

REVISÃO DO MODELO BLUME-CAPEL COM ÊNFASE NA LOCALIZAÇÃO DA TRANSIÇÃO DE SEGUNDA ORDEM E PONTO TRICRÍTICO

EDUARDO FERREIRA DA SILVA¹; ARTHUR KRINDGES²; CARLOS ALBERTO VAZ DE MORAIS JUNIOR³

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

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

³Universidade Federal de Pelotas (UFPel) – carlosavjr@gmail.com

1. INTRODUÇÃO

O estudo da matéria condensada, que procura compreender a natureza dos diferentes estados da matéria, possibilita o desenvolvimento de novas tecnologias (CALLISTER, 2002). Em particular, o fenômeno de anisotropia magnética, via campos cristalinos, é um dos temas de relevância científica dentro da física da matéria condensada. Tal ocorrência está relacionada ao fato de que alguns materiais necessitam de uma maior energia para se magnetizar em certas direções. Efeitos de campos de cristal têm sido estudados, por exemplo, a partir do modelo Blume-Capel (BC) (BLUME, 1966). Este modelo consiste em uma generalização do modelo Ising com a adição de um campo cristalino anisotrópico D que pode favorecer estados magnéticos ($D < 0$) e não magnéticos ($D > 0$) (BUTERA, 2018). O modelo acaba sendo uma peça chave na modelagem de sistemas físicos com anisotropia magnética, como encontrado nas terras raras (COEY, 2021).

Do ponto de vista de tratamento teórico do modelo BC, utilizam-se conceitos da termodinâmica e mecânica estatística, juntamente com uma aproximação de campo médio (KAUFMAN, 1990), resultando em uma equação de estado na forma $m(T, D)$. Conseqüentemente, estudaremos o comportamento magnético a partir da equação de estado obtida. Um fator importantíssimo neste modelo é o comportamento magnético para valores diferentes do campo anisotrópico, em que notamos também a ocorrência de uma mudança na criticalidade, caracterizada por uma descontinuidade na magnetização do sistema para certo valor de D crítico. Neste trabalho, mostramos essa característica do comportamento da magnetização, bem como a construção de um diagrama de fases que mostra o aparecimento de um ponto tricrítico, o ponto onde ocorre a separação entre as transições de primeira e segunda ordem, característico do modelo BC.

2. METODOLOGIA

O modelo Blume-Capel trata-se 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 anisotrópico (D) que atua sobre todos os sítios magnéticos, favorecendo ambos os estados magnéticos e não magnéticos.

O modelo Blume-Capel é descrito pelo seguinte hamiltoniano

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

onde os spins podem assumir os valores $S = \pm 1, 0$. J é a interação ferromagnética e D (positivo) o campo cristalino. Para obtenção das quantidades

macroscópicas, a conexão da mecânica estatística e termodinâmica é feita pela identidade $F = -T \ln(Z)$, sendo F a energia livre de Helmholtz e Z a função de partição ($Z = Tr \exp(-\beta H)$), onde $\beta = 1/T$ e T a temperatura). Utilizando da teoria de campo médio, é possível aplicar o traço e obter F , tomando como $J = 1$

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

Podemos notar que agora F é função também de uma variável auxiliar m , que surge da teoria de campo médio. Aplicando o método de ponto de sela para a energia livre em relação a m . Ou seja, fazendo com que o valor de m minimize a energia do sistema, obtemos

$$m(T, D, m) = \frac{\sinh \beta m}{e^{\frac{\beta D}{2}} + \cosh \beta m}. \quad (3)$$

Esta equação transcendental autoconsistente é chamada de parâmetro de ordem da magnetização, desta forma, não existe uma forma analítica de obtenção da sua solução (somente em alguns regimes). Assim, através do cálculo numérico computacional, obteremos a magnetização do sistema para poder enfim o descrever.

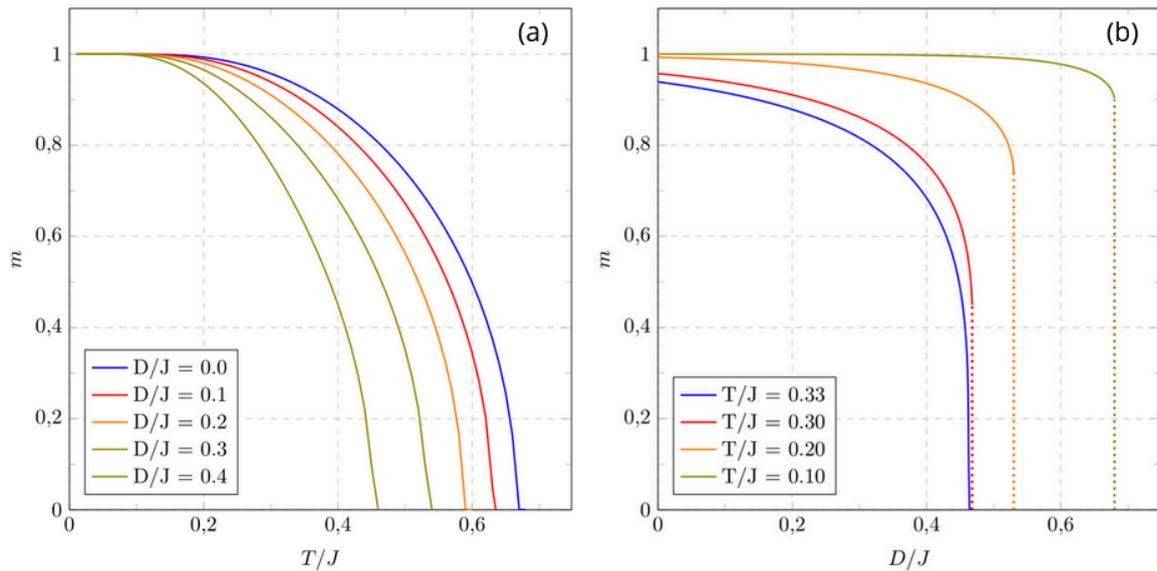
A partir da metodologia utilizada e da equação (3), vamos analisar o comportamento magnético para valores diferentes do campo anisotrópico D varrendo sua temperatura de maneira iterativa. Similarmente, podemos fixar alguns valores de temperatura T e criar um gráfico de m por D , onde perceberemos a transição de fase de primeira ordem, caracterizada pela descontinuidade da magnetização.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

A partir de um algoritmo implementado em FORTRAN, utilizando o método iterativo, o cálculo numérico do parâmetro de ordem é realizado.

