

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

BRUNO DE OLIVEIRA BENTOS<sup>1</sup>; ANDERSON RICARDO DA SILVA FERREIRA<sup>2</sup>;  
CARLOS ALBERTO VAZ DE MORAIS JUNIOR<sup>3</sup>.

<sup>1</sup> Universidade Federal de Pelotas – [bruno.o.bentos@gmail.com](mailto:bruno.o.bentos@gmail.com)

<sup>2</sup> Universidade Federal de Pelotas – [anderson.ricardo52592@gmail.com](mailto:anderson.ricardo52592@gmail.com)

<sup>3</sup> Universidade Federal de Pelotas – [carlosavjr@gmail.com](mailto: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 diatônicos, sendo utilizado o modelo de Blume–Capel, por exemplo, para estudar misturas He<sup>3</sup>–He<sup>4</sup> 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,

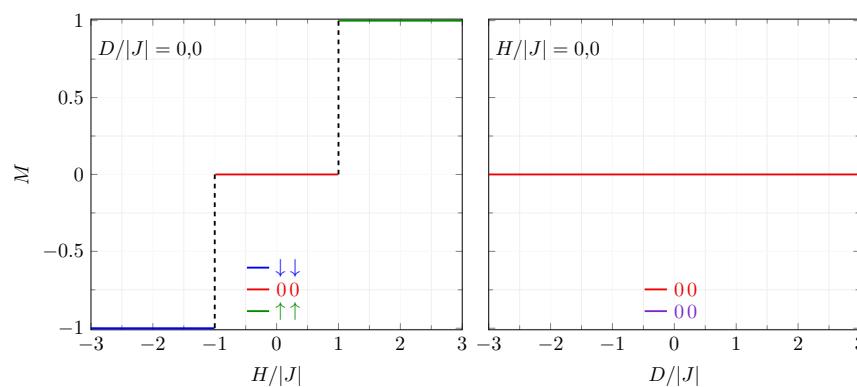
$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z, \quad (4)$$

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)



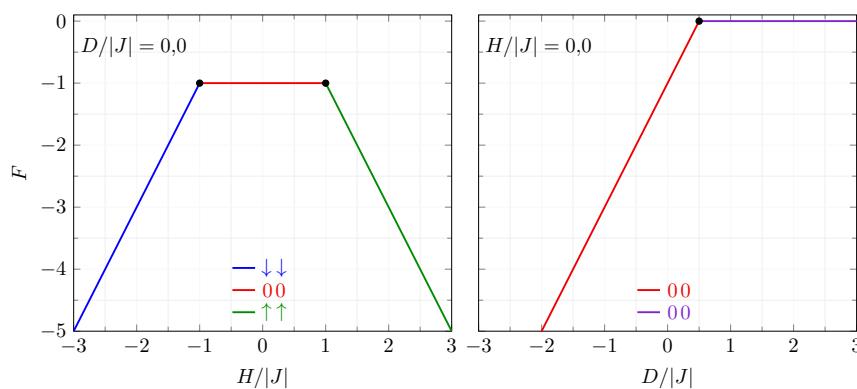
Fonte: acervo do autor (2025).

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)



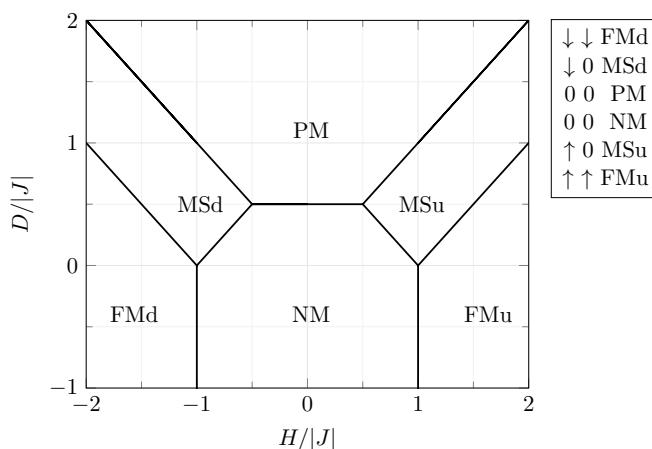
Fonte: acervo do autor (2025).

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  $\text{UO}_2$ . **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.