

ESTADO FUNDAMENTAL DO MODELO DE BLUME-CAPEL NA REDE QUADRADA UTILIZANDO CAMPO MÉDIO COM CLUSTERS

ANDERSON RICARDO DA SILVA FERREIRA¹;

ARTHUR KRINDGES²;

MATEUS SCHMIDT³;

CARLOS ALBERTO VAZ DE MORAIS JUNIOR⁴

¹ Universidade Federal de Pelotas – Anderson.ricardo525@yahoo.com.br

² Universidade Federal de Pelotas – arthur.krindges@ufpel.edu.br

³ Departamento de Física - Universidade Federal de Santa Maria – mateusing85@gmail.com

⁴ Instituto de Física e Matemática - Universidade Federal de Pelotas – Carlosavjr@gmail.com

1. INTRODUÇÃO

O modelo de Blume-Capel de spin-1 é um modelo magnético simples, mas, que ainda assim apresenta uma fenomenologia física bastante complexa e interessante (KIMEL, et al. 1992). Provavelmente, a propriedade mais interessante deste modelo consiste na presença da linha de transições de fase de segunda ordem que, com uma diminuição da temperatura, se torna de primeira ordem. O modelo de Blume-Capel foi uma generalização do modelo de Ising para descrever o comportamento de materiais magnéticos (BLUME, et al. 1971; CAPEL, 1966), mas pode ser aplicado de forma mais geral para compreender fenômenos como a transição λ e a separação de misturas de He³-He⁴ (BLUME, 1966).

O objetivo deste trabalho é estudar o modelo de Blume-Capel antiferromagnético (AFM) em uma rede quadrada através da teoria de campo médio com clusters (KIMEL, et al. 1992). Nesta investigação, faremos uma caracterização do estado fundamental desse sistema e analisaremos propriedades termodinâmicas. Na aproximação empregada, o sistema infinito é dividido em clusters iguais. As interações dentro dos clusters são calculadas de maneira exata, entretanto as interações com os clusters vizinhos são estimadas através de campos auxiliares introduzidos pela teoria de campo médio.

2. METODOLOGIA

Para o desenvolvimento do trabalho, utilizou-se o modelo de Blume-Capel com spin-1. O Hamiltoniano que descreve esse sistema pode ser escrito da seguinte forma

$$\mathcal{H}_c = -J \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j - \sum_{i=1}^N h_i \sigma_i - D \sum_i \sigma_i^2 + H \sum_i \sigma_i. \quad (1)$$

Na equação (1) o primeiro somatório mensura as interações no cluster central, onde σ é o momento magnético de spin e pode assumir os valores {-1,0,1}, J é o termo de interação de troca entre vizinhos e pode assumir a seguinte forma, quando $J > 0$ a interação é do tipo ferromagnética (FM) e quando $J < 0$ a interação é do tipo AFM, o primeiro somatório, então, calcula a interação entre os primeiros vizinhos mais próximos do cluster central, o termo D é conhecido como termo de campo cristalino que modula a energia do sistema, favorecendo estados de spins ± 1 quando $D > 0$ e spins zero quando $D < 0$, já o termo H é referente ao campo magnético externo aplicado. O termo h_i é referente ao campo magnético auxiliar. Para estudar as interações do sistema emprega-se

a aproximação de campo médio, onde a rede infinita é dividida em *clusters* (conjuntos de spins) de spins interagentes e cada *cluster* é resolvido de maneira exata. Então, utiliza-se o campo médio para lidar com as conexões entre o *cluster* central e os *clusters* adjacentes. O método aproximativo utilizado pode ser descrito pelo seguinte Hamiltoniano.

$$\mathcal{H} = -J \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j + \frac{1}{2} J \sum_{[i,j]} \sigma_i \sigma_j. \quad (2)$$

Na equação (2), o primeiro somatório mede a contribuição das interações dos termos do *cluster* central, já o segundo somatório calcula a interação entre os vizinhos mais próximos dos clusters adjacentes, somatório sobre $[i,j]$. No trabalho de (JIN et al., 2013), o autor diz que para minimizarmos \mathcal{H}_c (equação (1)) o valor de h_i , deve ser

$$h_i = - \sum_{[j]} J \langle \sigma_j \rangle. \quad (3)$$

Da equação (3) temos que $\langle \sigma_j \rangle$ é o valor médio de σ_j e é escrito como sendo $\langle \sigma_j \rangle = m$, onde m é a magnetização local. Com isso podemos reescrever \mathcal{H}_c de modo que

$$\mathcal{H}_c = -J \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j + J \sum_{[i,j]} \sigma_i \langle \sigma_j \rangle - D \sum_i \sigma_i^2 + H \sum_i \sigma_i. \quad (4)$$

