



Serviço Público Federal
Ministério da Educação
Fundação Universidade Federal de Mato Grosso do Sul



Curso de Física - Bacharelado

Transições de Fase Magnéticas: Um Estudo do Modelo de Ising

João Miguel Ramalho Dionizio

Campo Grande - MS

2024

INSTITUTO DE FÍSICA- INFI

Cidade Universitária|Unidade 5|

Fone (67) 3345 7485

79070-900 | Campo Grande | MS



Serviço Público Federal
Ministério da Educação
Fundação Universidade Federal de Mato Grosso do Sul



Curso de Física - Bacharelado

Transições de Fase Magnéticas: Um Estudo do Modelo de Ising

João Miguel Ramalho Dionizio

Orientador: Prof. Dr. Fábio Mallmann Zimmer

**Trabalho de conclusão de curso apresentado
à Universidade Federal de Mato Grosso Sul
- UFMS - Instituto de Física, para obtenção
do título de bacharel em Física.**

Campo Grande - MS

2024

INSTITUTO DE FÍSICA- INFI

Cidade Universitária|Unidade 5|

Fone (67) 3345 7485

79070-900 | Campo Grande | MS

Transições de Fase Magnéticas: Um Estudo do Modelo de Ising

João Miguel Ramalho Dionizio

Trabalho de conclusão de curso apresentado à banca examinadora do Instituto de Física da Universidade Federal de Mato Grosso do Sul - INFI/UFMS, como requisito parcial para obtenção do título de Bacharel em Física.

Prof. Dr. Fábio Mallmann Zimmer - UFMS

Prof. Dr. João Vitor Batista Ferreira - UFMS

Me. Luiz Felipe Scatena Guizado - UFMS

Bel. Carlos Henrique Duarte Batista - UFMS

Campo Grande - MS

2024

“Carece de ter coragem. Carece de ter muita coragem...”
- João Guimarães Rosa

Agradecimentos

Primeiramente agradeço aos meus pais, Eduardo e Devalci, pelo apoio ao longo de toda a minha vida, principalmente durante os anos da graduação, e por terem me garantido as condições para que pudesse chegar até aqui. Além dos meus irmãos, Eduardo Gabriel, Déborah e Otávio Murillo.

Agradeço também aos amigos que me acompanharam durante esses últimos anos, seja nos momentos de estudos, conversas nos momentos de distração e pela força nas situações difíceis de uma graduação em Física. São eles: Alan, Cássio, Giovanni, João Augusto, Matheus, Nicolas, Victoria, Wender, entre outros.

Agradeço ao Prof. Fábio Mallmann Zimmer, pela paciência e auxílio em quaisquer que fossem as dúvidas, tanto na Iniciação Científica quanto nas disciplinas. Também agradeço aos demais professores do Instituto de Física que participaram da minha formação, e contribuíram sempre para a minha melhora academicamente.

Por último mas não menos importante, agradeço ao PET-Física pelos anos onde pude aprender que a Física é muito além do visto em uma sala de aula, e aos colegas “petianos” que fizeram parte desse caminho comigo. Também agradeço ao Fundo Nacional de Educação (FNDE) pelo apoio financeiro os três últimos anos de graduação.

Resumo

Neste trabalho, é abordado como ocorrem transições entre fases magnéticas, com foco na transição de um estado ferromagnético para um paramagnético. Para isso, o modelo de Ising é adotado e estudado com a aplicação de dois métodos distintos: a Teoria de Campos Médios usual e a Teoria de Campos Médios Correlacionados. Por meio disto, busca-se comparar os métodos para determinação da temperatura crítica de transição de fase e fazer uma discussão sobre como a termodinâmica desses sistemas é modificada ao longo desse processo, com o estudo de grandezas fundamentais como energia e calor específico. Para isso, métodos numéricos para a análise das temperaturas de transição e demais grandezas termodinâmicas são adotados, como métodos iterativos para solução de equações auto-consistentes e um método de derivação numérica, para que de maneira comparativa verificar se há uma melhora da Teoria de Campos Médios Correlacionados com relação à usual.

Palavras-chave: **Sistemas magnéticos, modelo de Ising, teoria de campo médio, mecânica estatística, termodinâmica, fenômenos críticos, transições de fase.**

Abstract

In this paper, we look at how transitions between magnetic phases occur, focusing on the transition from a ferromagnetic to a paramagnetic state. To this end, the Ising model is adopted and studied using two different methods: the usual Mean Field Theory and the Correlated Mean Field Theory. The aim is to compare the methods for determining the critical phase transition temperature and to discuss how the thermodynamics of these systems is modified during this process, with the study of fundamental quantities such as energy and specific heat. To this end, numerical methods for analyzing transition temperatures and other thermodynamic quantities are adopted, such as iterative methods for solving self-consistent equations and a numerical derivation method, in order to comparatively verify whether there is an improvement in the Correlated Mean Field Theory compared to the usual one.

Keywords: **Magnetic systems, Ising model, mean field theory, statistical mechanics, thermodynamics, critical phenomena, phase transitions.**

Lista de Figuras

1	Exemplo de um sistema termodinâmico. Fonte: Autor	14
2	Representação do sistema (S) em contato com um reservatório Térmico (R) para o estudo do Ensemble Canônico. Fonte: Autor.	19
3	Comportamento ferromagnético em uma rede bidimensional de spins. Fonte: Disponível em < https://en.wikipedia.org/wiki/Magnetism >. Acesso em novembro de 2024.	24
4	Transição entre as fases ferromagnética e paramagnética, com a indicação da temperatura de Curie.	25
5	Comportamento antiferromagnético em uma rede bidimensional de spins. Fonte: Disponível em < https://en.wikipedia.org/wiki/Antiferromagnetism > , acesso em novembro de 2024	27
6	Susceptibilidade em função da temperatura para um antiferromagneto com a indicação da temperatura de Néel.	28
7	Tangente hiperbólica da magnetização dividido pela temperatura em função da magnetização para duas temperaturas: $T = 2.00$ (curva em vinho) e $T = 0.50$ (curva em verde). A linha $m = m$ também é mostrada na figura em cor preta.	35
8	magnetização em função da temperatura.	36
9	magnetização e Campos médios em função da temperatura para a rede quadrada $z = 4$ (a) e cúbica $z = 6$ (b).	38
10	Energia Interna em função da temperatura para a rede quadrada $z = 4$ (a) e cúbica $z = 6$ (b).	39
11	Calor específico para a rede quadrada $z = 4$ (a) e cúbica $z = 6$ (b).	40

Sumário

1	Introdução	9
1.1	Objetivos Gerais	10
1.1.1	Objetivos específicos	10
1.2	Metodologia adotada	11
1.3	Organização deste trabalho	11
2	Fundamentos de Termodinâmica e Mecânica Estatística	13
2.1	Potenciais Termodinâmicos	13
2.1.1	Energia Interna	15
2.1.2	Entropia	16
2.1.3	Energia Livre de Helmholtz	16
2.1.4	Derivadas segundas: Calor específico e Susceptibilidade magnética	17
2.2	Ensemble Canônico	18
3	Fases Magnéticas	21
3.1	Magnetização	21
3.2	Paramagnetismo	22
3.3	Ferromagnetismo	23
3.4	Antiferromagnetismo	26
4	Teoria de Campos Médios Correlacionados	29
4.1	Modelo de Ising	29
4.2	Teoria de campo médio correlacionado aplicado ao modelo de Ising	30
5	Resultados Numéricos e Discussões	34
5.1	Método de solução iterativo	34

5.1.1	Campo médio	34
5.1.2	Campo Médio Correlacionado	37
5.2	Calor Específico e Derivação numérica	39
6	Conclusão	42

Capítulo 1

Introdução

Sistemas constituídos por muitos corpos interagentes são recorrentes na Física, como no estudo de sólidos e fluidos. No geral, esses sistemas apresentam grandes dificuldades na obtenção de soluções analíticas exatas. Um dos exemplos mais simples que envolvem muitos constituintes é o formado por spins interagentes, conhecidos como sistemas magnéticos. Esses sistemas possuem grande importância em diversas áreas, com aplicações tecnológicas em medicina [1], computação e armazenamento de dados.

Entretanto, para potencializar ainda mais o desenvolvimento da estudo de materiais magnéticos, é necessário avançar na compreensão de materiais com novas propriedades magnéticas. Nesse sentido, muitas vezes é fundamental conhecer as soluções de modelos que buscam descrever teoricamente sistemas de spins fortemente interagentes. O comportamento coletivo desses spins pode levar a diferentes tipos de ordenamento, refletindo macroscopicamente a existência de propriedades magnéticas no material. Para estudar teoricamente modelos magnéticos, é interessante propor abordagens que possam ser aplicadas a diferentes sistemas magnéticos, com a possibilidade de fornecer resultados pelo menos qualitativos. Nesta direção, abordagens de campo médio podem ser excelentes candidatas. A teoria de campo médio consiste em tratar uma rede de spins interagentes por meio de um único spin representativo, no qual a interação deste com os demais é aproximada por campos efetivos médios.

Mesmo sistemas de spins com forte anisotropia, como o modelo de Ising, apresentam várias dificuldades técnicas para sua solução analítica, tornando necessário o uso de abordagens aproximativas. No modelo de Ising com spin $1/2$, os spins podem assumir duas configurações: $+1/2$ ou $-1/2$, que representam as orientações de spin “up” ou “down”. Em particular, esse modelo possui solução analítica exata em 2D, o que o torna um excelente recurso para testar novas

abordagens aproximativas.

No caso de adotar um modelo e técnicas para a descrição magnética dos materiais, estas devem ser capazes de descrever o comportamento coletivo dos spins. conforme os spins estão arrançados no material, o efeito percebido macroscopicamente será distinto, o que possibilitará caracterizar materiais magnéticos em diferentes fases, que geralmente são as: Ferromagnética, Antiferromagnética e Paramagnética. Porém, com a alteração de certos parâmetros, como acréscimo de temperatura, leva a uma mudança das características do sistema, ao exemplo de um ferromagneto que, após certa temperatura, se comporta como um paramagneto. Esse fenômeno de alteração de propriedades do material magnético com a alteração de algum parâmetro do sistema é denominado uma transição de fase.

