2N} (\sum_i S_i)^2 - \beta D \sum_i S_i^2 + \beta h \sum_i S_i\right). \quad (2)$$

Para linearizar o termo quadrático empregaremos a transformação de Hubbard-Stratonovich

$$\exp\left(\frac{-ax^2}{2}\right) = \sqrt{\frac{aN}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dm \exp(- Nam^2/2 + \sqrt{N}amx), \quad (3)$$

fazemos $a = \beta J$ e $x = \sum_i S_i/N$. Obtendo

$$Z = \sqrt{J\beta N} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dm}{2\pi} \exp(- N(\frac{J\beta}{2}m^2 - \ln[1 + 2e^{-\beta D} \cosh\beta(Jm + h)])). \quad (4)$$

Esta integral pode então ser resolvida pelo método de ponto de sela, no limite termodinâmico onde $N \rightarrow \infty$. Para cálculos numéricos adiante diremos que $\beta = 1/T$, $J = 1$ e $h = 0$. Por fim, obtemos a energia livre do sistema

$$F = -\frac{1}{2}m^2 + \frac{1}{\beta} \ln[1 + 2e^{-\beta D} \cosh(\beta m)]. \quad (5)$$

Para encontrar o parâmetro de ordem utilizamos o campo auxiliar m , usado na linearização, e fazemos com que este minimize a energia livre. Basta aplicar o método de ponto de sela na energia livre em relação ao campo m .

$$m = \frac{\sinh\beta m}{e^{\frac{\beta D}{2}} + \cosh\beta m}. \quad (6)$$

Esta equação transcendental é chamada de parâmetro de ordem da magnetização e será usada para o cálculo numérico da magnetização do sistema.

Com a energia livre e magnetização do sistema é possível calcular o comportamento da energia livre em função do parâmetro de ordem. Observamos na figura abaixo que o mínimo da energia livre está localizado em $m \neq 0$ quando $T < T_c$ e em $m = 0$ se $T > T_c$ (NISHIMORI, 2001).

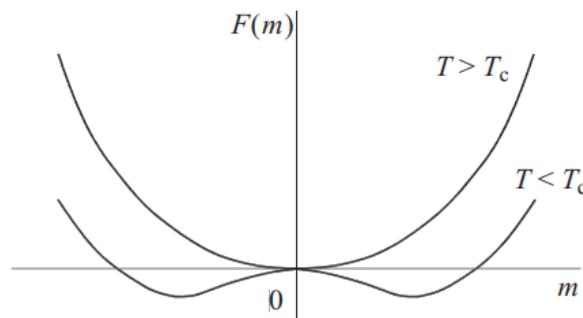


Figura 1: Energia livre em função do parâmetro de ordem (NISHIMORI, 2001).

Para obter os resultados referentes à magnetização (parâmetro de ordem) do sistema, tomamos o campo de cristal $D = 0$, e faremos uso do método de iteração para diferentes valores de T .

Observamos a partir disso a temperatura em que m passa a valer zero, esta temperatura, chamada temperatura crítica, será usada para calcular diferentes estados de energia livre do sistema, um acima de T_c e outro abaixo.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Nessa seção, a partir de um algoritmo implementado em FORTRAN, o cálculo numérico das grandezas parâmetro de ordem e energia livre é realizado. Compararemos qualitativamente então o cálculo numérico destas equações com a solução encontrada e apresentada na Figura 1.

Usando o método proposto temos os resultados sobre a magnetização representados na figura 2. A partir deste gráfico é possível analisar a relação entre magnetização e temperatura.

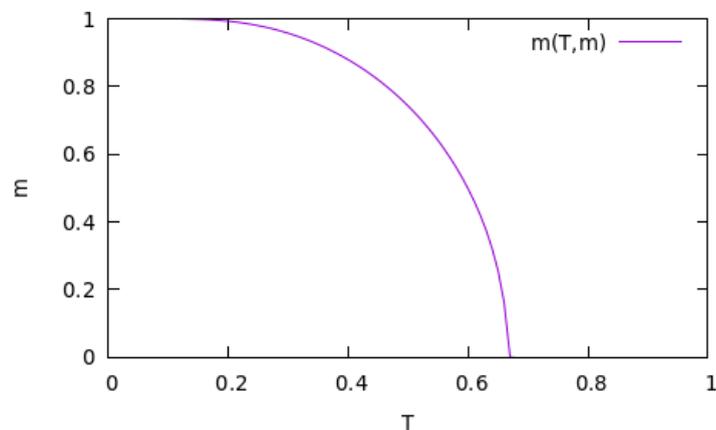


Figura 2: Gráfico do cálculo computacional da magnetização usando a equação 6.

