

ESTUDO DO MODELO DE BLUME-CAPEL EM UMA REDE DE DÍMEROS NO ESTADO FUNDAMENTAL A PARTIR DO MÉTODO DE ENUMERAÇÃO EXATA

BRUNO DE OLIVEIRA BENTOS¹; ANDERSON RICARDO DA SILVA FERREIRA²;
CARLOS ALBERTO VAZ DE MORAIS JUNIOR³.

¹ Universidade Federal de Pelotas – bruno.o.bentos@gmail.com

² Universidade Federal de Pelotas – anderson.ricardo52592@gmail.com

³ Universidade Federal de Pelotas – carlosavjr@gmail.com

1. INTRODUÇÃO

O modelo de Blume–Capel é uma extensão do modelo de Ising que introduz um termo de campo anisotrópico capaz de favorecer os estados de *spin* $S = 0$ e $S = 1$, a depender do sinal do campo (BLUME, 1966; CAPEL, 1966). Dímeros, por sua vez, são quaisquer agregados formados pela união de duas unidades básicas, distintas ou não, o que os caracteriza como a forma mais simples de se associar unidades elementares. Eles podem ser utilizados para descrever diversos sistemas reais como pares de íons de transição, acoplamento de *spins* e unidades moleculares como gases diatômicos, sendo utilizado o modelo de Blume–Capel, por exemplo, para estudar misturas $\text{He}^3\text{--He}^4$ a baixas temperaturas (BRITO, 2017).

Neste trabalho, estudaremos o modelo de Blume–Capel em uma rede de dímeros no estado fundamental, ou seja, em temperatura $T \approx 0$. Para isso, listamos os microestados acessíveis ao sistema, calcularemos propriedades termodinâmicas e, a partir de varreduras nos parâmetros de campo externo e campo anisotrópico, construímos o diagrama de fases do sistema, identificando as ordens magnéticas e os locais em que ocorrem as transições de fase.

2. METODOLOGIA

Para realizar os cálculos, foram adotados como valores constantes uma temperatura $T \approx 0$, constante de acoplamento magnético entre os *spins* $J = -1$ e constante de Boltzmann $k_B = 1$. Inicialmente, construímos uma lista completa dos $3^N = 9$ microestados acessíveis para o sistema, onde N é o número de sítios do dímero, com cada sítio, S_1 e S_2 , podendo possuir os valores de *spin* $S = \{-1, 0, 1\}$. Em seguida, para cada microestado, calcula-se a energia pelo Hamiltoniano.

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,k \rangle} S_i S_k + D \sum_{i=1}^N S_i^2 - H \sum_{i=1}^N S_i, \quad (1)$$

onde J é o termo acoplamento magnético entre os sítios, quando $J < 0$ este favorece o alinhamento antiferromagnético (AFM) enquanto que $J > 0$ favorece o alinhamento ferromagnético (FM), D é o campo anisotrópico e este, por sua vez, controla a ocupação do estado magnético $S = +1$ frente ao estado não magnético $S = 0$, ou seja, $D > 0$ favorece *spins* $S = 0$ e $D < 0$ favorece *spins* $S = +1$ e por último, H é o termo do campo magnético externo que favorece o estado magnético positivo $S = 1$ quando $H > 0$ e o estado magnético negativo $S = -1$ quando $H < 0$.

Após determinar as energias para cada um dos 9 microestados, o código então calcula a função de partição Z somando as contribuições de Boltzmann de cada

um, ou seja,

$$Z = \sum_{j=1}^{3^N} \exp[-\beta \mathcal{H}_j], \quad \text{onde} \quad \beta = \frac{1}{k_B T}. \quad (2)$$

Após ser calculado Z , é determinado o valor das magnetizações locais de cada sítio do dímero através de médias ponderadas de cada peso de Boltzmann ($\exp[-\beta \mathcal{H}_j]$), de forma que

$$m_i = \langle S_i \rangle = \sum_{j=1}^{3^N} S_{i,j} \frac{\exp[-\beta \mathcal{H}_j]}{Z}. \quad (3)$$

Por fim, utilizando as grandezas calculadas anteriormente, o código determina os valores para a energia livre F do sistema,