Uma técnica aproximativa relevante para tratar sistemas magnéticos interagentes foi proposta por Wysin e Kaplan [2], na qual campos médios correlacionados são adotados. É interessante aplicar essa abordagem de campos médios correlacionados ao modelo de Ising, fazendo um comparativo entre os resultados obtidos por essa técnica e o campo médio usual (teoria de Weiss), além de comparar com a solução exata. Assim, é possível discutir as melhorias da aproximação com campos médios correlacionados na localização da temperatura de transição de fase e outras propriedades, quando comparada à abordagem de campo médio. Isso poderá permitir avanços e novas propostas de abordagens aproximativas para estudar sistemas magnéticos interagentes.

1.1 Objetivos Gerais

O objetivo deste trabalho é descrever as fases magnéticas e, posteriormente, analisar como ocorrem suas transições de fase, baseando-se na descrição realizada pelo modelo de Ising, a fim de avaliar as potencialidades da abordagem de campo médio correlacionado.

1.1.1 Objetivos específicos

De maneira específica, busca-se descrever os métodos para o cálculo numérico para obter de maneira aproximada o comportamento de sistemas magnéticos durante a transição de fase. Com isso busca-se resolver computacionalmente as equações que decorrem da teoria de campos médios aplicada ao modelo de Ising, e por meio deste analisar de modo quantitativo o comportamento da magnetização, energia interna e calor específico, além da determinação da

temperatura crítica de transição de fase para diferentes casos.

Além disso, é de interesse comparar os resultados da Teoria de Weiss com a Teoria de Campos Médios Correlacionados, e averiguar se há uma melhoria na aproximação para obtenção de temperatura de transição de fase de um método para outro, e o estudo de como a Energia Interna e Calor Específico se comportam com base nesse modelo.

1.2 Metodologia adotada

Para estudar o sistema de interesse, considera-se o modelo de Ising com interações ferromagnéticas entre spins de primeiros vizinhos em duas redes distintas: a rede quadrada e a rede cúbica. O formalismo da mecânica estatística é adotado para discutir os resultados obtidos para o modelo nessas duas redes, com ênfase nas transições de fase.

Propõe-se a abordar inicialmente o modelo com a aproximação de campo médio de Weiss para o estudo da fase ferromagnética e suas transições, e após essa uma abordagem da Teoria de Campos Médios correlacionados, como proposto por Wysin e Kaplan [2], e por meio desta obter um formalismo para a obtenção de parâmetros termodinâmicos característicos de sistemas de spin $1/2$, como a magnetização, energia interna e calor específico, e conferir como esse modelo possibilita o estudo de transições de fase.

Para isso, usa-se de um método iterativo para soluções numéricas das equações auto-consistentes que descrevem o modelo, além disso, um método para a derivada necessária para o estudo do calor específico.

1.3 Organização deste trabalho

O restante do trabalho está organizado de tal forma que, no Capítulo 2, é realizada uma breve revisão dos conceitos pertinentes de Termodinâmica e Mecânica Estatística, que servem como base para tópicos abordados ao longo do texto.

No capítulo 3, discute-se de maneira detalhada as três fases magnéticas de maior interesse para o trabalho: paramagnética, ferromagnética e antiferromagnética. São apresentados a construção teórica da teoria de Langevin para o paramagnetismo, a de Weiss para a ferromagnetismo e a de Néel para o antiferromagnetismo. Com essas três fases estabelecidas, no Capítulo 4 é desenvolvido o estudo do Modelo de Ising, com foco na aplicação da Teoria de Campos Médios

Correlacionados. Com isso é discutido como parâmetros termodinâmicos são determinados por meio do desenvolvimento dessa teoria.

Após o estudo do Modelo de Ising com os métodos de Campo Médio usual e correlacionado, o Capítulo 5 trata de como os resultados foram obtidos computacionalmente, ao tornar explícito os métodos das soluções das Equações transcendentais para a magnetização e a energia interna. O método de derivação numérica, necessário para a devida análise do calor específico do sistema, é apresentado. Os resultados obtidos para as redes de geometrias quadrada e cúbica também são apresentados e discutidos no Capítulo 5. Por fim, o Capítulo 6 é reservado para as conclusões do trabalho.

Capítulo 2

Fundamentos de Termodinâmica e Mecânica Estatística

Em geral, sistemas magnéticos são constituídos por um grande número de átomos, em que os spins principalmente dos elétrons apresentam um papel relevante para as propriedades magnéticas. Nesses sistemas de muitos spins, o conhecimento de quantidades termodinâmicas podem ser fundamental para compreender o comportamento magnético dos mesmos. Essas quantidades são reflexos das interações entre os entes microscópicos, em que uma abordagem via a Mecânica Estatística pode ser de interesse para uma melhor descrição dos fenômenos que caracterizam esses sistemas. Por exemplo, a compreensão de parâmetros como a temperatura o influenciam, além da obtenção de grandezas essenciais, sendo elas a magnetização, energia interna e calor específico podem ajudar na análise desses sistemas.

Antes de tratar de maneira específica os sistemas magnéticos propriamente ditos, neste capítulo, é feita uma introdução de conceitos básicos da Mecânica Estatística e Termodinâmica.

2.1 Potenciais Termodinâmicos

Um sistema termodinâmico, pode ser compreendido ao considerar dois subsistemas, S_1 e S_2 em equilíbrio, isolados, de paredes fixas, adiabáticas, impermeáveis, definidos por suas próprias Energia Interna (U), entropia (S), volume (V), número de constituintes (N) e magnetização (M), como na Figura 1. A Termodinâmica busca estudar a nova configuração de equilíbrio dada a remoção de um desses vínculos (paredes permeáveis, diatérmicas, móveis).

Como base para o estudo dessas situações de equilíbrio, uma das possíveis formulações é via

Figura 1: Exemplo de um sistema termodinâmico. Fonte: Autor

U (1)	U (2)
S (1)	S(2)
V (1)	V (2)
N (1)	N (2)
M (1)	M (2)

os seguintes postulados[3]:

1. Existem estados específicos, denominados estados de equilíbrio, que são totalmente caracterizados por sua energia interna, volume, número de constituintes e magnetização.
2. A entropia é função do parâmetros extensivos ($S = S(U, V, N, M)$), definida em todos os estados de equilíbrio, e apresenta a seguinte propriedade: Os parâmetros extensivos, na ausência de vínculos internos no sistema termodinâmico, assumem o valor que maximiza entropia.
3. A entropia é aditiva com relação aos seus parâmetros, além de contínua, diferenciável e monótona crescente com a energia.
4. A entropia de qualquer sistema é nula para qualquer estado no qual a temperatura é zero ($T = 0$).

Com base nesses postulados, é possível definir potenciais termodinâmicos que auxiliam na caracterização desses estados de equilíbrio, com um enfoque maior em três deles: a Energia Interna, a entropia e a Energia Livre de Helmholtz, e com esses construir a noção de grandezas que derivam desses potenciais, as grandezas intensivas.

2.1.1 Energia Interna

A energia interna é uma grandeza termodinâmica que é função dos parâmetros extensivos, que dependem das dimensões do sistema: a entropia (S), o volume (V), o número de constituintes (N) e a magnetização (M), ou seja:

$$U = U(S, V, N, M). \quad (1)$$

Essas grandezas se relacionam por meio de um diferencial exato dado por:

$$dU = \frac{\partial U}{\partial S}dS + \frac{\partial U}{\partial V}dV + \frac{\partial U}{\partial N}dN + \frac{\partial U}{\partial M}dM, \quad (2)$$

onde as derivadas parciais são denotadas grandezas intensivas na representação da Energia Interna, ou seja, independem das dimensões, são elas a temperatura (T), a pressão (P), o potencial químico (μ) e o campo magnético (H), dadas por meio das expressões:

$$T = \frac{\partial U}{\partial S}, \quad (3)$$

$$P = -\frac{\partial U}{\partial V}, \quad (4)$$

$$\mu = \frac{\partial U}{\partial N} \quad (5)$$

e

$$H = \frac{\partial U}{\partial M}, \quad (6)$$

com isto, pode-se reescrever o diferencial exato da energia interna como função de seus parâmetros intensivos:

$$dU = TdS - PdV + \mu dN + HdM. \quad (7)$$

A partir dessa expressão, pode-se obter uma Relação Fundamental do Sistema a partir da qual todas as informações termodinâmicas podem ser obtidas. Um estado de equilíbrio na representação de energia interna é dado pela sua minimização, ou seja, para essa configuração, dados dois sistemas de entropias S_1 e S_2 , volumes V_1 e V_2 , número de partículas N_1 e N_2 e magnetizações M_1 e M_2 , o equilíbrio será caracterizado por:

$$T_1 = T_2, \quad (8)$$

$$P_1 = P_2, \quad (9)$$

$$\mu_1 = \mu_2 \quad (10)$$

e

$$H_1 = H_2. \quad (11)$$

2.1.2 Entropia

A entropia pode ser obtida a partir de uma simples inversão da expressão da energia interna. É possível escrevê-la na forma de um diferencial exato:

$$dS = \frac{\partial S}{\partial U}dU + \frac{\partial S}{\partial V}dV + \frac{\partial S}{\partial N}dN + \frac{\partial S}{\partial M}dM. \quad (12)$$

As equações de estado, ou grandezas intensivas na representação da entropia serão as seguintes:

