

unesp 

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO EM FÍSICA APLICADA

MARCOS ROBERTO DE GODOI

ESTUDO DO MODELO BLUME-CAPEL ATRAVÉS DA TEORIA
DE CAMPO MÉDIO

INSTITUTO DE GEOCIÊNCIAS E CIÊNCIAS EXATAS

RIO CLARO • SP

2019

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA
“Júlio de Mesquita Filho”
Instituto de Geociências e Ciências Exatas Campus de
Rio Claro

Marcos Roberto de Godoi

Estudo do modelo Blume-Capel através da teoria de campo médio

Dissertação de Mestrado apresentada ao programa de Pós-graduação em Física da Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho” – Campus de Rio Claro, como parte dos requisitos para a obtenção do título de mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Makoto Yoshida

Rio Claro – SP

2019

G588e Godoi, Marcos Roberto de
 Estudo do modelo Blume-Capel através da teoria de campo
 médio / Marcos Roberto de Godoi. -- Rio Claro, 2019
 84 p. : il., tabs. + 1 CD-ROM

 Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual Paulista
 (Unesp), Instituto de Geociências e Ciências Exatas, Rio Claro
 Orientador: Makoto Yoshida

 1. Física aplicada. 2. Teoria de campo médio. 3. Modelo
 Blume-Capel. 4. Modelo de Ising 2d. 5. Transição de fase. I.
 Título.

Marcos Roberto de Godoi

Estudo do modelo Blume-Capel através da teoria de campo médio

Dissertação de Mestrado apresentada ao programa de Pós-graduação em Física da Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho” – Campus de Rio Claro, como parte dos requisitos para a obtenção do título de mestre em Física.

Comissão
Examinadora

Prof. Dr. Edson Denis Leonel

Prof. Dr. Makoto Yoshida

Prof. Dr. Valter Luiz Líbero

Rio Claro – SP

2019

Resultado: Aprovado em 13 de agosto de 2019

AGRADECIMENTOS

Ao Universo, por se manter na mais perfeita ordem e permitir a existência de minha espécie no planeta Terra.

A Deus, por me guiar até aqui.

À minha mãe, pelos valores a mim transmitidos.

Ao meu pai, pelo exemplo e referência de honestidade.

À minha irmã, pela paciência que teve comigo quando criança.

À minha mulher Renata, pelo amor, carinho e companheirismo.

À minha filha Marina, pela alegria que me traz.

Ao meu tio Pedro Antonio Zagatto, pelo incentivo me dado ao longo do curso.

À UNESP de Rio Claro, por permitir que eu fizesse parte de seu seletivo grupo de alunos.

Ao meu nobre amigo Arthur Montanher, por me ensinar na questão do desenvolvimento de programas.

A todos alunos da Pós-graduação em Física, pelos aprendizados compartilhados durante todo o curso de mestrado.

Ao professor Makoto Yoshida, pelo apoio, por suas orientações, pelas sábias palavras, pela confiança e conhecimento a mim transmitido durante todo o curso.

A todos aqueles que acreditaram em mim.

O conhecimento emerge apenas através da invenção e da reinvenção, através da inquietante, impaciente, contínua e esperançosa investigação que os seres humanos buscam no mundo, com o mundo e uns com os outros.

Paulo Freire

Resumo:

Apresenta-se um estudo das transições de fase de um material ferromagnético representado pelo modelo Blume-Capel. A investigação é realizada através da teoria de campo médio implementada através da aproximação de Bethe-Peierls. Como tarefa preliminar é proposta uma revisão detalhada da aproximação de Weiss para investigação dos fenômenos críticos de sistemas magnéticos. Nesta etapa, tanto o modelo de Ising quanto o modelo Blume-Capel são considerados. Em seguida, uma revisão do modelo de Ising através da aproximação de Bethe-Peierls, tida como mais precisa, também é realizada e de posse da experiência adquirida, o modelo Blume-Capel é detalhadamente investigado.

Palavras chaves: Bethe-Peierls, modelo de Ising 2d, modelo Blume-Capel, transição de fase.

Abstract:

The study of the phase transition of Blume-Capel ferromagnet is carried out by means of Bethe-Peierls approximation. A detailed review of 2D Ising model and the Weiss/Bethe-Peierls mean field theory is presented as the preliminar task. This is followed by a review of Blume-Capel model and finally by the investigations of its critical phenomena in the Bethe-Peierls approximation.

Keywords: Bethe-Peierls, 2D Ising model, Blume-Capel model, phase transition.

Sumário

Capítulo 1	8
Introdução	8
Capítulo 2	11
Teoria de campo médio	11
2.1 Sistemas paramagnéticos	11
2.2 O modelo de Ising	12
2.3 A teoria de campo médio de Weiss	13
2.4 Estudos do modelo de Ising através da aproximação de Bethe-Peierls.....	19
Capítulo 3	29
Estudo do modelo Blume-Capel.....	29
3.1 Modelo Blume-Capel	29
3.2 Cálculo da magnetização por sítio através da teoria de campo médio de Curie-Weiss	31
3.3 Cálculo da energia livre pelo princípio variacional de Bogoliubov aplicado para o modelo Blume-Capel para spins $0, \pm 1$	34
3.4 Energia livre de Landau.....	40
3.5 Transições de fase e fenômenos críticos.....	44
3.6 Cálculos da energia média, da susceptibilidade magnética e do calor específico estendido para o modelo Blume-Capel através da aproximação de Weiss	51
Capítulo 4	56
Estudo do modelo Blume-Capel através da aproximação de Bethe-Peierls.....	56
4.1 Estudo das transições de fase e fenômenos críticos do modelo BC através da aproximação de Bethe-Peierls	56
4.2 Cálculo da energia média, do calor específico e da correlação entre spins vizinhos, pela aproximação de Bethe-Peierls estendida para o modelo Blume-Capel	62
Capítulo 5	72
Conclusão	72
Capítulo 6	76
Referências	76
Capítulo 7	78
Apêndices	78

Lista de figuras:

- Figura 1 – Solução gráfica realizada através da equação (2.3.9). Os resultados são para a rede de spins $S = \frac{1}{2}$. Para a determinação das raízes da equação transcendental utilizamo-nos da linguagem de programação Fortran 90. Conforme previsto na literatura, a temperatura crítica de Weiss para esta rede quadrada de spins ocorre a $\frac{k_B T_c^W}{J} = 1$. Os valores negativos da magnetização foram desconsiderados junto ao gráfico 16
- Figura 2 – O gráfico mostra a energia média do spin $\frac{1}{2}$ na aproximação de Weiss. Para a rede quadrada em questão, foi utilizado um parâmetro de troca constante $J = 1$ 17
- Figura 3 – Dependência entre a susceptibilidade magnética e a temperatura para o material ferromagnético ($J > 0$) numa rede quadrada de spins $\frac{1}{2}$ do modelo Ising, resolvido através da teoria de campo médio de Weiss, com $h = 0$. O pico da figura mostra que a susceptibilidade atinge seu valor máximo a $\frac{k_B T_c^W}{J} = 1$ 19
- Figura 4 – Funções plotadas para a determinação dos valores do campo efetivo λ do modelo de Ising pela aproximação BP, para a rede de spins $\frac{1}{2}$ com $J = 1$ e número de coordenação $q = 4$ 23
- Figura 5 – Dependência entre a temperatura e o campo efetivo λ para a rede quadrada de spins $\frac{1}{2}$, obtida pela aproximação de Bethe-Peierls 24
- Figura 6 – Resultado dos valores de m para a rede de spins $\frac{1}{2}$ com número de coordenação $q = 4$. É percebido que a curva de magnetização m (linha azul) se comporta de modo semelhante a do campo molecular λ da figura 5. Quando comparado ao modelo de Ising 2D (curva magenta), percebe-se que a transição de fase realizada pela aproximação de Bethe-Peierls (curva azul) apresenta melhores resultados que os obtidos pela teoria de campo de Weiss (curva roxa).... 25
- Figura 7 – Energia média para a rede quadrada de spins $\frac{1}{2}$, na aproximação de Bethe-Peierls. Como a flutuação espacial dos spins é muito pequena na região de baixa temperatura (STEINBARANA; YOSHIDA; LÍBERO, 2004), percebe-se pela leitura do gráfico acima que, nas

proximidades das transições de fases, a variação desta energia é menor que a variação da energia média obtida pela teoria de campo médio de Weiss, descrita pelo gráfico da figura 2.....27

Figura 8 – Níveis de energia de spins controlados pelo campo de anisotropia D30

Figura 9 – Valores da magnetização m calculados para uma rede quadrada de spins $S = -1,0,1$, com $\frac{D_c}{J} = 1,85$ e $J = 1$ (curva magenta). A temperatura aproximada para a transição de fase se deu a $\frac{k_B T_{tc}^W}{J} \approx 1,33$. No detalhe, observa-se uma transição de fase de primeira ordem para a mesma configuração de rede utilizando $\frac{D}{J} = 2,0$39

Figura 10 – O gráfico mostra todos os valores da magnetização em função da temperatura. As curvas denotam as raízes positivas, negativas e nula, encontradas através da resolução da equação 3.3.13, para uma rede de spins $-1,0,1$ com número de coordenação $q = 4$ a um campo B nulo e $\frac{D}{J} = \frac{D_c}{J}$40

Figura 11 – Potencial termodinâmico de Landau em função da magnetização da rede de spins $-1,0,1$ com coordenação $q = 4$. As duas curvas com concavidades voltadas para baixo (ponto de máximo local) mostram que o sistema se torna bastante instável a uma magnetização aproximada de $\pm 0,14$. No entanto, as curvas que apresentam concavidades voltadas para cima revelam que as raízes aproximadas da magnetização $\frac{m}{g\mu_B}$, obtida à $\frac{k_B T_c}{J} \approx 1,33$, ocorrem para valores iguais a $0, \pm 0,24$ 42

Figura 12 – A curva do gráfico maior da figura acima, que se apresenta na cor preta, mostra que as raízes da eq. (3.4.2) ocorrem para $m = 0, m_+$ e m_- . Os pontos Q e Q' do gráfico $\frac{m}{g\mu_B}$ contra $\frac{k_B T}{J}$ evidenciam que a transição de fase ocorre a $\frac{k_B T_c^W}{J} \approx 1,33$. A curva tracejada de cor azul do gráfico $(F - F_0)$ contra $\frac{m}{g\mu_B}$ mostra que, quando $\frac{k_B T}{J} < \frac{k_B T_c^W}{J}$, existem cinco soluções possíveis para o sistema. Para $\frac{k_B T}{J} > \frac{k_B T_c^W}{J}$ a solução gráfica apresenta apenas a fase paramagnética do sistema (curva tracejada vermelha do gráfico $(F - F_0)$ contra $\frac{m}{g\mu_B}$).....43

Figura 13 – Os gráficos da figura mostram os valores distintos do parâmetro de anisotropia $\frac{D}{J}$ obtido através de diferentes temperaturas $\frac{k_B T}{J}$. Observa-se através de $\frac{D_c}{J} = 1,85$ que a transição

de fase se dá a uma temperatura tricrítica aproximada de $\frac{k_B T_{tc}^W}{J} \approx 1,33$46

Figura 14 – Os valores encontrados pelas intersecções das equações (3.5.5), determinaram o gráfico $\frac{k_B T_c}{J}$ contra $\frac{D}{J}$. O ponto tricrítico ocorre com A' e B' igual a zero e $D' > 0$. O intervalo destacado com a cor magenta (no detalhe) representa a transição de fase de segunda ordem do modelo Blume-Capel, que ocorre também com $B' = 0$ e $D' > 0$ 47

Figura 15 – A curva contínua do gráfico $\frac{m}{g\mu_B}$ contra $\frac{k_B T}{J}$ identifica através do ponto azul que a transição de fase para-ferromagnética do modelo, com $\frac{D}{J} = 0$, se dá nas proximidades de 2,67048

Figura 16 – Conforme mostram os gráficos acima, o estudo da hamiltoniana estendida para o modelo Blume-Capel apresenta resultados de transições de fase de primeira e segunda ordem. Nota-se que para $\frac{D}{J} = 0$ (linha com pontos laranjas) e $\frac{D}{J} = 1$ (linha com pontos verdes) a transição de fase é contínua, e apresenta estado crítico a uma temperatura que pode ser bem identificada. A descontinuidade do gráfico azul a direita revela a coexistência de $\frac{m}{g\mu_B}$ nas proximidades da temperatura crítica. A identificação da temperatura de transição de fase, com $\frac{D}{J} = 2,01$, é melhor descrita pelo potencial termodinâmico de Landau49

Figura 17 – A curva do gráfico $(F - F_0)$ contra $\frac{m}{g\mu_B}$ à direita, mostra através da linha cheia azul que a transição de fase do sistema se dá a $m = 0$ e $m \approx \pm 0,8468$. A linha vertical de cor preta do gráfico $\frac{m}{g\mu_B}$ contra $\frac{k_B T}{J}$ no detalhe à direita, evidencia que a transição de fase do sistema é de primeira ordem e ocorre a uma temperatura $\frac{k_B T_c}{J} \approx 0,79$ 49

Figura 18 – Magnetização $\frac{m}{g\mu_B}$ da rede quadrada de spins $S = -1,0,1$ e $J = 1$. A temperatura aproximada para a transição de fase de primeira ordem se deu a $\frac{k_B T_c}{J} = 0,79$ 50

Figura 19 – Energia média por sítio da rede de spins $-1,0,1$ com coordenação $q = 4$. Com o parâmetro $\frac{D}{J} = 0$ a curva apresenta uma linha de transição bem definida.....51

Figura 20 – Energia média por sítio da rede de spins $-1,0,1$ com $q = 4$. Para a realização do

gráfico foram elegidos valores de $\frac{D}{J} = \frac{D_c}{J} = 1,85$ (linha vermelha) e $\frac{D}{J} = 2,01$ (linha azul)... 52

Figura 21 – Resultados das susceptibilidades em relação aos valores de cada temperatura referente a rede de spins $0, \pm 1$ com $q = 4$. O pico da curva evidencia que a transição de fase do modelo ocorre a uma temperatura crítica $\frac{k_B T_c}{J} \approx 2,670$ 53

Figura 22 – Curvas de susceptibilidades magnéticas referente a rede de spins $0, \pm 1$. A curva com parâmetro $\frac{D_c}{J} = 1,85$ (linha azul) mostra através do pico uma transição de fase de segunda ordem bem definida a $\frac{k_B T_c^W}{J} \approx 1,33$. A curva com parâmetro $\frac{D}{J} = 2,01$ (linha vermelha), descreve que próximo a transição de fase de primeira ordem, os spins se comportam de um modo diferente quando comparados às transições de fase de segunda ordem 53

Figura 23 – Curvas de calor específico através da aproximação de campo médio de Weiss com parâmetros $\frac{D}{J}$ distintos. Os resultados se referem à rede quadrada de spin $S = 0, \pm 1$ 55

Figura 24 – Aglomerado contendo um sítio central e quatro sítios periféricos..... 56

Figura 25 – Magnetização obtida pela aproximação de Bethe-Peierls estendida para o modelo Blume-Capel com resultados referentes a rede de spins $S = -1, 0, 1$ e número de coordenação $q = 4$ (curva azul). O detalhe mostra a ação do campo efetivo λ (curva laranja) sobre os q spins periféricos. O comportamento de ambas as curvas são análogos e se anulam a uma temperatura aproximada $\frac{k_B T_c}{J} \approx 2,115$ 60

Figura 26 – Dependência com a temperatura da magnetização m para a rede de spins $S = 0, \pm 1$, com coordenação $q = 4$. Para um parâmetro $\frac{D}{J} = 2,01$ e $J = 1$, a transição de fase do sistema ocorre a uma temperatura crítica $\frac{k_B T_c}{J} \approx 0,66375$ 61

Figura 27 – Magnetizações $\frac{m}{g\mu_B}$ obtidas pela aproximação de Bethe-Peierls estendida para o modelo Blume-Capel para uma rede de spins $0, \pm 1$. O campo efetivo em destaque (curva vermelha) é análogo a curva de magnetização de cor magenta. Para temperaturas iguais ou maiores que $T \geq T_c \approx 1,0275$ (curva magenta), as transições se apresentam como de segunda ordem. Para temperaturas abaixo de $T_c \approx 1,0275$ o modelo identifica as transições de fase de

primeira ordem	62
Figura 28 – O gráfico evidencia a energia média \bar{E} , obtida pela aproximação de Bethe-Peierls e pela teoria de campo médio de Weiss, ambas, em função da temperatura $\frac{k_B T}{J}$ para a rede de spins $S = 0, \pm 1$, com número de coordenação $q = 4$	64
Figura 29 – Energia da rede de spins $S = 0, \pm 1$ com número de coordenação $q = 4$. Os resultados comparam os estados de energia do parâmetro de anisotropia crítico $\frac{D_c}{J}$ obtidos pelas aproximações de Weiss e de Bethe-Peierls.	64
Figura 30 – Energias médias de Weiss e de Bethe-Peierls estendidas para o modelo Blume-Capel utilizando valores de $\frac{D}{J} = 2,01$. A linha cheia verde oliva identifica que o estado energético da transição de fase obtido pela aproximação BP continua se dando abaixo do determinado pela da teoria de campo médio de Weiss (linha cheia laranja).....	65
Figura 31 – Calor específico do modelo Blume-Capel obtido pela aproximação de Bethe-Peierls. As curvas evidenciam as coerências das flutuações das variáveis dinâmicas próximo às transições de fase do modelo analisado, com parâmetros $\frac{D}{J}$ distintos.....	66
Figura 32 – Calores específicos do modelo Blume-Capel obtidos pelas aproximações de campo médio de Bethe-Peierls (curva roxa) e Weiss (curva verde) calculados para a rede de spins $S = 0, \pm 1$ com número de coordenação $q = 4$, utilizando o parâmetros de anisotropia $\frac{D}{J} = 2,01$.	67
Figura 33 - Correlação entre dois vizinhos próximos da rede obtidas pela aproximação de Bethe-Peierls com $S = 0, \pm 1$ e número de coordenação $q = 4$ com parâmetro de troca $J = 1$	68
Figura 34 – Curvas de susceptibilidades magnéticas obtidas pela aproximação de Bethe-Peierls para uma rede de spins $S = 0, \pm 1$. As divergências dos comportamentos das curvas que ocorrem próximas de $\frac{k_B T_c}{J}$, indicam as ordens de transições de fase do modelo	70
Figura 35 – Gráfico da magnetização exata de Onsager, 1944.	78
Figura 36 – Dependência da susceptibilidade magnética com a temperatura para materiais ferromagnéticos.	79

Lista de Tabelas:

Tabela1 – Pontos tricríticos do modelo Blume-Capel obtidos pelas teorias de campo médio e pelo método de simulação de Monte-Carlo 73

Tabela 2 – Resultados de transições de fases do modelo Blume-Capel através do método de simulação Wang-Landau Monte-Carlo descritos por SILVA; CAPARICA; PLASCAK (2006) utilizando de diferentes parâmetros de testes $\frac{D}{J}$ 74

Lista de siglas:

2D – Duas Dimensões

AF – Antiferromagnetismo

BC – Blume-Capel

BP – Bethe-Peierls

F - Ferromagnetismo

ME – Mecânica estatística

TCM – Teoria de campo médio

Capítulo 1

Introdução

A teoria clássica do magnetismo da matéria revela que grande parte dos sólidos apresentam um certo grau de magnetismo. Embora os materiais magnéticos sejam conhecidos há cerca de três mil anos, foi no primeiro quarto do século 20, com o advento da mecânica quântica, que a origem microscópica do magnetismo pôde realmente ser compreendida (OLIVEIRA; JESUS, 2011).

Nos dias de hoje, em diversos países do mundo, grupos teóricos e experimentais, estudam o magnetismo na matéria. A intensificação por esses estudos pode ser tanto voltada a pesquisas acadêmicas, quanto às aplicações práticas do cotidiano, que atualmente vem sendo bastante estimulada pelos altos investimentos das empresas privadas que têm suas atividades voltadas ao ramo do eletromagnetismo.

Neste trabalho, os estudos dos fenômenos magnéticos são apenas de âmbito acadêmico, e nossa proposta é analisar teoricamente a transição de fase de um sólido magnético através da teoria de campo médio de Weiss e da aproximação de Bethe-Peierls aplicados ao modelo Blume-Capel. Estas abordagens clássicas desempenham um papel interessante no entendimento de fenômenos críticos. Outro fato que merece destaque é a descrição dos processos termodinâmicos do material. Estes procedimentos decorrem das análises da magnetização por partícula, da energia média, do calor específico, da susceptibilidade magnética, da correlação de primeiros vizinhos, dentre outros que forem necessários.

Vale a pena ressaltar que os estudos da teoria de campo médio (TCM) tiveram grandes avanços em 1907, quando Weiss propôs que as interações entre as moléculas deveriam gerar um campo magnético interno que mantinha uma magnetização não nula na fase ferromagnética, mesmo sem campo externo, obtendo então uma equação para a magnetização em função do campo externo e da temperatura (ROCHA, 2015). Mais tarde, em 1928, Heisenberg, usando a mecânica quântica, explicou a origem deste campo interno (CARNEIRO, 1999).

Como a magnetização do modelo Blume-Capel obtida através do método de Weiss tende a zero nas proximidades da transição de fase para-ferromagnética, realizamos um estudo detalhado da teoria de Landau (PHATRIA; BEALE, 2011). Além de refletir a simetria do sistema físico (SALINAS, 2005), esta teoria identifica muito bem a transição de fase do sistema estudado. O potencial termodinâmico da teoria de Landau calcula as diversas grandezas termodinâmicas e mostra as características do sistema particular que esteja sendo estudado

(PHATRIA; BEALE, 2011).

Conforme já apontamos, uma outra aproximação clássica, semelhante à teoria de campo médio de Weiss (CARNEIRO, 1999), foi introduzida pela aproximação de Bethe e Peierls, cuja ideia é descrever o comportamento do ferromagnetismo em duas dimensões de um modo mais interessante, visto que a técnica utilizada por este método procura levar em consideração as correlações entre os spins vizinhos de uma rede (STEIN-BARANA; YOSHIDA; LÍBERO, 2004). Estas teorias que discutiremos em detalhe mais adiante têm consequências importantes (CARNEIRO, 1999) na questão da transição de fase de modelos, inclusive o de Blume-Capel.

Este modelo foi descrito originalmente por M. Blume e H.W. Capel, e portanto, popularizado como modelo Blume-Capel. Devido a esta descrição apresentar resultados interessantes próximos às transições de fases magnéticas, estenderemos o modelo de interação à uma rede de spins $S = 0, \pm 1$, com número de coordenação $q = 4$. Face os bons resultados apresentados na questão da transição de fase de sistemas magnéticos, esta teoria foi empregada em diversas abordagens da mecânica estatística, tais como: método de Monte Carlo, teoria de campo médio, métodos variacionais, entre outros.

É interessante mencionar que a eficiência dos resultados que descrevem o modelo Blume-Capel através da teoria de campo médio de Weiss foi de boa base para a abordagem do modelo na aproximação de Bethe-Peierls. Entretanto, nosso principal objetivo é analisar a transição de fase no contexto dos fenômenos críticos (CARNEIRO, 1999) e comparar os resultados obtidos a de alguns dados existentes na literatura.

Deste modo, este trabalho organiza-se em 7 capítulos e será descrito da seguinte forma: o capítulo 1, que trata da introdução, tem como objetivo levantar dados bibliográficos para o estudo da teoria de campo médio e nossa contribuição para a área é investigar a transição de fase de um sólido magnético do modelo Blume-Capel através da aproximação de Bethe-Peierls. Espera-se que este trabalho apresente resultados tão eficientes quanto aos apresentados na literatura. No capítulo 2 serão discutidas a fundamentação teórica do campo médio de Weiss e da aproximação de Bethe-Peierls. Essas teorias são essenciais para o estudo da transição de fase do sólido magnético de spin $S = \frac{1}{2}$. O capítulo 3 introduz o modelo Blume-Capel, em uma rede aleatória de spins $0, \pm 1$. Os cálculos das propriedades termodinâmicas do modelo proposto foram realizados da seguinte forma: a magnetização foi calculada pela teoria de Weiss e pelo princípio variacional de Bogoliubov (SALINAS, 2005). O cálculo da energia livre foi realizado pela teoria de Landau (PHATRIA; BEALE, 2011), e as demais propriedades termodinâmicas foram calculadas de acordo com os métodos usuais apresentados na literatura. Já no capítulo

4, a aproximação de Bethe-Peierls é aplicada ao modelo Blume-Capel. O desenvolvimento teórico desta técnica encontra-se bem explicado através das equações termodinâmicas apresentadas nas seções desse capítulo. As considerações finais descritas no capítulo 5 comparam os resultados das temperaturas críticas e tricríticas que ocorrem próximos das transições de fases obtidas pelas aproximações de campo médio estudadas nos capítulos 3 e 4, aos descritos pelo modelo Blume-Capel obtido através do método de simulação de Wang-Landau Monte-Carlo (SILVA; CAPARICA; PLASCAK, 2006). Os dois últimos capítulos deste trabalho são destinados à bibliografia e aos anexos.

Por fim, espera-se que o estudo da teoria de campo médio (TCM) permita resolver de maneira satisfatória (explorando o conceito estatístico de média termodinâmica de determinadas quantidades) os principais processos termodinâmicos que descrevem a transição de fase do sistema magnético, para que possam ser comparados aos estudos realizados através da técnica computacional de Wang-Landau Monte-Carlo estendida para modelo de sólido Blume-Capel, apresentado na literatura.

Capítulo 2

Teoria de campo médio

2.1 Sistemas paramagnéticos

Este capítulo inicia-se com o estudo de um modelo de material paramagnético com momentos magnéticos não interagentes. Num primeiro instante, analisou-se uma rede de spins submetida a um campo magnético \vec{B} . O hamiltoniano do sistema é dado pelos momentos magnéticos, ou spins

$$\mathcal{H} = -g\mu_B \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{B}, \quad (2.1.1)$$

sendo g o fator de Landé e μ_B o magneton de Bohr. Com o campo \vec{B} na direção \hat{z} , os autovalores de \mathcal{H} são dados por

$$\vec{S}_i \cdot \vec{B} = m_i B; \quad S_i = -S, -S + 1, \dots, 0, \dots, S - 1, S. \quad (2.1.2)$$

A equação formal dos autovalores descrita em (2.1.2) é definida pela mecânica quântica como

$$S_z |S\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |S\rangle,$$

onde \hbar é a razão da constante de Planck por 2π . Nesta equação $|S\rangle$ é o autoestado para o operador S_z . Vale a pena apontar que apenas o operador S_z contribui para a energia do sistema. Para o caso $S = \frac{1}{2}$, o número m_i quântico pode assumir valores de $S_i = \pm \frac{1}{2}$.

Devido às teorias de campo médio consideradas neste trabalho serem clássicas, os estudos serão realizados por meio de aproximações clássicas da física estatística. Uma equação de grande importância que descreve os processos termodinâmicos dessa teoria é definida pela função canônica de partição.

Entretanto, a função de partição Z do sistema paramagnético da eq. (2.1.1) é dada pela soma sobre todos os estados de energia do sistema a uma temperatura T , e se apresenta na forma

$$Z = \sum_{m_1=-S}^S \dots \sum_{m_N=-S}^S \exp\left(x \sum_{i=1}^N m_i\right), \quad (2.1.3)$$

com

$$x \equiv \frac{g\mu_B B}{k_B T}, \quad (2.1.4)$$

em que k_B é a constante de Boltzmann.