A função de partição desse sistema pode ser escrita como

$$Z = Z_0 \exp\{-\beta \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_c \rangle\}, \quad (5)$$

onde $Z_0 = \exp\{-\beta \mathcal{H}_0\}$ e $\beta = 1/K_b T$ onde K_b é a constante de Boltzmann e T é a temperatura. O modelo é resolvido pela desigualdade de Bogoliubov, o que pode ser visto em (CALLEN, 1985). Assim, conseguimos escrever a energia livre da seguinte forma

$$F = -K_b T \ln Z_0 + \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_c \rangle = -K_b T \ln (\text{Tr}(\exp\{-\beta \mathcal{H}_{eff}\})), \quad (6)$$

onde, \mathcal{H}_{eff} é a contribuição energética das interações do *cluster* interno separadamente e as interações do cluster interno com os *clusters* externos. A magnetização do sistema pode ser escrita como

$$m = \frac{\sum_{i=j}^N \sigma_i \exp\{-\beta \mathcal{H}_{eff}\}}{\sum_{i=j}^N \exp\{-\beta \mathcal{H}_{eff}\}}. \quad (7)$$

Como foi dito anteriormente, $\mathcal{H}_{eff} = \mathcal{H}_{interno} + \mathcal{H}_{externo}$ onde os termos representam as seguintes contribuições

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{interno} = & -J(\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_4 + \sigma_4 \sigma_1) + D(\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \sigma_3^2 + \sigma_4^2) + \\ & - H(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4), \end{aligned} \quad (8)$$

e

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{externo} = & -J \left(\left[\sum_{i=1}^3 (\sigma_i m_{i+1} - \frac{1}{2} m_i m_{i+1} + \sigma_{i+1} m_i - \frac{1}{2} m_{i+1} m_i) \right] + \right. \\ & \left. + (\sigma_1 m_4 - \frac{1}{2} m_1 m_4) + (\sigma_4 m_1 - \frac{1}{2} m_4 m_1) \right). \end{aligned} \quad (9)$$

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os resultados obtidos foram feitos a partir de cálculos computacionais utilizando o ferramental teórico discutido na metodologia. Nesse contexto, cada sítio (σ) pode assumir o valor de $\sigma = \{-1, 0, 1\}$. O valor do termo de interação J foi mantido fixo em -1 de forma a privilegiar alinhamentos antiferromagnéticos. Variando então o valor do campo cristalino D e do campo magnético externo H obtemos os resultados das figuras abaixo.

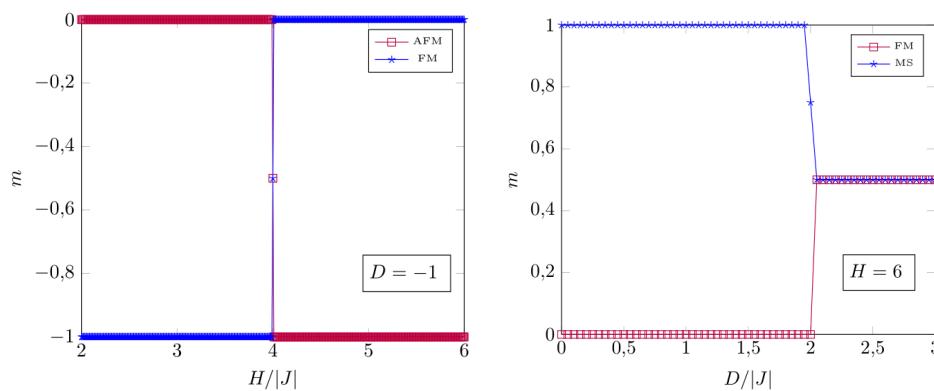


Figura 3.1: Parâmetro de ordem como função de $H/|J|$ (à esquerda) e $D/|J|$ (à direita).

À esquerda temos o valor de $D/|J| = -1$ constante e a magnetização das fases, AFM (em vermelho) e FM (em azul). À direita temos o valor de $H/|J| = 6$ constante e as magnetizações das fases FM (em vermelho) e MS (em azul). Em ambos resultados o parâmetro de ordem é descontínuo.

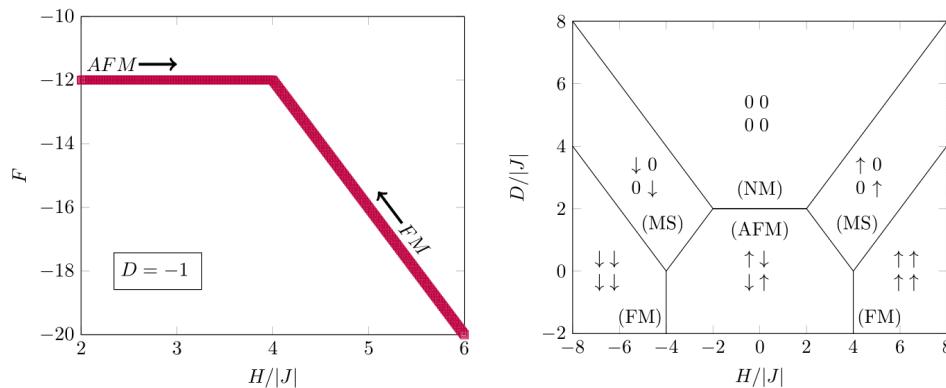


Figura 3.2: Valores da energia livre F versus $H/|J|$ com $D/|J| = -1$ (à esquerda) e o diagrama de fases (à direita).