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial U}, \quad (13)$$

$$\frac{P}{T} = \frac{\partial S}{\partial V}, \quad (14)$$

$$\frac{\mu}{T} = -\frac{\partial S}{\partial N} \quad (15)$$

e

$$\frac{H}{T} = -\frac{\partial S}{\partial M}, \quad (16)$$

com isso, uma relação fundamental na representação de entropia pode ser escrita como:

$$dS = \frac{1}{T}dU + \frac{P}{T}dV - \frac{\mu}{T}dN - \frac{H}{T}dM, \quad (17)$$

com essa relação a termodinâmica do sistema em análise pode ser estabelecida. Uma situação de equilíbrio para a representação de entropia, pode ser obtido a partir da sua maximização, considerando dois subsistemas cada um descrito pelo seu próprio conjunto de parâmetros extensivos, o equilíbrio será caracterizado por:

$$\frac{1}{T_1} = \frac{1}{T_2}, \quad (18)$$

$$\frac{P_1}{T_1} = \frac{P_2}{T_2}, \quad (19)$$

$$\frac{\mu_1}{T_1} = \frac{\mu_2}{T_2} \quad (20)$$

e

$$\frac{H_1}{T_1} = \frac{H_2}{T_2}. \quad (21)$$

2.1.3 Energia Livre de Helmholtz

A energia livre de Helmholtz (F) pode ser obtida de maneira alternativa ao uso da função de partição por meio de uma Transformada de Legendre aplicada à energia interna, o que o

ocasiona uma substituição da entropia pela temperatura ao escrever o diferencial exato, como abaixo:

$$F = U - TS. \quad (22)$$

a partir dessa Transformada, esse potencial pode ser escrito em função dos seguintes parâmetros:

$$F = F(T, V, N), \quad (23)$$

com isso, o diferencial exato nesse contexto será dado por:

$$dF = \frac{\partial F}{\partial T}dT + \frac{\partial F}{\partial V}dV + \frac{\partial F}{\partial N}dN + \frac{\partial F}{\partial M}dM. \quad (24)$$

As grandezas intensivas, exceto aquela relacionada com a temperatura, serão as mesmas que para a Energia interna:

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T}, \quad (25)$$

$$P = -\frac{\partial F}{\partial V}, \quad (26)$$

$$\mu = \frac{\partial F}{\partial N} \quad (27)$$

e

$$H = \frac{\partial F}{\partial M}, \quad (28)$$

ou seja, o diferencial pode ser escrito na seguinte forma:

$$dF = -SdT - PdV + \mu dN + HdM. \quad (29)$$

Assim como para a Energia Interna, o estado de equilíbrio para a representação de Helmholtz é dado por um princípio de minimização.

2.1.4 Derivadas segundas: Calor específico e Susceptibilidade magnética

As derivadas segundas das grandezas termodinâmicas também são de interesse Físico, pois caracterizam propriedades únicas de certos materiais, ao fixar poucos parâmetros. Para o caso de sistemas magnéticos, existe um foco em principalmente duas: o Calor Específico a volume constante e a Susceptibilidade Magnética.

O Calor Específico de um material pode ser compreendido como a quantidade de calor necessária para que a temperatura de uma amostra tenha um acréscimo de uma unidade [3].

Isso pode ser escrito ao compreender como ocorre a variação de uma grandeza extensiva com relação à uma grandeza intensiva, nesse caso a partir de mudanças na temperatura:

$$C = \frac{T}{N} \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V = \frac{1}{N} \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V. \quad (30)$$

Para materiais magnéticos, uma propriedade característica é a susceptibilidade magnética, que diz respeito à uma resposta da magnetização de acordo com a variação do campo magnético,

$$\chi = \frac{1}{N} \left(\frac{\partial M}{\partial H} \right), \quad (31)$$

a partir do conhecimento da Susceptibilidade Magnética, é possível descrever as fases magnéticas de maneira única, por meio de como este parâmetro se comporta na presença de um campo externo ou com a variação da temperatura, o que será abordado posteriormente no trabalho.

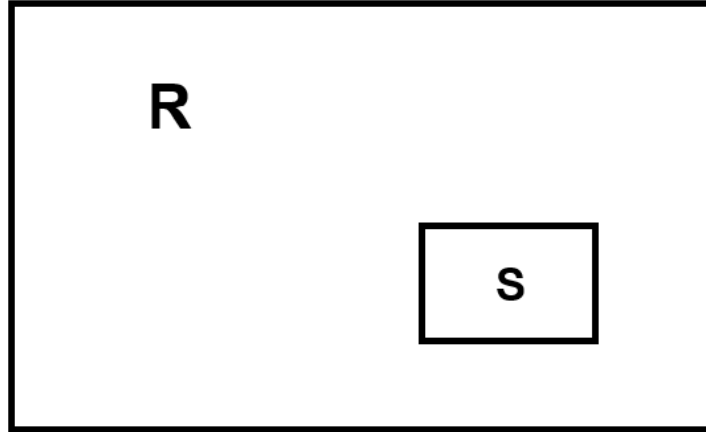
2.2 Ensemble Canônico

A Termodinâmica e a Mecânica Estatística abordam problemas em equilíbrio. Nesta linha, cabe salientar um dos conceitos essenciais para a Mecânica Estatística, que diz respeito aos ensembles: conjunto da especificação dos estados microscópicos de um sistema. A ideia vem do postulado básico da mecânica estatística que afirma que “todos os estados microscópicos acessíveis a um sistema fechado em equilíbrio são igualmente prováveis” [4]. Um dos primeiros ensembles estudados é o microcanônico, onde a energia do sistema é fixa, impedindo trocas energéticas com a vizinhança. Nesse caso, a probabilidade de ocorrência de um microestado é definida pelo inverso da contagem dos microestados com uma dada energia.

Uma perspectiva interessante vem com a possibilidade do sistema ter contato com um reservatório térmico: um sistema com temperatura constante, independentemente das trocas energéticas que possam ocorrer. Essa possibilidade leva a definição de um ensemble alternativo, o ensemble canônico, o qual permite a troca de energia entre o sistema e o reservatório térmico em temperatura constante. O ensemble canônico é conectado com a termodinâmica do sistema por meio da função de partição, à qual está relacionada a soma sobre os estados acessíveis ao sistema. O seu detalhamento é dado a seguir.

Inicia-se considerando dois sistemas como os representados pela Fig. 2. Os dois sistemas são fixos, mas permitem trocas de energia, sendo um deles um reservatório térmico (R) muito maior que o sistema principal (S), ou seja, sua temperatura não é alterada mesmo ao ceder ou receber energia [4].

Figura 2: Representação do sistema (S) em contato com um reservatório Térmico (R) para o estudo do Ensemble Canônico. Fonte: Autor.



Nesse contexto, considerando que as energias possíveis para o sistema principal são E_n , pode-se definir uma função que abrange uma soma de todos os estados acessíveis, chamada Função de Partição (Z), definida como:

$$Z = \sum_{i=1}^N e^{-\beta E_n}, \quad (32)$$

em que $\beta = \frac{1}{K_b T}$ é a temperatura inversa vezes a constante de Boltzmann $K_b = 1,38 \cdot 10^{-23} \frac{m^2 kg}{sK}$.

A conexão com a Termodinâmica no Ensemble Canônico é estabelecida por meio da Energia Livre de Helmholtz (F),

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z, \quad (33)$$

e, com isso, pode-se obter toda a informação termodinâmica do sistema.

Outros potenciais termodinâmicos podem ser recuperados a partir do conhecimento da Função de Partição, como a Energia Interna:

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z. \quad (34)$$

Além dessas, a entropia também pode ser fornecida a partir da função de partição do sistema e valor médio da energia interna $\langle U \rangle$, por meio da seguinte relação:

$$S = k_b (\ln Z + \beta \langle U \rangle). \quad (35)$$

A magnetização (M) também pode ser encontrada diretamente com o uso da função de partição, pela seguinte expressão:

$$M = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial H} \ln Z, \quad (36)$$

ou seja, com o uso do Ensemble Canônico, a termodinâmica pode ser construída assim como visto na última seção. As grandezas abordadas durante esse capítulo serão a base para uma melhor discussão sobre as fases magnéticas e posteriormente o estudo de suas transições.

Capítulo 3

Fases Magnéticas

Fenômenos associados às propriedades magnéticas de materiais são de conhecimento da humanidade desde a antiguidade, com registros do uso do mineral Magnetita para a atração de objetos de metal desde a Grécia Antiga, ou até mesmo na China, com o uso de propriedades magnéticas para a criação da Bússola [5]. Atualmente, o uso de materiais magnéticos é verificado em dispositivos eletrônicos, meios de transporte como trens, na área da saúde como em aparelhos de Ressonância Magnética Nuclear entre outras aplicações.

As fases magnéticas podem ser definidas microscopicamente pelo ordenamento dos momentos de spin ao longo do material. Ao depender de como ocorre esse arranjo, o fenômeno coletivo resultante da distribuição dos spins pode levar a fases com propriedades distintas, como a ocorrência de magnetização espontânea. Nesse capítulo, discute-se de maneira mais detalhada sobre a magnetização e são descritas três dessas fases: Paramagnética, Ferromagnética e Antiferromagnética.

3.1 Magnetização

Materiais magnéticos apresentam propriedades que podem depender de parâmetros como a temperatura, o campo magnético externo, entre outras. Como visto, uma dessas propriedades é a magnetização, que advém dos spins, principalmente dos elétrons. Seja um material com número total “N” de spins, com N_{\uparrow} destes no estado “up” e N_{\downarrow} no estado “down”, a magnetização por spin (m) pode ser escrita da seguinte maneira:

$$m = \frac{|N_{\uparrow} - N_{\downarrow}|}{N}. \quad (37)$$

De maneira macroscópica, o comportamento da magnetização é evidenciado pela soma total

dos momentos de dipolo magnético (m_i) em um certo volume V :

$$M = \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{V}. \quad (38)$$

A magnetização é obtida diretamente ao derivar a Energia Livre de Helmholtz, como tratada no Capítulo 2, em relação a um campo magnético H , como segue:

$$M = \left(\frac{\partial F}{\partial H} \right)_T = \frac{\text{Tr}(\sigma_i e^{-\beta \mathcal{H}})}{Z}, \quad (39)$$

que representa o valor médio da magnetização, onde $\sigma_i = \pm 1$ representa a variável de spin.

A magnetização é conhecida como um parâmetro de ordem, que se trata de um reflexo do estado geral no qual o material se encontra, que por sua vez depende de como se dá o alinhamento entre spins, paralelo ou antiparalelo, em certo momento. Com isso, é possível definir a fase paramagnética (os spins se distribuem de forma aleatória), que é dita uma fase desordenada; ferromagnética (os spins se alinham em um mesmo sentido), que caracteriza uma fase ordenada. No caso de uma fase antiferromagnética, os spins apresentam a tendência de se anti-alinharem, o que leva a ocorrência de subredes no material, nesse caso o parâmetro de ordem é a magnetização de cada uma dessas subredes. As respectivas Transições de Fase entre esses estados também podem ser obtidas por meio da magnetização total, sendo esta uma grandeza fundamental para o estudo de fenômenos críticos.