Os somatórios da equação (2.1.3) são particularmente elementares para o caso de um sistema de dois níveis ($S = \frac{1}{2}$). Assim, tem-se

$$Z = \prod_{i=1}^N \left\{ \sum_{m_i=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} e^{xm_i} \right\}, \quad (2.1.5)$$

ou, numa forma mais conveniente, dada por

$$Z = \left[\frac{\sinh\left\{\left(s + \frac{1}{2}\right)x\right\}}{\sinh\left(\frac{x}{2}\right)} \right]^N, \quad (2.1.6)$$

em que foi possível obter uma expressão exata para a função de partição no caso de momentos independentes. Através da função (2.1.6) pode-se compreender os sistemas paramagnéticos e obter as funções termodinâmicas que estão diretamente relacionadas a ele, tais como a magnetização, a energia, o calor específico (STANLEY, 1971) e a susceptibilidade magnética do sistema.

2.2 O modelo de Ising

O modelo de Ising é um caso particular do modelo de Heisenberg, idealizado na

tentativa de explicar o ferromagnetismo em sólidos. Este modelo é definido pela hamiltoniana de spin

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - B \sum_{i=1}^N S_i, \quad (2.2.1)$$

em que S_i é a componente z do operador de spins, doravante um escalar, que pode assumir os valores ± 1 nos sítios $i = 1, 2, \dots, N$ de uma rede cristalina em d dimensões. O primeiro termo, em que a soma deve ser realizada sobre os pares de sítios vizinhos mais próximos da rede, representa as energias de interação, de curto alcance, produzindo na rede um estado ferromagneticamente ordenado (quando $J > 0$). O segundo termo, envolvendo as interações entre um campo externo aplicado B e o sistema de spins, tem um caráter puramente paramagnético. O modelo de Ising foi resolvido exatamente em uma dimensão por Ising em 1924 (SALINAS, 2015), que concluiu corretamente que o modelo tinha uma transição de fase ferromagnética a temperatura zero ($T_c = 0$), mas conjecturou, erroneamente, que o mesmo aconteceria em duas dimensões (STEIN-BARANA; YOSHIDA; LÍBERO, 2004).

Em 1944, Onsager obteve melhores resultados que Ising quando determinou a resolução exata para o sistema em duas dimensões, e concluiu que a temperatura crítica do sistema seria $\frac{k_B T}{J} = \frac{1}{2. \ln(\sqrt{2}+1)}$. Doze anos antes de Onsager encontrar a solução exata para o modelo de Ising 2D, Peierls já se mostrava contrário às ideias de Ising, apontando que a temperatura crítica para o modelo 2D não seria nula, conforme propunha Ising à época.

Tendo como base os estudos descritos acima, serão iniciados as análises da teoria de campo médio (TCM). Mesmo sabendo que as soluções dos sistemas decorrem por meio de aproximações, entende-se que o estudo em questão, sirva de boa base para a compreensão da teoria de transições de fase em sistemas magnéticos.

2.3 A teoria de campo médio de Weiss

Conforme descrito na seção anterior, o modelo de Ising descreve de modo bastante satisfatório o comportamento crítico dos ferromagnetos. Consideremos novamente o modelo de Ising cuja hamiltoniana é dada por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j. \quad (2.3.1)$$

Como se estuda a rede quadrada e levando em conta somente a interação entre os primeiros vizinhos $\langle ij \rangle$, será analisado inicialmente o tratamento do modelo de Ising através da teoria de campo médio de Weiss. Esta proposta parte da ideia, de que a flutuação espacial do spin pode ser descrita através da diferença entre o spin analisado S_i e o seu valor médio termodinâmico \bar{S}_i .

Definindo

$$\delta S_i = S_i - \bar{S}_i, \quad (2.3.2)$$

a interação de cada par de primeiros vizinhos $\langle ij \rangle$ dar-se-á então como

$$S_i S_j = \bar{S}_i \bar{S}_j + \bar{S}_i \delta S_j + \bar{S}_j \delta S_i + \delta S_i \delta S_j, \quad (2.3.3)$$

em que S_i e S_j são variáveis clássicas, e \bar{S}_i o valor médio de S_i .

Ressalta-se que foram desprezados os termos de flutuações espaciais $\delta S_i \delta S_j$ da interação entre o par $\langle ij \rangle$. Assim, a hamiltoniana da aproximação de Weiss para o caso ferromagnético é escrita na forma

$$\mathcal{H}^W = -J \sum_{\langle ij \rangle} (-\bar{S}_i \bar{S}_j + \bar{S}_i S_j + \bar{S}_j S_i). \quad (2.3.4)$$

Para a condição descrita acima, a invariância translacional implica que $\bar{S}_i = \bar{S}_j \equiv \bar{S}$. No intuito de facilitar a leitura, denomina-se a magnetização \bar{S} do sistema por m , e ela será expressa em unidades de grandezas de $g\mu_B$. Assim,

$$\mathcal{H}^W = -J \sum_{\langle ij \rangle} (-m^2 + S_i m + S_j m). \quad (2.3.5)$$

Para descrever a equação (2.3.5), primeiramente se concentra no caso uniforme, em que $\bar{S}_j = m$, independente do sítio j (MIRANDA, 2005). Neste caso, pode-se reescrever a teoria de campo médio de Weiss na forma

$$\mathcal{H}^W = N \frac{Jqm^2}{2} - Jqm \sum_i S_i, \quad (2.3.6)$$

onde $h^W = Jqm$ é o campo efetivo de Weiss. Se existir um campo magnético externo h , o campo efetivo de Weiss também será acrescido dele. Desta forma temos $h^W = Jqm + h$. Logo, a função de partição do modelo é descrita por

$$Z = \sum_{S_i=-S}^S e^{-\beta \mathcal{H}^W},$$

que, por praticidade, resolvida com $S = \frac{1}{2}$, apresenta-se como

$$Z = 2^N e^{-N \frac{\beta Jqm^2}{2}} \cosh^N \beta \frac{(h^W)}{2}. \quad (2.3.7)$$

O cálculo da energia livre por spin é feito da expressão

$$\begin{aligned} f(T, h) &= -\frac{1}{\beta N} \ln Z, \\ &= \frac{Jq}{2} m^2 - \frac{1}{\beta} \ln \left[2 \cosh \left(\frac{\beta (Jqm + h)}{2} \right) \right], \end{aligned} \quad (2.3.8)$$

que fornece a magnetização

$$m = -\frac{\partial f(T, h)}{\partial h},$$

por sítio, na forma

$$m(T, h) = \frac{1}{2} \tanh \left[\left(\frac{\beta(Jqm + h)}{2} \right) \right], \quad (2.3.9)$$

onde $\beta = \frac{1}{k_B T}$. O comportamento da magnetização em função da temperatura é apresentado na figura 1.

A equação (2.3.9), pode ser resolvida numericamente, e verifica-se que há soluções estáveis para cada valor de $T \leq 1$ e não há solução não trivial para $T > 1$.

Como uma primeira aproximação (qualitativamente) a teoria de campo médio de Weiss dá uma boa descrição deste comportamento. Note que há discrepâncias no limite de baixas temperaturas e também quando $T \rightarrow T_c$, $m \rightarrow 0$ suavemente (sem descontinuidades) o que caracteriza uma transição de fase ferro-paramagnética de segunda ordem (NOVAK, 21-?).

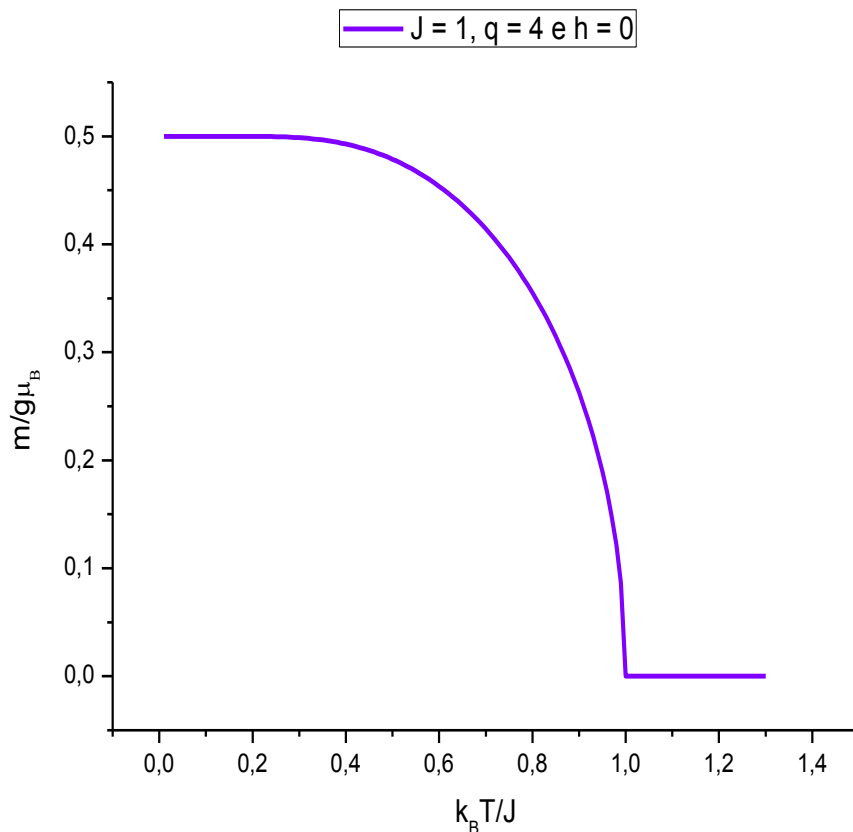


Figura 1 – Solução gráfica realizada através da equação (2.3.9). Os resultados são para a rede de spins $S = \frac{1}{2}$. Para a determinação das raízes da equação transcendental utilizamo-nos da linguagem de programação Fortran 90. Conforme previsto na literatura, a temperatura crítica de Weiss para esta rede quadrada de spins ocorre a $\frac{k_B T_c^W}{J} = 1$. Os valores negativos da magnetização foram desconsiderados junto ao gráfico.

É importante notar através da equação (2.3.6), que cada spin S_i está submetido a um campo magnético efetivo Jqm , proporcional à magnetização média. Como \bar{E}_{S_i} independe do sítio i , em decorrência de $\bar{S}_i = \bar{S}$, a energia é dada pela soma dos autovalores da \mathcal{H}^W (STEINBARANA; YOSHIDA; LÍBERO, 2004).

Ao atribuímos os valores possíveis para S_i (por sítio), calcula-se a energia média da rede pela equação

$$\bar{E} = \frac{1}{N} \bar{E}_S = \bar{E}_{S_i} = -\frac{Jqm^2}{2}. \quad (2.3.10)$$

A figura 2 apresenta a energia média por sítio em função da temperatura, ou seja, \bar{E} contra $\frac{k_B T}{J}$.

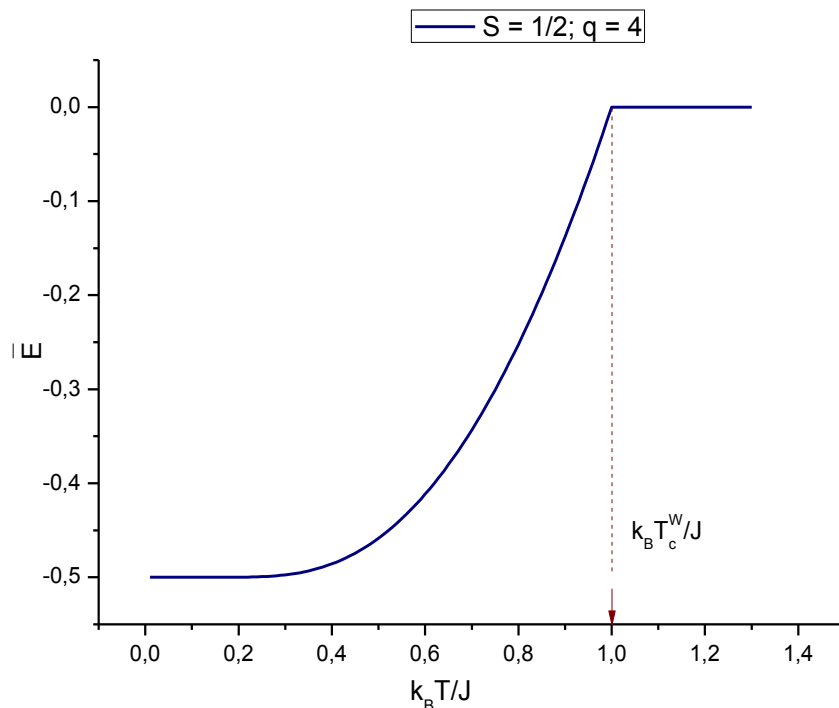


Figura 2 – O gráfico mostra a energia média do spin $\frac{1}{2}$ na aproximação de Weiss. Para a rede quadrada em questão, foi utilizado um parâmetro de troca constante $J = 1$.

Para valores acima de $\frac{k_B T_c^W}{J}$, a figura 2 apresenta uma saturação de energia, donde T_c^W é

a temperatura crítica de Weiss. Quando comparados com $\frac{k_B T_c}{J} = \frac{0,5}{(\ln(\sqrt{2}+1))} = 0,567296$ (STEIN-BARANA; YOSHIDA; LÍBERO, 2004), o valor da energia \bar{E} apresenta uma diferença esperada, visto que a hamiltoniana de Weiss despreza os termos de flutuações espaciais.

Ao se reescrever a equação (2.3.9) com $J = 1$ e $q = 4$ para a rede de spins $S = \frac{1}{2}$, a campo magnético nulo ($h = 0$) tem-se, $2m = \tanh\left(\frac{2m}{k_B T}\right)$. Para facilitar o cálculo do expoente crítico escreve-se $2m = \sigma$. Assim pode-se interpretar a equação da magnetização de Weiss como

$$\sigma = \tanh\left(\frac{\sigma}{k_B T}\right). \quad (2.3.11)$$

Ao se expandir a equação acima em série de Taylor, de modo que a magnetização seja muito pequena, tem-se a descrição de forma assintótica dada por

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{\sigma}{k_B T} - \frac{1}{3} \left(\frac{\sigma}{k_B T}\right)^3, \\ &= T k_B \sqrt{3} (1 - k_B T)^{\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (2.3.12)$$

Para a equação (2.3.12), temos $k_B T_c = 1$. Desta forma, chega-se a uma solução aproximada para o expoente β da magnetização

$$\sigma \approx \frac{T}{T_c} \left(\frac{T_c - T}{T_c}\right)^{\frac{1}{2}} \sqrt{3} = \frac{T}{T_c} t^{\beta} \sqrt{3}, \quad (2.3.13)$$

sendo $t = \frac{T_c - T}{T_c}$ e $\beta = \frac{1}{2}$ (expoente crítico da magnetização para a classe de universalidade de Ising em $d = 2$ e $d = 3$), previsto pela teoria de Weiss.

Para se observar a interação do campo magnético aplicado ao modelo, diferencia-se a equação (2.3.9) em função de h . Assim obtém-se a equação da susceptibilidade magnética χ na forma

$$\chi(T, h = 0) = \frac{\beta}{4 \cosh^2 \left(\frac{1}{2} \beta (J m q) \right)}. \quad (2.3.14)$$

Os resultados de χ para cada valor de temperatura T correspondente são representados através do gráfico disposto na figura 3 a seguir

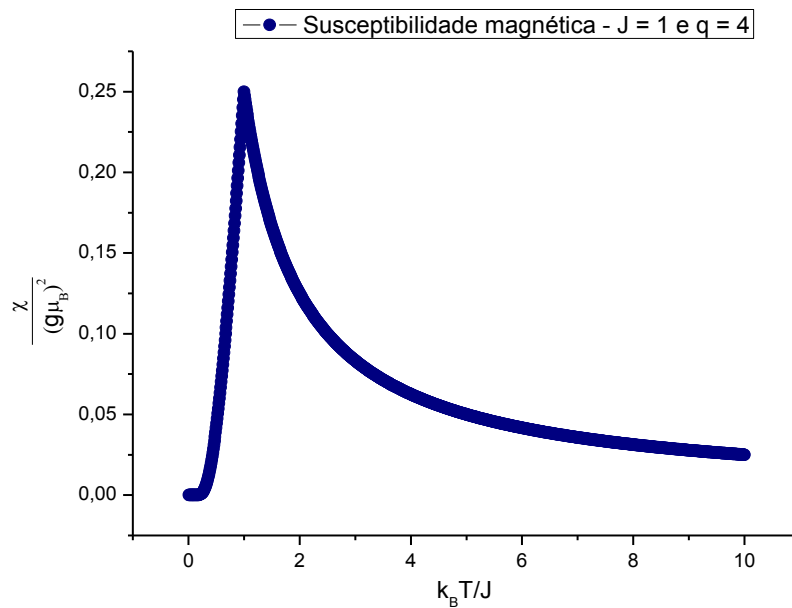


Figura 3 – Dependência entre a susceptibilidade magnética e a temperatura para material ferromagnético ($J > 0$) numa rede quadrada de spins $\frac{1}{2}$ do modelo Ising, resolvido através da teoria de campo médio de Weiss, com $h = 0$. O pico da figura mostra que a susceptibilidade atinge seu valor máximo a $\frac{k_B T_c^W}{J} = 1$.

O gráfico $\frac{\chi}{(g\mu_B)^2}$ contra $\frac{k_B T}{J}$ é bem definido pelo valor máximo da susceptibilidade onde $T = T_c^W$. O comportamento da curva para $T > T_c^W$ pode facilmente ser comparado à curva determinada pela lei de Curie-Weiss (KITTEL, 1978).

Existem outras propriedades termodinâmicas que também são bastante importantes na questão da descrição do sólido analisado, mas tanto nesta, quanto na próxima seção, iremos ater-se apenas em comparações que remetem à energia média por spin e à magnetização por sítio.

2.4 Estudos do modelo de Ising através da aproximação de Bethe-Peierls

O estudo do modelo de Ising através da aproximação de Bethe-Peierls tem como

propósito melhorar os resultados obtidos pelo método de Weiss. Levando em conta as flutuações de curto alcance, destaca-se que esta possível melhoria de resultados se deve a autoconsistência do modelo (na qual é possível eliminar o campo efetivo), que consegue captar alguns efeitos que escapam dos tratamentos usuais de campo médio. Embora os expoentes críticos mantenham seus valores clássicos, a aproximação de Bethe-Peierls é muito representativa de todos esses métodos (SALINAS, 2015).

Para que as melhorias descritas no parágrafo anterior sejam possíveis, estuda-se nessa seção a transição de fase descrita pela aproximação de Bethe-Peierls. Para o estudo do método BP, é necessário eleger um spin da rede como central e tratar a interação entre ele e os quatro sítios periféricos formado pelo aglomerado de spins. Para a coordenação de rede $q = 4$, descreve-se a hamiltoniana de aproximação de campo médio, considerando o produto dos termos de flutuações espaciais $\delta S_i \delta S_j$, desprezados pela equação de campo médio de Weiss. Com isso a equação (2.3.3), que deu origem à hamiltoniana de aproximação de Weiss, torna-se

$$\mathcal{H}_a = -J \sum_{j=1}^q S_0 S_j, \quad (2.4.1)$$

em que S_0 é o spin da posição central $i = 0$.

Considerando que os spins S_j vizinhos do spin central S_0 são submetidos a um campo molecular ou efetivo λ , produzido pelo restante da rede (STEIN-BARANA; YOSHIDA; LÍBERO, 2004), tem-se

$$\mathcal{H}_a^{\text{BP}} = -JS_0 \sum_{j=1}^q S_j - \lambda \sum_{j=1}^q S_j, \quad (2.4.2)$$

ou na forma mais conveniente por

$$\mathcal{H}_a^{\text{BP}} = -(JS_0 + \lambda) \sum_{j=1}^q S_j. \quad (2.4.3)$$

Neste modelo, cada spin periférico sofre a ação de um campo efetivo λ , criado pela rede

que rodeia o aglomerado. A magnetização \bar{S} e o campo molecular λ são obtidos impondo novamente a condição de invariância translacional (STEIN-BARANA; YOSHIDA; LÍBERO, 2004)

$$\bar{S} = \bar{S}_j = \bar{S}_0. \quad (2.4.4)$$

Por comodidade chamou-se a igualdade obtida em (2.4.4) de $m = m_j = m_0$. A energia de uma configuração de spins $\{S\}$ do aglomerado, $\{S\} = \{S_0, S_1, \dots, S_q\}$ é dada por

$$E\{S\} = -(JS_0 + \lambda)(S_1 + S_2 + \dots + S_q). \quad (2.4.5)$$

A descrição da função de partição do modelo de Ising $S_i = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$ para a rede de coordenação $q = 4$ se apresenta na forma

$$Z_a = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta \mathcal{H}_a^{BP}}, \quad (2.4.6)$$

ou ainda

$$Z_a = 2^q \cosh^q \frac{\beta}{2} (JS_0 + \lambda). \quad (2.4.7)$$

A magnetização do spin central m_0 será

$$m_0 = \frac{1}{Z_a} \sum_{\{S\}} S_0 e^{\beta(JS_0 + \lambda)(S_1 + S_2 + \dots + S_q)}, \quad (2.4.8)$$

em que $\{S\}$ representa a soma sobre todas as configurações de spins. O resultado desta soma reduz-se à forma

$$m_0 = \frac{1}{Z_a} \sum_{S_0=-S}^S S_0 [F(S_0)]^q, \quad (2.4.9)$$

sendo

$$F(S_0) \equiv \sum_{S_1=-S}^S e^{\beta(JS_0+\lambda)S_1}. \quad (2.4.10)$$

Portanto, a magnetização de um sítio na periferia é dada por

$$\begin{aligned} m_j &= \frac{1}{Z_a} \sum_{\{S\}} S_j e^{\beta(JS_0+\lambda)(S_1+S_2+\dots+S_q)}, \\ &= \frac{1}{Z_a} \sum_{S_0} \sum_{S_1} S_1 e^{\beta(JS_0+\lambda)S_1} \left(\sum_S e^{\beta(JS_0+\lambda)S} \right)^{(q-1)}, \\ &= \frac{1}{Z_a} \sum_{S_0} \frac{dF(S_0)}{d\gamma} F^{q-1}(S_0), \end{aligned} \quad (2.4.11)$$

onde $\gamma = \beta(JS_0 + \lambda)$. Para encontrar a equação do campo molecular λ foi imposta a condição de invariância translacional à magnetização do sítio central m_0 e dos sítios da periferia m_j . Ao substituir as equações (2.4.9) e (2.4.11) na (2.4.4), obtém-se

$$\sum_{S_0=-S}^S \left[S_0 F(S_0) - \frac{d}{d\gamma} F(S_0) \right] [F(S_0)]^{q-1} = 0, \quad (2.4.12)$$

que deve ser resolvida para o campo efetivo λ . A equação acima vale para qualquer spin S com qualquer número de coordenação q da rede (STEIN-BARANA; YOSHIDA; LÍBERO, 2004), mas inicialmente, iremos abordar o modelo de Ising com $S = \frac{1}{2}$.

Desta forma a função $F(S_0)$ descrita em (2.4.10) é expressa por

$$F(S_0) = 2 \cosh \left[\frac{\beta}{2} (JS_0 + \lambda) \right], \quad (2.4.13)$$

e no momento em que a função acima é levada à equação (2.4.12), tem-se a forma para o campo molecular λ (PHATRIA; BEALE, 2011 apud STEIN-BARANA; YOSHIDA; LÍBERO, 2004)

apresentada como

$$\beta\lambda = (q - 1) \ln \left\{ \frac{\cosh \left[\frac{\beta}{2} \left(\frac{J}{2} + \lambda \right) \right]}{\cosh \left[\frac{\beta}{2} \left(\frac{J}{2} - \lambda \right) \right]} \right\}. \quad (2.4.14)$$

Ao resolvermos a equação transcendental acima encontramos os possíveis valores de λ .

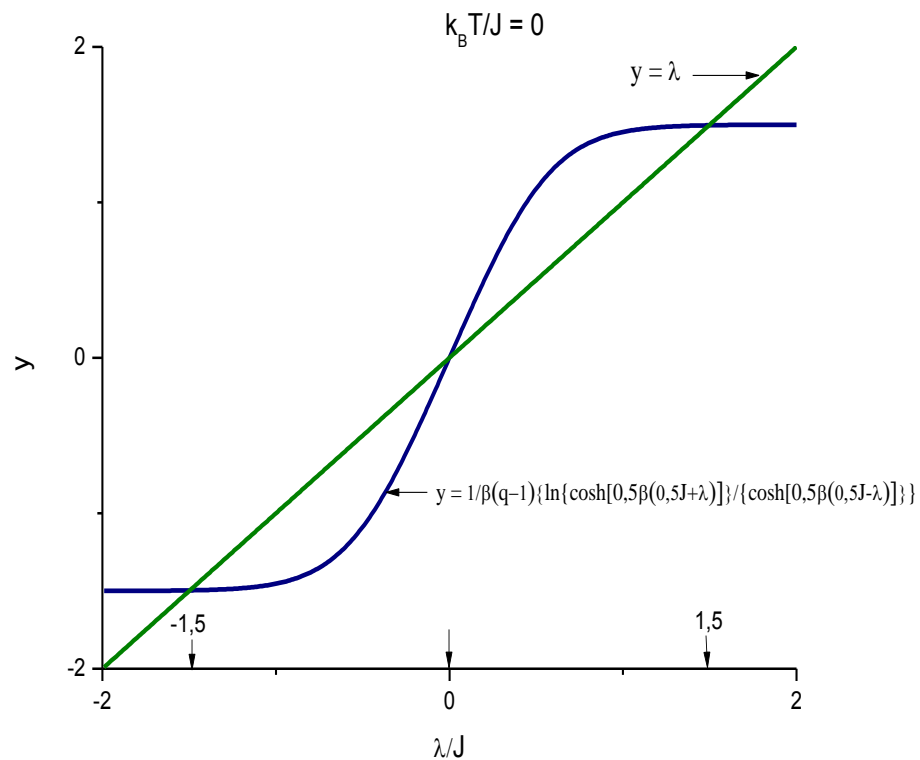


Figura 4 – Funções plotadas para a determinação dos valores do campo efetivo λ do modelo de Ising pela aproximação BP, para a rede de spins $\frac{1}{2}$ com $J = 1$ e número de coordenação $q = 4$.

Os valores do campo molecular λ se deram pelas intersecções de $y = \lambda$ (linha verde) e $y = \frac{1}{\beta} \left\{ (q - 1) \ln \left\{ \frac{\cosh \left[\frac{\beta}{2} \left(\frac{J}{2} + \lambda \right) \right]}{\cosh \left[\frac{\beta}{2} \left(\frac{J}{2} - \lambda \right) \right]} \right\} \right\}$ (linha azul), que representam respectivamente os lados direito e esquerdo da equação transcendental descrita em (2.4.14).

A figura 5 a seguir mostra os resultados do campo efetivo λ em função da temperatura, com $q = 4$ e $J = 1$.

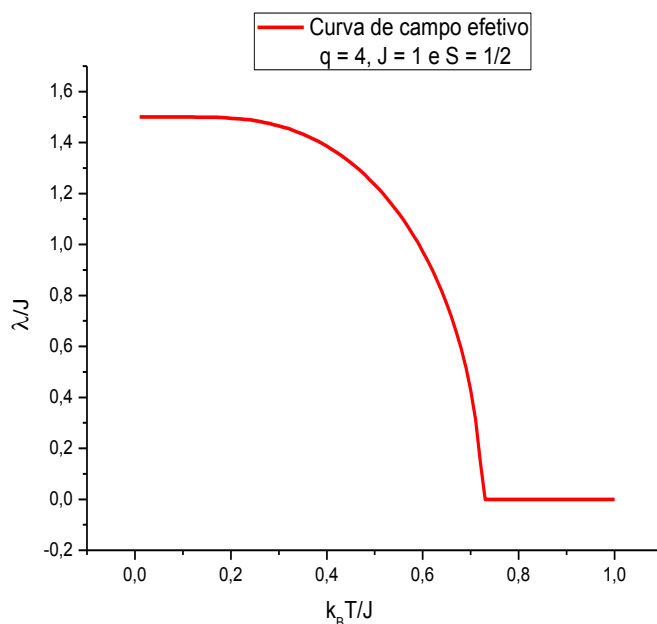


Figura 5 – Dependência entre a temperatura e o campo efetivo λ para a rede quadrada de spins $\frac{1}{2}$, obtida pela aproximação de Bethe-Peierls.