Vemos que conforme a temperatura T aumenta, a magnetização m decai, encontramos então a temperatura crítica, que vale $T \approx 0,67$. Quando alcançada, a magnetização passa a ser zero. Esta temperatura crítica indica o ponto onde ocorre uma transição de fase.

Na figura 3, mostramos o cálculo numérico da energia livre em função do parâmetro de ordem para uma temperatura acima da temperatura crítica, e outra abaixo desta temperatura.

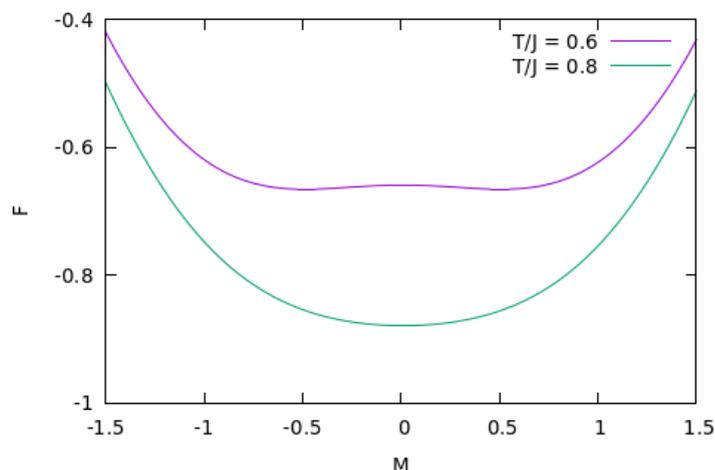


Figura 3: Gráfico do cálculo computacional da energia livre em função do parâmetro de ordem para $D/J=0$.

Analiticamente, como mostra a figura 1, vemos que para uma temperatura acima da temperatura crítica, neste caso $T/J = 0.8$, a energia livre apresenta apenas um mínimo em $m=0$. E para uma temperatura abaixo da temperatura crítica, $T/J = 0.6$, a energia livre apresenta dois mínimos (um $m>0$, correspondente ao valor de m em $T/J=0,6$ da figura 2 e outro $m<0$), como mostra a figura 3.

4. CONCLUSÕES

Neste trabalho, o valor de mínimo do m que satisfaz a condição ponto de sela, necessária para resolução da integral na Eq. (3), é obtido de duas formas distintas: i) a partir do comportamento da energia livre, ii) e a partir da equação do parâmetro de ordem advindo da condição de extremização da energia. A partir dos resultados apresentados, observa-se que o valor de m obtido no comportamento da energia livre é idêntico àquele visto no comportamento da magnetização para a temperatura selecionada, indicando que os resultados estão em concordância. Como possibilidade de trabalho futuro, resultados referentes à energia livre e magnetização do sistema na presença de um campo anisotrópico $D>0$ para o modelo Blume-Capel serão calculados.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

NISHIMORI, H. **Statistical Physics of Spin Glasses and Information Processing. An Introduction**. Londres: Clarendo Press, 2001.

CALLISTER, W.D. **Materials Science and Engineering. An Introduction**. Nova Jersey: John Wiley & Sons, Inc., 1940. 7e.

KAUFMAN, M; KANNER, M. **Random-field Blume-Capel model: Mean-field theory**. Physical Review B, v. 42, p. 2379, 1990.

BUTERA, P; PERNICI, M. **The Blume-Capel model for spins $S=1$ and $3/2$ in dimensions $d=2$ and 3** . Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, v. 507, p. 22, 2018

Blume, M. **Theory of the First-Order Magnetic Phase Change in UO_2** . Physical Review, v.141, p. 517, 1966.