3.2 Paramagnetismo

A fase paramagnética é caracterizada por não apresentar um alinhamento dos momentos de dipolo magnético que se orientam aleatoriamente e apresentam mudanças de sentido e/ou orientação a medida que o tempo passa. Essa orientação dos momentos magnéticos de maneira aleatória no material leva a uma magnetização total nula, ou seja $M = 0$. A presença de um campo magnético externo pode alinhar os momentos magnéticos ao longo de sua direção, fazendo com que o sistema paramagnético apresente uma magnetização induzida (M diferente de zero) apenas na presença do campo magnético externo. Esse tipo de arranjo é visto em materiais com um número par de elétrons na camada de valência, como o Sódio, Lítio, Tungstênio, entre outros. Em altas temperaturas, onde há uma maior flutuação na orientação dos momentos, hora direcionados em um sentido, hora em outro, esses materiais são caracterizados como paramagnéticos.

Para discutir os efeitos causados pela presença de um campo magnético externo H em um material paramagnético, a teoria de Langevin, de 1905, considera que o comportamento das energias resultantes do alinhamento dos momentos σ_i com o campo externo é descrito pelo seguinte Hamiltoniano [4]:

$$\mathcal{H} = -H \sum_{i=1}^N \sigma_i, \quad (40)$$

onde $\sigma_i = \pm 1$ representa a variável de spin 1/2 em seus dois valores possíveis. Com isto, é possível obter informações termodinâmicas pertinentes acerca do sistema, como a magnetização por sítio (m), com o uso do formalismo do ensemble canônico como tratado no Capítulo 2,

$$m(T, H) = \tanh(\beta H). \quad (41)$$

É notável que na ausência de campo magnético ($H = 0$), a forma da magnetização para um paramagneto será:

$$m(T, H = 0) = 0. \quad (42)$$

A susceptibilidade para esse contexto é obtida de maneira simples ao derivar a expressão da magnetização com relação ao campo magnético:

$$\chi(T, H) = \frac{\partial m}{\partial H} = \beta \operatorname{sech}^2(\beta H). \quad (43)$$

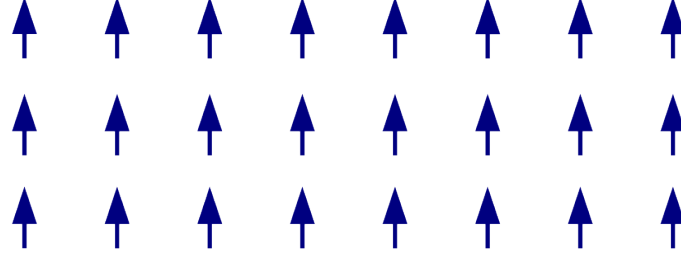
Para o caso de campo nulo, é evidente a chamada lei de Curie, na qual indica que a dependência da susceptibilidade magnética se dá com o inverso da temperatura:

$$\chi(T, H = 0) = \beta = \frac{1}{K_B T}. \quad (44)$$

3.3 Ferromagnetismo

Para um material ferromagnético, existem certas regiões denominadas domínios magnéticos, nas quais os momentos de spin estão distribuídos de maneira ordenada ao longo de sua extensão, com pouca flutuação nos momentos, pois possuem forte correlação, principalmente em baixas temperaturas, o que favorece a existência de magnetização mesmo na ausência de um campo magnético externo. Uma representação do ordenamento dos momentos magnéticos na fase ferromagnética é apresentada na Figura 3, que ilustra os momentos alinhados e, como consequência, uma magnetização espontânea. São materiais desse tipo metais como o Ferro, Níquel, Cobalto, entre outros.

Figura 3: Comportamento ferromagnético em uma rede bidimensional de spins. Fonte: Disponível em <<https://en.wikipedia.org/wiki/Magnetism>>. Acesso em novembro de 2024.



Para uma melhor descrição teórica desses materiais, o conceito de campo molecular, ou campo médio (h^{ef}), proposto por Pierre Weiss em 1907, é de grande valia. Uma maneira de abordar sistemas ferromagnéticos utilizando a teoria de campo médio é considerar que os momentos magnéticos estão sujeitos a campos efetivos proporcionais à magnetização por sítio, podendo ser escritos como:

$$h^{ef} = H + zm, \quad (45)$$

onde z é uma média da influência dos spins vizinhos da rede naquele momento magnético que está sendo analisado e “ m ” é a magnetização média por sítio. Nesse caso, o Hamiltoniano com abordagem de campo médio para o sistema ferromagnético é da seguinte forma:

$$\mathcal{H} = -H \sum_{i=1}^N \sigma_i - zm \sum_{i=1}^N \sigma_i. \quad (46)$$

Com o uso da função de partição, é possível obter quantidades termodinâmicas relevantes como a magnetização por sítio:

$$m(T, H) = \tanh(\beta H + \beta zm), \quad (47)$$

é evidente que para um ferromagneto, mesmo na ausência de campo magnético, a magnetização ainda pode apresentar um valor diferente de zero:

$$m(T, H = 0) = \tanh(\beta zm). \quad (48)$$

Ao escrever de maneira explícita o fator β , a magnetização pode ser reescrita como função da temperatura:

$$m(T) = \tanh\left(\frac{zm}{K_B T}\right). \quad (49)$$

A equação (49) estabelece uma relação entre a magnetização e a tangente hiperbólica da magnetização dividida pela temperatura. Essa equação transcendental pode ser resolvida numericamente ou por meio da análise gráfica para cada valor de temperatura. A obtenção da magnetização para cada valor de temperatura permite analisar na Fig. 4 o comportamento da magnetização conforme ocorre o acréscimo de temperatura.

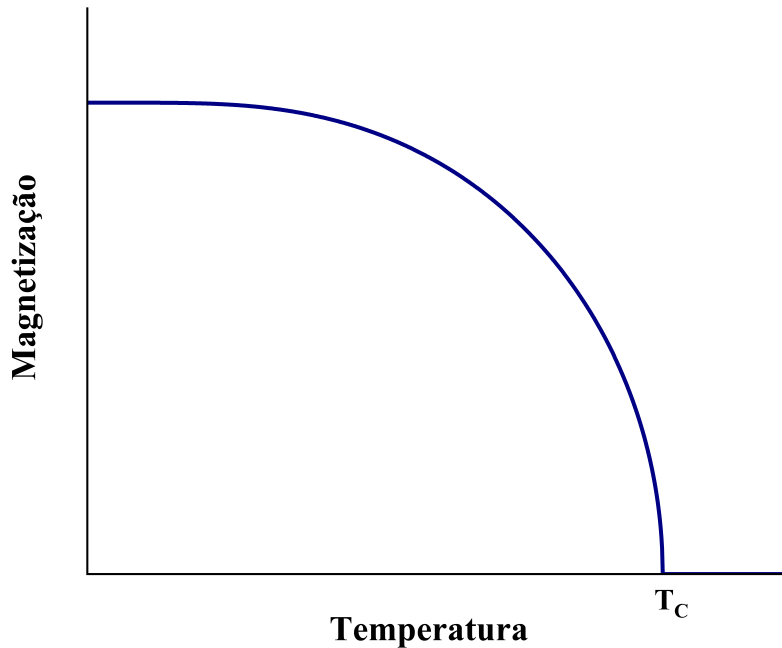


Figura 4: Transição entre as fases ferromagnética e paramagnética, com a indicação da temperatura de Curie.

É notório que a partir de certa temperatura, denotada por temperatura crítica ou de Curie (T_C), a magnetização total do material vai à zero, o que caracteriza uma transição de fase de um estado de ferromagnetismo para um de paramagnetismo. Também é notável, que nesse caso a transição ocorre sem que ocorram descontinuidades, o que se denomina uma Transição de Fase de segunda ordem.

Para um ponto próximo à criticalidade, ou seja, próximo à transição, é conveniente reescrever a expressão para a magnetização aplicando a função inversa da tangente hiperbólica [4]:

$$\tanh^{-1}(m(T, H)) = \beta H + \beta z m. \quad (50)$$

O comportamento nas proximidades da temperatura crítica, pode ser melhor compreendido por meio de uma expansão em Série de Taylor no lado esquerdo da Equação (50), pois nessa

região o valor da magnetização é suficientemente pequeno:

$$m + \frac{1}{3}m^3 + \frac{1}{5}m^5 + \dots = \beta(H + zm). \quad (51)$$

A susceptibilidade magnética para o ferromagneto pode ser obtida ao derivar ambos os lados da Equação (51) em relação à magnetização para, posteriormente, tomar a recíproca de $\frac{\partial H}{\partial m}$.

$$1 + m^2 + m^4 = \beta\left(\frac{\partial H}{\partial m} + z\right). \quad (52)$$

Nesse caso, é possível notar que:

$$\frac{\partial H}{\partial m} = \frac{1}{\frac{\partial m}{\partial H}} = \frac{1}{\chi(T, H)}. \quad (53)$$

Ao truncar a expressão para a magnetização no primeiro termo da série, a susceptibilidade magnética para um ferromagneto pode ser escrita, nas proximidades da criticalidade e campo nulo, como:

$$\chi(T, H = 0) = \frac{1}{z - K_b T}. \quad (54)$$

Ou ainda, ao conhecer a temperatura de transição T_c , a susceptibilidade pode ser reescrita como:

$$\chi(T, H = 0) = \frac{T_c}{z(T - T_c)}, \quad (55)$$

onde se percebe que há uma divergência em $T \rightarrow T_c$.