A curva do campo molecular da figura 5 revela que a rede de spins $\frac{1}{2}$, com o número de coordenação $q = 4$, apresenta transição de fase a uma temperatura $\frac{k_B t_c^{BP}}{J} = 0,7213$, onde t_c^{BP} é a temperatura crítica de Bethe-Peierls. A equação de campo molecular apresenta resultado bastante satisfatório nas proximidades da temperatura crítica, quando comparado com a resposta da solução exata do modelo de Ising 2D $\left(\frac{k_B T_c}{j} = 0,567296\right)$. Os resultados encontrados, por ambas as técnicas, foram obtidos para a mesma rede de spins com mesmo número de coordenação (SILVA, 2009). É conveniente destacar ainda, a analogia do comportamento do campo molecular λ e da magnetização m da figura 6. Outro detalhe evidenciado pela linha cheia vermelha da fig. 5, e pela linha cheia azul da fig. 6 é que; os dois resultados se anulam em t_c^{BP} .

A equação m da magnetização se dá por meio de (2.4.7) e (2.4.9) (STEINBARANA; YOSHIDA; LÍBERO, 2004)

$$m = \frac{1}{2} \frac{\left[F\left(\frac{1}{2}\right)\right]^q - \left[F\left(-\frac{1}{2}\right)\right]^q}{\left[F\left(\frac{1}{2}\right)\right]^q + \left[F\left(-\frac{1}{2}\right)\right]^q}, \quad (2.4.15)$$

utilizando a equação (2.4.13) para spins $S = \frac{1}{2}$, reescrevemos a equação (2.4.14) na forma;

$$e^{\beta\lambda} = \frac{\left[\cosh \frac{\beta}{2} \left(\frac{J}{2} + \lambda \right) \right]^q \cosh \frac{\beta}{2} \left(\frac{J}{2} - \lambda \right)}{\left[\cosh \frac{\beta}{2} \left(\frac{J}{2} - \lambda \right) \right]^q \cosh \frac{\beta}{2} \left(\frac{J}{2} + \lambda \right)}, \quad (2.4.16)$$

que inserida na equação (2.4.15) (STEIN-BARANA; YOSHIDA; LÍBERO, 2004), apresenta-se como

$$m = \frac{1}{2} \cdot \frac{\sinh(\beta\lambda)}{e^{-\frac{\beta J}{2}} + \cosh(\beta\lambda)}. \quad (2.4.17)$$

A resolução da equação acima, pode ser descrita através da leitura do gráfico da figura 6. Os resultados encontrados pela aproximação de Bethe-Peierls apresentam transição de fase mais próxima de $\frac{k_B T_c^{\text{exato}}}{J}$ do modelo de Ising 2D, que o calculado com a aproximação de Weiss.

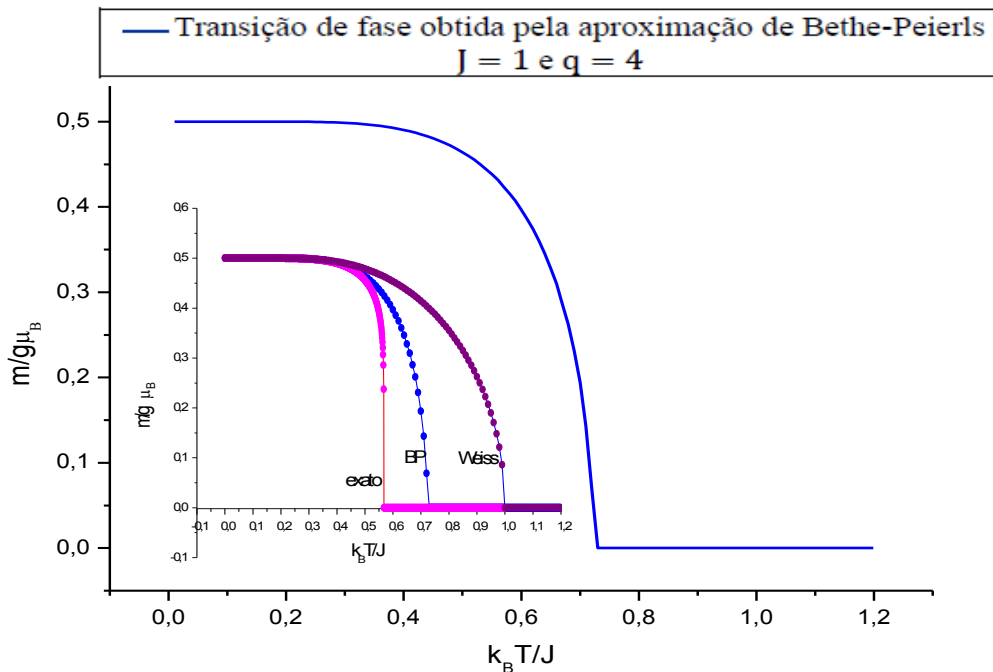


Figura 6 – Resultado dos valores de m para a rede de spins $\frac{1}{2}$ com número de coordenação $q = 4$. É percebido que a curva de magnetização m (linha azul) se comporta de modo semelhante a do campo molecular λ da figura 5. Quando comparado ao modelo de Ising 2D (curva magenta), percebe-se que a transição de fase descrita pela aproximação de Bethe-Peierls (curva azul) apresenta melhores resultados que os obtidos pela teoria de campo de Weiss (curva roxa).

A figura 6 ilustra a magnetização do modelo de Ising obtida pela aproximação de Bethe-Peierls. No detalhe, os resultados da aproximação BP são comparados com a teoria de campo médio de Weiss e com a magnetização exata obtida por Onsager. Observa-se ainda que, quando a magnetização $m \neq 0$, ocorre um alinhamento dos momentos magnéticos, que determina a fase ferromagnética do material. Quando a temperatura é elevada, esse ordenamento desaparece, caracterizando assim, a fase paramagnética do sistema. É importante ressaltar que as figuras 5 e 6 demonstram que as transições de fase obtida pela aproximação de Bethe-Peierls apresentam resultados interessantes para o estudo das propriedades termodinâmicas dos materiais ferromagnéticos.

Para o cálculo da energia média por sítio, a equação é dada por

$$\bar{E} = \frac{1}{N} \bar{\mathcal{H}} = -\frac{J}{N} \sum_{\langle ij \rangle} \overline{S_i S_j}, \quad (2.4.18)$$

onde $\mathcal{H}_a^{\text{BP}}$ não é mais uma hamiltoniana de spins independentes, já que ela contém o termo $S_0 S_j$ (STEIN-BARANA; YOSHIDA; LÍBERO, 2004). A hamiltoniana \mathcal{H} deste aglomerado de spins é o mesmo da equação (2.4.1).

Os valores da energia média por sítio são calculados com base nas configurações de spins de toda rede. Como $\overline{S_i S_j}$ mede a correlação de curto alcance entre os vizinhos analisados (S_i e S_j), é aceitável, e é uma proposição da aproximação de Bethe-Peierls, que esta correlação seja igual à calculada no aglomerado entre o sítio central S_0 e os q primeiros vizinhos (STEIN-BARANA; YOSHIDA; LÍBERO, 2004). Assim, a equação (2.4.18), que tenta descrever a rede completa, pode ser reescrita da seguinte forma

$$\bar{E} = -\frac{J}{N} \frac{N}{2} \sum_{j=1}^q \overline{S_0 S_j} = -\frac{J}{2} q \overline{S_0 S_1}, \quad (2.4.19)$$

que, quando levada à hamiltoniana de aproximação de Bethe-Peierls para o cálculo da média, apresenta-se como

$$\bar{E} = -\frac{Jq}{2Z_a} \sum_{S_0} S_0 \sum_{S_1} S_1 e^{\beta(JS_0+\lambda)} \left(\sum_{S_2} e^{\beta(JS_0+\lambda)} \right)^{q-1},$$

e somando sobre as configurações de spins resulta em

$$\bar{E} = -\frac{Jq}{2Z_a} \sum_{S_0=-S}^S S_0 \frac{\partial F(S_0)}{\partial \gamma} F(S_0)^{q-1}, \quad (2.4.20)$$

em que $\gamma = \beta(JS_0 + \lambda)$ e $F(S_0)$ é o mesmo da equação (2.4.10). Com exceções das somas de S_0 e S_1 , as demais são idênticas a $F(S_0)$. Para o spin $S = \frac{1}{2}$, foi utilizada a equação (2.4.14), obtendo assim

$$\bar{E} = -\frac{qJ}{8} \frac{\cosh\beta\lambda - e^{-\frac{\beta J}{2}}}{\cosh\beta\lambda + e^{-\frac{\beta J}{2}}}, \quad (2.4.21)$$

que resolvida, apresenta a característica ilustrada na figura 7.

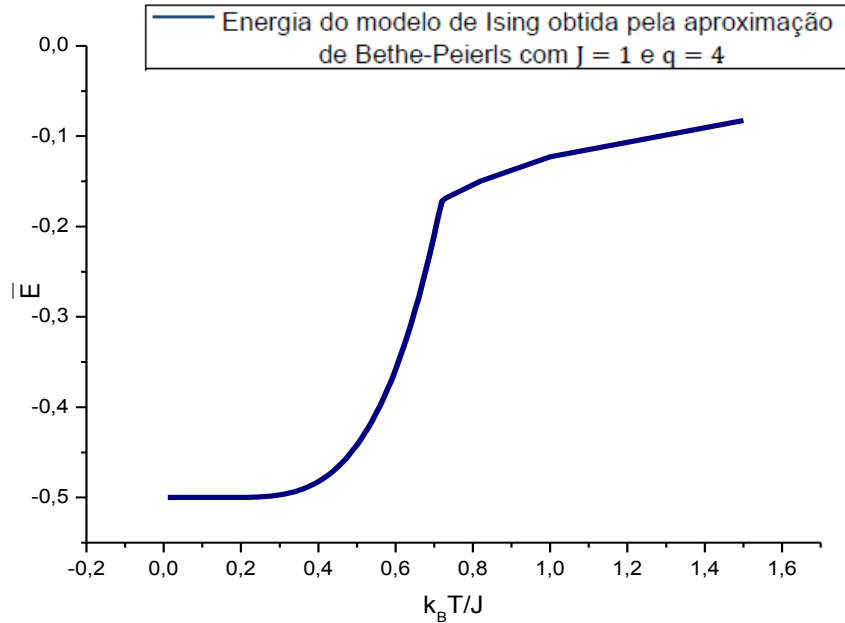


Figura 7 – Energia média para a rede quadrada de spins $\frac{1}{2}$, na aproximação de Bethe-Peierls. Como a flutuação espacial dos spins é muito pequena na região de baixa temperatura (STEIN-BARANA; YOSHIDA; LÍBERO, 2004), percebe-se pela leitura do gráfico acima que, nas proximidades das transições de fases, a variação desta energia é menor que a variação da energia média obtida pela teoria de campo médio de Weiss, descrita pelo gráfico da figura 2.

Encerrada a revisão teórica, passa-se para apresentação do estudo de um modelo de sólido magnético conhecido como modelo Blume-Capel. Estes estudos serão realizados através da TCM de Weiss apresentada na seção 2.3 deste capítulo. Vale a pena mencionar que as respostas a serem exibidas no próximo capítulo serão comparadas com alguns dos resultados apresentados na literatura.

Capítulo 3

Estudo do modelo Blume-Capel

Neste capítulo será feita uma revisão da aproximação de Weiss para estudar o modelo Blume-Capel. Como o modelo de Ising (que também foi estudado com a aproximação de campo médio de Weiss) descreve problema estatístico de muitos corpos interagentes, que dá origem a um comportamento termodinâmico de grande riqueza (SALINAS, 2005), estenderemos seu estudo para o modelo Blume-Capel.

O estudo de fenômenos críticos é fortemente baseado no estudo de modelos (MIRANDA, 2005). Conforme visto no capítulo anterior, o modelo de Ising apresenta grande importância no estudo da teoria de campo médio. A aplicação da teoria de Weiss é aproximada, constatando-se que melhorias são necessárias quando confrontada suas previsões com dados experimentais (STEIN-BARANA; YOSHIDA; LÍBERO, 2004).

Com o intuito de se estudar o fenômeno da transição de fase de um sólido magnético numa rede quadrada de spins $S = 0, \pm 1$, serão realizados os estudos das transições de fase de um sólido magnético através da teoria de campo de Weiss aplicada ao modelo Blume-Capel (BC). Espera-se que o estudo deste modelo apresente os resultados esperados, para que possam ser comparados as publicações de trabalhos já existentes.

O modelo BC é um dos modelos de spin mais estudados em mecânica estatística (LOPES, 2016), podendo ser considerado como uma extensão do modelo de Ising para spin-1 acrescido de uma interação de campo cristalino (SALINAS, 2015). O modelo BC foi resolvido pela primeira vez usando a teoria de campo médio (BLUME, 1966 e CAPEL, 1966) e aplicado em diversos sistemas físicos dentre os quais estão os sistemas magnéticos.

Por permitir resultados satisfatórios no estudo da transição de fase magnética (LOPES, 2016), aborda-se, neste capítulo, o estudo do modelo Blume-Capel através da teoria de campo médio de Weiss.

3.1 Modelo Blume-Capel

Nesta seção, serão estudadas as transições de fase de um sistema descrito pelo modelo Blume-Capel. Conforme visto no início deste capítulo, a ideia é estudá-la através da teoria de

campo médio em uma rede quadrada de spins com componentes $S = 0, \pm 1$. Este modelo é apresentado pela hamiltoniana

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + D \sum_i S_i^2 - B \sum_i S_i, \quad (3.1.1)$$

em que a primeira soma no lado direito descreve a interação entre os dois vizinhos mais próximos, enquanto o segundo e terceiro se estendem a todos os sítios. Se $S = 1$, o spin S_i pode assumir os valores $S_i = 0, \pm 1$. O parâmetro J é a interação de troca entre os spins, que pode ser F ($J > 0$) ou AF ($J < 0$) e D representa o campo cristalino que atua sobre os spins. É conveniente mencionar que o parâmetro D está intimamente ligado a simetria da rede que interfere nos níveis de energia dos spins.

Para melhor compreensão do parâmetro D , considera-se apenas um sítio do sistema. Neste caso

$$\mathcal{H} = DS_0^2, \quad (3.1.2)$$

em que S_0 pode assumir dois valores. Quando $D = 0$, a energia do spin é zero e dizemos que encontra-se em dois estados aceitáveis: $S_0 = 1$ e $S_0 = -1$ e nesta situação, alegamos que são estados degenerados.

Quando o campo cristalino é considerado, ambos níveis de energia são deslocados e passam a ter energia D . O diagrama ilustrativo da figura 8 mostra esse deslocamento.

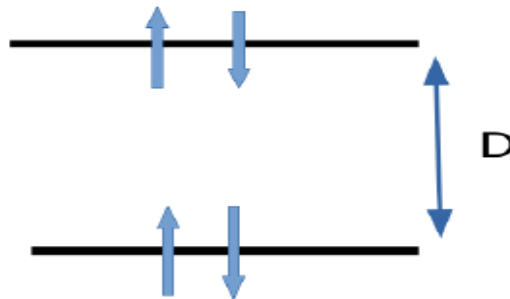


Figura 8 – Níveis de energia de spins controlados pelo campo de anisotropia D .

Quando deslocado, introduz-se um quadro de grande interesse no estudo da mecânica estatística. É relevante apontar que este campo cristalino possibilita descrever transições de

fases para-ferromagnéticas de primeira e segunda ordens por meio de diferentes métodos estendidos para o modelo Blume-Capel.

Conforme se vê mais adiante (através da fig. 14), existe também um valor crítico para o parâmetro de anisotropia D que é chamado de ponto tricrítico, onde a natureza da transição de fase do sistema muda de contínua para descontínua (LOPES, 2016), descrevendo as características das transições de fases do modelo.

3.2 Cálculo da magnetização por sítio através da teoria de campo médio de Curie-Weiss

Um importante tratamento do modelo de Ising estendido ao modelo Blume-Capel é a teoria de campo médio de Curie-Weiss. Como esta teoria despreza as flutuações espaciais de campo (ver seção 2.3), será reescrita a interação entre os pares de primeiros vizinhos $\langle i, j \rangle$ descrito em (3.1.1) pelo modelo Blume-Capel generalizado

$$\mathcal{H} = -\frac{Jq}{2N} \sum_{\langle i, j \rangle} S_i S_j + \frac{D}{N} \sum_i S_i^2 - B \sum_i S_i, \quad (3.2.1)$$

em que a primeira soma é realizada sobre todos pares de spins da rede. O fator $1/N$ é introduzido para garantir o limite termodinâmico. A segunda e a terceira soma são realizadas sobre todos os N spins da rede (SILVA, 2009). Como a interação de troca do modelo é de curto alcance, considera-se $S_i = S_j$ e reescreve-se a equação na forma

$$\mathcal{H} = -\frac{Jq}{2N} \sum_i S_i^2 + \frac{D}{N} \sum_i S_i^2 - B \sum_i S_i. \quad (3.2.2)$$

Para este trabalho, o interesse é estudar as propriedades termodinâmicas do modelo. Dessa forma, será necessário calcular a energia livre, que no formalismo canônico da mecânica estatística é a grandeza que faz a conexão com a termodinâmica. Outra quantidade de interesse é a magnetização. De acordo com os preceitos da mecânica estatística todas as grandezas físicas são obtidas a partir da função de partição. Portanto, a função de partição canônica é dada pela expressão (SILVA, 2009)

$$Z = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta \mathcal{H}}. \quad (3.2.3)$$

Substituindo a equação (3.2.2) em (3.2.3), obtém-se

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \exp \left(\frac{\beta J q}{2N} \sum_i S_i^2 - \frac{\beta D}{N} \sum_i S_i^2 + \beta B \sum_i S_i \right), \quad (3.2.4)$$

ou ainda

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \exp \left\{ \left[\left(\frac{\beta J q}{2N} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_i S_i \right]^2 - \frac{\beta D}{N} \sum_i S_i^2 + \beta B \sum_i S_i \right\}. \quad (3.2.5)$$

Para facilitar os cálculos, o termo ao quadrado da expressão (3.2.5) será reescrito através da identidade gaussiana

$$e^{a^2} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2 + 2ax} dx, \quad (3.2.6)$$

sendo $a = \left(\frac{\beta J q}{2N} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_i S_i$.

Com base no termo ao quadrado da equação (3.2.5), faz-se a seguinte mudança de variável:

$$\exp \left[\left(\frac{\beta J q}{2N} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_i S_i \right]^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(-x^2 + 2 \left(\frac{\beta J q}{2N} \right)^{\frac{1}{2}} x \sum_i S_i \right) dx. \quad (3.2.7)$$

Para que o modelo seja reescrito de modo adequado, faz-se a troca de variáveis

$$2 \left(\frac{\beta J q}{2N} \right)^{\frac{1}{2}} x = \beta J q m,$$

$$x = \left(\frac{\beta J q N}{2} \right)^{\frac{1}{2}} m, \quad (3.2.8)$$

que diferenciada apresenta a forma

$$dx = \left(\frac{\beta J q N}{2} \right)^{\frac{1}{2}} dm. \quad (3.2.9)$$

Substituindo as novas variáveis em (3.2.7), a equação apresenta a seguinte característica:

$$\begin{aligned} \exp \left[\left(\frac{\beta J q}{2N} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_i S_i \right]^2 &= \left(\frac{\beta J q N}{2\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dm \exp \left\{ - \left[\left(\frac{\beta J q N}{2} \right)^{\frac{1}{2}} m \right]^2 + 2 \left(\frac{\beta J q}{2N} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\beta J q N}{2} \right)^{\frac{1}{2}} m \sum_i S_i \right\}, \\ &= \left(\frac{\beta J q N}{2\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dm \exp \left(- \frac{\beta J q N}{2} m^2 + \beta J q m \sum_i S_i \right), \end{aligned} \quad (3.2.10)$$

que substituída pelo termo ao quadrado da equação (3.2.5), torna-se

$$Z = \left(\frac{\beta J q N}{2\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dm \sum_{S_i} \exp \left(- \frac{\beta J q N}{2} m^2 + \beta J q m \sum_i S_i - \frac{\beta D N}{N} \sum_i S_i^2 + \beta B \sum_i S_i \right). \quad (3.2.11)$$

Atribuindo valores de $S_i = 0, \pm 1$, para todos os sítios da rede, dispõe-se da função de partição

$$Z = \left(\frac{\beta J q N}{2\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dm \left\{ e^{\frac{-\beta J N q m^2}{2}} \left[e^{-\beta D} (e^{-\beta(J q m + B)} + e^{\beta(J q m + B)}) + 1 \right] \right\}, \quad (3.2.12)$$

sendo $x = e^{\beta(J q m + B)}$ e usando a definição de cosseno hiperbólico a seguir

$$\cosh(x) = \frac{e^{-x} + e^x}{2},$$

pode-se reescrever a função de partição da eq. (3.2.12) na forma

$$Z = \left(\frac{\beta J q N}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dm \left\{ e^{-\frac{\beta J N q m^2}{2}} [2e^{-\beta D} \cosh\beta(Jqm + B) + 1] \right\}. \quad (3.2.13)$$

Segundo a formulação usual da mecânica estatística, a expressão da energia livre por sítio é descrita por

$$f = -\frac{1}{\beta N} \ln Z. \quad (3.2.14)$$

Ao inserir a equação (3.2.13) na (3.2.14), tem-se

$$f = -\frac{1}{\beta N} \ln \left\{ \left(\frac{\beta J q N}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dm \left\{ e^{-\frac{\beta J N q m^2}{2}} [2e^{-\beta D} \cosh\beta(Jqm + B) + 1] \right\} \right\}, \quad (3.2.15)$$

e dessa forma, podemos escrever a equação da magnetização por sítio do sistema como

$$m = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i \rangle = \frac{-\partial f}{\partial B} = \frac{2 \sinh\beta(Jqm + B)}{2 \cosh\beta(Jqm + B) + e^{\beta D}}. \quad (3.2.16)$$

Para se comprovar o resultado da magnetização obtido nesta seção, será apresentado a seguir, o cálculo da energia livre pelo princípio variacional de Bogoliubov.

3.3 Cálculo da energia livre pelo princípio variacional de Bogoliubov aplicado para o modelo Blume-Capel para spins $0, \pm 1$

A magnetização descrita em (3.2.16) também pode ser encontrada através do cálculo da energia livre, dada pela minimização de uma função Φ , que representa o princípio variacional de Bogoliubov. Este princípio também é conhecido como desigualdade de Gibbs-Bogoliubov,

bastante utilizado no contexto da mecânica estatística. Para o caso que será tratado, esta desigualdade será calculada de modo relativamente simples. Neste contexto a hamiltoniana \mathcal{H} é de solução desconhecida e \mathcal{H}_0 é a hamiltoniana de teste parametrizada por uma solução exata conhecida. A escolha da hamiltoniana de teste para este trabalho é arbitrária, porém relevante na obtenção dos resultados (CARVALHO, 2011).

Para que se possa entender mais acerca dessa técnica, os parâmetros do modelo Blume-Capel serão interpretados como novos parâmetros, em que J , B e D são independentes. Dessa forma, descreve-se a equação a seguir pelo parâmetro variacional de Bogoliubov e utiliza-se a hamiltoniana de teste na forma,

$$\mathcal{H}_0 = D \sum_i S_i^2 - \eta \sum_i S_i, \quad (3.3.1)$$

onde as variáveis S_i tomam os valores $-1, 0, 1$ e $\frac{D}{J} > 0$ é o parâmetro de anisotropia do sólido analisado. Para a hamiltoniana acima, η é considerado como o parâmetro variacional do sistema, que tem por finalidade obter a solução aproximada para a energia livre do problema. Abaixo, descreve-se a função de partição da hamiltoniana como

$$Z_0 = \sum_{\{s\}} e^{-\beta(D \sum_i S_i^2 - \eta \sum_i S_i)}. \quad (3.3.2)$$

Por serem spins não interagentes, podemos reescrever o produtório de Z_0 como sendo

$$Z_0 = (Z_{00})^N, \quad (3.3.3)$$

em que

$$Z_{00} = e^{-\beta D(1)^2 + \beta \eta(1)} + e^{-\beta D(0)^2 + \beta \eta(0)} + e^{-\beta D(-1)^2 + \beta \eta(-1)} = e^{-\beta D} (e^{\beta \eta} + e^{-\beta \eta}) + 1. \quad (3.3.4)$$

Assim, a função de partição de tentativa ficaria melhor representada na forma

$$Z_{00} = 2e^{-\beta D} \cosh(\beta \eta) + 1,$$

e

$$Z_0 = [2e^{-\beta D} \cosh(\beta \eta) + 1]^N. \quad (3.3.5)$$

Para escrever a equação da magnetização através da hamiltoniana de teste \mathcal{H}_0 , faz-se o uso da expressão da energia livre descrita pela equação (3.2.14) em termos da função de partição de (3.3.5). Como η é o parâmetro variacional do sistema, escreve-se a equação da magnetização m através da derivada da eq. (3.2.14) em função deste parâmetro ($m = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln(Z_{00})}{\partial \eta}$). Assim, a magnetização por spin, obtida pela hamiltoniana de teste é dada por

$$m = \frac{2\sinh(\beta \eta)}{2\cosh(\beta \eta) + e^{\beta D}}. \quad (3.3.6)$$

Com intuito de se encontrar o valor de campo médio da hamiltoniana do modelo proposto, realizou-se o cálculo da energia livre através do teorema variacional de Bogoliubov (SALINAS, 2005). Entende-se que estes princípios propõem uma solução aproximada dada pela minimização de Φ , que é definida por

$$\Phi = F_0 + \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0, \quad (3.3.7)$$

em que Φ também pode ser representado através da soma da energia $F_0 = -k_B T \ln(Z_{00})$ com a média da diferença das hamiltonianas $\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0$.

Dessa forma pode-se definir a energia livre como

$$F_0 = -k_B T \ln(2e^{-\beta D} \cosh(\beta \eta) + 1), \quad (3.3.8)$$

e

$$\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 = \sum_{\{s\}} S e^{-\beta \mathcal{H}_0} \left(\sum_{\{S\}} e^{-\beta \mathcal{H}_0} \right)^{-1} =$$

$$\begin{aligned} \left(\sum_{\{S\}} e^{-\beta \mathcal{H}_0} \right)^{-1} \sum_{\{S\}} \left(-J \sum_i S_i S_{i+1} + D \sum_i S_i^2 - B \sum_i S_i - D \sum_i S_i^2 + \eta \sum_i S_i \right) e^{-\beta \mathcal{H}_0} = \\ \left(\sum_{\{S\}} e^{-\beta \mathcal{H}_0} \right)^{-1} \sum_{\{S\}} \left(-J \sum_i S_i S_{i+1} - B \sum_i S_i + \eta \sum_i S_i \right) e^{-\beta \mathcal{H}_0}, \end{aligned} \quad (3.3.9)$$

onde em (3.3.8) insere-se do lado direito a equação (3.3.5) e, em (3.3.9) se utiliza a definição de média da mecânica estatística, para solucionar parte de nosso problema. Como se está levando em conta a magnetização do sítio central i , define-se

$$\sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j,$$

da função (3.1.1) como

$$\sum_i S_i S_{i+1}.$$

A teoria de Weiss supõe que a flutuação de cada spin pode ser escrita na forma $\delta S_i = S_i - \bar{S}_i$. Desprezando os termos δS_i , tem-se

$$\left\langle \sum_i S_i S_{i+1} \right\rangle = \frac{qNm^2}{2}. \quad (3.3.10)$$

Assim, pode-se obter

$$\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 = -\frac{JqN}{2} m^2 + N(\eta - B)m, \quad (3.3.11)$$

onde, $\left\langle \sum_i S_i \right\rangle = Nm$.