Na Figura 3.1 temos o comportamento do parâmetro de ordem, quando mantemos $D/|J| = -1$ fixo e analisamos a variação de $H/|J|$, podemos notar que as fases apresentam uma descontinuidade no parâmetro de ordem caracterizado pelo fato da temperatura ser zero. Na parte direita da Figura 3.1 temos um comportamento similar ao da parte esquerda, quando mantemos fixo $H/|J| = 6$ e variarmos $D/|J|$, temos a transição entre as fases FM e a fase mista (MS). Por estarmos incapacitados de analisar a transição de fase pelo parâmetro de ordem, nós precisamos fazer a análise a partir da energia livre do sistema, o resultado pode ser visto na parte esquerda da Figura 3.2. Nós temos que para $D/|J| = -1$ fixo, a transição acaba ocorrendo em $H/|J| = 4$, onde temos a inflexão da reta,

onde as setas indicam o sentido que $H/|J|$ está sendo percorrido e a fase presente antes e depois da inflexão da reta. Para caracterização do ordenamento magnético, calculamos o mesmo intervalo, adotando diferentes valores para a magnetização, de modo que a escolha das fases que compõem o diagrama são selecionadas baseadas em um critério de menor energia. Com as fases caracterizadas, podemos finalmente montar o diagrama de fases, na parte direita da Figura 3.2 temos este diagrama, onde a fase FM é delimitada em $-4 \geq H/|J| \geq 4$, onde temos o sentido oposto dos momentos em cada um dos extremos. As fases FM são delimitadas em $D/|J| = |H/J| - 4$. Acima da fase FM, temos a fase MS, delimitada em $(2 \leq |H/J| \leq 4)$ e $(0 \leq D/|J| \leq 2)$ onde $D/J = 4 - |H/J|$ e para $(2 \leq D/|J| \leq 8)$ temos que o valor de $D/J = |H/J|$. A fase presente na parte superior do diagrama é uma fase não magnética (NM) que é delimitada próximo das laterais pela fase MS e abaixo pela fase AFM de modo que $D/|J| = 2$ em que $(-2 \leq |H/J| \leq 2)$.

4. CONCLUSÕES

O presente trabalho investigou o modelo de Blume-Capel em uma rede quadrada em temperatura zero. Esse modelo foi tratado através da teoria de campo médio com clusters, a qual foi utilizada com o intuito de incorporar a geometria da rede. Esse modelo, portanto, foi tratado utilizando o método variacional de Bogoliubov para a solução com aproximação de campo médio. A estrutura proposta foi escolhida por possuir solução conhecida, a qual foi discutida na referência (KIMEL et al. 1992), e por ser base para aplicações posteriores.

Métodos numéricos foram empregados para a resolução do problema onde as fases eram limitadas pelas transições. Como consequência, as energias livres associadas às ordens magnéticas e linhas de transição foram obtidas. Para futuros trabalhos, é considerado o aumento do número de sítios que compõem a rede, bem como a mudança na geometria da mesma. Ademais, com a implementação da temperatura, será proposta a adição de desordem térmica ao sistema. Consequentemente, é esperado mudanças significativas nas quantidades termodinâmicas, que enriquecem as propriedades analisadas pelo modelo.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BLUME, M. Theory of the First-Order Magnetic Phase Change in UO_2 . **Physical Review**, v.141(2), p.517-524. 1966.
- BLUME, M., EMERY, V. J., & GRIFFITHS, R. B. Ising model for the λ transition and phase separation in $\text{He}^3\text{-He}^4$ mixtures. **Physical review A**, v.4(3), p.1071-1077. 1971.
- CALLEN, H. B. **Thermodynamics and an introduction to thermostatistics**. 2. ed. New York: John Wiley & Sons, Inc, p.433-439, 1985.
- Capel, H. W. On the possibility of first-order phase transitions in Ising systems of triplet ions with zero-field splitting. **Physica** v.32, n.5 p.966-988, 1966.
- JIN, S.; SEN, A.; GUO, W.; SANDVIK, A.W. Phase transitions in the frustrated Ising model on the square lattice. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 87, p. 144406, 2013.
- KIMEL, J. D., RIKVOLD, P. A., & WANG, Y. L. Phase diagram for the antiferromagnetic Blume-Capel model near tricriticality. **Physical Review B**, v.45(13), p.7237–7243, 1992.