3.4 Antiferromagnetismo

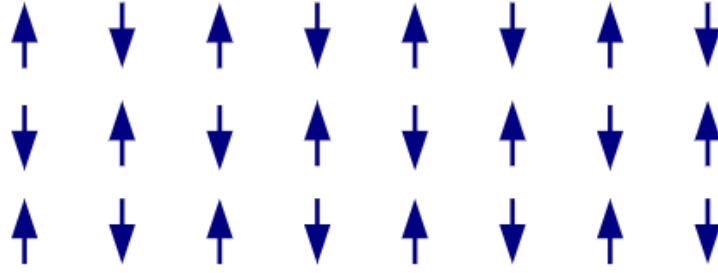
A fase antiferromagnética é caracterizada por um alinhamento anti-paralelo dos spins de sítios vizinhos na rede, como apresentado na Figura 5, de forma que a magnetização resultante é nula. Esse tipo de ordenamento é encontrado em materiais como nos fluoretos FeF_2 e MnF_2 e em compostos como KMnF_3 e RbMnFe_3 .

De maneira diferente do paramagnetismo, a resultante nula da magnetização do material se dá devido ao arranjo dos dipolos ser ordenado em duas ou mais subredes, que embora favoreçam o aparecimento de uma magnetização espontânea, os momentos apresentam direções distintas para cada uma das subredes, o que no todo leva à uma magnetização $M = 0$ [6].

Para o estudo do Antiferromagnetismo, semelhante à Teoria de Campo Molecular de Weiss, utiliza-se da Teoria de Néel. Nesse caso, considera-se um sistema com apenas duas subredes, com campos efetivos dados por:

$$h_1^{ef} = H - zm_1, \quad (56)$$

Figura 5: Comportamento antiferromagnético em uma rede bidimensional de spins. Fonte: Disponível em <<https://en.wikipedia.org/wiki/Antiferromagnetism>> , acesso em novembro de 2024



e

$$h_2^{ef} = H - zm_2. \quad (57)$$

Os sinais negativos nos campos médios são devido ao alinhamento antiparalelos dos momentos entre subredes vizinhas e m_1 e m_2 representam as magnetizações da primeira a da segunda subrede respectivamente, de modo que elas são vinculadas por meio da magnetização total "m":

$$m = \frac{1}{2}(m_1 + m_2). \quad (58)$$

De maneira análoga ao feito para um Ferromagneto, é possível escrever a partir da Função de partição as magnetizações por sítio para cada uma das subredes:

$$m_1(T, H) = \tanh(\beta H - \beta z m_1), \quad (59)$$

e

$$m_2(T, H) = \tanh(\beta H - \beta z m_2). \quad (60)$$

Ao proceder de forma similar ao realizado na última seção, para obter as susceptibilidades magnéticas, aplica-se a função inversa da tangente hiperbólica nas Equações (59) e (60) seguida de uma expansão em série:

$$1 + m_1^2 + m_1^4 \dots = \beta \left(\frac{\partial H}{\partial m_1} - z \right), \quad (61)$$

e

$$1 + m_2^2 + m_2^4 \dots = \beta \left(\frac{\partial H}{\partial m_2} - z \right). \quad (62)$$

Com isso, ao truncar no primeiro termo, é possível obter as seguintes susceptibilidades magnéticas para cada uma das subredes para o caso do campo magnético $H = 0$:

$$\chi_1(T, H = 0) = \frac{1}{z + K_b T}, \quad (63)$$

e

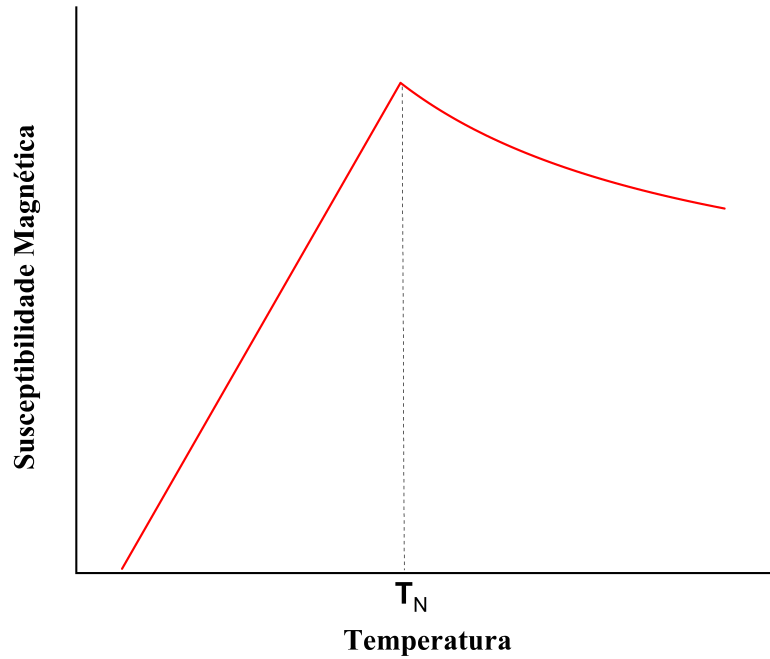
$$\chi_2(T, H = 0) = \frac{1}{z + K_b T}. \quad (64)$$

Dessa maneira, a susceptibilidade magnética total pode ser escrita da seguinte forma:

$$\chi = \frac{(\chi_1 + \chi_2)}{2} = \frac{1}{z + K_b T}. \quad (65)$$

Ao analisar o comportamento da susceptibilidade com relação à temperatura, é possível verificar uma temperatura de transição entre as fases antiferromagnética e paramagnética, denominada temperatura de Néel (T_N), como apresentada no gráfico da Figura 6: Pode-se

Figura 6: Susceptibilidade em função da temperatura para um antiferromagneto com a indicação da temperatura de Néel.



reescrever a expressão da susceptibilidade em termos da temperatura de Néel:

$$\chi = \frac{T_N}{z(T + T_N)}. \quad (66)$$

Capítulo 4

Teoria de Campos Médios

Correlacionados

Em sistemas de muitos corpos interagentes, como em uma rede de spins, é possível recorrer à modelos estatísticos para uma melhor descrição dos fenômenos típicos, como a determinação da temperatura de Curie para transição de fase e análise de parâmetros termodinâmicos do sistema como energia interna e calor específico.

Para o estudo desses sistemas, a partir do século XX, houve a criação de modelos pertinentes como o Modelo de Ising, Heisenberg, XY, entre outros. Porém, poucos desses modelos apresentam soluções analíticas exatas, o que traz à tona a busca por métodos aproximativos para a estimativa dessas grandezas.

A seguir, serão abordados dois métodos distintos para o estudo de sistemas magnéticos e suas transições de fase, o modelo de Ising dito usual, com detalhes da solução numérica de campo molecular como proposto por Weiss, além de uma melhoria para a solução com relação ao proposto por Weiss, que considera que os dois estados possíveis para um spin $1/2$ apresentam respostas distintas com relação à rede, como proposto por Wysin e Kaplan.

4.1 Modelo de Ising

O modelo de Ising, proposto por Ernst Ising em sua tese de doutorado em 1924, permite o estudo de diversos modelos estatísticos, entre estes sistemas de spin $1/2$. Nesse modelo, os spins estão dispostos em uma rede, de forma que podem assumir dois valores possíveis $\sigma_i = \pm 1$.

O Hamiltoniano desse modelo em uma rede bidimensional é como abaixo:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i^N \sigma_i, \quad (67)$$

onde σ_i e σ_j representam as variáveis de spin $1/2$, J é a constante de troca, que trata da interação entre os spins que são primeiros vizinhos na rede e H é o campo magnético externo. De acordo com o valor assumido pela variável J , o sistema apresenta diferentes fases. Para o caso de $J > 0$, os spins que são primeiros vizinhos minimizam sua energia de interação quando apresentam configurações ferromagnéticas, ou seja, de forma que se alinhem entre si em uma mesma direção e sentido, favorecendo o surgimento de uma ordem de longo-alcance ferromagnética. Caso a constante de troca seja negativa, $J < 0$, a interação antiferromagnética é energeticamente favorecida, assim, primeiros vizinhos se alinham de forma antiparalela.

Ao longo do tempo, diversos métodos e abordagens analíticas foram propostas para resolver o modelo de Ising ou, pelo menos, encontrar a temperatura de transição de fase e determinar características relevantes como calor específico e energia interna. Neste sentido, o Modelo de Ising tem sido estudado através de aproximações de campo médio realizadas em diversos casos, como a aproximação de Bethe-Peierl-Weiss [7, 8], e nos trabalhos realizados por Oguchi [9], Mattis [10], entre outros.

A seguir, é tratado um dos métodos de campo médio proposto por Wysin e Kaplan [2], que traz melhorias na determinação da temperatura de transição e em análises termodinâmicas do sistema, quando comparados ao campo médio de Weiss.

4.2 Teoria de campo médio correlacionado aplicado ao modelo de Ising

Inicialmente considera-se o Hamiltoniano de Ising na ausência de um campo externo ($H = 0$), assumindo a seguinte forma:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j. \quad (68)$$

Por simplicidade, considera-se um dado sítio com spin, chamado aqui de spin central, e as interações com seus primeiros vizinhos. As interações com os vizinhos são repassados por campos efetivos, similar ao que é descrito na Teoria de Campo Molecular de Weiss. No entanto, o campo efetivo que atua no spin central depende do estado assumido pelo spin central. Por

exemplo, no modelo de Ising, o spin central pode assumir duas configurações possíveis: “up” ou “down”. Quando o spin central está no estado “up” ($\sigma_i = +1$) um campo médio m^+ atua nele e, quando spin central está no estado “down” ($\sigma_i = -1$), o campo médio m^- é o responsável pela interação. Neste sentido, o campo médio que atua no spin está correlacionado ao estado do spin. Com isso, é possível encontrar o problema efetivo de um único sítio, reescrevendo o Hamiltoniano da Eq. (68) em termos de seu modelo efetivo que repassa as interações por campos médios correlacionados, resultando no seguinte hamiltoniano efetivo do sistema:

$$H_{ef} = - \sum_i \sigma_i h_i^{ef}, \quad (69)$$

com o termo que indica o campo médio descrito de maneira única para seus dois casos possíveis ao utilizar a Função delta de Kroenecker, fixando os valores $\sigma_j = \pm 1$:

$$h_i^{ef} = zJ(\delta_{\sigma_i,1}m^+ + \delta_{\sigma_i,-1}m^-), \quad (70)$$

sendo z o número de coordenação, que indica de primeiros vizinhos de um spin na rede. No caso de uma rede quadrada, existem 4 primeiros vizinhos para cada spin, o que indica o número de coordenação. Ao escrever os valores possíveis para a função delta:

$$\delta_{\sigma_i,s} = \begin{cases} 1, & \sigma_i = s \\ 0, & \sigma_i \neq s \end{cases}, \quad (71)$$

onde $s = \pm 1$.

