ESTUDO DO MODELO BLUME-CAPEL COM CAMPO ALEATÓRIO

WILLIAN MACEDO SOARES[1]; GERSON DANTAS ROCHA[2], CARLOS ALBERTO VAZ DE MORAIS JUNIOR[3]

[1]*Universidade Federal de Pelotas – willianmsoares@live.com*
[2]*Universidade Federal de Pelotas –dantas_gerson@hotmail.com*
[3]*Universidade Federal de Pelotas– carlosavjr@gmail.com*

1. INTRODUÇÃO

O modelo mais simples que mostra o diagrama de fase tricrítico na ausência de uma aleatoriedade é o modelo Blume-Capel (BC) (BLUME, CAPEL (1966)). Este modelo tem sido estudado por uma variedade de técnicas, como por exemplo teoria de campo médio. Neste trabalho, estudaremos os efeitos do campo aleatório sobre os contornos de fase e pontos tricriticos obtidos a partir do modelo BC. Em particular, os resultados aqui obtidos empregam teoria de campo médio, seguindo em detalhes os procedimentos discutidos na Referência KAUFMAN, M (1990).

Portanto, o presente trabalho estuda o modelo BC na presença de campo magnético aleatório acoplado, que pode assumir os valores $\pm H$ com probabilidade bimodal simétrica. Como consequência, os efeitos que este campo causa sobre os ordenamentos ferromagnético e paramagnético são analisados.

2. METODOLOGIA

O modelo de Blume-Capel inclui dois campos termodinâmicos: a temperatura *T* e o campo cristalino *D* conjugado a *-S²*, onde *S* é o spin, que pode assumir três valores ± 1 ou 0 . Logo, em cada sítio da rede, há um spin $S_i = \pm 1, 0$. O Hamiltoniano associado com N spins é:

$$-\mathrm{H}/T = \frac{J}{2N} \sum_{i,j} S_i S_j - JD \sum_{i=1}^{N} S_i^2 + J \sum_i H_i s_i$$

Onde $J \equiv 1/T$. O campo magnético h_i é distribuído de acordo com a distribuição bimodal:

$$P(h_i) = \frac{1}{2} [\delta(H_i - H) + \delta(H_i + H)] .$$

Para o tratamento do modelo é utilizado teoria de campo médio, que consiste em uma aproximação para somar a função de partição de um sistema e então poder obter as suas propriedades termodinâmicas.

Para o calculo da energia livre utilizamos a seguinte equação:

$$f = \frac{1}{J} min_m \Phi(m)$$

onde:

$$\Phi = \frac{1}{J} m^2 - \langle \ln\{1 + e^{-JD} 2\cosh[J(m + H_i)]\} \rangle .$$

A média sobre a desordem em H_i é realizada usando a distribuição bimodal. O valor da magnetização m é obtido através da extremização da energia livre. Em particular, m é uma equação auto-consistente, em que $m = f(m, D, T, H)$. Portanto, para obtenção da solução para o parâmetro de ordem m para um dado conjunto D, T, H , é utilizado o recurso do método numérico de iteração linear. Particularmente, foi utilizada linguagem FORTRAN (NASCIMENTO, E.M DO) para confecção do algoritmo que calcula numericamente (RUGGIERO, M.A.G.) os valores de m que satisfazem a condição $m-f(m,D,T,H)=0$. Como consequência, o comportamento do parâmetro m é obtido para diversos valores de D,T,H na forma de dados. Posteriormente, os dados obtidos são utilizados para construção de resultados apresentados na forma de gráficos, os quais permitem a análise em detalhes da influência do campo aleatório e do campo cristalino assim como da temperatura sobre o comportamento dos ordenamentos ferromagnético e paramagnético.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Nos resultados, a temperatura T, campo de cristal D e o campo aleatório H são escalonados de acordo com a interação J, que é fixada em $J=1$ Na fig.1(a), é mostrado que com o aumento de T/J a magnetização decresce. Para um valor de T/J grande o bastante, ocorre a transição da fase ferromagnética (FM) ($m\neq 0$) para paramagnética (PM) ($m=0$), marcada pela temperatura de transição T_c/J. Em particular, a temperatura de transição T_c/J decresce com o aumento do H/J. Portanto, com o aumento do campo aleatório há um favorecimento a fase paramagnética em relação a fase ferromagnética. Fig. 1(b) ilustra o comportamento da energia livre f como uma função do campo aleatório H para $T/J=0.2$ e $D=0$. Em particular, este resultado ilustra o comportamento das energias livres das soluções ferromagnética e paramagnética em baixas temperaturas, onde o parâmetro de ordem m pode apresentar descontinuidades dependendo da combinação de D,T,H. Através da comparação das energias livres das soluções ferromagnética e paramagnética, as linhas de transição de primeira ordem mostradas na Fig. 2 (a) e (b) são determinadas.

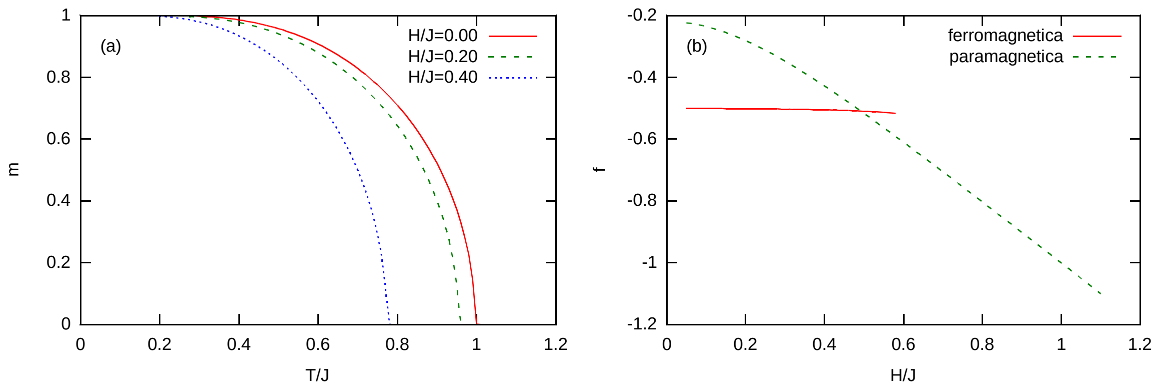

Figura 1. (a) m como uma função de T/J para diversos valores de H/J para $D=0$. (b) Energia livre f como uma função do campo aleatório para $T/J=0.2$ e $D=0$ mostrando em detalhes a localização da linha de primeira ordem.

Figura 2 mostra os diagramas de fase T/J como uma função de H/J para dois valores de $D/J:-5{,}0$. A figura 2(a) ($D/J=-5$) mostra que com o aumento do H/J, a linha de transição de segunda ordem entre as fases FM/PM decresce. Além disso, para valores altos de H/J ocorre o surgimento de uma transição de primeira ordem T_{1c}. Na figura, T_{tc} representa o ponto tricrítico, que separa as linhas T_c e T_{1c}. A figura 2(b) ($D=0$) mostra os efeitos do aumento do D. Para um valor maior de D, o ordenamento ferromagnético aparece em uma menor região do diagramas de fases, quando comparado com o caso $D/J=-5$. Este comportamento ocorre devido ao favorecimento dos estados não interagentes com o aumento de D, o que leva a diminuição da temperatura de transição. Em baixas temperaturas e para valores grandes de h_0/J os spins magnéticos são favorecidos em relação aos não magnéticos e ainda são simultaneamente aleatorizados pelo campo aleatório.

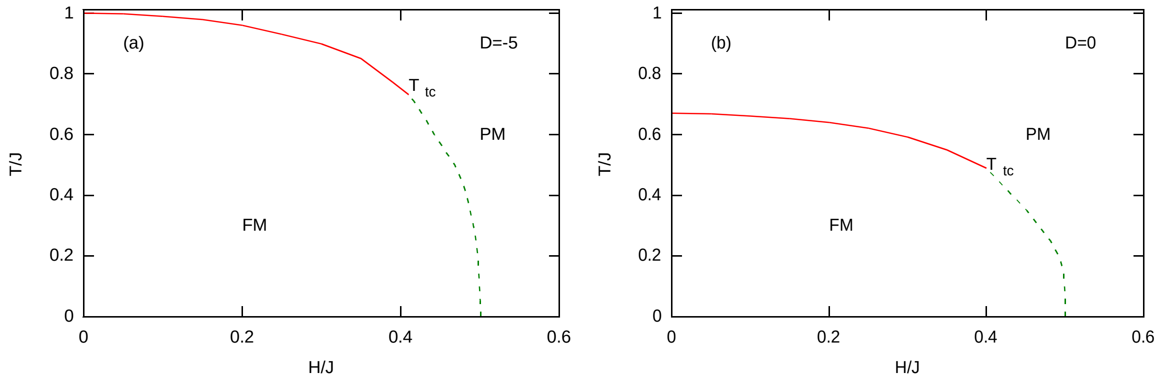

Figura 2(a) Diagrama de fases com D/J=-5 e (b) D=0 (linha vermelha indica a linha de transição de 2°ordem e a linha verde a linha de transição de 1º ordem).

Como consequência, as linhas de transição de primeira ordem em baixas temperaturas são pouco afetadas pelo aumento do campo de cristal D .

4. CONCLUSÕES

O presente trabalho teve por objetivo a análise e o entendimento de resultados já conhecidos na literatura, onde diagramas de fase do modelo Blume-Capel em um campo aleatório distribuído bimodalmente foram determinados a partir do uso de aproximação de campo médio (KAUFMAN, M (1990)). O estudo deste modelo serve como ponto de partida acerca da compreensão de modelos magnéticos mais complicados, tanto do ponto de vista analítico quanto computacional (VAZ DE MORAIS JUNIOR (2010)). Em particular, pode-se citar como exemplo o modelo Vidro de Spin de Alcance Infinito, proposto por Sherrington-Kirkpatrick (1997). Este modelo magnético desordenado tem sido usados na descrição do problema do vidro de spin, que é uma espécie de ordem magnética, em que momentos magnéticos (spins) estão congelados de forma desordenada em baixas temperaturas.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BLUME, M. Theory of the First-Order Magnetic Phase Change in UO2 ;**Phys. Rev.** 141**,** 517 1966;

KAUFMAN, M. Random-Field Blume-Capel Model: Mean-Field Theory. **Physics Faculty Publications**, Cleveland, Ohio,1990

NASCIMENTO, E.M DO. Introdução ao fortran 90. **CENAPAD-SP**, Bahia, 1-62

RUGGIERO, M.A.G. **Cálculo Numérico, Aspectos Teóricos e Computacionais**. São Paulo. Makron Books. 2009. 2° Edição.

VAZ DE MORAIS JUNIOR, C.A. **Transiçoes Inversas em Modelos fermionicos de vidro de spin**. 2010. Tese de doutorado-Programa, Programa de Pós-graduação em Física, Universidade Federal de Santa Maria

KIRKPATRICK, S.; SHERRINGTON, S. Infinite-ranged models of spin-glasses. Physical Review B. **The american Physical Society**, 1977

CAPEL, H. W. On the possibility of first-order phase transitions in Ising systems of triplet ions with zero-field splitting ; **Physica (Amsterdam)** 32, 966 1966