Logo, utilizando a equação (3.3.7), a energia livre pode ser reescrita como

$$\Phi = -k_B T \ln(2e^{-\beta D} \cosh(\beta \eta) + 1) + Nm(\eta - B) - \frac{JqN}{2} m^2.$$

Minimizando Φ , através de $\frac{\partial \Phi}{\partial \eta} = 0$, tem-se

$$-\frac{1N}{\beta} \frac{\partial \ln(Z_{00})}{\partial \eta} + Nm + N\eta \frac{\partial m}{\partial \eta} - BN \frac{\partial m}{\partial \eta} - JqNm \frac{\partial m}{\partial \eta} = 0,$$

com $m = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln(Z_{00})}{\partial \eta}$.

Assim, a minimização em Φ permite que se obtenha

$$\eta = Jqm + B, \tag{3.3.12}$$

que inserida, novamente em (3.3.6), fornece a magnetização esperada

$$m = \frac{2\sinh\beta(Jqm + B)}{2\cosh\beta(Jqm + B) + e^{\beta D}}, \tag{3.3.13}$$

e inicialmente apresentada em (3.2.16).

Para cada temperatura T encontramos o valor da magnetização m . A figura 9 mostra uma solução aproximada do modelo Blume-Capel para a curva de magnetização em relação a temperatura na aproximação de Weiss.

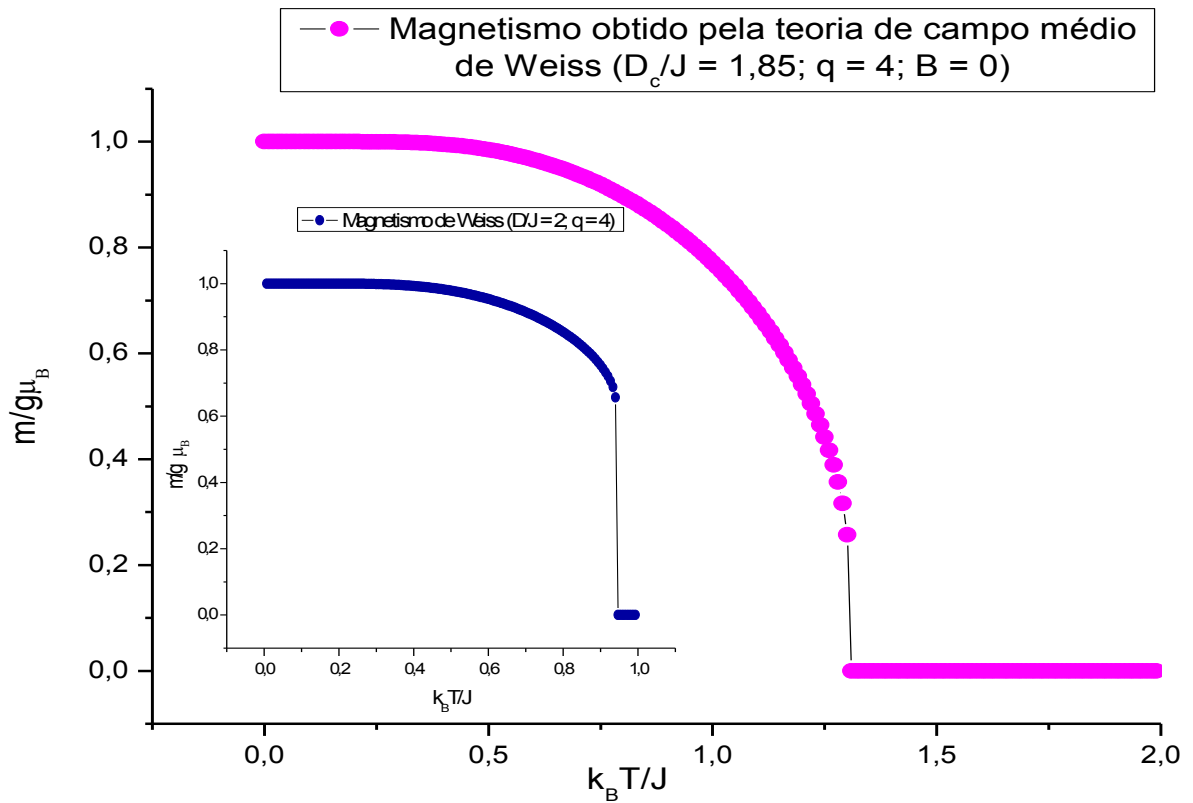


Figura 9 – Valores da magnetização m calculados para uma rede quadrada de spins $S = -1, 0, 1$, com $\frac{D_c}{J} = 1,85$ e $J = 1$ (curva magenta). A temperatura aproximada para a transição de fase se deu a $\frac{k_B T_{ic}^W}{J} \approx 1,33$. No detalhe, observa-se uma transição de fase de primeira ordem para a mesma configuração de rede utilizando $\frac{D}{J} = 2,0$.

É importante ressaltar que, para a solução da equação (3.3.13) foram encontrados resultados de m menores que zero. Apesar de serem valores aceitáveis pelo sistema físico, foram desconsiderados no gráfico da fig. 9, respostas para $m < 0$. Será dada ênfase a essas e outras discussões a posteriori, através do potencial de Landau.

Com relação a transições de fase do sistema, nota-se através da curva magenta uma transição de fase contínua que ocorre a uma temperatura tricrítica $\frac{k_B T_{ic}}{J} \approx 1,33$ obtida a um parâmetro $\frac{D_c}{J} = 1,85$. A escolha por este parâmetro se deve à análise da transição de fase espontânea, obtida pela resolução da eq. (3.5.3) com variável $B' = 0$, descrita através do gráfico da fig. 13. Nessa temperatura o sistema sofre uma transição de segunda ordem que é caracterizada da seguinte forma: em um sistema ferromagnético, sem campo externo, à medida que se aumenta a temperatura do sistema a magnetização espontânea vai diminuindo até que é alcançada uma certa temperatura crítica e a magnetização vai a zero. Há uma quebra de simetria nesse momento (figura 10), o que caracteriza uma transição de fase contínua (SIMÕES, 2017).

Já a curva azul no detalhe da fig. 9, descreve através da fase descontínua, uma transição de fase de primeira ordem obtida a um parâmetro de teste $\frac{D}{J} = 2,0$. Através da temperatura crítica desta transição de fase, é possível distinguir melhor a fase para-ferromagnética na qual o sistema se encontra.

As discussões que surgirão mais à frente, evidenciarão que, para valores de $\frac{D}{J}$ acima de $\frac{D_c}{J}$, teremos uma certa descontinuidade na curva de magnetização, caracterizada pelas transições de fase de primeira ordem.

Para a completeza das análises aqui discutidas, serão mostrados através da figura 10, todos os valores da magnetização m em função das temperaturas, donde apenas duas curvas são válidas. A escolha delas depende da análise da energia livre de Landau nas vizinhanças do ponto crítico a ser apresentada na próxima seção.

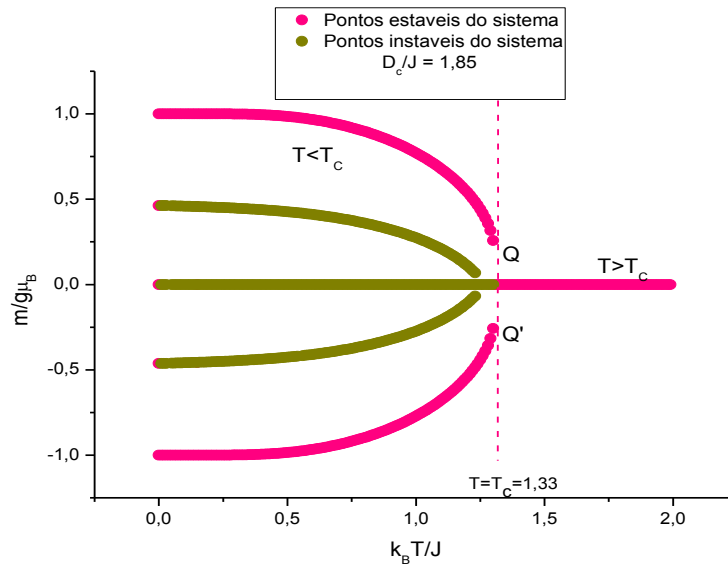


Figura 10 – O gráfico mostra todos os valores da magnetização em função da temperatura. As curvas denotam as raízes positivas, negativas e nula, encontradas através da resolução da equação 3.3.13, para uma rede de spins $-1, 0, 1$ com número de coordenação $q = 4$ a um campo B nulo e $\frac{D}{J} = \frac{D_c}{J}$.

3.4 Energia livre de Landau

A teoria de Landau para as transições de fases contínuas baseia-se na introdução do conceito do parâmetro de ordem e no estabelecimento de uma expansão da energia livre em termos dos invariantes dessa grandeza. Conforme visto na seção anterior, exige-se que a energia livre seja uma função analítica nas vizinhanças da criticalidade (SALINAS, 2005). Vale

ressaltar que as transições de fases contínuas são caracterizadas pela divergência ou descontinuidade nas segundas derivadas da energia livre na região crítica. Como exemplo, as segundas derivadas da energia livre de Helmholtz, dão o calor específico (ou seja o calor específico com relação a um volume constante) e a susceptibilidade (SIMÕES, 2017).

Muitas vezes é possível definir o parâmetro de ordem associado a uma determinada transição de diferentes maneiras. Nesta seção será feito uso dos cálculos da teoria de Landau para que se encontrem os valores da energia livre dos spins a campo nulo. A expressão desta energia pode ser escrita na forma (SALINAS, 2005)

$$F(T, B) = \Phi|_{\eta=Jqm+B} = -Nk_B T \ln[2e^{-\beta D} \cosh(\beta(Jqm + B)) + 1] + \frac{JqN}{2} m^2. \quad (3.4.1)$$

Seguindo a teoria de Landau, a expressão da energia livre foi expandida em torno do parâmetro de ordem m . Próximo à transição de fase ($m \rightarrow 0$) a expansão assume a forma

$$F(T, H, m) = F_0(T) - Hm + A(T)m^2 + B(T)m^4 \dots \quad (3.4.2)$$

Aqui, será denominado H como o valor do campo externo (nulo) e, A e B constantes positivas da equação.

Deste modo, expande-se a expressão apresentada em (3.4.1) em termos das variáveis de F . Através do desenvolvimento de alguns cálculos chegamos a energia livre de Landau $F - F_0$. Esta energia representa o potencial termodinâmico dos spins da rede $-1,0,1$, e pode ser descrita pela equação

$$\begin{aligned} F - F_0 = & m^2 \left[-NkT \frac{(\beta j q)^2}{2} \left(\frac{2e^{-\beta D}}{1 + 2e^{-\beta D}} \right) + \frac{JqN}{2} \right] \\ & + m^4 \left[-NkT \frac{(\beta j q)^4}{8} \left(\frac{2e^{-\beta D}}{1 + 2e^{-\beta D}} \right) \left(\frac{1}{3} - \left(\frac{2e^{-\beta D}}{1 + 2e^{-\beta D}} \right) \right) \right] \\ & + m^6 \left[-NkT \frac{(\beta j q)^6}{24} \left(\frac{2e^{-\beta D}}{1 + 2e^{-\beta D}} \right) \left(\frac{1}{30} - \frac{1}{2} \left(\frac{2e^{-\beta D}}{1 + 2e^{-\beta D}} \right) \right) + \left(\frac{2e^{-\beta D}}{1 + 2e^{-\beta D}} \right)^2 \right]. \end{aligned} \quad (3.4.3)$$

Para acompanhar os detalhes do desenvolvimento da equação, sugere-se ao leitor que veja o apêndice E do capítulo 7 deste trabalho.

A equação $F - F_0$ representa a parte singular do potencial termodinâmico de Landau (SALINAS, 2005) que descreve um funcional do parâmetro de ordem, cujo mínimo operacional nos dá o valor de equilíbrio do parâmetro de ordem e da energia do sistema (MIRANDA, 2005), deduzido nesta seção para a teoria de campo médio de Weiss. Através da fig.11, obtém-se o valor aproximado da transição de fase do sólido magnético estudado pela teoria de Weiss.

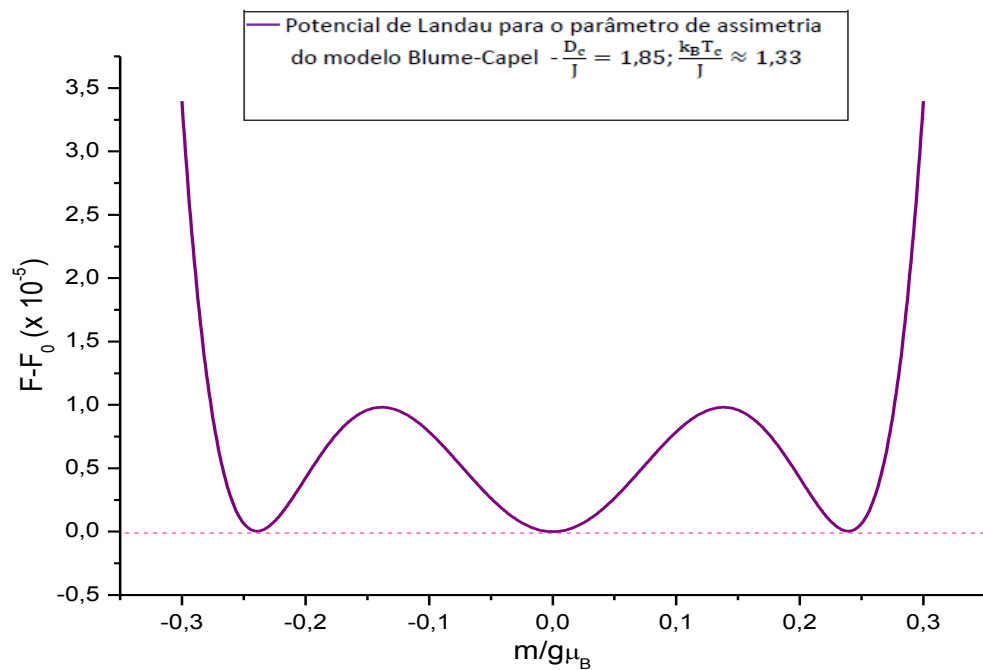


Figura 11 – Potencial termodinâmico de Landau em função da magnetização da rede de spins $-1, 0, 1$ com coordenação $q = 4$. As duas curvas com concavidades voltadas para baixo (ponto de máximo local) mostram que o sistema se torna bastante instável a uma magnetização aproximada de $\pm 0,14$. No entanto, as curvas que apresentam concavidades voltadas para cima revelam que as raízes aproximadas da magnetização $\frac{m}{g\mu_B}$, obtida à $\frac{k_B T_c}{J} \approx 1,33$, ocorrem para valores iguais a $0, \pm 0,24$.

Os pontos de mínimos locais do potencial de Landau, apresentados na figura 11, apontam três soluções para a magnetização $\frac{m}{g\mu_B}$, sendo duas delas não nulas e uma igual a zero. Os resultados confirmam, através das raízes da solução gráfica, que a transição de fase para-ferromagnética do sistema ocorre nas proximidades de $\frac{k_B T_c}{J} \approx 1,33$, utilizando um parâmetro de teste $\frac{D_c}{J} = 1,85$.

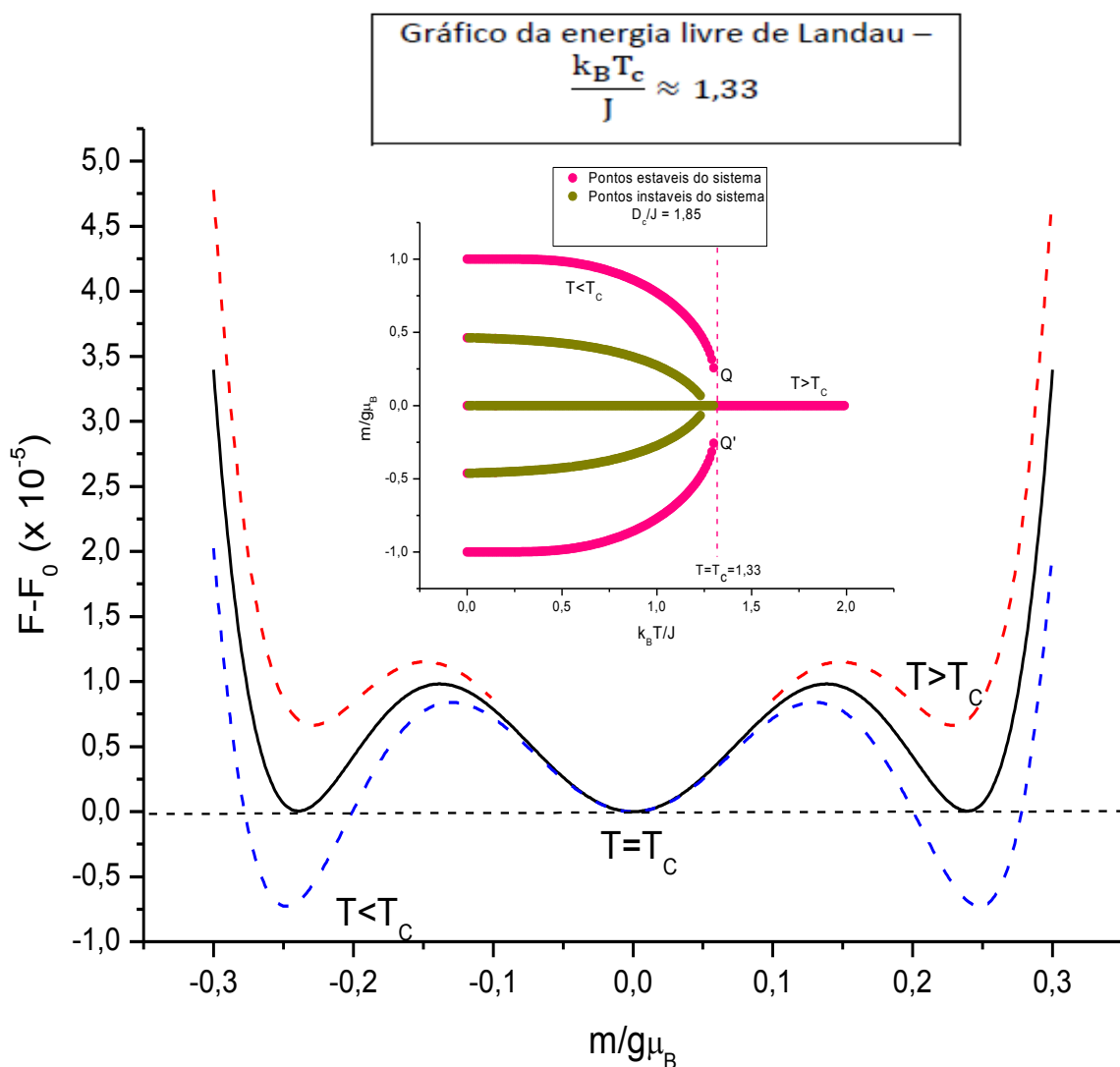


Figura 12 – A curva do gráfico maior da figura acima, que se apresenta na cor preta, mostra que as raízes da eq. (3.4.2) ocorrem para $m = 0, m_+$ e m_- . Os pontos Q e Q' do gráfico $\frac{m}{g\mu_B}$ contra $\frac{k_B T}{J}$ evidenciam que a transição de fase ocorre a $\frac{k_B T_c^W}{J} \approx 1,33$. A curva tracejada de cor azul do gráfico $(F - F_0)$ contra $\frac{m}{g\mu_B}$ mostra que, quando $\frac{k_B T}{J} < \frac{k_B T_c^W}{J}$, existem cinco soluções possíveis para o sistema. Para $\frac{k_B T}{J} > \frac{k_B T_c^W}{J}$ a solução gráfica apresenta apenas a fase paramagnética do sistema (curva tracejada vermelha do gráfico $(F - F_0)$ contra $\frac{m}{g\mu_B}$).

Os valores da magnetização apresentados na figura 11, podem ser confirmados através das comparações dos gráficos da figura 12. Observamos através dos pontos Q e Q' do gráfico $\frac{m}{g\mu_B}$ contra $\frac{k_B T}{J}$ (no detalhe) que a transição de fase do sólido ocorreu à mesma magnetização descrita pelos mínimos funcionais do gráfico $(F - F_0)$ contra $\frac{m}{g\mu_B}$ do potencial de Landau (curva contínua preta).

3.5 Transições de fase e fenômenos críticos

Conforme visto no final da seção anterior, a fenomenologia de Landau permite interpretar as transições de fases nas vizinhanças dos pontos críticos e multicríticos do sistema. Para determinar algumas temperaturas críticas do modelo com parâmetros de testes $\frac{D}{J}$ diferentes de 1,85, a equação (3.4.2) será reescrita na forma

$$F_{(T,H=0,m)} = A' + B'm^2 + C'm^4 + D'm^6, \quad (3.5.1)$$

em que analisou-se, num primeiro momento, os valores da variável B' . Para o estudo da transição de fase, é interessante se igualar essa variável a zero, pois assim se pode obter os valores da temperatura crítica $\frac{k_B T_c}{J}$ do modelo Blume-Capel, utilizando para a equação, diferentes valores de parâmetros $\frac{D}{J}$.

Da equação (3.4.3) e (3.5.1) faremos

$$\begin{aligned} A' &= F_0 = [-NK_B T \ln(1 + 2e^{-\beta D})], \\ B' &= \left[-NK_B T \frac{(\beta j q)^2}{2} \left(\frac{2e^{-\beta D}}{2e^{-\beta D} + 1} \right) + \frac{JqN}{2} \right], \\ C' &= \left[-NK_B T \frac{(\beta j q)^4}{8} \left(\frac{2e^{-\beta D}}{2e^{-\beta D} + 1} \right) \left(\frac{1}{3} - \left(\frac{2e^{-\beta D}}{2e^{-\beta D} + 1} \right) \right) \right] e \\ D' &= \left[-NK_B T \frac{(\beta j q)^6}{24} \left(\frac{2e^{-\beta D}}{2e^{-\beta D} + 1} \right) \left(\frac{1}{30} - \frac{1}{2} \left(\frac{2e^{-\beta D}}{2e^{-\beta D} + 1} \right) + \left(\frac{2e^{-\beta D}}{2e^{-\beta D} + 1} \right)^2 \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.5.2).$$

Para facilitar os cálculos a seguir, as variáveis já conhecidas serão definidas por variáveis auxiliares

$$d = \frac{D}{J}; \quad t = \frac{k_B T}{J} = \frac{1}{\beta J}; \quad \frac{d}{t} = D\beta \quad e \quad u = \frac{2e^{-\beta D}}{2e^{-\beta D} + 1}.$$

Assim, (3.5.2) se apresenta da seguinte forma

$$\begin{aligned}
 A' &= [-Nk_B T \ln(2e^{-\beta D} + 1)], \\
 B' &= -NJ \left[\frac{q^2}{2t} u + \frac{q}{2} \right], \\
 C' &= -NJ \left[\frac{q^4}{8t^3} u \left(\frac{1}{3} - u \right) \right] e \\
 D' &= -NJ \left[\frac{q^6}{24t^5} u \left(\frac{1}{30} - \frac{1}{2} u + u^2 \right) \right].
 \end{aligned} \tag{3.5.3}$$

Em concordância com a descrição do segundo parágrafo desta seção, pode-se verificar que, para que haja uma transição de fase espontânea próxima à magnetização nula é conveniente se estudar $B' = 0$. Assim, pode-se reescrever o parâmetro de assimetria do modelo Blume-Capel na forma

$$d = t \ln \left(\frac{2q}{t} - 2 \right), \tag{3.5.4}$$

donde

$$y = t e y = \frac{2q}{e^{\frac{d}{t}} + 2}. \tag{3.5.5}$$

Para mostrar como foi definido o parâmetro crítico $\frac{D}{J}$ da figura 11, faz-se a leitura do gráfico apresentado na figura 13, obtido pela intersecção das funções de (3.5.5). As intersecções obtidas pelo método do gráfico foram determinantes para se encontrar o ponto tricrítico do sistema.

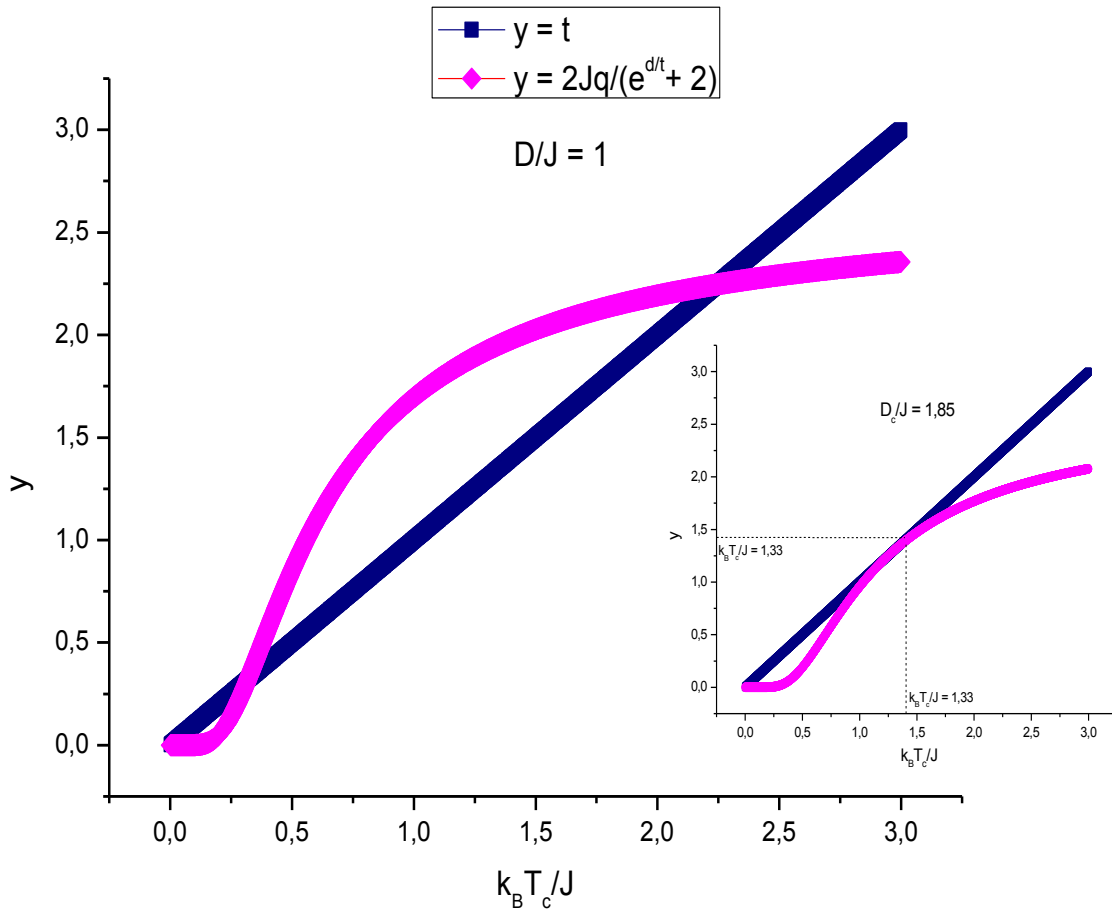


Figura 13 – Os gráficos da figura mostram os valores distintos do parâmetro de anisotropia $\frac{D}{J}$ obtido através de diferentes temperaturas $\frac{k_B T}{J}$. Observa-se através de $\frac{D_c}{J} = 1,85$ que a transição de fase se dá a uma temperatura tricrítica aproximada de $\frac{k_B T_{tc}^W}{J} \approx 1,33$.

Para se fazer uma análise e se verificar o valor de $\frac{k_B T_c^W}{J}$ da figura 13, fizemos $B' = 0$ e $C' = 0$. Assim, se $B' = 0$, temos $u = \frac{t}{q}$ e, se $C' = 0$ temos, $\frac{q^4 u}{8t^3} \left(\frac{1}{3} - u \right) = 0$, donde $u = \frac{1}{3}$. Pela igualdade de u pode-se obter a temperatura crítica do sistema, com o número de coordenação $q = 4$

$$t = \frac{k_B T}{J} = \frac{q}{3}. \quad (3.5.6)$$

A figura 14 mostra as temperaturas críticas de $\frac{k_B T_c}{J}$ nas quais ocorrem as transições de fases de segunda ordem. Os resultados foram obtidos por meio da intersecção dos pontos do gráfico da figura 13.

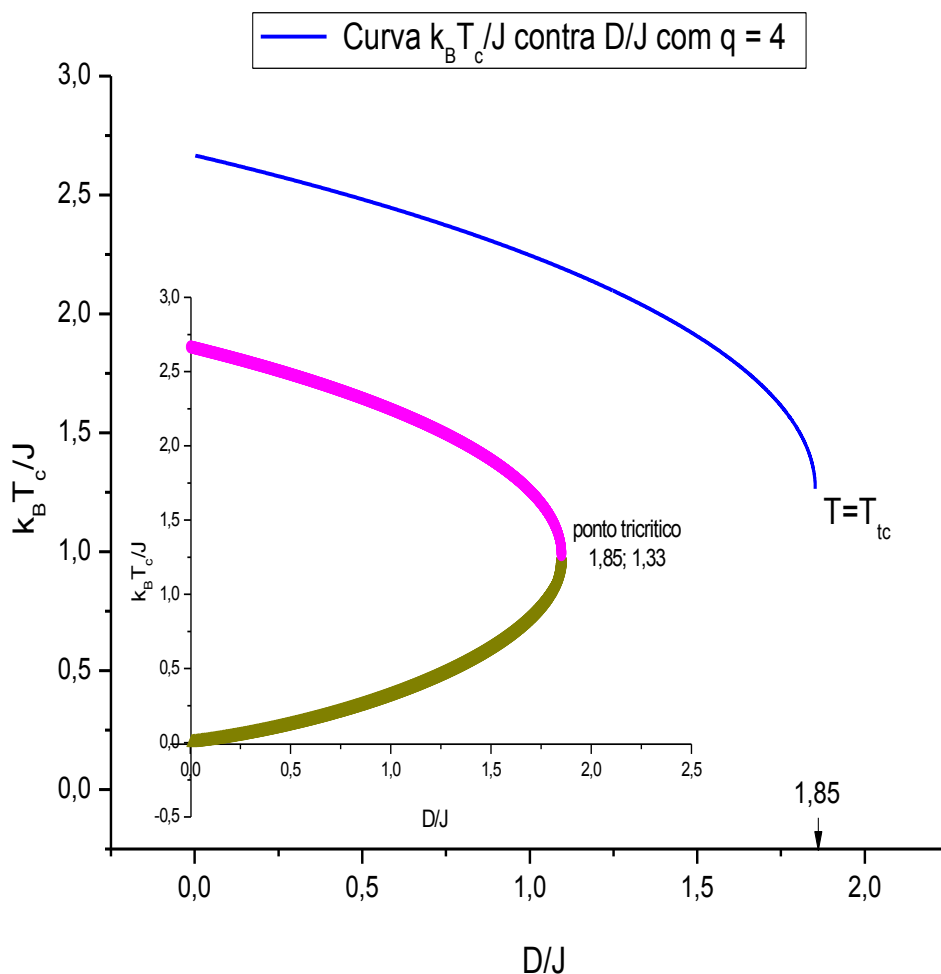


Figura 14 – Os valores encontrados pelas intersecções das equações (3.5.5) determinaram o gráfico $\frac{k_B T_c}{J}$ contra $\frac{D}{J}$. O ponto tricrítico ocorre com A' e B' iguais a zero e $D' > 0$. O intervalo destacado com a cor magenta (no detalhe) representa a transição de fase de segunda ordem do modelo Blume-Capel, que ocorre também com $B' = 0$ e $D' > 0$.

A figura 14 revela os valores de todas as temperaturas críticas possíveis para as transições de fase de segunda ordem do modelo. Estas transições ocorrem apenas para temperaturas igual ou maiores que T_{tc} . Os valores de cada temperatura crítica e seus respectivos parâmetros de testes $\frac{D}{J}$ são facilmente identificados através da leitura do gráfico maior descrito pela figura acima (linha cheia azul).

Para ilustrar ainda mais acerca dos fenômenos críticos estudados e confirmar os resultados aqui obtidos, será demonstrada pela figura 15, a característica da curva contínua de magnetização que descreve a equação (3.3.13) para o parâmetro de teste $\frac{D}{J} = 0$.

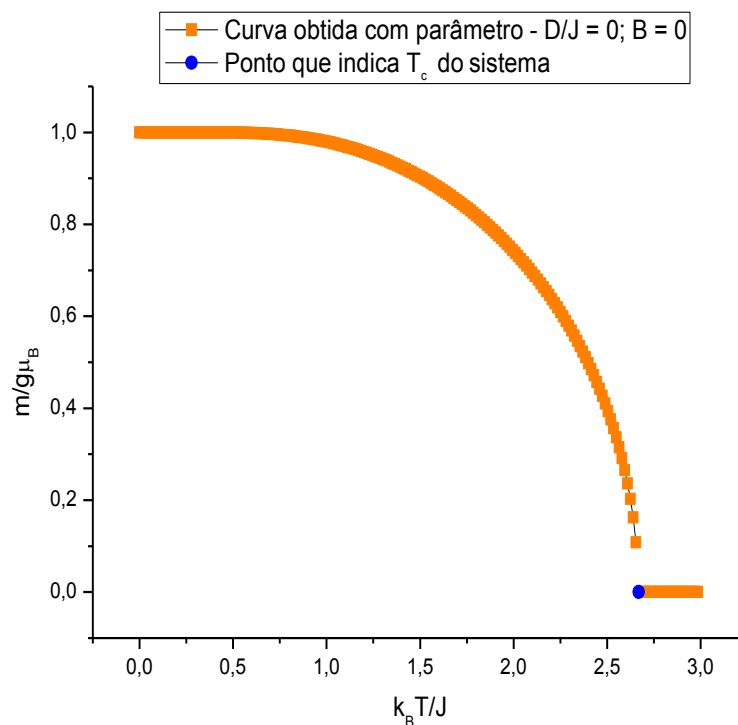


Figura 15 – A curva contínua do gráfico $\frac{m}{g\mu_B}$ contra $\frac{k_B T}{J}$ identifica através do ponto azul que a transição de fase para-ferromagnética do modelo, com $\frac{D}{J} = 0$, se dá nas proximidades de 2,670.

O gráfico da figura 15 acima evidencia que a temperatura crítica do sistema, com parâmetro de teste $\frac{D}{J} = 0$, se dá a uma temperatura de $\frac{k_B T_c}{J} \approx 2,670$. Esses valores foram descritos de modo bastante eficiente através do gráfico $\frac{k_B T_c}{J}$ contra $\frac{D}{J}$ disposto na figura 14. Para complementar o estudo da transição de fase para-ferromagnética do sistema, analisou-se também a transição de fase de primeira ordem do modelo.

Como na região dos pontos críticos os gráficos apresentam comportamentos semelhantes, identifica-se a ordem das transições de fase através do comportamento do parâmetro de ordem do sistema. Se esse mudar de forma contínua entre uma fase e outra, a transição é de segunda ordem, mas se for descontínua, a transição será de primeira ordem.

Conforme revelam estes estudos, a classificação da transição de fase do modelo BC, motivada pela teoria de campo de Weiss, fornece respostas adequadas através do estudo da energia de Landau. Ao se observar o gráfico $\frac{k_B T_c}{J}$ contra $\frac{D}{J}$ da figura 14, verifica-se que as transições de fase de primeira ordem ocorrem a temperaturas menores que T_c com parâmetros de assimetria $\frac{D}{J}$ maiores que $\frac{D_c}{J}$.

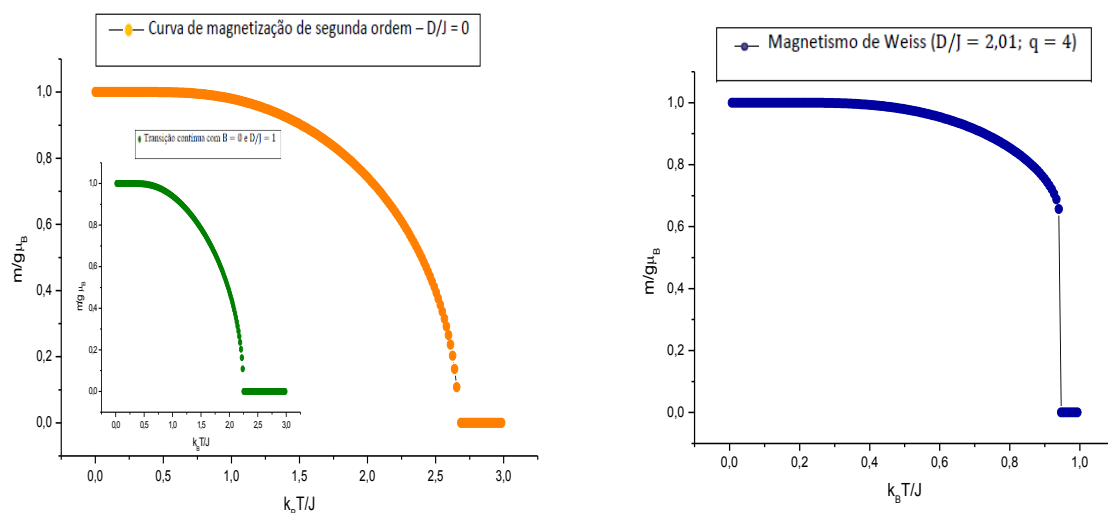


Figura 16 – Conforme mostram os gráficos acima, o estudo da hamiltoniana estendida para o modelo Blume-Capel apresenta resultados de transições de fase de primeira e segunda ordem. Nota-se que para $\frac{D}{J} = 0$ (linha com pontos laranjas) e $\frac{D}{J} = 1$ (linha com pontos verdes) a transição de fase é contínua, e apresenta estado crítico a uma temperatura que pode ser bem identificada. A descontinuidade do gráfico azul a direita revela a coexistência de $\frac{m}{g\mu_B}$ nas proximidades da temperatura crítica. A identificação da temperatura de transição de fase, com $\frac{D}{J} = 2,01$, é melhor descrita pelo potencial termodinâmico de Landau.

A respeito da transição de fase de primeira ordem, são apresentados através do gráfico a esquerda da fig. 17, todos os valores da magnetização do modelo Blume-Capel aplicado a teoria de campo de Weiss, com $\frac{D}{J} = 2,01$. Os valores de m da equação (3.3.13) foram definidos junto as temperaturas correspondentes.

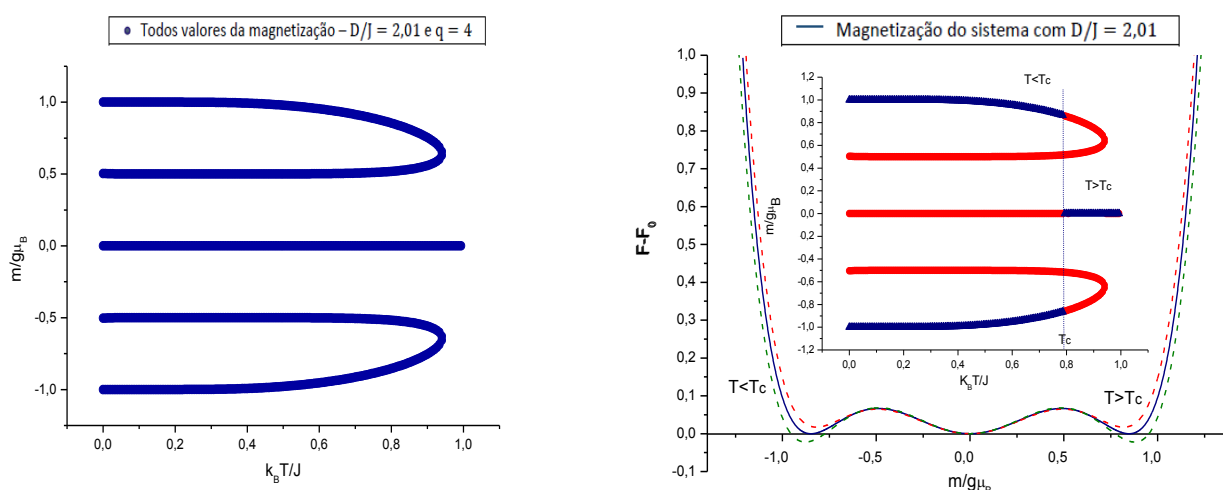


Figura 17 – A curva do gráfico $(F - F_0)$ contra $\frac{m}{g\mu_B}$ à direita, mostra através da linha cheia azul que a transição de fase do sistema se dá a $m = 0$ e $m \approx \pm 0,8468$. A linha vertical de cor preta do gráfico $\frac{m}{g\mu_B}$ contra $\frac{k_B T}{J}$ no detalhe à direita, evidencia que a transição de fase do sistema é de primeira ordem e ocorre a uma temperatura $\frac{k_B T_c}{J} \approx 0,79$.

Para se determinar a temperatura crítica T_c do modelo BC, a parâmetro de teste $\frac{D}{J} = 2,01$, recorre-se aos cálculos da energia livre de Landau. O potencial de Landau identificou através de seus mínimos locais (linha cheia azul do gráfico a direita), que o valor desta temperatura, para a rede de spins $S = 0, \pm 1$ com o número de coordenação $q = 4$, ocorre à $T_c \approx 0,79$. Este valor de temperatura revelou três soluções para as magnetizações do sistema, sendo que uma das soluções descreve $m = 0$ e duas soluções identificam $m \neq 0$.

Desse modo, a curva de magnetização do gráfico à direita da figura 17 deve se apresentar na forma descrita pela figura 18.

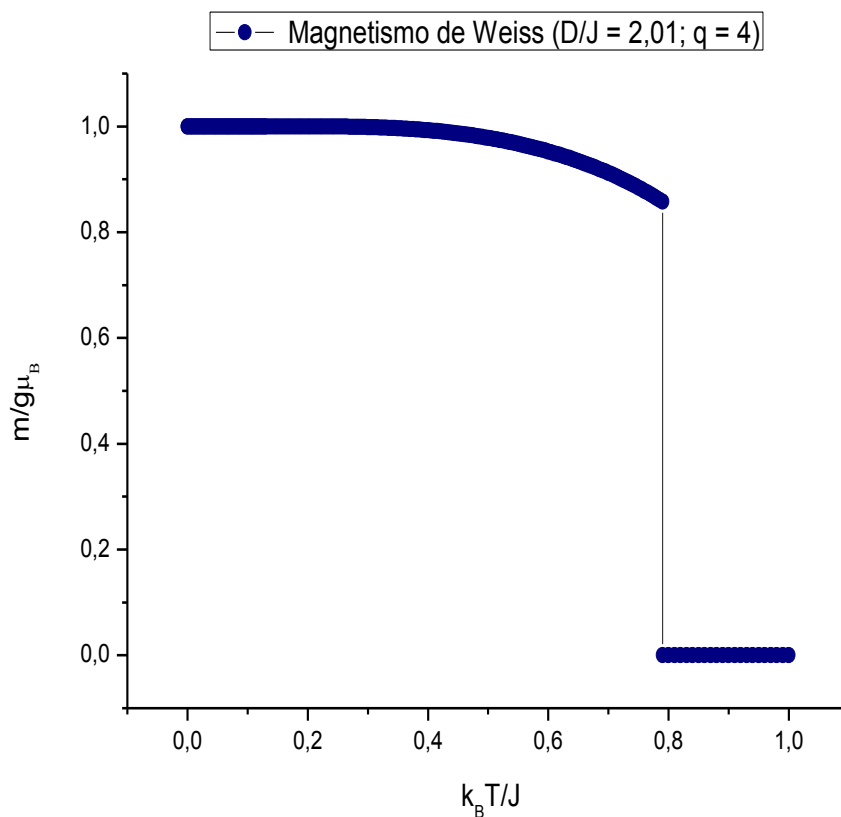


Figura 18 – Magnetização $\frac{m}{g\mu_B}$ da rede quadrada de spins $S = -1, 0, 1$ e $J = 1$. A temperatura aproximada para a transição de fase de primeira ordem se deu a $\frac{k_B T_c}{J} = 0,79$.

Assim, encerra-se os estudos das transições de fases do sólido analisado, de modo a evidenciar que o parâmetro de anisotropia $\frac{D}{J}$ tem um papel fundamental para o estudo de fenômenos críticos do modelo Blume-Capel efetuada com a aproximação de Weiss .

3.6 Cálculos da energia média, da susceptibilidade magnética e do calor específico estendido para o modelo Blume-Capel através da aproximação de Weiss

Outra quantidade importante a ser estudada é a energia média do sistema. O cálculo da energia média \bar{E} por sítio, da rede de spins $-1, 0, 1$ se dá por meio da equação

$$\bar{E} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z, \quad (3.6.1)$$

em que a função de partição Z é dada pela equação (3.3.5), sendo $\eta = Jqm + B$. A resolução da equação acima nos leva a obter o valor esperado na forma

$$\bar{E} = -\frac{JqNm^2}{2} + \frac{2D \cosh \beta(Jqm)}{2 \cosh \beta(Jqm) + e^{\beta D}}, \quad (3.6.2)$$

com $B = 0$.

Para o parâmetro de teste $\frac{D}{J} = 0$, a energia média \bar{E} obtida pela aproximação de Weiss fornece os resultados apresentados através do método do gráfico a seguir.

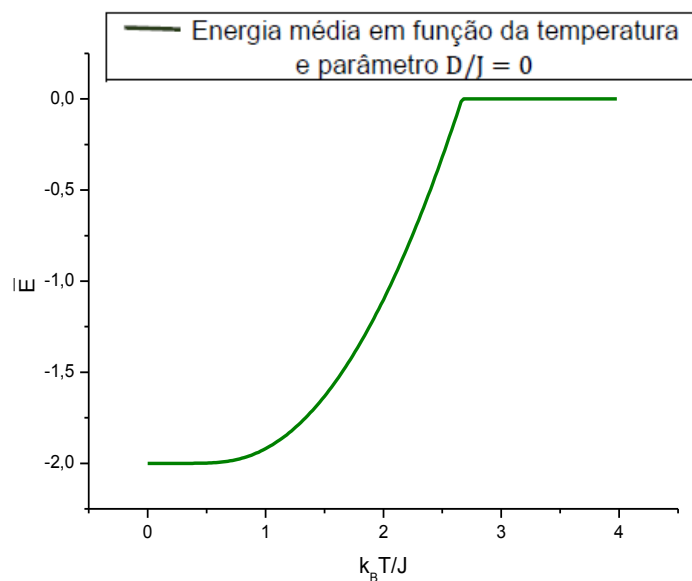


Figura 19 – Energia média por sítio da rede de spins $-1, 0, 1$ com coordenação $q = 4$. Com o parâmetro $\frac{D}{J} = 0$ a curva apresenta uma linha de transição bem definida.

Observa-se através da figura 19 que para temperaturas maiores que $\frac{k_B T_c}{J} \approx 2,670$ os valores da energia média \bar{E} tornam-se nulos.

Ao se atribuir valores maiores que zero para o parâmetro de teste $\frac{D}{J}$ à equação (3.6.2), observa-se através da figura 20 um aumento dos estados de energia média do sistema. É conveniente lembrar que, os parâmetros de testes $\frac{D}{J}$ escolhidos para os cálculos que resultaram nas curvas de energia dos gráficos da figura 20, são iguais a 1,85 e 2,01, e os resultados de m introduzido na equação da energia média \bar{E} advém dos resultados obtidos das seções anteriores. Assim, os resultados das energias médias descritos através dos parâmetros $\frac{D}{J} > 0$ são apresentados através da figura a seguir.

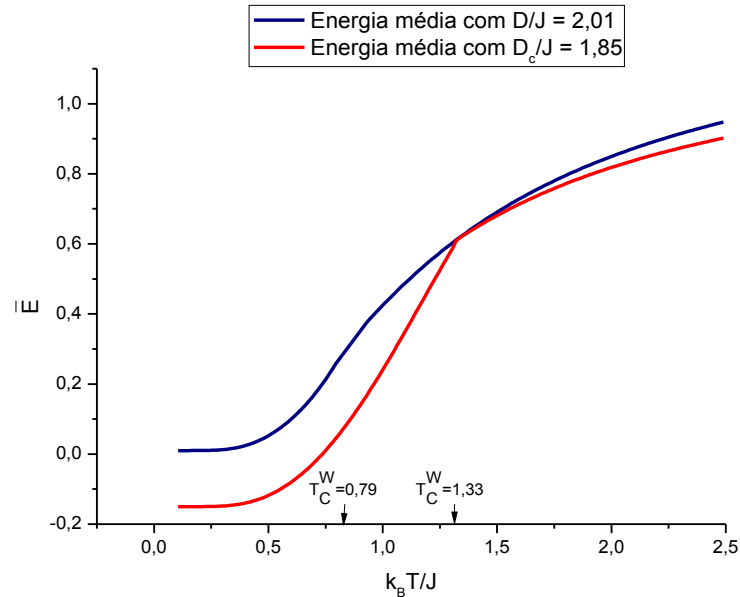


Figura 20 – Energia média por sítio da rede de spins $-1, 0, 1$ com $q = 4$. Para a realização do gráfico foram elegidos valores de $\frac{D_c}{J} = \frac{D}{J} = 1,85$ (linha vermelha) e $\frac{D}{J} = 2,01$ (linha azul).

Ao se diferenciar a equação (3.3.13), obtém-se a equação da susceptibilidade magnética χ na forma

$$\chi = \frac{2\beta[e^{\beta D} \cosh\beta(Jqm + B) + 2]}{[2\cosh\beta(Jqm + B) + e^{\beta D}]^2}, \quad (3.6.3)$$

com $\beta = \frac{1}{k_B T}$.

O gráfico da susceptibilidade magnética mostrado na figura 21, revela valores de $\frac{\chi}{(g\mu_B)^2}$ para cada valor de temperatura obtidos através do parâmetro de teste $\frac{D}{J} = 0$.

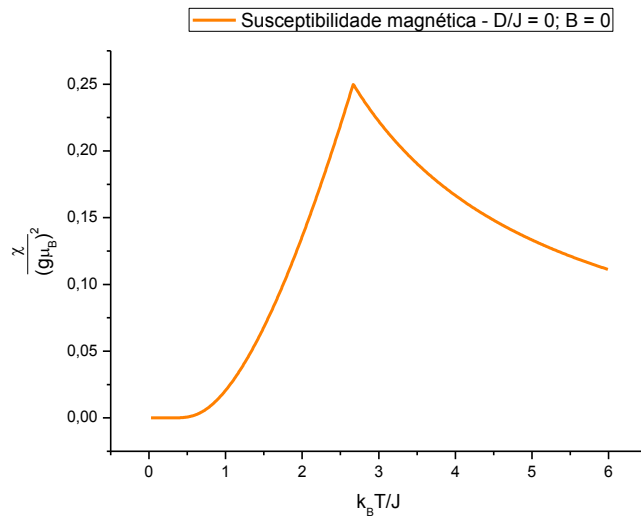


Figura 21 – Resultados das susceptibilidades em relação aos valores de cada temperatura referente a rede de spins $0, \pm 1$ com $q = 4$. O pico da curva evidencia que a transição de fase do modelo ocorre a uma temperatura crítica $\frac{k_B T_c}{J} \approx 2,670$.

Para os parâmetros de teste $\frac{D_c}{J} = 1,85$ e $\frac{D}{J} = 2,01$, a figura 22 revela que a característica de cada gráfico analisado é dado pela diferença do comportamentos das curvas nas proximidades das transições de fase do modelo.

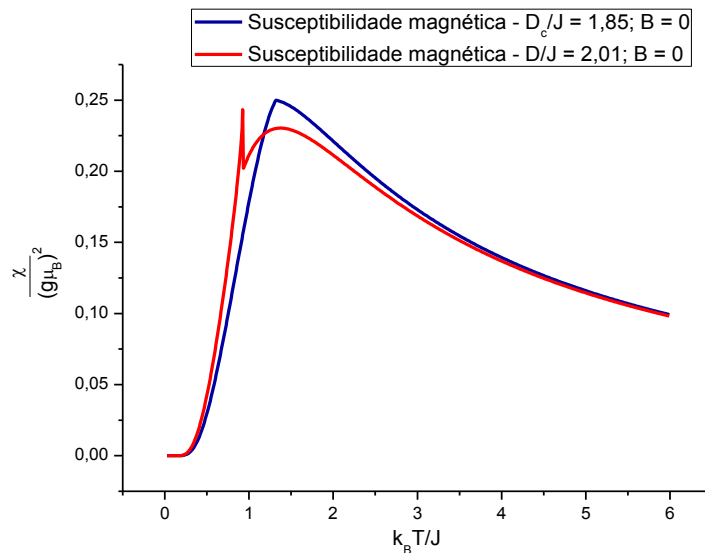


Figura 22 – Curvas de susceptibilidades magnéticas referente a rede de spins $0, \pm 1$. A curva com parâmetro $\frac{D_c}{J} = 1,85$ (linha azul) mostra através do pico uma transição de fase de segunda ordem bem definida a $\frac{k_B T_c^W}{J} \approx 1,33$. A curva com parâmetro $\frac{D}{J} = 2,01$ (linha vermelha), descreve que próximo a transição de fase de primeira ordem, os spins se comportam de um modo diferente quando comparados às transições de fase de segunda ordem.

As susceptibilidades magnéticas observadas através das figuras 21 e 22 apresentam picos bem definidos para as transições de fase do sistema. As divergências entre os picos das curvas obtidas a parâmetros $\frac{D}{J} = 0$ (linha cheia laranja) e $\frac{D_c}{J} = 1,85$ (linha cheia azul), mostram as transições de fases de segunda ordens do modelo (indicados anteriormente pelo parâmetro de ordem m da magnetização). A linha cheia vermelha da figura 22, aponta que o comportamento da curva de susceptibilidade difere das demais curvas de $\frac{\chi}{(g\mu_B)^2}$ contra $\frac{k_B T}{J}$ para valores de $\frac{k_B T}{J} > \frac{k_B T_c}{J}$. É possível que esta diferença seja motivada pelo fato da transição de fase ser de primeira ordem.

Outra grandeza de medição física que tem grande importância para verificar os dados experimentais do modelo, é o calor específico. Em sólidos magnéticos existe uma grande contribuição de energia para a capacidade calorífica no intervalo de temperatura, no qual os momentos magnéticos se tornam ordenados (KITTEL, 1978). A equação desta variação de energia que contribui para a capacidade calorífica do sistema é dada por

$$C_v = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right) = - \frac{1}{T^2} \frac{\partial E}{\partial \beta}. \quad (3.6.4)$$

Para o modelo estudado, a equação do calor específico a volume constante em função da temperatura é obtido através da equação (3.6.2)

$$C_v = - \frac{1}{T^2} \frac{\partial}{\partial \beta} \left(- \frac{JqNm^2}{2} + \frac{2D \cosh \beta (Jqm)}{2 \cosh \beta (Jqm) + e^{\beta D}} \right), \quad (3.6.5)$$

em que $\beta = \frac{1}{k_B T}$ e $B = 0$. Desta forma, o gráfico $\frac{C_v}{N}$ contra $\frac{k_B T}{J}$, se apresenta conforme mostrado na figura 23.

As curvas descritas através da figura 23, evidenciam as transições de fases do modelo teórico estudado por nós. A curva azul revela que o calor específico que ocorre nas proximidades de $\frac{k_B T_c}{J} \approx 2,670$ obtida a parâmetro $\frac{D}{J} = 0$, apresenta um resultado bem maior que os obtidos pelos parâmetros $\frac{D_c}{J} = 1,85$ e $\frac{D}{J} = 2,01$. Percebe-se ainda, que nas proximidades das temperaturas críticas a variação de temperatura é menor para a transição de fase de primeira

ordem quando comparada com as transições de fase de segunda ordem do modelo.

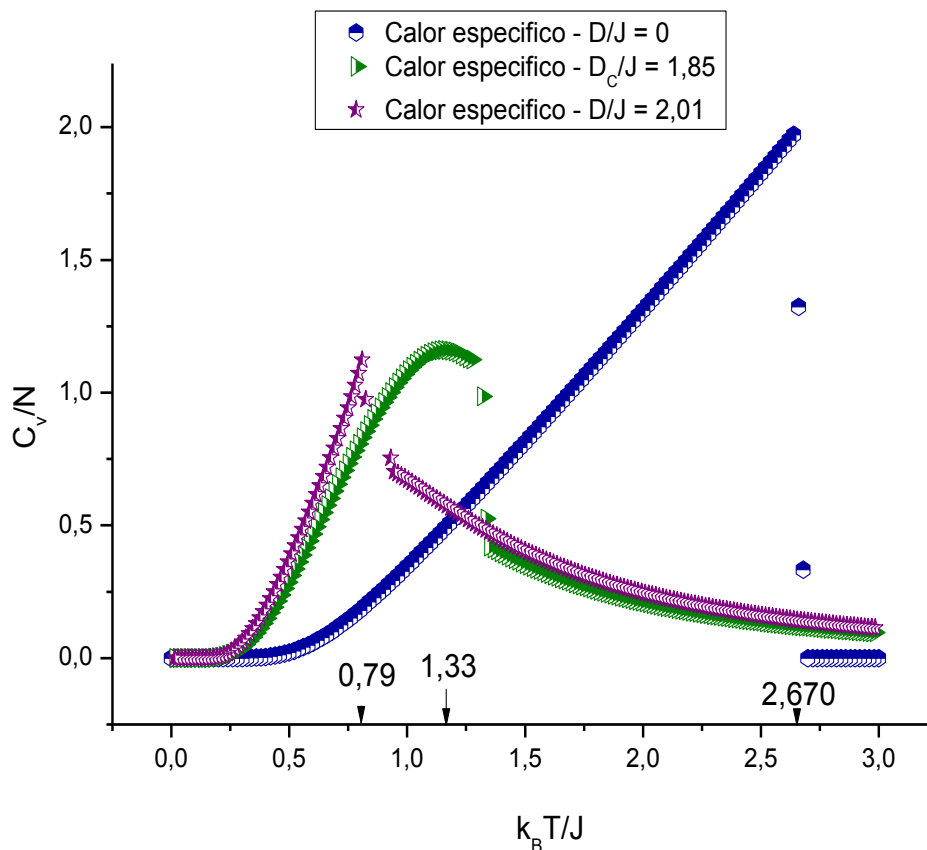


Figura 23 – Curvas de calor específico através da aproximação de campo médio de Weiss com parâmetros $\frac{D}{J}$ distintos. Os resultados se referem à rede quadrada de spin $S = 0, \pm 1$.

Como o efeito do calor fornecido à amostra é, microscopicamente, promover as transições das partículas do sistema entre os seus diversos níveis (OLIVEIRA; JESUS, 2011), observa-se através das curvas descritas na figura 23 que as flutuações se propagam de um modo incoerente próximo das temperaturas críticas em que ocorrem as transições de fases de segunda ordem.

Dessa forma, encerra-se os estudos das propriedades termodinâmicas obtidas pela aproximação de campo de Weiss. Por conseguinte, no próximo capítulo estuda-se o comportamento do modelo BC através da aproximação de Bethe-Peierls.

Capítulo 4

Estudo do modelo Blume-Capel através da aproximação de Bethe-Peierls

A aproximação de campo médio de Bethe-Peierls consiste em descrever a interação de curto alcance de certo aglomerado contendo um spin central sob a ação de um campo externo com q spins periféricos sob a ação de um campo efetivo (SALINAS, 2005). Por considerar as interações entre os primeiros vizinhos, a aproximação de Bethe-Peierls constitui-se num método de grande interesse no estudo de modelos mais sofisticados (STEIN-BARANA; YOSHIDA; LÍBERO, 2004).

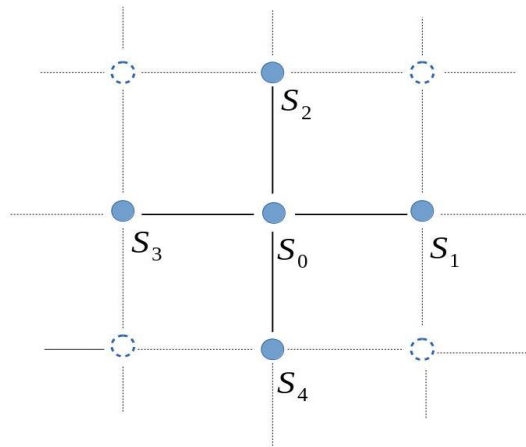


Figura 24 – Aglomerado contendo um sítio central e quatro sítios periféricos.

Neste capítulo, o modelo Blume-Capel será estudado através da aproximação de campo médio de Bethe-Peierls. Espera-se que os resultados previstos por esses estudos se confirmem dentro de nossas expectativas, e que a transição de fase do sistema apresente melhores resultados que o de Weiss, se comparáveis aos resultados obtidos por outros métodos que estudam modelos semelhantes a este.

4.1 Estudo das transições de fase e fenômenos críticos do modelo BC através da aproximação de Bethe-Peierls

Inicia-se nossos estudos elegendo um spin da rede como central, isto é, o da posição $j = 0$. Em seguida, será tratada a interação entre ele, S_0 , e seus q vizinhos, formando um

aglomerado de $q + 1$ spins (STEIN-BARANA; YOSHIDA; LÍBERO, 2004). Para descrever a hamiltoniana de um modo bem detalhado, considera-se que o spin central S_0 esteja sob a ação de um campo externo B , e que os q spins periféricos estejam sob a ação de um campo efetivo λ , que simula o efeito do restante da rede. Com isso, a equação (2.4.2) estendida a (3.1.1) se apresenta na forma

$$\mathcal{H} = -JS_0 \sum_i S_i - BS_0 + DS_0^2 - (B + \lambda) \sum_i S_i + D \sum_i S_i^2, \quad (4.1.1)$$

em que os parâmetros J e D são os mesmos da equação (3.1.1). Considerando estes pressupostos, pode-se reescrever a equação anterior como

$$\mathcal{H} = -BS_0 + DS_0^2 - (JS_0 + B + \lambda) \sum_i S_i + D \sum_i S_i^2. \quad (4.1.2)$$

Para uma rede de spins $S = 0, \pm 1$, a função de partição é dada por

$$Z = \sum_{\{S\}} e^{-\beta\mathcal{H}} = \sum_{\{S\}} e^{\beta(BS_0 - DS_0^2)} [1 + 2e^{-\beta D} \cosh\beta(JS_0 + B + \lambda)]^q. \quad (4.1.3)$$

Para obter a magnetização m e o campo efetivo λ do sistema, impõe-se novamente a condição de invariância translacional descrita pela eq. (2.4.4). Desta forma, tem-se

$$m = m_0 = m_i. \quad (4.1.4)$$

É interessante apontar que a equação acima foi descrita inicialmente como $\bar{S} = \bar{S}_j = \bar{S}_0$.

Por conveniência, expressa-se a energia $E\{S\}$ para a configuração de spins $\{S\}$ do aglomerado, $\{S\} = \{S_0, S_1, \dots, S_q\}$ através de uma equação semelhante a (2.4.5) dada por

$$E\{S\} = -BS_0 + DS_0^2 - (JS_0 + B + \lambda)(S_1 + S_2 + \dots + S_q) + D(S_1^2 + S_2^2 + \dots + S_q^2), \quad (4.1.5)$$

que levada à magnetização, apresenta-se como

$$m_0 = \frac{1}{Z_a} \sum_{\{S\}} S_0 e^{\beta BS_0 - \beta DS_0^2 + \beta(JS_0 + B + \lambda)(S_1 + S_2 + \dots + S_q) - \beta D(S_1^2 + S_2^2 + \dots + S_q^2)}. \quad (4.1.6)$$

Conforme visto na seção (2.4), a magnetização do spin central m_0 pode ser escrita da mesma forma que em (2.4.9), ou seja,

$$m_0 = \frac{1}{Z_a} \sum_{S_0=-S}^S S_0 e^{\beta(BS_0 - DS_0^2)} [F(S_0)]^q, \quad (4.1.7)$$

onde

$$F(S_0) \equiv \sum_{S_1=-S}^S e^{\beta(JS_0 + B + \lambda)S_1 - \beta DS_1^2}. \quad (4.1.8)$$

A função de partição Z pode ser reescrita na forma

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{S\}} e^{\beta BS_0 - \beta DS_0^2 + \beta(JS_0 + B + \lambda)(S_1 + S_2 + \dots + S_q) - \beta D(S_1^2 + S_2^2 + \dots + S_q^2)}, \\ &= \sum_{S_0=-S}^S e^{\beta(BS_0 - DS_0^2)} [F(S_0)]^q, \end{aligned} \quad (4.1.9)$$

com diferença de que agora $S_i = -1, 0, 1$.

A magnetização de um sítio na periferia é dada por

$$\begin{aligned} m_i &= \frac{1}{Z} \sum_{\{S\}} S_i e^{\beta BS_0 - \beta DS_0^2 + \beta(JS_0 + B + \lambda)(S_1 + S_2 + \dots + S_q) - \beta D(S_1^2 + S_2^2 + \dots + S_q^2)}, \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{S_0} e^{\beta(BS_0 - DS_0^2)} \sum_{S_1} S_1 e^{\beta(JS_0 + B + \lambda)S_1 - \beta DS_1^2} \left(\sum_S e^{\beta(JS_0 + B + \lambda)S - \beta DS^2} \right)^{(q-1)}, \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{S_0} e^{\beta(BS_0 - DS_0^2)} \frac{dF(S_0)}{dy} [F(S_0)]^{q-1}, \end{aligned} \quad (4.1.10)$$

onde $\gamma = \beta(JS_0 + B + \lambda)$. Com a intenção de eliminar a magnetização m , para encontrar o campo efetivo λ foi imposta a condição de autoconsistência dada pela equação (4.1.4). Ao se substituir esta equação pelas equações (4.1.7) e (4.1.10), temos uma equação similar à (2.4.12)

$$\sum_{S_0=-S}^S e^{\beta(BS_0 - DS_0^2)} [F(S_0)]^{q-1} \left[S_0 F(S_0) - \frac{dF(S_0)}{d\gamma} \right] = 0, \quad (4.1.11)$$

e para se encontrar o valor do campo efetivo λ , tornamos a função $F(S_0)$ da equação (4.1.8) para a rede de spins $S = 0, \pm 1$ em

$$F(S_0) = [2e^{-\beta D} \cosh \beta(JS_0 + B + \lambda) + 1]. \quad (4.1.12)$$

Considerando $B = 0$, quando levada à equação (4.1.11) obtém-se a seguinte equação não trivial para o campo efetivo λ

$$\beta\lambda = \ln \left\{ \frac{\alpha + \alpha'}{[(2e^{-\beta D} \cosh(\beta\lambda) + 1)]^{q-1}} + e^{-\beta\lambda} \right\}. \quad (4.1.13)$$

Para a equação (4.1.13), α é dado por

$$\alpha = [2e^{\beta(-D-J-\lambda)} + 1][2e^{-\beta D} \cosh \beta(J + \lambda) + 1]^{q-1}, \quad (4.4.14)$$

e α' se apresenta na forma

$$\alpha' = [-2e^{\beta(-D-J+\lambda)} - 1][2e^{-\beta D} \cosh \beta(-J + \lambda) + 1]^{q-1}. \quad (4.1.15)$$

A magnetização pode ser obtida pela equação (4.1.7). Para a rede de spins $S = 0, \pm 1$ e $B = 0$, obtém-se

$$m = \frac{e^{-\beta D} [2e^{-\beta D} \cosh \beta(J + \lambda) + 1]^q - e^{-\beta D} [2e^{-\beta D} \cosh \beta(J - \lambda) + 1]^q}{e^{-\beta D} [2e^{-\beta D} \cosh \beta(J + \lambda) + 1]^q + e^{-\beta D} [2e^{-\beta D} \cosh \beta(J - \lambda) + 1]^q + [2e^{-\beta D} \cosh \beta(\lambda) + 1]^q}. \quad (4.1.16)$$

A equação (4.1.13) foi resolvida de modo que, a cada valor da temperatura $\frac{k_B T}{J}$, foi encontrado um valor para o campo efetivo λ , que substituída na equação (4.1.16), forneceu os resultados aproximados da magnetização m em função de $\frac{k_B T}{J}$.

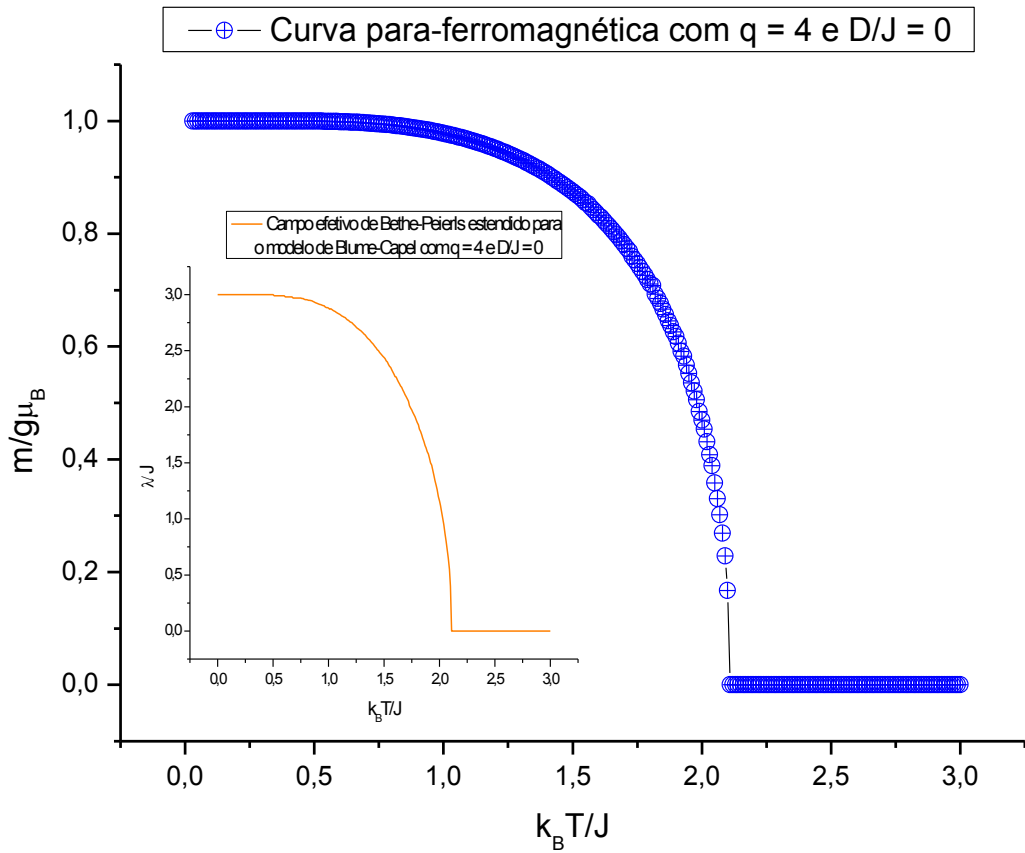


Figura 25 – Magnetização obtida pela aproximação de Bethe-Peierls estendida para o modelo Blume-Capel com resultados referentes a rede de spins $S = -1, 0, 1$ e número de coordenação $q = 4$ (curva azul). O detalhe mostra a ação do campo efetivo λ (curva laranja) sobre os q spins periféricos. O comportamento de ambas as curvas são análogos e se anulam a uma temperatura aproximada $\frac{k_B T_c}{J} \approx 2,115$.

As curvas dos gráficos da figura 25 evidenciam que a transição de fase do sistema, com o parâmetro $\frac{D}{J} = 0$, é de segunda ordem. Para completude de nossas análises, será feito novamente o uso das equações (4.1.13) e (4.1.16) donde determinaremos o valor da temperatura crítica do modelo. Comparando os resultados, à posteriori, será feito o uso do

parâmetro de anisotropia $\frac{D}{J} = 2,01$ utilizado na eq. (3.3.13) que resultou na descrição do gráfico da figura 18. Vale a pena mencionar que os resultados do campo efetivo $\frac{\lambda}{J}$ e da magnetização $\frac{m}{g\mu_B}$ correspondem a cada valor de temperatura considerado.

Os gráficos da magnetização (de cor vinho) e de campo efetivo (de cor verde) contra a temperatura, descritas pelo gráfico da figura 26, revelam através de suas descontinuidades, uma transição de fase bem definida para o sistema.

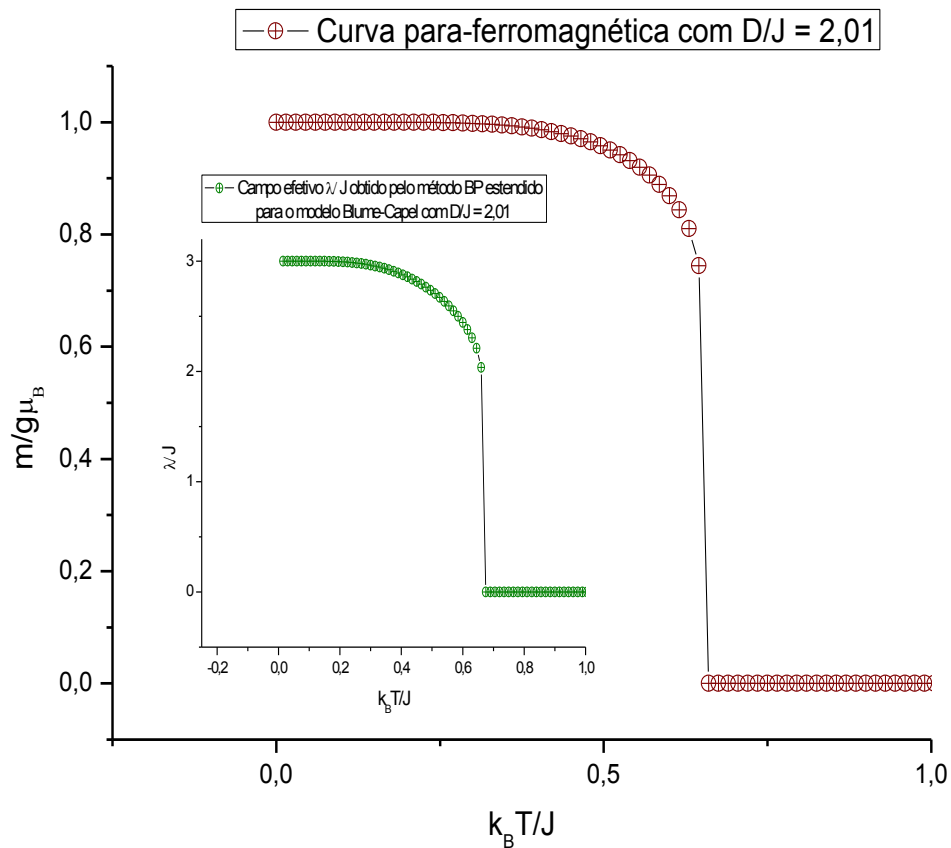


Figura 26 – Dependência com a temperatura da magnetização m para a rede de spins $S = 0, \pm 1$, com coordenação $q = 4$. Para um parâmetro $\frac{D}{J} = 2,01$ e $J = 1$, a transição de fase do sistema ocorre a uma temperatura crítica $\frac{k_B T_c}{J} \approx 0,66375$.

Por meio de análises gráficas da figura 27, identifica-se que o modelo analisado apresenta transições de fase de primeira ordem a parâmetro $\frac{D}{J} > \frac{D_C}{J} = 1,88$. Quando $\frac{D}{J} \leq \frac{D_C}{J} = 1,88$ observa-se que as transições de fase do modelo são de segunda ordem.

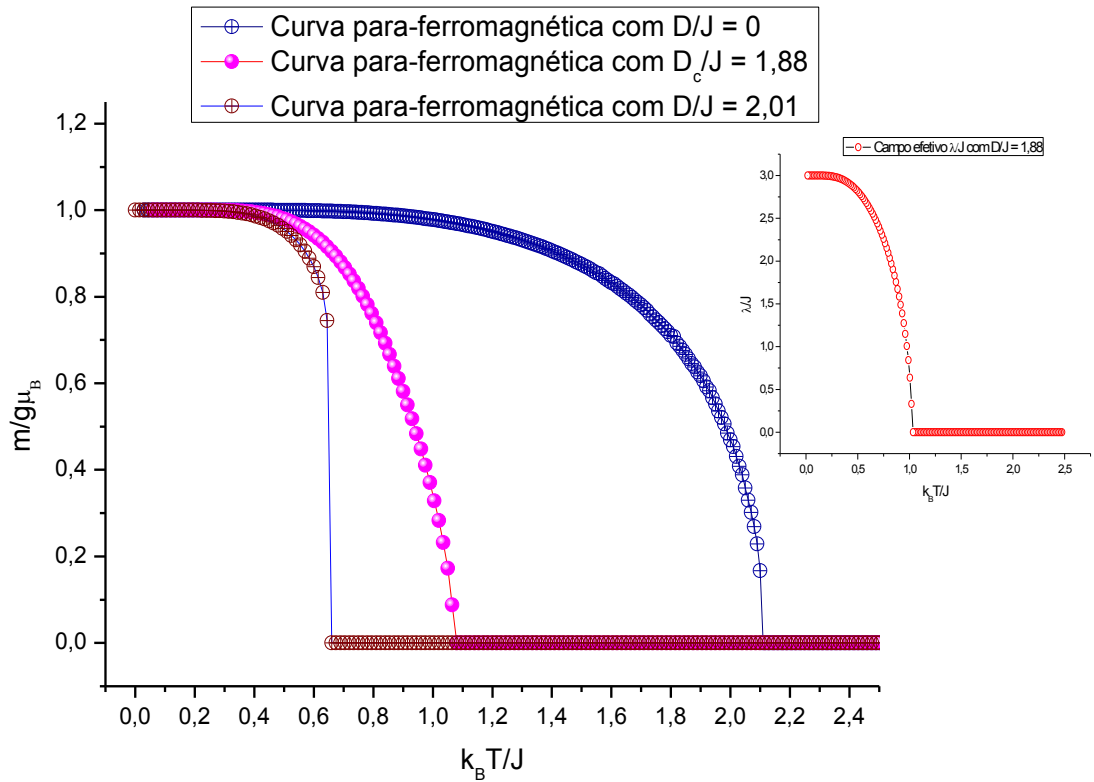


Figura 27 – Magnetizações $\frac{m}{g\mu_B}$ obtidas pela aproximação de Bethe-Peierls estendida para o modelo Blume-Capel para uma rede de spins $0, \pm 1$. O campo efetivo em destaque (curva vermelha) é análogo a curva de magnetização de cor magenta. Para temperaturas iguais ou maiores que $T \geq T_c \approx 1,0275$ (curva magenta), as transições se apresentam como de segunda ordem. Para temperaturas abaixo de $T_c \approx 1,0275$ o modelo identifica as transições de fase de primeira ordem.

A figura 27 evidencia que a ação do campo efetivo λ , que atua sobre os q spins periféricos, modifica consideravelmente os valores das temperaturas críticas do modelo, quando comparado aos valores obtidos pela aproximação de campo médio de Weiss estendido para o modelo Blume-Capel. Antes de discutir e comparar as teorias de campo médio de Weiss e da aproximação BP, será realizado, na seção seguinte, o cálculo da energia média através do método de Bethe-Peierls na versão estendida do modelo Blume-Capel.

4.2 Cálculo da energia média, do calor específico e da correlação entre spins vizinhos, pela aproximação de Bethe-Peierls estendida para o modelo Blume-Capel

Para encontrar a energia de equilíbrio térmico do sistema, recorre-se ao cálculo da energia média da rede. Como a hamiltoniana BP estendida na versão de Blume-Capel não é mais de spins independentes (STEIN-BARANA; YOSHIDA; LÍBERO, 2004) (visto que ela

contém o termo S_0S_i que indica a dependência entre o aglomerado de spins) calcula-se a quantidade através da função

$$\bar{E} = \frac{1}{N} \bar{\mathcal{H}} = -\frac{J}{N} \sum_{\langle ij \rangle} \overline{S_i S_j} + \frac{D}{N} \sum_j \overline{S_j^2}, \quad (4.2.1)$$

que pode ser reescrita como

$$\bar{E} = -\frac{J}{N} \frac{1}{2} \sum_{i=1}^q \overline{S_i S_0} + \frac{D}{N} \sum_{i=1}^q \overline{S_0^2} = -\frac{J}{2} q \overline{S_0 S_1} + D \overline{S_0^2}. \quad (4.2.2)$$

Para o cálculo desta média utilizou-se da hamiltoniana descrita em (4.1.1) e da função canônica de partição de Z da equação (4.1.3). Deste modo, a energia média apresenta-se como

$$\begin{aligned} \bar{E} &= -\frac{Jq}{2} \frac{1}{Z} \sum_{S_0} S_0 e^{\beta(BS_0 - DS_0^2)} \sum_{S_1} S_1 e^{\beta(JS_0 + B + \lambda)S_1 - \beta DS_1^2} \left(\sum_{S_2} e^{\beta(JS_0 + B + \lambda)S_2 - \beta DS_2^2} \right)^{(q-1)} + D \sum_{S_0} \overline{S_0^2}, \\ &= -\frac{Jq}{2Z} \sum_{S_0=-S}^S S_0 e^{\beta(BS_0 - DS_0^2)} \frac{\partial F(S_0)}{\partial x} [F(S_0)]^{(q-1)} + \\ &\quad \frac{D}{Z} \sum_{S_0=-S}^S S_0^2 e^{\beta(BS_0 - DS_0^2)} [F(S_0)]^q, \end{aligned} \quad (4.2.3)$$

sendo aqui, $x = \beta(JS_0 + B + \lambda)$ e $F(S_0) = [2e^{-\beta D} \cosh \beta(JS_0 + B + \lambda) + 1]$.

A figura 28 compara os resultados da energia média \bar{E} obtidos pela teoria de campo médio de Weiss e pela aproximação de Bethe-Peierls, ambas, estendidas para o modelo Blume-Capel.

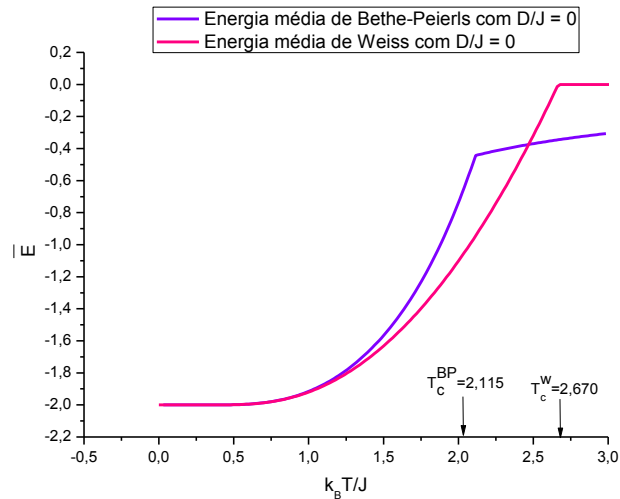


Figura 28 – O gráfico evidencia a energia média \bar{E} , obtida pela aproximação de Bethe-Peierls e pela teoria de campo médio de Weiss, ambas, em função da temperatura $\frac{k_B T}{J}$ para a rede de spins $S = 0, \pm 1$, com número de coordenação $q = 4$.

O gráfico da figura 28 mostra que a transição de fase descrita pela aproximação de Bethe-Peierls (curva roxa) ocorre em uma temperatura mais baixa que a obtida pela teoria de campo médio de Weiss (curva rosa). Isso era de se esperar, visto que na T_c^{BP} os spins estão mais correlacionados espacialmente. A seguir resolvem-se as equações (4.2.3) e (3.6.2) utilizando os parâmetros de testes críticos $\frac{D_c}{J}$ apresentados no capítulo 3 e no início deste capítulo, através da teoria de Weiss e pela aproximação de campo BP, respectivamente.

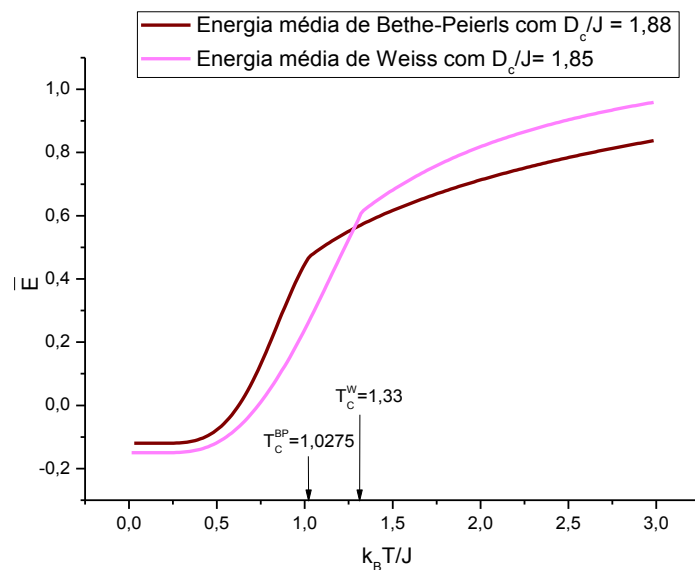


Figura 29 – Energia da rede de spins $S = 0, \pm 1$ com número de coordenação $q = 4$. Os resultados comparam os estados de energia do parâmetro de anisotropia crítico $\frac{D_c}{J}$ obtidos pelas aproximações de Weiss e de Bethe-Peierls.

O gráfico da figura 29 evidencia as temperaturas críticas do modelo Blume-Capel com valores de $\frac{D_c}{J}$ críticos. Nota-se através das curvas que caracterizam a energia média \bar{E} , que ao se elevar os valores de $\frac{D}{J}$ (tanto para a aproximação de Weiss representada pela linha magenta, quanto para a aproximação BP mostrada através da linha vinho), aumentam também, os respectivos estados de energia do sistema. Mesmo que $D \neq 0$, constata-se novamente, que a transição de fase obtida pelo método de Bethe-Peierls ocorre a uma temperatura menor do que a fornecida pela aproximação de campo médio de Weiss para a rede de spins $0, \pm 1$ com número de coordenação $q = 4$.

Para complementar o estudo da energia média da rede, atribui-se o valor de parâmetro de teste $\frac{D}{J} = 2,01$, para ambas as aproximações estudadas. Os cálculos realizados sob esse parâmetro descrevem bem a característica das curvas de energia da rede.

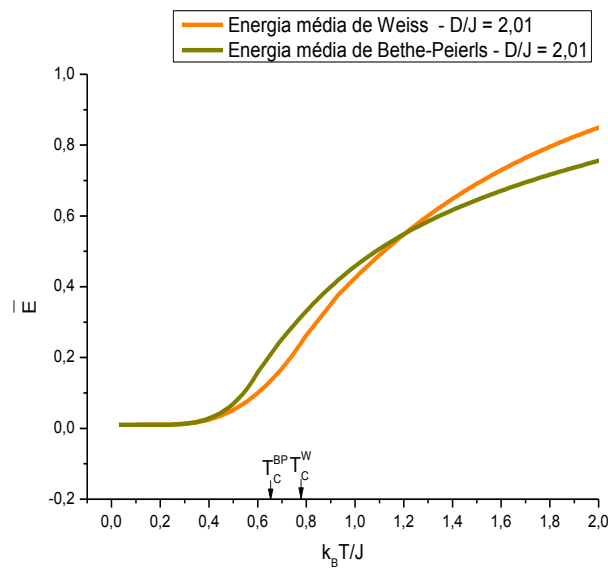


Figura 30 – Energias médias de Weiss e de Bethe-Peierls estendidas para o modelo Blume-Capel utilizando valores de $\frac{D}{J} = 2,01$. A linha cheia verde oliva identifica que o estado energético da transição de fase obtido pela aproximação BP continua se dando abaixo do determinado pela da teoria de campo médio de Weiss (linha cheia laranja).

Observa-se através do comportamento das curvas do gráfico da figura 30 que os valores de energia média apresentam resultados acima dos descritos pelos gráficos \bar{E} contra $\frac{k_B T}{J}$ das figuras 28 e 29. Fica evidente que este aumento de energia foi estimulado através do novo aumento do parâmetro D (resolvido pelas equações (3.6.2) e (4.2.3)). Novamente, verifica-se que a transição de fase de primeira ordem, resolvida pela aproximação BP (linha cheia verde),

apresenta um resultado de T_c menor que o obtido pela teoria de campo médio de Weiss (linha cheia laranja).

Para verificar o processo de transferência de calor do sólido estudado, será realizado o cálculo do calor específico através da derivada parcial da energia em função da variação de temperatura da rede. Com determinação da energia obtida pela equação (4.2.3), o calor específico, a volume constante, pode ser obtido por

$$C_v = \frac{\partial E}{\partial T} = -\frac{1}{k_B T^2} \frac{\partial E}{\partial \beta}. \quad (4.2.4)$$

Utilizando a equação (4.2.3) a campo externo nulo, e escrevendo na forma da eq. (4.2.4), tem-se

$$C_v = -\frac{NJq}{2} \frac{\partial}{\partial T} \overline{S_0 S_1} + ND \frac{\partial}{\partial T} \overline{S_0^2}, \quad (4.2.5)$$

sendo aqui $\overline{S_0 S_1}$ e $\overline{S_0^2}$, os mesmos da eq. (4.2.3)

A grandeza proposta como calor específico permite a obtenção das curvas mostradas pela figura 31.

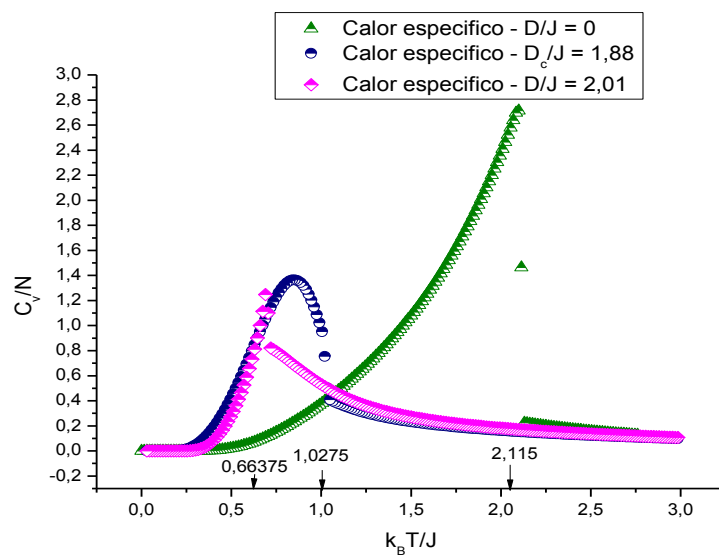


Figura 31 – Calor específico do modelo Blume-Capel obtido pela aproximação de Bethe-Peierls. As curvas evidenciam as coerências das flutuações das variáveis dinâmicas próximo às transições de fase do modelo analisado, com parâmetros $\frac{D}{J}$ distintos.

Identifica-se através das curvas do gráfico da fig. 31, que nas proximidades das temperaturas críticas, a variação de calor específico, a volume constante, é maior para as transições de fase de segunda ordem (curvas verde e azul) quando comparada com a variação de calor específico da transição de fase de primeira ordem (curva rosa). Observa-se ainda, que nas proximidades das transições para-ferromagnéticas as variações de temperaturas são menores para a transição de fase de primeira ordem (curva rosa) quando comparada com as transições de fase de segunda ordem (curvas verde e azul). Pela leitura do gráfico da figura 31 demos também a entender que os parâmetros de anisotropia $\frac{D}{J}$ exercem uma influência significativa nos resultados.

Visto as causas de efeito de $\frac{D}{J}$ pela aproximação BP, passa-se à figura 32 para se analisar também, o efeito das aproximações de campo médio de Weiss e de Bethe-Peierls obtidos a parâmetro de teste $\frac{D}{J} = 2,01$.

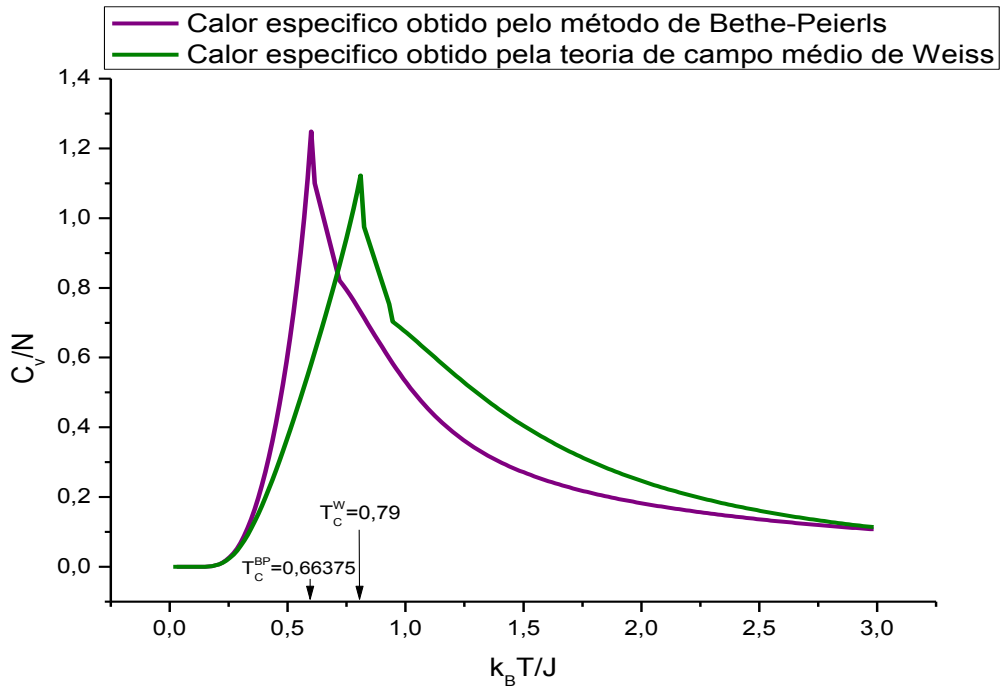


Figura 32 – Calores específicos do modelo Blume-Capel obtidos pelas aproximações de campo médio de Bethe-Peierls (curva roxa) e Weiss (curva verde) calculados para a rede de spins $S = 0, \pm 1$ com número de coordenação $q = 4$, utilizando parâmetros de anisotropia $\frac{D}{J} = 2,01$.

As curvas do gráfico da figura 32 evidenciam através dos valores máximos de $\frac{C_v}{N}$ que as transições de fase de primeira ordem do modelo Blume-Capel ocorrem a temperaturas críticas

de $\frac{k_B T_c^{BP}}{J} \approx 0,66375$ e $\frac{k_B T_c^W}{J} \approx 0,79$. Nas proximidades de $\frac{k_B T_c}{J}$, em que as variações de temperaturas são muito pequenas, o valor de $\frac{C_v}{N}$ varia mais para os resultados obtidos pela aproximação BP (linha cheia roxa) que os conseguidos pela teoria de Weiss (linha cheia verde). Isso evidencia que próximo à transição de fase há mais energia em trânsito em virtude da diferença de temperatura nas proximidades de $\frac{k_B T_c^{BP}}{J}$ que nas vizinhanças de $\frac{k_B T_c^W}{J}$.

Para complementar estes estudos, calcularemos a correlação de primeiros vizinhos da rede quadrada de spins $S = 0, \pm 1$, através da seguinte equação

$$G_{01} = \overline{S_0 S_1} - \overline{S_0} \overline{S_1} = \frac{1}{Z} \sum_{S_0=-S}^S S_0 e^{\beta(BS_0 - DS_0^2)} \frac{\partial F(S_0)}{\partial x} [F(S_0)]^{(q-1)} - m^2, \quad (4.2.6)$$

onde $\overline{S_0 S_1}$ é a mesma da equação (4.2.3) e m igual ao da equação (4.1.16).

Ao se resolver a equação (4.2.6), para a rede de spins $S = 0, \pm 1$ com o número de coordenação $q = 4$, utilizando parâmetros de testes $\frac{D}{J}$ distintos, obtém-se o gráfico na forma

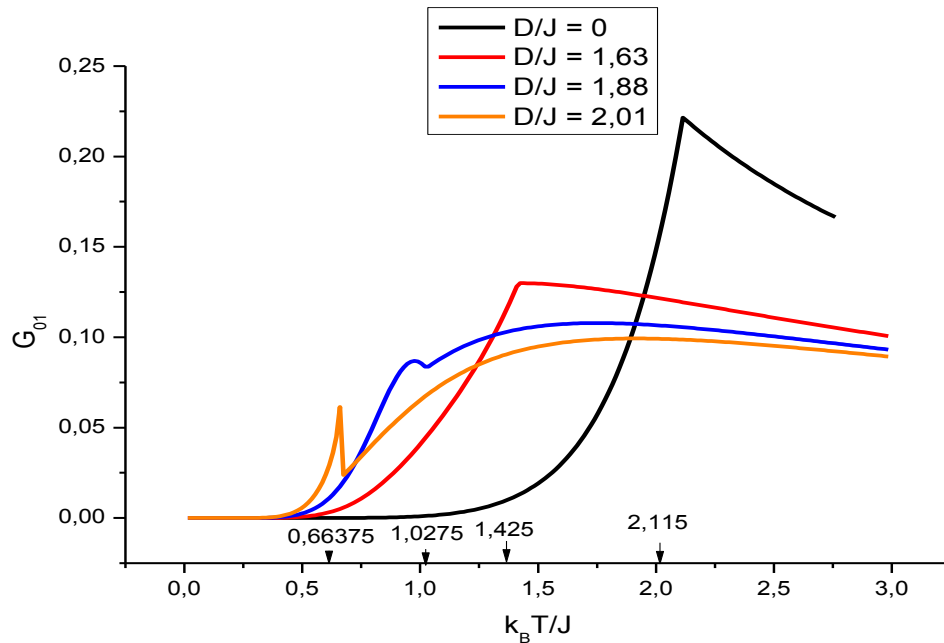


Figura 33 – Correlação entre dois vizinhos próximos da rede obtidas pela aproximação de Bethe-Peierls com $S = 0, \pm 1$ e número de coordenação $q = 4$ com parâmetro de troca $J = 1$.

As correlações identificadas pela aproximação de Bethe-Peierls, dispostas na figura 33, apresentam as descrições dos resultados obtidos, utilizando diferentes parâmetros de testes $\frac{D}{J}$. Ao se usar valores maiores que 1,63 para o parâmetro $\frac{D}{J}$, nota-se um comportamento diferente nas curvas de correlação, visto que as linhas representadas pelas curvas azul e laranja diferem das linhas apresentadas pelas curvas preta e vermelha. Esta mudança de comportamento decorre da sobreposição de D ao parâmetro de troca J. Isso revela ainda que, próximo das temperaturas de transições de fase de segunda ordem, os spins estão bem mais correlacionados e que suas flutuações são muito relevantes nos pontos críticos (SIMÕES, 2017). Outro ponto notável da fig. 33 remete as coincidências dos resultados das correlações entre spins para temperaturas $\frac{k_B T}{J} < \frac{J}{2}$.

Presume-se que, mesmo diante de uma certa imprecisão, próximo ou em $\frac{k_B T_c}{J}$, nunca se poderão desprezar as flutuações espaciais dos spins (STEIN-BARANA; YOSHIDA; LÍBERO, 2004). Outro ponto que deve ser destacado remete ao fato dessa quantidade não poder ser calculada na aproximação de Weiss.

Realiza-se agora, o estudo da susceptibilidade magnética do modelo BC pela aproximação de Bethe-Peierls através da equação que é definida por

$$\chi = \frac{\partial}{\partial B} \left\{ \frac{1}{Z} \sum_{S_0} S_0 e^{\beta(BS_0 - DS_0^2)} [F(S_0)]^q \right\}, \quad (4.2.7)$$

em que o termo em evidência do lado direito da equação é a magnetização m , que na aproximação de Bethe-Peierls é dada pela equação (4.1.7) e, $F(S_0) = [2e^{-\beta D} \cosh\beta(JS_0 + B + \lambda) + 1]$. O campo efetivo λ de $F(S_0)$ é também uma função do campo magnético B . Deste modo χ também deve depender de $\frac{\partial \lambda}{\partial B}$. Assim, a equação se apresenta na forma

$$\begin{aligned} \chi &= \frac{\beta}{Z} \sum_{S_0} S_0^2 e^{\beta(BS_0 - DS_0^2)} [F(S_0)]^q \\ &+ q\beta \left(\frac{\partial \lambda}{\partial B} + 1 \right) \frac{1}{Z} \sum_{S_0} S_0 e^{\beta(BS_0 - DS_0^2)} [F(S_0)]^{q-1} 2e^{-\beta D} \sinh\beta(JS_0 + \lambda + B) \\ &\quad - \frac{1}{Z^2} \frac{\partial Z}{\partial B}. \end{aligned} \quad (4.2.8)$$

No caso descrito pela eq. anterior, pode-se usar o resultado da eq. (4.2.3) junto com as equações (4.1.7) e (4.1.10), considerando $\beta m_0 = \frac{\partial \ln Z}{\partial B}$. Dessa forma, reescreve-se a eq. (4.2.8) como

$$\chi = \beta \overline{S_0^2} + q\beta \left(\frac{\partial \lambda}{\partial B} + 1 \right) m_1 - \frac{\beta}{Z_a} m_0. \quad (4.2.8)$$

Devido à condição especificada na equação (4.1.4), obtém-se

$$\chi = \beta \overline{S_0^2} + q\beta \left(\frac{\partial \lambda}{\partial B} + 1 \right) m - \frac{\beta}{Z_a} m, \quad (4.2.9)$$

que representa a equação da susceptibilidade magnética de uma rede de spins $S = 0, \pm 1$ obtida para o modelo BC na aproximação de Bethe-Peierls.

A derivada parcial $\frac{\partial \lambda}{\partial B}$ foi resolvida numericamente para cada valor temperatura $\frac{k_B T}{J}$, que substituído na eq. (4.2.8), forneceram valores de χ . A figura 34 revela os resultados χ para cada valor correspondente de temperatura T, utilizando parâmetros de teste $\frac{D}{J}$ que determinam a ordem do sistema.

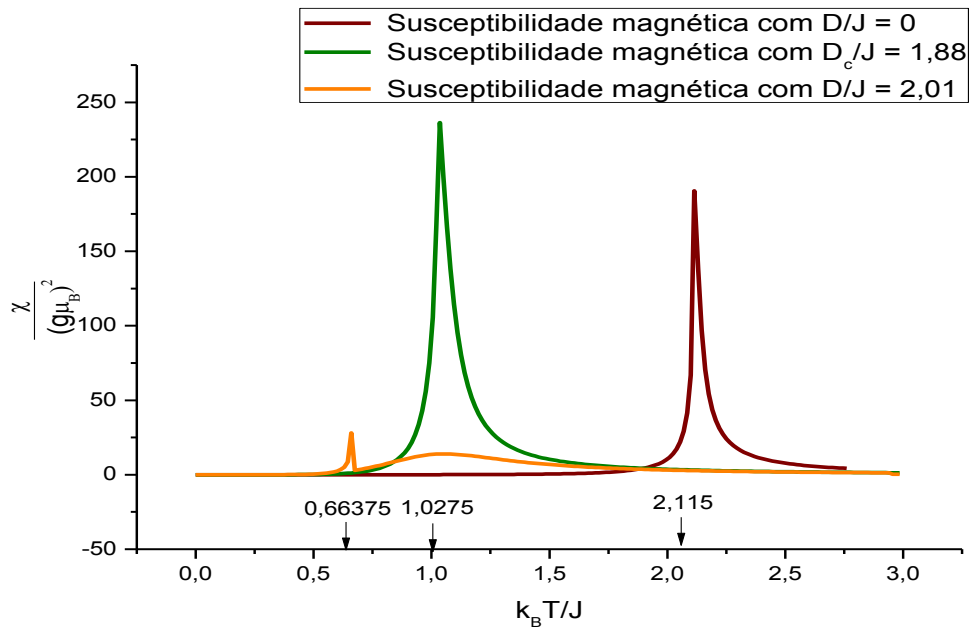


Fig. 34 – Curvas de susceptibilidades magnéticas obtidas pela aproximação de Bethe-Peierls para uma rede de spins $S = 0, \pm 1$. As divergências dos comportamentos das curvas que ocorrem próximas de $\frac{k_B T_c}{J}$, indicam as ordens de transições de fase do modelo.

Os resultados das susceptibilidades magnéticas do método BP obtidos em função de cada temperatura são bem descritos pelas curvas do gráfico da figura 34. Os altos valores de susceptibilidades das curvas marrom e verde indicam que as transições de fase para-ferromagnética do modelo atingem seus valores máximos em $\frac{k_B T_c}{J}$. Quando são comparados as curvas de susceptibilidades do gráfico da figura 34, observa-se que a curva laranja, que representa a transição de fase de primeira ordem do sistema (identificado pelo parâmetro de ordem $\frac{m}{g\mu_B}$), apresenta um comportamento diferente para valores de $\frac{\chi}{(g\mu_B)^2}$ na fase paramagnética.

Vale a pena apontar que a variação de susceptibilidade magnética da curva laranja ocorre num intervalo de temperatura muito pequeno em torno da transição de fase do modelo. Esse intervalo pequeno de variação de susceptibilidade revela que há uma reorientação radical dos spins nas proximidades de $\frac{k_B T_c}{J} = 0,66375$.

Este capítulo conclui que as análises clássicas dos processos termodinâmicos realizados pela aproximação de Bethe-Peierls estendido para o modelo Blume-Capel apresentam resultados de transições de fases bem interessantes para o estudo da teoria de campo médio.

Capítulo 5

Conclusão

No início deste trabalho, estudou-se a transição de fase de sistemas para-ferromagnéticos através da teoria de campo médio de Weiss e da aproximação de Bethe-Peierls aplicadas ao modelo de Ising 2D. A escolha por estes trabalhos deve-se a uma boa descrição dos resultados apresentados através das teorias de campo médio quando comparadas as descrições da transição de fase exata obtida por Onsager em 1944.

Estes métodos foram de boa base para o estudo de um modelo de sólido magnético conhecido como modelo Blume-Capel. Por fornecer bons resultados e ser um dos modelos mais estudados na mecânica estatística, foram calculadas propriedades termodinâmicas como magnetização por partícula, energia média, calor específico, susceptibilidade magnética e a correlação entre pares de vizinhos próximos da rede. A contribuição para a área se deu por meio dos resultados obtidos pelo estudo do modelo Blume-Capel através da aproximação de Bethe-Peierls.

A primeira propriedade termodinâmica do modelo BC estudada, foi a magnetização por partícula. Os cálculos da magnetização deste modelo foram realizados através da aproximação de Weiss em uma rede de spins $S = 0, \pm 1$ com número de coordenação $q = 4$. Para intensificar ainda mais as discussões, descreveu-se, através do potencial termodinâmico da teoria de Landau, a transição de fase para-ferromagnética do sistema. A magnetização m descrita em função dos parâmetros da energia livre de Landau determinou que a temperatura tricrítica $\frac{k_B T_{tc}}{J}$ do modelo BC na aproximação de Weiss ocorreu a $\frac{k_B T_{tc}^W}{J} \approx 1,33$. Para a realização dos cálculos que resultaram neste valor de temperatura, utilizamo-nos do parâmetro de teste crítico $\frac{D_c}{J} = 1,85$. Além da magnetização, outros fenômenos termodinâmicos foram estudados para o modelo BC através desta teoria de campo médio, mas a priori nos ativemos ao valor da magnetização m do modelo.

O próximo fato deste desenvolvimento foi a resolução dos cálculos das magnetizações m_0 e m_i do modelo Blume-Capel, realizado através da aproximação de campo médio de Bethe-Peierls. A condição de autoconsistência do modelo permitiu identificar a equação e os valores do campo efetivo do sistema, necessários para os cálculos dos demais processos termodinâmicos estudados neste trabalho. Os resultados da magnetização m do modelo Blume-Capel, aplicados à teoria de campo médio BP, identificaram que o valor da temperatura

tricrítica, que determina a ordem do sistema, se deu a $\frac{k_B T_{tc}^{BP}}{J} \approx 1,0275$, utilizando o parâmetro de teste $\frac{D_c}{j} = 1,88$.

A comparação dos resultados deste estudo aos de SILVA; CAPARICA; PLASCAK (2006), pode ser verificada através da tabela 1. Nota-se que as respostas apresentadas para as transições de fase do modelo BC na aproximação de Bethe-Peierls descreveram melhores resultados que os obtidos pela teoria de campo médio de Weiss. Isso era de se esperar, visto que os spins estão mais correlacionados na aproximação de campo médio BP do que na TCM de Weiss.

Métodos	Weiss	BP	Wang-Landau
$\frac{D_c}{j}$	1.85	1.88	1.966
$\frac{k_B T_{tc}}{J}$	1.33	1.0275	0.609

Tabela 1 – Pontos tricríticos do modelo Blume-Capel obtidos pelas teorias de campo médio e pelo método de simulação de Monte-Carlo.

Apesar da melhoria apresentada pelo método BP, observou-se que ambas aproximações indicam valores de $\frac{k_B T_c}{J}$ acima do estimado por SILVA; CAPARICA; PLASCAK (2006). A técnica de simulação baseada em um método Monte-Carlo, introduzida por Wang e Landau, para o modelo BC, apresenta excelentes resultados de transições de fases para uma rede de spins $S = 0, \pm 1$. A ordem dessa transição é identificada através dos pontos tricríticos, que para o método de simulação de Monte-Carlo ocorre a uma temperatura tricrítica $\frac{k_B T_{tc}}{J} = 0,609$ utilizando $\frac{D_c}{j} = 1,966$.