Para obter o valor dos campos médios, m^- e m^+ , pode-se fixar o estado do spin central em um dos valores possíveis, seja, $\sigma_i = -1$ ou $+1$, e avaliar o momento magnético médio de seu vizinho j : $m^- = \langle \sigma_j \rangle |_{\sigma_i=-1}$ ou $m^+ = \langle \sigma_j \rangle |_{\sigma_i=1}$. Para descrever detalhadamente este procedimento, é conveniente considerar que o spin no sítio j , primeiro vizinho do spin central, interage com o spin $\sigma_i = -1$ ou $+1$ e por meio de campos médios com os seus demais vizinhos, resultando em um modelo efetivo para o cálculo dos campos médios:

$$H_{ef}^{aux}(\sigma_i) = - \sum_j \sigma_j h_j^{ef'} - J\sigma_j\sigma_i, \quad (72)$$

onde $h_j^{ef'} = (z-1)J(\delta_{\sigma_i,1}m^+ + \delta_{\sigma_i,-1}m^-)$ com o $z-1$ indicando os vizinhos de j exceto o sítio central i , e σ_i fixando em -1 ou 1 . Sendo assim, o hamiltoniano auxiliar definido na equação (72) é adotado para obter os campos, onde $\beta = \frac{J}{K_B T}$:

$$\begin{aligned} m^+ = \langle \sigma_j \rangle |_{\sigma_i=1} &= \frac{\text{Tr} \sigma_j \exp(-\beta H_{ef}^{aux}(\sigma_i = 1))}{\text{Tr} \exp(-\beta H_{ef}^{aux}(\sigma_i = 1))} \\ &= \frac{e^{\beta[(z-1)m^++1]} - e^{-\beta[(z-1)m^-+1]}}{e^{\beta[(z-1)m^++1]} + e^{-\beta[(z-1)m^-+1]}} \end{aligned} \quad (73)$$

e o campo médio m^- pode ser expresso da seguinte forma:

$$\begin{aligned} m^- = \langle \sigma_j \rangle \Big|_{\sigma_i = -1} &= \frac{\text{Tr} \sigma_j \exp(-\beta H_{ef}^{aux}(\sigma_i = -1))}{\text{Tr} \exp(-\beta H_{ef}^{aux}(\sigma_i = -1))} \\ &= \frac{e^{\beta[(z-1)m^+ - 1]} - e^{-\beta[(z-1)m^- - 1]}}{e^{\beta[(z-1)m^+ - 1]} + e^{-\beta[(z-1)m^- - 1]}}. \end{aligned} \quad (74)$$

Nesse caso, a dependência dos campos médios será autoconsistente com próprios campos m^+ e m^- .

Para uma melhor determinação da temperatura de transição, como artifício é possível usar a média aritmética dos campos médios. Ao defini-la por Δ , pode-se escrever:

$$\Delta = \frac{m^+ + m^-}{2}. \quad (75)$$

Com isso, é possível reescrever as expressões para os campos médios. O campo médio m^+ será dado da seguinte forma:

$$m^+ = \tanh \beta [(z-1)\Delta + 1]. \quad (76)$$

Já m^- , com o uso da função Δ , é possível reescrevê-lo da seguinte forma:

$$m^- = \tanh \beta [(z-1)\Delta - 1]. \quad (77)$$

Após obter os campos médios, é possível retornar ao modelo de Ising com campos médios correlacionados, Eq.(69), para obter as demais quantidades de interesse. Por exemplo, a magnetização por sítio é dada por:

$$m = \frac{\text{Tr} \sigma_i \exp(-\beta H_{ef}(m^+, m^-))}{\text{Tr} \exp(-\beta H_{ef}(m^+, m^-))}, \quad (78)$$

que pode ser expresso por:

$$m = \frac{\exp(-\beta z m^+) - \exp(-\beta z m^-)}{\exp(-\beta z m^+) + \exp(-\beta z m^-)}. \quad (79)$$

Adotando a definição da equação (75), tem-se:

$$m = \tanh(z\beta\Delta). \quad (80)$$

Para obter outras grandezas termodinâmicas de interesse nesse sistema, considera-se a correlação entre spins que são primeiros vizinhos, escrita da seguinte forma como função dos campos médios:

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \frac{m^+ e^{\beta z m^+} - m^- e^{-\beta z m^-}}{e^{\beta z m^+} + e^{-\beta z m^-}}. \quad (81)$$

Com uso da média dos campos (Δ), a correlação entre spins será dada por:

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \Delta \tanh(z\beta\Delta) + \frac{1}{2}(m^+ - m^-). \quad (82)$$

A energia interna do sistema, pode ser escrita em função da correlação entre spins da seguinte forma:

$$U = -\frac{1}{2}zNJ \langle \sigma_i \sigma_j \rangle, \quad (83)$$

ao reescrever explicitamente a função de correlação, a energia interna será:

$$U = -\frac{1}{2}zNJ(\Delta \tanh(z\beta\Delta) + \frac{1}{2}(m^+ - m^-)). \quad (84)$$

Outra grandeza de interesse é o calor específico do sistema. Como visto no Capítulo 2, este pode ser obtido ao derivar a energia interna com relação à temperatura:

$$C = \frac{dU}{dT} = -\frac{d}{dT}\left(\frac{1}{2}zNJ \langle \sigma_i \sigma_j \rangle\right). \quad (85)$$

Os métodos usados para obter informações numéricas desses parâmetros são descritos a seguir, com a determinação das temperaturas de transição para diferentes casos.

Capítulo 5

Resultados Numéricos e Discussões

Como tratado nos capítulos prévios, usualmente, o decorrer da teoria para a transição de fases magnéticas leva muitas vezes a equações transcendentais, ou seja, as grandezas, como os parâmetros de ordem, são funções que dependem, além de outros parâmetros como a temperatura, delas mesmas. Além disso, em muitos casos, é necessário o uso de derivação numérica para a obtenção de quantidades termodinâmicas, a exemplo, do calor específico.

Este capítulo visa descrever os métodos computacionais necessários para obter grandezas como a magnetização, campos médios autoconsistentes, energia interna e calor específico, além de apresentar e discutir os resultados obtidos.

5.1 Método de solução iterativo

5.1.1 Campo médio

Inicialmente, para um caso mais simples, considere a Teoria de Weiss para o ferromagnetismo, assim como descrito no Capítulo 3. A magnetização nesse contexto é dada como abaixo:

$$m = \tanh\left(\frac{Jzm}{T}\right). \quad (86)$$

Essa se trata de uma equação transcendental em “ m ”. A solução para essa equação pode ser obtida ao igualar ambos os lados a um valor arbitrário α , de tal forma que:

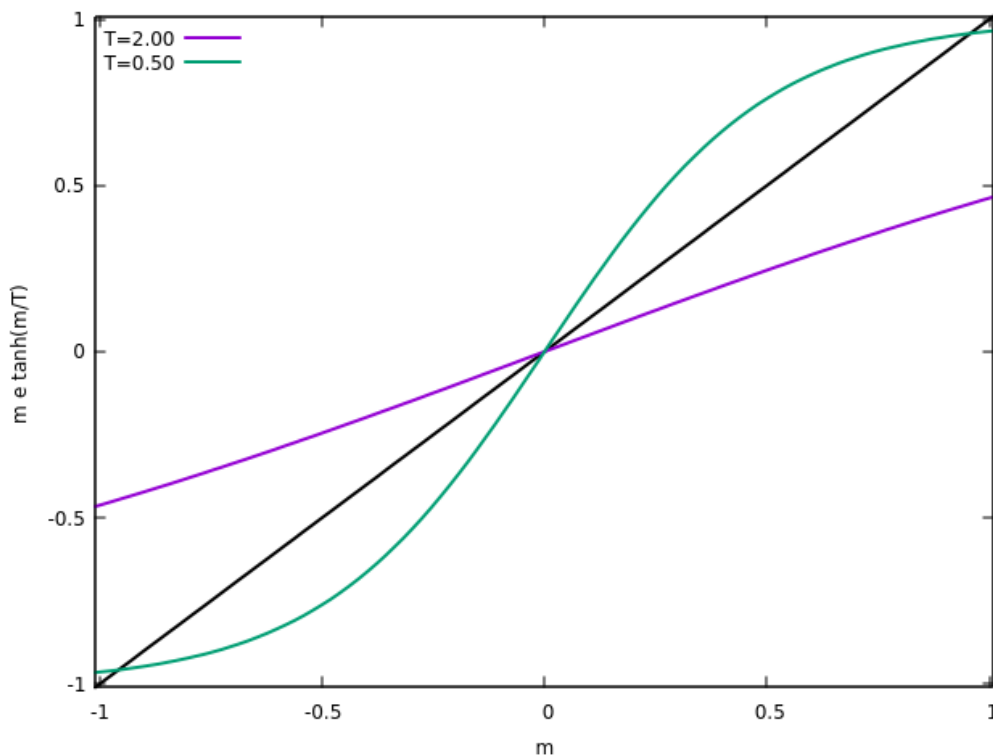
$$m = \alpha, \quad (87)$$

e

$$\tanh\left(\frac{Jzm}{T}\right) = \alpha. \quad (88)$$

Com isso, se torna evidente que um dos lados da Equação (87) corresponde a uma reta e, o outro, a uma tangente hiperbólica. A Figura 7 ilustra essas duas curvas em um único gráfico, onde o(s) ponto(s) de interceptação entre as curvas representa(m) a(s) solução(ões) do sistema. Vale ressaltar que a solução trivial, $m = 0$, é sempre solução do sistema. Porém, buscamos as soluções com magnetização finita que, geralmente, ocorrem em temperaturas mais baixas. Por exemplo, em $T = 2,00$, o único ponto de interceptação entre m (curva em preto) e $\tanh(m/2)$ (curva em vinho) ocorre em $m = 0$, sendo essa a solução para $T/J = 2,00$. Já, em $T/J = 0,50$, há três pontos de interceptação entre m e $\tanh(m/0,50)$ (curva em verde): $m = 0$, $m = -0,95$ e $m = 0,95$. Assim, a solução $m = 0,95$ (ou $m = -0,95$) representa a magnetização do sistema em $T = 0,50$.