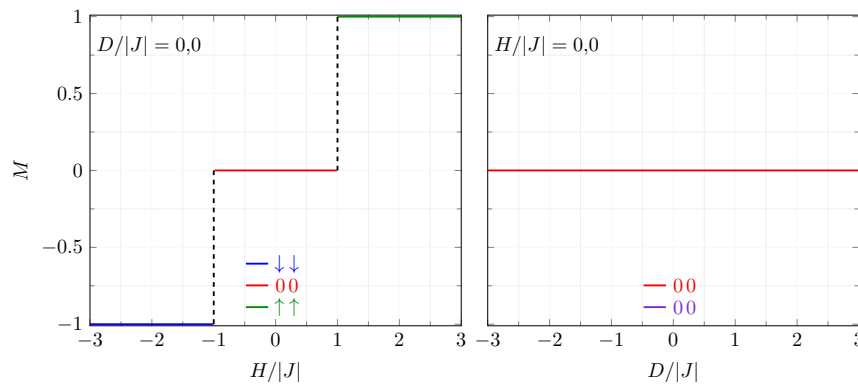
$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z, \quad (4)$$

que será utilizada para mapear as regiões em um diagrama de $H/|J| \times D/|J|$ onde há transição de fase magnética.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os resultados foram obtidos a partir de varreduras do código em uma faixa de valores variados de $H/|J|$ e $D/|J|$, de forma que fosse obtida uma série de dados que permitiram identificar, a partir da energia livre F e da magnetização total M as regiões onde há mudança de fase magnética no sistema. A Figura 1 mostra a magnetização total M do sistema em função de $H/|J|$ à esquerda e de $D/|J|$ à direita.

Figura 1 – Magnetização total M em função de $H/|J|$ para $D/|J| = 0$ (à esquerda) e em função de $D/|J|$ para $H/|J| = 0$ (à direita)



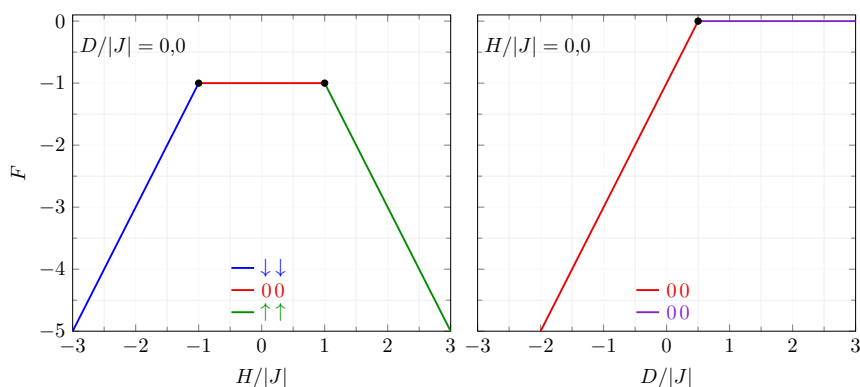
Fonte: acervo do autor (2025).

Como visto na Figura 1, o gráfico à esquerda apresenta a curva de $M \times H/|J|$ exibindo três platôs bem definidos, com $H/|J| < -1$ temos $M = -1$, o que caracteriza uma fase ferromagnética com *spins down* (FMd), para $-1 < H/|J| < 1$ é possível observar que $M = 0$, o que caracteriza uma fase não-magnética (NM), e para $H/|J| > 1$ vê-se que $M = 1$ o que caracteriza uma fase ferromagnética com

spins up (FMu). Além disso, o gráfico apresenta saltos abruptos localizados em $H/|J| = -1$ e $H/|J| = +1$ que caracterizam transições de primeira ordem, pois a magnetização se torna descontínua nesses locais. No quadro à direita da Figura 1, temos o comportamento contínuo de $M = 0$ para $-3 < D/|J| < 3$ com $H/|J| = 0$ o que, por sua vez, sugere que a análise de transições de fase via parâmetro de ordem, neste cenário, não evidencia a existência de uma transição. Neste caso, faz-se uso de critério termodinâmico via comparativo das energias livres para verificar possíveis transições de fase. Esse comportamento da magnetização ocorre pois, por estarmos em baixa temperatura, o parâmetro de ordem magnetização total M acaba tendo múltiplas soluções acessíveis e, para determinar qual solução será tomada, a análise da energia livre se torna necessária.

A partir da análise da energia livre F determinamos um ponto onde diferentes fases possuem a mesma energia e, quando o sistema transita entre os estados de menor energia, surgem assim inflexões visíveis nas curvas de F . A Figura 2 mostra a energia livre F em função de $H/|J|$ e $D/|J|$ variados.