Primeiramente varremos a magnetização e a temperatura para diferentes valores de D . Conforme apresentado no gráfico (a) da Figura 1, notamos que o comportamento magnético decai conforme a temperatura aumenta, até a ocorrência de uma transição de fase ferromagnética (FM) ($m \neq 0$) para uma paramagnética (PM) ($m = 0$). A temperatura em que esta transição ocorre é chamada de temperatura crítica. Para os valores de D apresentados no gráfico da figura 1, as temperaturas críticas são, em ordem crescente do campo cristalino D : $T/J = 0,68$, $T/J = 0,635$, $T/J = 0,6$, $T/J = 0,54$ e $T/J = 0,46$. A temperatura crítica diminui conforme a intensidade do campo D aumenta.

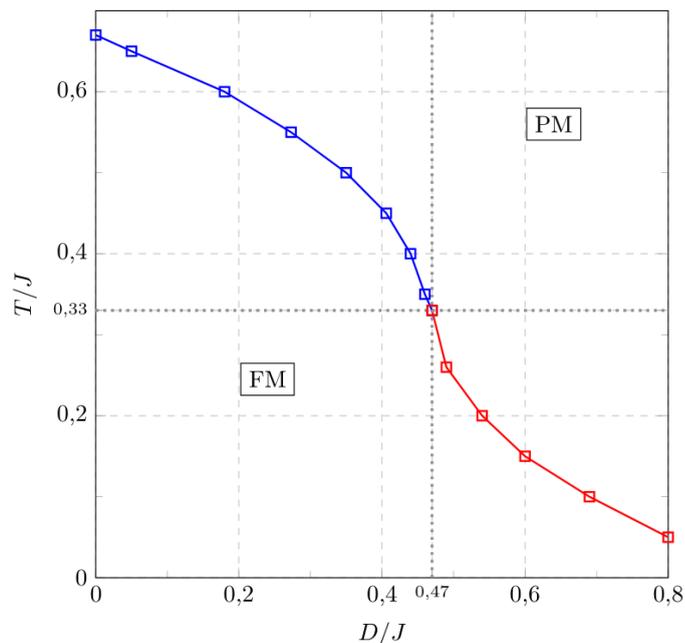
Figura 1: (a) Magnetização m em função da temperatura T/J para diferentes intensidades do campo cristalino D/J . (b) Magnetização m em função do campo cristalino D/J para diferentes valores de temperatura T/J .



Fonte: do Autor (2024).

Outro ponto a ser analisado é o comportamento da magnetização em função do campo cristalino D em diferentes valores de temperatura, como é mostrado na Figura 1 (b). Podemos observar que para valores suficientemente grandes de T ($T/J=0.33$) o comportamento da magnetização é contínuo em função de D . Mas quando diminuimos a temperatura ocorre que m começa a mostrar um comportamento descontínuo para determinados valores de D , isso indica uma mudança na natureza da transição de fase, indo de uma transição contínua (2 ordem) para descontínua (1 ordem).

Figura 2: Diagrama de fase $T \times D$ destacando o ponto tricrítico, linha azul marca a transição de segunda ordem e linha vermelha o limite de validade da solução magnética (espinodal).



Fonte: do Autor (2024).

Como vimos pela Figura 1 (b) existe uma mudança no tipo de transição de fase em função de T e D , assim, montamos um diagrama de fase, disposto na Figura 2, que engloba todas as características. Nele temos a linha que separa as fases FM e PM, sendo a linha azul a que marca a transição de segunda ordem e a linha vermelha a que marca a espinodal. Note que a marcação da transição de fase foi feita somente através do comportamento de m (quando m vai a zero), desta forma, não temos ainda uma maneira de marcar a transição de primeira ordem. Assim, a análise que fizemos foi o limite de validade para a solução diferente de zero em m que é a espinodal. Outro ponto importante neste diagrama é o ponto tricrítico que marca a separação dos tipos de transição, sendo o divisor do comportamento contínuo e descontínuo do sistema.

4. CONCLUSÕES

Neste trabalho, a criticalidade proveniente do tratamento analítico e numérico do modelo BC foi discutida. Essencialmente, foram localizadas a transição de segunda ordem via parâmetro de ordem e o ponto tricrítico, que marca o ponto em que o parâmetro de ordem m contínuo passa a ser descontínuo. Uma consequência da descontinuidade surge devido a uma dificuldade na localização da transição de fase abaixo do ponto tricrítico. Sem uma análise a nível de energia livre, somente foi possível localizar o limite de validade da solução magnética. Logo, para possibilidade de trabalho futuro, será realizada uma análise da energia livre com ajuste do campo de cristal e a localização da transição de fase de primeira ordem, o que a princípio nos permitiria concluir o diagrama de fases em acordo com a literatura.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

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 UO₂.** Physical Review, v.141, p. 517, 1966.

COEY, J. M. D.; PARKIN, Stuart S. P. (Eds.). **Handbook of Magnetism and Magnetic Materials.** 2021.