Figura 7: Tangente hiperbólica da magnetização dividido pela temperatura em função da magnetização para duas temperaturas: $T = 2.00$ (curva em vinho) e $T = 0.50$ (curva em verde). A linha $m = m$ também é mostrada na figura em cor preta.



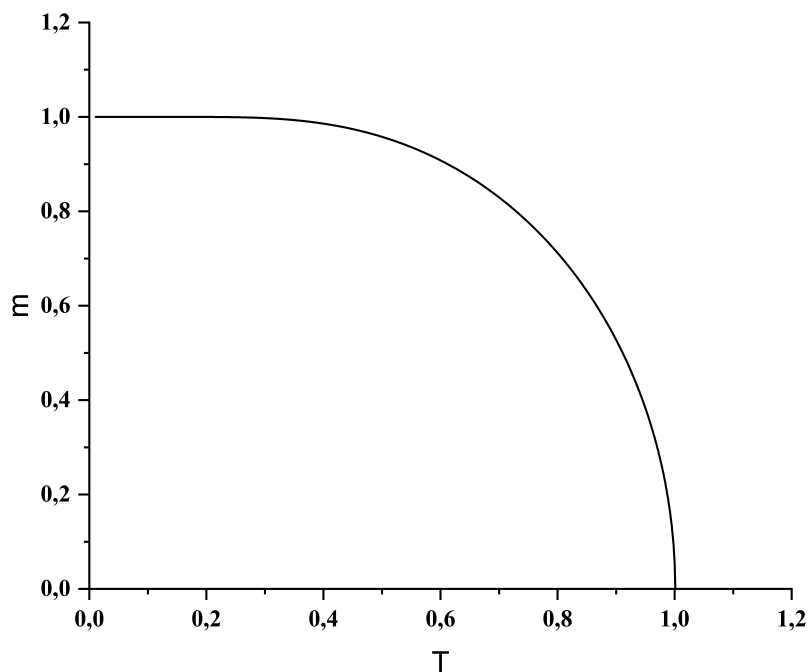
Outra forma de resolver o sistema da Eq. (86) é por meio numérico, pelo método iterativo. O método iterativo, trata de avaliar as funções no intervalo no qual a igualdade entre essas duas curvas é satisfeita. Para isso, atribui-se um valor tentativa para a magnetização e, então, calcula-se a tangente hiperbólica da magnetização atribuída, obtendo-se um valor atualizado para a nova magnetização. A nova magnetização torna-se a magnetização tentativa e o pro-

cesso é repetido até que o valor da magnetização calculada seja igual ao valor da magnetização atribuída. Na prática, o critério de convergência (igualdade entre as soluções tentativa e calculada) é definido pelo valor absoluto da diferença entre essas duas funções: m e $\tanh(m/T)$. Isto é, quando a diferença entre duas funções for menor do que um certo erro (“ e ”), que nesse caso é na ordem de $e = 10^{-8}$.

A fim de obter uma curva de magnetização, após uma solução tentativa (chute) inicial para o seu valor, o loop descrito acima é realizado. Após a solução convergir, armazenam-se os valores da temperatura e respectiva magnetização, sendo a temperatura do sistema acrescida de um passo, e a magnetização no próximo ponto calculada, até que atinja o critério de parada da temperatura máxima definida, nesse caso, $T = 1,5$.

A Figura 8 exhibe a curva da magnetização em função da temperatura obtida pelo procedimento numérico acima descrito. Com esse, é possível determinar a temperatura de transição T_C entre as soluções ferromagnética ($m \neq 0$) e paramagnética ($m = 0$) como sendo aquela na qual a magnetização se torna zero, ou seja, $T_C = 1,0$.

Figura 8: magnetização em função da temperatura.



Aqui, cabe ressaltar que a intensidade da interação de troca J entre spins vizinhos foi assumida como igual a 1 e não foi explicitamente representada na Eq. (86). Além disso, o

número de coordenação z também foi suprimido da Eq. (86), assumindo $z = 1$. Se esses dois termos forem considerados, a Eq. (86) torna-se $m = \tanh(Jzm/T)$, e a temperatura crítica é dada por $T_C/J = z$. Isso mostra que, no campo médio, T_C está diretamente relacionada ao número de coordenação.

5.1.2 Campo Médio Correlacionado

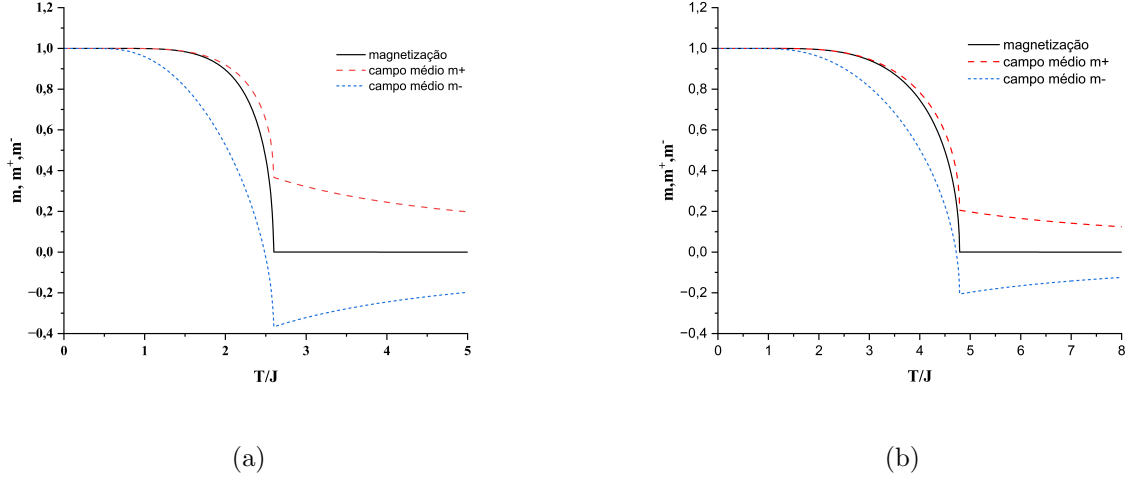
Para o caso da Teoria de Campos Médios Correlacionados, a solução para a magnetização envolve um sistema de três Equações ((75), (76) e (77)), dependentes dos parâmetros m^+ e m^- . Os parâmetros serão dependentes da média desses campos, m^+ e m^- , ou seja, da função Delta definida na Equação 75.

Para obter os resultados, é necessário resolver esse sistema de equações transcendentais de maneira numérica. Similarmente ao feito para o campo médio usual, define-se inicialmente uma tentativa/chute inicial para m^+ e m^- . Com o uso da função $\Delta = (m^+ + m^-)/2$, resolve-se iterativamente as equações (76) e (77). Quando a solução convergir para ambas as equações, com erro $e < 10^{-8}$, há o acréscimo na temperatura de um passo ($T = T + 0,01$), e novamente calcula-se a magnetização e campos médios para esse novo ponto, até que a temperatura chegue no limite estabelecido, nesse caso, $T = 5,0$ para $z = 4$ e $T = 8,0$ para $z = 6$.

A critério de comparação, os resultados para a magnetização, campo médio m^+ e campo médio m^- são como na Figura 9, onde foi realizado o cálculo para os números de coordenação $z = 4$ e $z = 6$. É notável, que com o aumento do número de coordenação houve um deslocamento tanto da magnetização, quanto dos campos médios, para regiões de temperaturas mais altas. A título de comparação, com respeito à temperatura de Curie, o resultado para $z = 4$ é de $T_c = 2,599$, já para $z = 6$ é de $T_c = 4,789$, que se trata de um aumento de 54 % na temperatura de transição. Além disso, é evidente que a temperatura crítica não é mais o valor do número de coordenação como no campo médio usual. Isso indica que o campo médio correlacionado leva a uma melhora significativa na localização da temperatura crítica em comparação ao campo médio usual. Além disso, em comparação com a solução exata, para $z = 4$ o resultado da temperatura crítica de transição é de $T_c = 2,269$, ou seja, um diferença percentual de 14,54% e para $z = 6$ de $T_c = 3,640$, com um desvio de 31,56% com relação à temperatura de transição obtida pela Teoria de Campos Médios Correlacionados.

No caso dos campos médios, além da ocorrência do desvio para maiores temperaturas, é possível visualizar que o campo médio m^+ , que em um primeiro momento, o valor do campo

Figura 9: magnetização e Campos médios em função da temperatura para a rede quadrada $z = 4$ (a) e cúbica $z = 6$ (b).



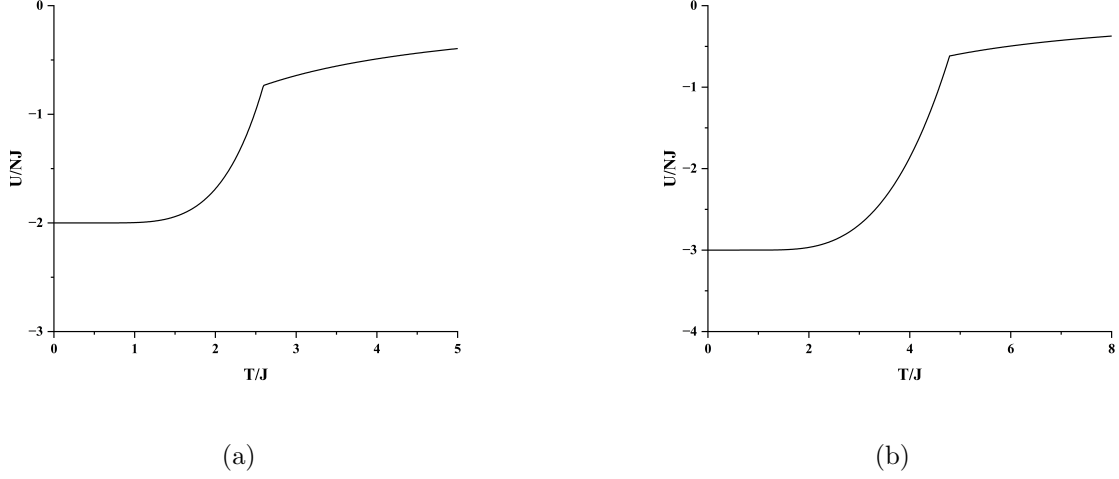
é praticamente constante, que segue uma queda abrupta e, após esta, apresenta uma pequena queda em seu valor. Já no caso do campo médio m^- , é notável que após um pequeno trecho constante, decai de maneira abrupta, voltando a aumentar logo em seguida.