Figura 2 – Energia livre F em função de $H/|J|$ para $D/|J| = 0$ (à esquerda) e em função de $D/|J|$ para $H/|J| = 0$ (à direita)



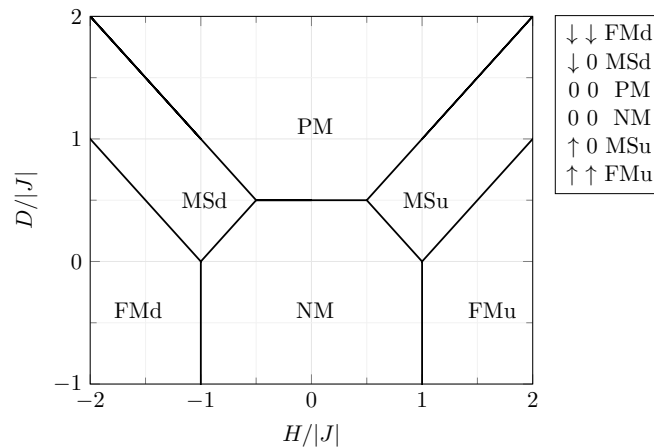
Fonte: acervo do autor (2025).

No quadro à esquerda na Figura 2, é possível observar que em $H/|J| = -1$ temos uma transição entre as fases FMd/NM, já em $H/|J| = 1$ temos a transição entre as fases NM/FMu. No gráfico à direita na Figura 2, vemos a transição entre as fases NM/paramagnética (PM) em $D/|J| = 0,5$. Vale notar que as energias livres demonstradas são referentes aos intervalos dos gráficos apresentados na Figura 1. Devido à descontinuidade, ou pelo comportamento constante da magnetização, a análise da energia livre é o que torna possível a identificação dos pontos onde ocorrem as transições de fase.

Realizando a análise da energia livre ao longo de várias varreduras em $H/|J|$ e $D/|J|$, é possível construir o diagrama de fases da rede de dímeros, como pode ser visto na Figura 3.

O diagrama subdivide-se em seis regiões, sendo elas uma faixa central NM para $D/|J| < 0,5$; duas regiões FM: FMd para valores de $H/|J| < -1$ e FMu para valores de $H/|J| > 1$; dois setores mistos: *spins* zero e *down* na fase MSd e *spins* zero e *up* na fase MSu, além de uma região PM, para valores de $D/|J| > 0,5$. As retas que constituem o diagrama indicam transições de primeira ordem demarcadas

Figura 3 – Diagrama de fases magnéticas de $D/|J|$ em função de $H/|J|$ para um sistema composto por dímeros em temperatura $T \approx 0$



Fonte: acervo do autor (2025).

através da mínima energia mútua entre as fases. A partir da análise do diagrama, podemos notar que o aumento ou diminuição de $H/|J|$ gera uma tendência dos *spins* se alinharem com o campo externo. Já quando variamos o termo de campo anisotrópico, para $D/|J| > 0,5$ temos uma tendência do aparecimento de estado $S = 0$ e para $D/|J| < 0,5$ temos a priorização dos estados de *spin* $S = +1$, entretanto, como havia sido dito anteriormente, o termo $J = -1$ foi escolhido a fim de priorizar alinhamentos antiparalelos, ou seja, $S_1 = -S_2$. Essa escolha faz com que a magnetização total do sistema seja zero, assim como foi apresentado no quadro à direita da Figura 1, e por consequência, fazendo com que o estado NM seja a configuração de menor energia.

4. CONCLUSÃO

É possível concluir com esse trabalho que o estudo do dímero no modelo de Blume–Capel a uma temperatura de $T \approx 0$, mostra que a energia livre permite identificar as mudanças de fase, já que os pontos de inflexão nas curvas F indicam exatamente onde o estado de menor energia do sistema muda. Dessa forma, a partir das varreduras dos parâmetros de ordem $H/|J|$ e $D/|J|$ foi possível a determinação das transições de fase, caracterizando então o diagrama de fases do sistema. Como perspectiva de trabalhos futuros, pretende-se trabalhar com outras abordagens, alterar a geometria da rede e considerar novas interações do sistema, com isso possibilitando explorar novos resultados e cenários exóticos.

5. REFERÊNCIAS

- BLUME, M. Theory of the first-order magnetic phase change in UO_2 . **Physical Review**, New York, v. 141, n. 2, p. 517–524, 1966.
- CAPEL, H. W. On the possibility of first-order phase transitions in Ising systems of triplet ions with zero-field splitting. **Physica**, Amsterdam, v. 32, p. 966–988, 1966.
- BRITO, R. A. **Método variacional de Bogoliubov aplicado a modelos de spins: Ising e Blume-Capel**. 2017. 52 f. Dissertação (Mestrado em Física) – Programa de Pós-Graduação em Física, Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa.