

ESTUDO DE TRANSIÇÕES INVERSAS NO MODELO BLUME CAPEL

GERSON DANTAS ROCHA¹; WILLIAN MACEDO SOARES²; CARLOS ALBERTO VAZ DE MORAIS JÚNIOR³

¹Universidade Federal de Pelotas UFPel 1 – dantas_gerson@hotmail.com 1

²Universidade Federal de Pelotas UFPel ²– willianmsoares@live.com 2

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

1. INTRODUÇÃO

Recentemente, as transições inversas (ERTAS, D.; NELSON, D. R, (1996), CHEVILLARD, C.; AXELOS, M. A. V (1997)), uma classe não usual de transições de fase, tem ganhado atenção. Nessas transições (reversíveis), a fase dita mais ordenada tem maior nível entrópico maior que a fase desordenada. Essencialmente, tais transições podem ser classificadas em duas espécies: Derretimento e Congelamento inverso. No derretimento inverso, pode ocorrer, por exemplo, uma transição de fase líquida em baixas temperaturas para uma cristalina através de aumento de temperatura. Já no congelamento inverso, a fase desordenada, por exemplo líquida, é substituída em altas temperaturas por uma fase do tipo vidro, caracterizada essencialmente pela quebra de ergodicidade sem o surgimento de uma estrutura ordenada aparente.

Um dos modelos mais simples para descrever transições inversas é o de Blume-Capel (BLUME; CAPEL (1966)). Neste, os constituintes são partículas de spin-1, e há duas interações que competem: uma troca de interação que baixa a energia dos estados ± 1 (*interagentes*) e um campo de cristal que favorece o estado 0 (*não interagente*). Portanto, este trabalho visa caracterizar, exemplificar e descrever o comportamento das transições inversas e o modelo empregado nessa caracterização que é o modelo Blume-Capel (BC). Particularmente, a análise proposta no presente trabalho segue em detalhes a discussão realizada na referência SCHUPPER; SHNERB (2005) .

2. METODOLOGIA

Para N interações de spins o modelo Blume-Capel apresenta seu hamiltoniano desta forma:

$$H = -J \sum_{i,j} S_i S_j + D \sum_{i=1}^N S_i S_j - h \sum_{i=1}^N S_i,$$

Onde as variáveis spin podem assumir os valores $S_i = \pm 1, 0$, com h sendo o campo magnético aplicado e D o campo de cristal que favorece estados não interagentes. Para obtenção de transição inversa no modelo BC, um ingrediente deve ser introduzido ao modelo, que é a vantagem entrópica dos estados interagentes. Para tal, SCHUPPER; SHNERB (2005) incorporaram ao modelo BC o parametro de degenerescência r, que dita uma vantagem entrópica dos estados interagentes.

Consequentemente, o modelo BC com modificação para obtenção de transições inversas pode ser resolvido no limite de alcance infinito, isto é, onde não há uma estrutura espacial e quaisquer pares de spin podem interagir com

outro par. Usando técnica padrão de integração Gaussiana uma expressão para a energia livre por spin no limite de alcance infinito é encontrada, tal que:

$$\beta f = \beta F/N = \frac{\beta J M^2}{2} - \ln(1 + 2r \cosh[\beta(JM)] e^{-\beta D}) .$$

O M é o parâmetro de ordem do sistema (magnetização por spin), em que uma expressão para M pode ser obtida através da minimização da energia livre com respeito ao parâmetro M . Como consequência, as curvas de transição de fase podem ser obtidas numericamente a partir da equação do parâmetro de ordem M , como segue

$$M = \frac{2r \sinh[\beta(JM)]}{e^{\beta D} + 2r \cosh[\beta(JM)]}$$

Em particular, m é uma equação auto-consistente, em que $m = f(m, D, T)$. Portanto, para obtenção da solução para o parâmetro de ordem m para um dado conjunto D, T , é utilizado o recurso do método numérico de iteração linear (RUGGIERO, 2009). Este método consiste em buscar a raiz de uma função isolando o M da função, de forma a se obter $m = f(m, D, T)$, para então se buscar a intersecção da curva da função $f(m, D, T)$ com a reta M . Particularmente, foi utilizada linguagem FORTRAN (NASCIMENTO) para confecção do algoritmo que calcula numericamente os valores de m que satisfazem a condição $m - f(m, D, T) = 0$. Como consequência, o comportamento do parâmetro m é obtido para diversos valores de D, T 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 parâmetro de degenerescência 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 e o campo de cristal D são escalonados de acordo com a interação J , que é fixada em $J=1$. Na Fig. 1, em que $r=1$, é mostrado que com o aumento de D/J a magnetização m decresce. Para um valor de D/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 . É observado também que para baixas temperaturas, o parâmetro m apresenta descontinuidades, conforme pode ser exemplificado no comportamento de m para os valores de $T/J=0.1, 0.01$. Fig. 2 ilustra o comportamento da energia livre f como uma função do campo aleatório D/J para $T/J=0.1$. 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, conforme visto na Fig. 1 para baixas temperaturas. Através da comparação das energias livres das soluções ferromagnética e paramagnética, as linhas de transição de primeira ordem mostradas na Fig. 3 e 4 são determinadas.

No diagrama de fase visto na Fig. 3, são apresentados resultados obtidos do modelo BC original (caso $r=1$), com a linha vermelha (cheia) simbolizando uma transição de segunda ordem, onde acima desta ocorre uma fase paramagnética ($M=0$) e abaixo desta a fase ferromagnética é encontrada ($M \neq 0$). Além disso,

para valores altos de D/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} . Ao longo da linha tracejada, a energia livre das fases paramagnética e ferromagnética é igual. Particularmente, o modelo BC original não mostra transição inversa (SCHUPPER; SHNERB (2005)).

Realizando o mesmo procedimento descrito para obtenção do resultado da Fig. 3, mas com aumento de r ($r=6$), é encontrado o diagrama de fase da Fig. 4. Neste diagrama, é observado o surgimento de um comportamento reentrante, que indica o surgimento de transição inversa. Este comportamento reentrante surge devido a vantagem entrópica dos estados interagentes, causada pelo aumento do r . Em particular, o fato de a fase ferromagnética cobrir uma maior porção do diagrama de fases indica esta vantagem entrópica.

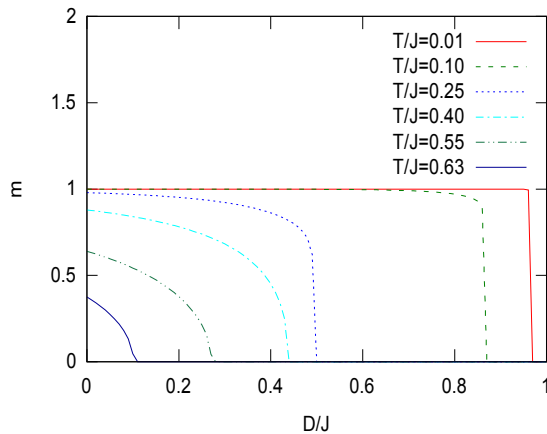


Figura 1: Parâmetro de Ordem M como uma função do Campo de Cristal D .

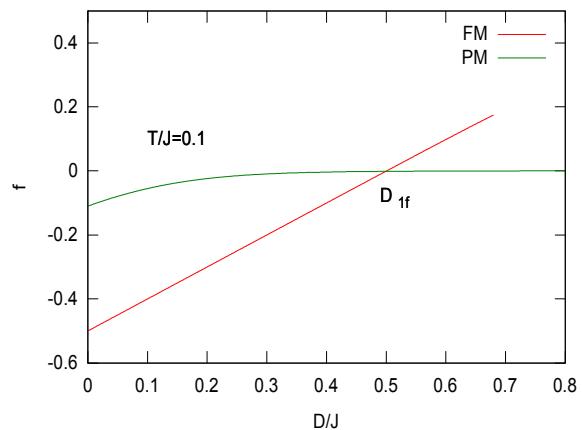


Figura 2: Energia Livre como uma função do campo de cristal D .

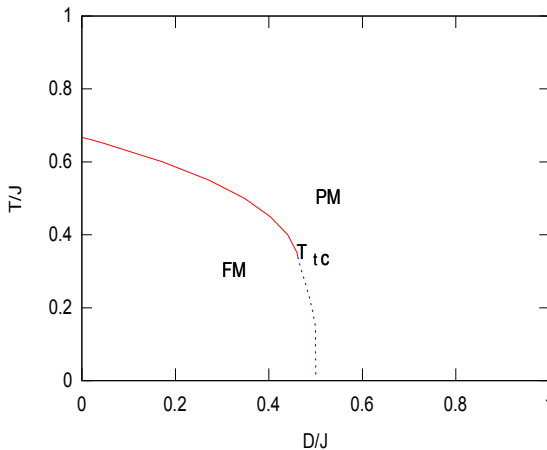


Figura 3: Diagrama de fase T/J versus D/J para $r=1$

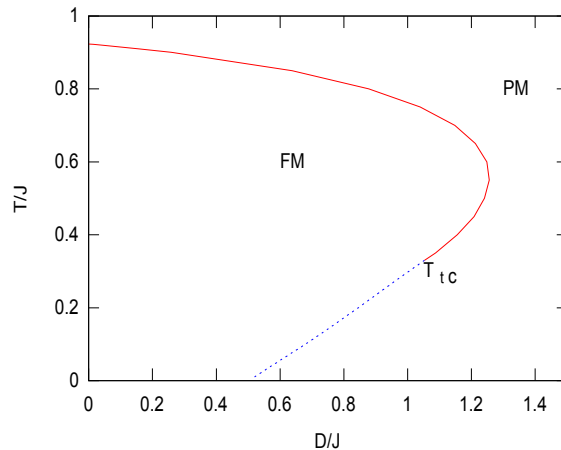


Figura 4: Diagrama de fase T/J versus D/J para $r=6$

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 modificado para obtenção de transição inversa foram determinados a partir do uso de aproximação de campo médio (SCHUPPER; SHNERB (2005)). 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 Ghatak-Sherrington (GS) de Alcance Infinito, proposto

por GHATAK; SHERRINGTON (1977). 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. Em adição, este modelo também é útil para descrição de transições inversas, mais especificamente congelamento inverso.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BLUME, M. Theory of the First-Order Magnetic Phase Change in UO_2 , **Phys. Rev**, v.141, p.141-517, 1996.

CAPEL, H.W. Phase Transitions in Spin-One Ising Systems, **Physica Amsterdam**, v.32, p. 966-988, 1996.

CHEVILLARD, C.; AXELOS, M. A. V. Phase separation of aqueous solution of methylcellulose **Colloid and Polymer Science**, v. 275, p. 537-545, 1997.

ERTAS, D.; NELSON, D. R. Irreversibility, mechanical entanglement and thermal melting in superconducting vortex crystals with point impurities **Physica C: Superconductivity**, v. 272, p. 79 - 86, 1996.

GHATAK, S.K.; SHERRINGTON, D. Condens. Matter **J. Phys. C: Solid State Phys** 10, 3149, 1977

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.

SCHUPPER, N; SHNERB, N. M. Inverse Melting and Inverse Freezing: A Spin Model, *Physical Review E*, **The American Physical Society**, v. 72, p. 046107, 2005

VAZ DE MORAIS JUNIOR, C.A. **Transições Inversas em Modelos Fermiônicos de Vidro de Spin**, Tese de Doutorado-Programa, Programa de Pós-Graduação em Física, Universidade Federal de Santa Maria, 2010.