Além da magnetização e dos campos médios, a energia interna foi analisada. A Energia Interna U foi obtida diretamente, após a determinação dos campos médio, pelo cálculo da média Δ , com o uso da Equação (84), ao adicioná-la no laço descrito acima para determinação de m^+ e m^- . O comportamento da energia com relação à temperatura é mostrado na Figura 10. Nesse gráfico, é possível notar que a energia se torna menos negativa de acordo que a temperatura aumenta, com uma região de maior queda na região central do gráfico, e tanto para o regime de baixas quanto de altas temperaturas a variação de energia é mais amena. É importante destacar que a maior derivada de U em relação à temperatura está na região ferromagnética, nas proximidades da transição de fase.

Considerando que no estado fundamental o sistema se encontra na fase ferromagnética, pode-se obter uma estimativa analítica para a energia interna. Por exemplo, a interação entre dois spins vizinhos ($-\sigma_i\sigma_j$) leva a uma contribuição de -1 para a energia interna. Como no sistema cada spin tem z primeiros vizinhos, espera-se uma contribuição $-z/2$ para energia interna por sítio, onde o fator $1/2$ foi adicionado para descontar a contagem dupla das interações entre vizinhos, ou seja, espera-se, analiticamente uma energia do estado fundamental em $U/N = -z/2$. É importante salientar que os resultados numéricos apresentados na Fig. 10 em $T \rightarrow 0$ recuperam os valores esperados para a energia interna obtida analiticamente. Isso ajuda a

conferir credibilidade a técnica de campos médios correlacionados aqui discutida.

Figura 10: Energia Interna em função da temperatura para a rede quadrada $z = 4$ (a) e cúbica $z = 6$ (b).



5.2 Calor Específico e Derivação numérica

No caso do calor específico, definido pela Equação (85), é necessário implementar um método de derivação numérica para a aquisição dos resultados. Para esse caso, foi implementado o método das diferenças finitas. Considere-se um valor positivo h , o qual dará conta de variações na energia interna. Para variações da energia interna geradas por acréscimos de h na temperatura, pode-se escrever (Séries de Taylor):

$$U(T + h) = U(T) + h \frac{dU}{dT} + \frac{h^2}{2!} \frac{d^2U}{dT^2} + \frac{h^3}{3!} \frac{d^3U}{dT^3} + \dots, \quad (89)$$

já para um decréscimo de h na temperatura, a energia interna original, devido à subtrações na temperatura, poderá ser expressa da seguinte forma:

$$U(T - h) = U(T) - h \frac{dU}{dT} + \frac{h^2}{2!} \frac{d^2U}{dT^2} - \frac{h^3}{3!} \frac{d^3U}{dT^3} + \dots, \quad (90)$$

ao truncar até o termo para a primeira derivada nessas expansões, a Equação (89) pode ser reescrita como:

$$U(T + h) = U(T) + h \frac{dU}{dT}, \quad (91)$$

e a Equação (90) como:

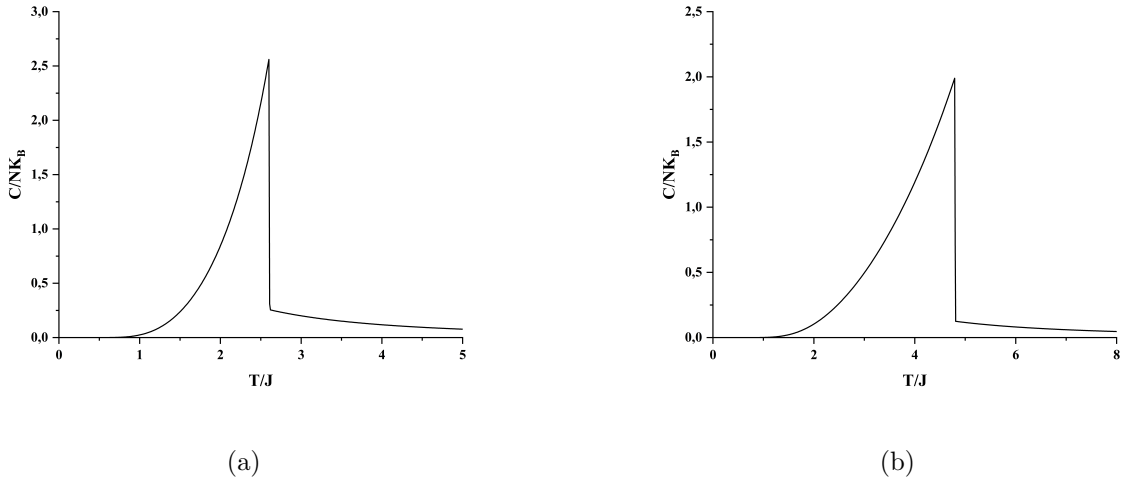
$$U(T - h) = U(T) - h \frac{dU}{dT}. \quad (92)$$

Porém, a primeira derivada da energia interna com relação à temperatura corresponde ao calor específico C . Ao subtrair a Equação 91 da Equação 92 e isolar o calor específico, este pode ser escrito como:

$$C = \frac{dU}{dT} = \frac{U(T+h) - U(T-h)}{2h}. \quad (93)$$

Por meio desse método, também denominado de derivação de dois pontos, é possível obter numericamente o calor específico. Para isso, os campos médios m^+ e m^- são determinados para duas temperaturas distintas, $T' = T+h$ e $T'' = T-h$, onde nesse caso $h = 0,005$, a partir das quais é possível estabelecer uma função Δ' para temperaturas T' e um Δ'' para temperaturas T'' . Com essas variáveis, por meio da solução em um laço, como descrito anteriormente para o cálculo da magnetização, é possível obter as energias deslocadas $U(T+h)$ e $U(T-h)$, e consequentemente o calor específico.

Figura 11: Calor específico para a rede quadrada $z = 4$ (a) e cúbica $z = 6$ (b).



O comportamento do calor específico com a variação da temperatura é mostrado na Figura 11. Nesta, é possível observar um aumento abrupto do calor específico do sistema, até que este atinge um máximo na temperatura crítica ($T_c = 2,599$ para $z = 4$ e $T_c = 4,789$ para $z = 6$), onde ocorre uma transição de fase dita de segunda ordem, pois no ponto de máximo há uma descontinuidade no calor específico. Após isso, o calor específico apresenta um rápido decaimento, retornando em um valor praticamente constante após esse pico.

Com o aumento do número de coordenação de $z = 4$ para $z = 6$, é notável que o calor específico é deslocado para regiões de temperaturas mais altas, além do calor específico assumir valores menores com a mudança de z , com um máximo de $\frac{C}{NK_B} = 2,560$ para $z = 4$ e de

$\frac{C}{NK_B} = 1,984$ para $z = 6$, o que representa uma queda de 22,5% no maior valor assumido pelo calor específico.

Capítulo 6

Conclusão

Neste trabalho estudamos o modelo de Ising por meio de duas abordagens de campo médio, usual e correlacionado. Obtemos a magnetização e focamos na discussão da termodinâmica do sistema correlacionado, com a construção das Equações essenciais para a formulação teórica da transição de fase de sistemas magnéticos.

Nos resultados há uma melhora no estudo das transições de fase por meio do campo médio correlacionado com relação ao usual proposto por Weiss, o que é observado na independência do número de coordenação para a temperatura crítica de transição de fase, além da possibilidade de observar como a mudança do número de coordenação altera a temperatura de transição de fase, com a determinação para $z = 4$ e $z = 6$, e as características termodinâmicas do sistema quando tomado como base a Teoria de Campos Médios Correlacionados.

Com perspectivas de trabalhos sequenciais com relação ao abordado, existem diversas linhas, como interações antiferromagnéticas entre spins que são primeiros vizinhos, considerar interações da constante de troca que abrangem segundos vizinhos, ampliar o método ao usar clusters de spins e uma terceira possibilidade é considerar um sistema onde os spins apresentam correlações quânticas.

Referências Bibliográficas

- [1] M.W Freeman, A Arrot, and J.H.L Watson. Magnetism in medicine. *Journal of Applied Physics*, 31(5):S404–S405, 1960.
- [2] G. M. Wysin and J. Kaplan. Correlated molecular-field theory for ising models. *Phys. Rev. E*, 61:5, Jun 2000.
- [3] H.B Callen. *Thermodynamics and an introduction to thermostatistics; 2nd ed.* Wiley, New York, NY, 2006.
- [4] S.R.A. Salinas. *Introdução a Física Estatística Vol. 09.* EDUSP, 1997.
- [5] J.F Rocha. *Origens e evolução das idéias da física.* Editora da Universidade Federal da Bahiaa, 2002.
- [6] M.J de Oliveira. *Termodinâmica.* Editora Livraria da Física, 2005.
- [7] R. Peierls. On ising’s model of ferromagnetism. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 32(3):477–481, 1936.
- [8] P Ro Weiss. The application of the bethe-peierls method to ferromagnetism. *Physical Review*, 74(10):1493, 1948.
- [9] Takehiko Oguchi. A theory of antiferromagnetism, ii. *Progress of Theoretical Physics*, 13(2):148–159, 1955.
- [10] Daniel C Mattis. Molecular-field theory with correlations. *Physical Review B*, 19(9):4737, 1979.