Em face dessas informações, os resultados mostram que a temperatura tricrítica obtida pela teoria de campo médio de Weiss apresenta uma diferença de 118,4% e a descrita pela aproximação BP aponta uma dessemelhança de 68,7%, quando comparadas ao método de Wang-Landau. A tabela 1 evidencia também, que os valores distintos de $\frac{k_B T_{tc}}{J}$ foram obtidos através de diferentes valores de campos cristalinos.

Para verificar se os demais resultados descritos através das transições de fases obtidas pela teoria de campo médio de Weiss e pela aproximação de Bethe-Peierls estendidas para o modelo BC se deram de maneira satisfatória, foram realizadas diversas análises comparativas ao método computacional de Wang-Landau Monte-Carlo. Como o valor da temperatura crítica de Weiss $\frac{k_B T_c^W}{J} \approx 0,79$, obtida através do campo cristalino $\frac{D}{J} = 2,01$, descreve melhor a fase do sólido através potencial termodinâmico de Landau, considera-se prudente realizar as demais comparações de transições de fases descritas neste trabalho, ao resultado de Wang-Landau Monte-Carlo (ver tabela 2) com valores de $\frac{D}{J} \cong 2,0$.

Comparação entre os resultados das linhas de segunda e primeira ordem com os resultados anteriores obtidos pela técnica de escala de tamanho finito.

$\frac{D}{J}$	$\frac{k_B T}{J}$			Ordem de transição
	Ref. [42]	Ref. [43]	Wang-Landau	
-0.5		1.794	1.816	Segunda
0.0	1.695	1.681	1.714	Segunda
0.5	1.567		1.584	Segunda
1.0	1.398		1.413	Segunda
1,5	1.150		1.155	Segunda
1.87	0.800		0.800	Segunda
1.9		0.764	0.755	Segunda
1.92	0.700		0.713	Segunda
1.95	0.650		0.651	Segunda
1.962	0.620		0.619	Segunda
1.969	0.600		0.596	Primeira
1.99	0.550		0.555	Primeira
1.992	0.500		0.499	Primeira

Tabela 2 – Resultados de transições de fases do modelo Blume-Capel através do método de simulação Wang-Landau Monte-Carlo descritos por SILVA; CAPARICA; PLASCAK (2006) utilizando de diferentes parâmetros de testes $\frac{D}{J}$.

A última linha da quarta coluna da tabela 2 mostra que, a transição de fase do modelo Blume-Capel, realizada através do método de Wang-Landau ocorreu a uma temperatura crítica

de $\frac{k_B T_c^{WL}}{J} = 0,499$ na presença de um campo cristalino $\frac{D}{J} = 1,992$, ou seja, o mais próximo de $\frac{D}{J} = 2,0$.

Os resultados obtidos com parâmetros de testes $\frac{D}{J} \cong 2,0$ revelam que a diferença entre as temperaturas críticas identificadas pela teoria de Weiss $\frac{k_B T_c^W}{J}$ é de aproximadamente 58,3% quando comparada a $\frac{k_B T_c^{WL}}{J}$. Já o resultado obtido pela aproximação BP apresenta uma diferença aproximada de 33% em relação à temperatura crítica de Wang-Landau. Ambas aproximações estão acima de $\frac{k_B T_c^{WL}}{J}$, porém a de Bethe-Peierls apresenta resultados melhores.

As demais propriedades termodinâmicas do modelo Blume-Capel obtidas pelas teorias de campo médio apresentadas neste trabalho, evidenciam resultados bastante satisfatórios quando comparados aos resultados de SILVA; CAPARICA; PLASCAK (2006), porém os descritos pelo método de Bethe-Peierls são melhores que os apresentados pela teoria de campo de Weiss. Os estudos revelaram que a melhoria dos resultados obtidos pela aproximação BP vem do fato da hamiltoniana do modelo levar em consideração o produto entre os termos de flutuações espaciais entre os spins da rede, resguardando então a correlação entre esses spins (STEIN-BARANA; YOSHIDA; LÍBERO, 2004). É conveniente destacar que a interação do spin central com seus q primeiros vizinhos periféricos, que estão sob a ação de um campo efetivo, também foram responsáveis por estas melhoras.

Desta forma, através deste trabalho concluiu-se que as teorias de campo médio apresentam resultados interessantes para o estudo de modelos, incluindo o modelo Blume-Capel, e espera-se que através deste, sejam desenvolvidos novas propostas de estudos que contribuam para as melhorias das transições de fase do modelo. Além dessas propostas, deixou-se, como sugestão aos estudantes com afinidades no desenvolvimento de equações numéricas e manipulações de softwares, o estudo das aplicações dos formalismos termodinâmicos utilizados neste trabalho, para outras redes de spins com diferentes números de coordenações q .

Capítulo 6

Referências

- BLUME, M. **Theory of the first-order magnetic phase change in UO₂**. v. 141, p. 517–524, 1966. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.141.517>. Acesso em: 12. ago. 2018
- BLUME, M.; EMERY, V. J.; GRIFFITHS, R. B. **Ising model for the λ transition and phase separation in he3-he4 mixtures**. Phys. Rev. A, v. 4, p. 1071–1077, Sep 1971.
- Butera P.; Percini M. **The Blume-Capel model for spins $S = 1$ and $3/2$ in dimensions $d = 2$ and 3** . [s.l.], vol 507, pages 22-66, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.physa.2018.05.010>. Acesso em: 12. dez. 18.
- CAPEL, H. **On the possibility of first-order phase transitions in Ising systems of triplet**, May, 1966, Pages 966-988. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0031-8914\(66\)90027-9](https://doi.org/10.1016/0031-8914(66)90027-9). Acesso em: 12. ago. 2018.
- CARNEIRO, Carlos Eugenio Imbassahy. **Transições de fase**. 1999. 128f. Tese de Livre Docência – Universidade de São Paulo, [S.l.], 1999.
- CARVALHO, Diego da Cunha. **Estudo Analítico de Modelos tipo XY Tridimensionais Puros e Diluídos Via Princípio Variacional de Bogoliubov**. 2011. 83f. Dissertação de Mestrado – Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2011.
- ERCULE, Adinei. **Comportamento multicrítico do modelo de Blume–Emery–Griffiths com acoplamentos biquadráticos repulsivos**. 2016. 59f. Dissertação de Mestrado – Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2016.
- KITTEL, Charles. **Introdução à Física do Estado Sólido**. Rio de Janeiro: Editora Guanabara Dois S.A., 1978.
- LOPES, Amanda de Azevedo. **Modelo de Blume-Capel na rede aleatória**. 2016. 67f. Dissertação de Mestrado – Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2016.
- MEDEIROS, Anna Cecília Dantas de. **Anisotropia Magnética (110) em Nanofilmes de Permalloy Sobre MgO (100)**. 2014. 76f. Dissertação de Mestrado – Universidade Federal do Rio Grande no Norte, 2014.
- MIRANDA E. **Transições de fase e o grupo de renormalização**. Campinas, [s.n.], 2005. Disponível em: <https://www.ifi.unicamp.br/~emiranda/notes/rg.pdf>. Acesso em: 22. abr. 18.
- NOVAK, Miguel A. **Introdução ao Magnetismo**. In: Palestra da II Escola Brasileira de Magnetismo, 1.[21-?], Rio de Janeiro. Disponível em: <http://www.cbpf.br/~labmag/miguel.pdf>. Acesso em: 22. mai. 2019.

- OLIVEIRA, Ivan S. de; JESUS, Vitor L. B. de. **Introdução à física do estado sólido**. 2 ed. S. Paulo: Liv. da física, 2011.
- PHATRIA, R.K.; BEALE, Paul D. **Statistical Mechanics**. 3 ed. USA: Editora Elsevier Ltda, 2011.
- REZENDE, Sergio M. **Materiais e Dispositivos Eletrônicos**. 2 ed. São Paulo: Livraria da Física, 2004.
- ROCHA, José Fernando M. **Origens e evolução das ideias da física**. 2. ed. Salvador: EDUFBA, 2015.
- SALINAS, Silvio R. A. **Conceitos de física estatística – flutuações no equilíbrio**. [S.I], pags 1-27, jan. 2015. Disponível em: <http://periodicos.unb.br/index.php/e-bfis/index>. Acesso em: 10. jan. 2019.
- SALINAS, Sílvio R.A. **Introdução à Física Estatística**. S. Paulo: Editora da Universidade de São Paulo, 2005.
- SILVA, C. J.; CAPARICA, A.A.; PLASCAK, J. A. **Wang-Landau Monte-Carlo simulation of the Blume-Capel model**. Physical review e 73. 036702, 2006.
- SILVA, Walter Pereira da. **Efeitos das Aleatoriedades dos Campos Cristalino e Magnético no Modelo de Blume-Capel**. 2009. 71f. Dissertação de Mestrado – Universidade Federal de Mato Grosso, [s.I], 2009.
- SIMÕES Lilah Fialho de Lima. **Estudo do comportamento termodinâmico de sistemas físicos com interação de longo alcance na proximidade da região crítica**. 2017. 70f. Dissertação de mestrado – Universidade de Brasília, Brasília, 2017.
- STANLEY, H. E. **Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena**. New York: Oxford University Press, 1971.
- Stein-Barana A.C.M; Yoshida M.; Líbero V.L. **A aproximação de campo médio de Bethe-Peierls**. Revista Brasileira de Ensino de Física. São Paulo, vol. 26, n.4. out./ dez.2004. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1590/S1806-11172004000400013>. Acesso em: 05. jan. 18.
- YEOMANS, J. M. **Statistical Mechanics of Phase Transitions**. New York: Oxford University Press, 1992.

Capítulo 7

Apêndices

Apêndice A - Equação exata obtida por Onsager em que mostra que a temperatura crítica na rede quadrada é dada por $2k_B T_C = \frac{J}{\ln(\sqrt{2}+1)}$ (STEIN-BARANA; YOSHIDA; LÍBERO, 2004).

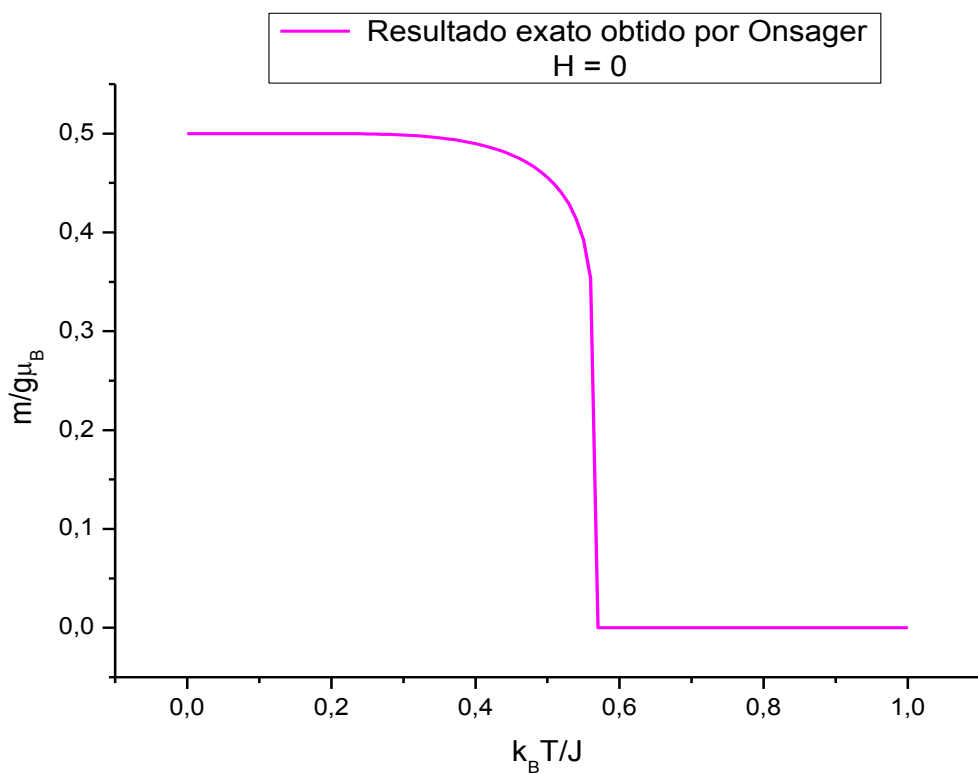


Figura 35 – Gráfico remete a magnetização exata de Onsager, 1944.

Para a curva em questão foi utilizada a equação

$$M = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{\sinh^4 \left[\frac{\beta}{2} (Jq) \right]} \right)^{\frac{1}{8}}, \quad (7.1)$$

para uma rede de spins $S = \frac{1}{2}$ e $q = 4$.

Apêndice B – Fórmula exata para o modelo de Ising $S = \pm \frac{1}{2}$ na rede quadrada (STEINBARANA; YOSHIDA; LÍBERO, 2004).

Para $T < T_c$, tem-se

$$\frac{k_B T_c}{J} = \frac{0,5}{(\ln(\sqrt{2} + 1))} = 0,567296. \quad (7.2)$$

Apêndice C – Lei de Curie-Weiss para o ferromagnetismo ($T > T_c$) (KITTEL, 1978)

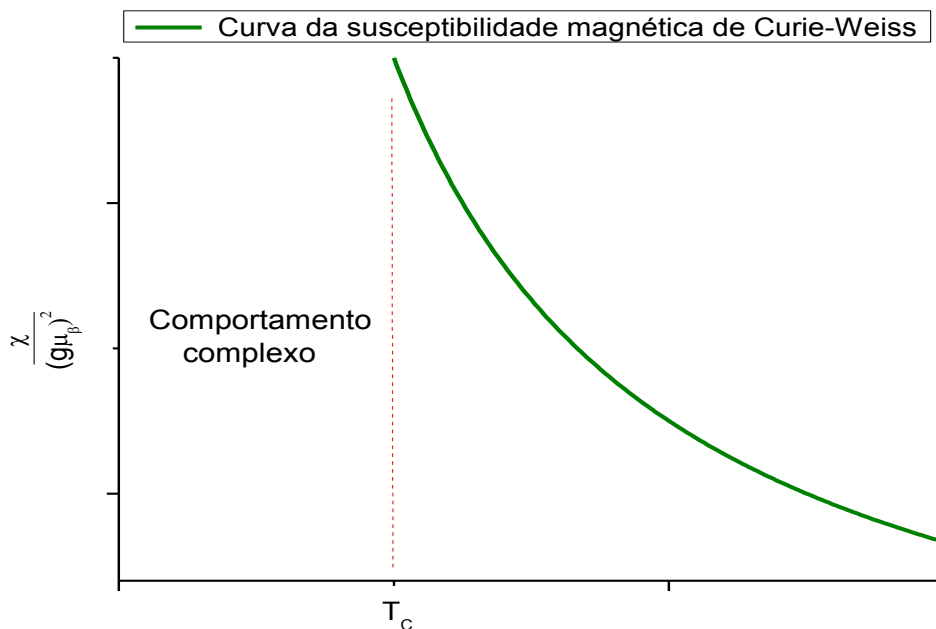


Figura 36 – Dependência da susceptibilidade magnética com a temperatura para materiais ferromagnéticos

onde a curva é caracterizada por

$$\chi = \frac{C}{T - T_c}, \quad (7.3)$$

sendo T a temperatura, T_c a temperatura de Curie e C a constante de Curie.

**Apêndice D – Desenvolvimento da equação para o campo molecular λ de Bethe-
Peierls, com $S = \frac{1}{2}$ (2.4.12)**

$$\begin{aligned}
& \sum_{s_0=-S}^S \left[S_0 \left(2 \cosh \frac{\beta}{2} (JS_0 + \lambda) \right) - \sinh \frac{\beta}{2} (JS_0 + \lambda) \right] \left(2 \cosh \frac{\beta}{2} (JS_0 + \lambda) \right)^{q-1} = 0, \\
& \left[-\frac{1}{2} \left(2 \cosh \frac{\beta}{2} \left(J \left(-\frac{1}{2} \right) + \lambda \right) \right) - \sinh \frac{\beta}{2} \left(J \left(-\frac{1}{2} \right) + \lambda \right) \right] \left(2 \cosh \frac{\beta}{2} \left(J \left(-\frac{1}{2} \right) + \lambda \right) \right)^{q-1} = \\
& \left[-\frac{1}{2} \left(2 \cosh \frac{\beta}{2} \left(J \left(\frac{1}{2} \right) + \lambda \right) \right) - \sinh \frac{\beta}{2} \left(J \left(\frac{1}{2} \right) + \lambda \right) \right] \left(2 \cosh \frac{\beta}{2} \left(J \left(\frac{1}{2} \right) + \lambda \right) \right)^{q-1}, \\
& \left[\left(-\cosh \frac{\beta}{2} \left(-\frac{J}{2} + \lambda \right) \right) - \sinh \frac{\beta}{2} \left(-\frac{J}{2} + \lambda \right) \right] \left(2 \cosh \frac{\beta}{2} \left(-\frac{J}{2} + \lambda \right) \right)^{q-1} = \\
& \left[\left(-\cosh \frac{\beta}{2} \left(\frac{J}{2} + \lambda \right) \right) - \sinh \frac{\beta}{2} \left(\frac{J}{2} + \lambda \right) \right] \left(2 \cosh \frac{\beta}{2} \left(\frac{J}{2} + \lambda \right) \right)^{q-1}, \\
& -e^{\frac{\beta}{2} \left(-\frac{J}{2} + \lambda \right)} \left(2 \cosh \frac{\beta}{2} \left(-\frac{J}{2} + \lambda \right) \right)^{q-1} = -e^{-\frac{\beta}{2} \left(\frac{J}{2} + \lambda \right)} \left(2 \cosh \frac{\beta}{2} \left(\frac{J}{2} + \lambda \right) \right)^{q-1}, \\
& \frac{-e^{\frac{\beta}{2} \left(-\frac{J}{2} + \lambda \right)}}{-e^{-\frac{\beta}{2} \left(\frac{J}{2} + \lambda \right)}} = \left(\frac{2 \cosh \frac{\beta}{2} \left(\frac{J}{2} + \lambda \right)}{2 \cosh \frac{\beta}{2} \left(\frac{J}{2} - \lambda \right)} \right)^{q-1}, \\
& \frac{-e^{-\frac{\beta J}{4} + \frac{\lambda}{2}}}{-e^{\frac{\beta J}{4} + \frac{\lambda}{2}}} = \left(\frac{\cosh \frac{\beta}{2} \left(\frac{J}{2} + \lambda \right)}{\cosh \frac{\beta}{2} \left(\frac{J}{2} - \lambda \right)} \right)^{q-1}, \\
& e^{\frac{\beta \lambda}{2}} e^{\frac{\beta \lambda}{2}} = \left(\frac{\cosh \frac{\beta}{2} \left(\frac{J}{2} + \lambda \right)}{\cosh \frac{\beta}{2} \left(\frac{J}{2} - \lambda \right)} \right)^{q-1}, \\
& e^{\beta \lambda} = \left(\frac{\cosh \frac{\beta}{2} \left(\frac{J}{2} + \lambda \right)}{\cosh \frac{\beta}{2} \left(\frac{J}{2} - \lambda \right)} \right)^{q-1}, \\
& \ln e^{\beta \lambda} = \ln \left(\frac{\cosh \frac{\beta}{2} \left(\frac{J}{2} + \lambda \right)}{\cosh \frac{\beta}{2} \left(\frac{J}{2} - \lambda \right)} \right)^{q-1},
\end{aligned}$$

$$\beta\lambda = (q - 1)\ln\left(\frac{\cosh\frac{\beta}{2}\left(\frac{J}{2} + \lambda\right)}{\cosh\frac{\beta}{2}\left(\frac{J}{2} - \lambda\right)}\right). \quad (7.4)$$

Apêndice E – Expansão da função $F(T, B)$ de (3.4.1) para a $m \approx 0$

$$F(T, B) = \Phi|_{\eta=Jqm+B} = -Nk_B T \ln[2e^{-\beta D} \cosh(\beta(Jqm + B)) + 1] + \frac{JNq}{2} m^2. \quad (7.5)$$

Sendo $\beta Jq = A$, $B = 0$ (campo externo nulo), e $\cosh(Am) = \frac{e^{Am} + e^{-Am}}{2}$ a relação de cosseno hiperbólico, expande-se o primeiro termo do lado direito da expressão (7.5) e apresenta-se as passagens necessárias a energia livre de Landau descrita em (7.12).

Assim

$$\begin{aligned} e^{Am} + e^{-Am} &\approx 1 + (Am) + \frac{(Am)^2}{2!} + \frac{(Am)^3}{3!} + \frac{(Am)^4}{4!} + \frac{(Am)^5}{5!} + \frac{(Am)^6}{6!} + \\ &1 - (Am) + \frac{(Am)^2}{2!} - \frac{(Am)^3}{3!} + \frac{(Am)^4}{4!} - \frac{(Am)^5}{5!} + \frac{(Am)^6}{6!}, \end{aligned} \quad (7.6)$$

que reagrupado, apresenta a seguinte forma

$$e^{Am} + e^{-Am} \approx 2\left(1 + \frac{(Am)^2}{2!} + \frac{(Am)^4}{4!} + \frac{(Am)^6}{6!}\right), \quad (7.7)$$

ou ainda

$$2 \cosh(Am) \approx 2\left(1 + \frac{(Am)^2}{2!} + \frac{(Am)^4}{4!} + \frac{(Am)^6}{6!}\right), \quad (7.8)$$

em que

$$\ln[2e^{-\beta D}(\cosh(\beta Jqm)) + 1] = \ln\left[2e^{-\beta D}\left(1 + \frac{(Am)^2}{2!} + \frac{(Am)^4}{4!} + \frac{(Am)^6}{6!}\right) + 1\right], \quad (7.9)$$

com $2e^{-\beta D} = B$.

Rearranjando a equação (7.9), tem-se

$$\begin{aligned} & \ln \left[(B + 1) \left(1 + \frac{B}{B + 1} \left(\frac{(Am)^2}{2!} + \frac{(Am)^4}{4!} + \frac{(Am)^6}{6!} \right) \right) \right] \\ &= \ln(B + 1) + \ln \left(1 + \frac{B}{B + 1} \left(\frac{(Am)^2}{2!} + \frac{(Am)^4}{4!} + \frac{(Am)^6}{6!} \right) \right). \end{aligned}$$

Pelas séries de expansão, para $y = 0$, tem-se também que, $\ln(1 + y) \approx y - \frac{y^2}{2} + \frac{y^3}{3} - \dots$, sendo $y = \frac{B}{B+1} \left(\frac{(Am)^2}{2!} + \frac{(Am)^4}{4!} + \frac{(Am)^6}{6!} \right)$.

Onde $\ln[2e^{-\beta D} \cosh(\beta(Jqm + B)) + 1]$, da equação (7.5), assume

$$\begin{aligned} & \ln(B + 1) + \left[\left(\frac{B}{B + 1} \right) \left(\frac{(Am)^2}{2!} + \frac{(Am)^4}{4!} + \frac{(Am)^6}{6!} \right) \right] \\ & - \frac{1}{2} \left[\left(\frac{B}{B + 1} \right) \left(\frac{(Am)^2}{2!} + \frac{(Am)^4}{4!} + \frac{(Am)^6}{6!} \right) \right]^2 \\ & + \frac{1}{3} \left[\left(\frac{B}{B + 1} \right) \left(\frac{(Am)^2}{2!} + \frac{(Am)^4}{4!} + \frac{(Am)^6}{6!} \right) \right]^3, \end{aligned} \quad (7.10)$$

que pode ser reescrita da seguinte forma

$$\begin{aligned} & \ln(B + 1) + m^2 \left[\left(\frac{B(A)^2}{2(B + 1)} \right) \right] + m^4 \left[\frac{B(A)^4}{4!(B + 1)} - \frac{1}{2} \left(\frac{B(A)^2}{2(B + 1)} \right)^2 \right] \\ & + m^6 \left[\frac{B(A)^6}{6!(B + 1)} \left(\frac{1}{30} - \frac{B}{2(B + 1)} \right) + \left(\frac{B}{B + 1} \right)^2 \right]. \end{aligned} \quad (7.11)$$

Assim, a energia livre de Landau $F - F_0$, é dada como

$$F - F_0 = m^2 \left[-NkT \frac{(\beta jq)^2}{2} \left(\frac{2e^{-\beta D}}{1 + 2e^{-\beta D}} \right) + \frac{JqN}{2} \right]$$

$$\begin{aligned}
& +m^4 \left[-NkT \frac{(\beta jq)^4}{8} \left(\frac{2e^{-\beta D}}{1+2e^{-\beta D}} \right) \left(\frac{1}{3} - \left(\frac{2e^{-\beta D}}{1+2e^{-\beta D}} \right) \right) \right] \\
& +m^6 \left[-NkT \frac{(\beta jq)^6}{24} \left(\frac{2e^{-\beta D}}{1+2e^{-\beta D}} \right) \left(\frac{1}{30} - \frac{1}{2} \left(\frac{2e^{-\beta D}}{1+2e^{-\beta D}} \right) \right) + \left(\frac{2e^{-\beta D}}{1+2e^{-\beta D}} \right)^2 \right]. \quad (7.12)
\end{aligned}$$

Apêndice F – Desenvolvimento dos cálculos da função de partição Z da teoria de campo médio de Bethe-Peierls estendido para o modelo Blume-Capel, com $S = 0, \pm 1$

(4.1.3)

$$\begin{aligned}
Z &= \sum_{\{S_i\}} \exp(-\beta \mathcal{H}) = \sum_{\{S_i\}} \exp \left[\beta \left((JS_0 + B + \lambda) \sum_i S_i - D \sum_i S_i^2 \right) \right], \\
&= \sum_{S_1, S_2, \dots, S_q} \exp \left[\beta \left((JS_0 + B + \lambda) \sum_i S_i - D \sum_i S_i^2 \right) \right], \\
&= \left\{ \sum_S \exp[(\beta JS_0 + \beta B + \beta \lambda)S - DS^2] \right\}^q, \\
&= \sum_{\{S\}} [1 + 2e^{-\beta D} \cosh(JS_0 + B + \lambda)]^q. \quad (7.13)
\end{aligned}$$

Apêndice G – Cálculos da equação do campo efetivo λ de Bethe-Peierls estendido para o modelo Blume-Capel, com $S = 0, \pm 1$ (4.1.11)

$$\sum_{S_0=-S}^S e^{\beta(BS_0 - DS_0^2)} [F(S_0)]^{q-1} \left[S_0 F(S_0) - \frac{dF(S_0)}{dy} \right] = 0, \quad (7.14)$$

levando a função $F(S_0) = 2e^{-\beta D} \cosh \beta(JS_0 + B + \lambda) + 1$ da eq. (4.1.12) a equação 7.14, tem-se

$$\begin{aligned}
& \sum_{S_0=-S}^S e^{\beta(BS_0 - DS_0^2)} [2e^{-\beta D} \cosh \beta(JS_0 + B + \lambda) + 1]^{q-1} \\
& \left[S_0 (2e^{-\beta D} \cosh \beta(JS_0 + B + \lambda) + 1) - \frac{d(1 + 2e^{-\beta D} \cosh \beta(JS_0 + B + \lambda))}{dy} \right] = 0, \quad (7.15)
\end{aligned}$$

sendo $\gamma = \beta(JS_0 + B + \lambda)$. Derivando $\frac{d(1+2e^{-\beta D} \cosh\beta(JS_0+B+\lambda))}{d\gamma}$, com $B = 0$ considera-se

$$\sum_{S_0=-S}^S e^{\beta(-DS_0^2)} [2e^{-\beta D} \cosh\beta(JS_0 + \lambda) + 1]^{q-1} [S_0(2e^{-\beta D} \cosh\beta(JS_0 + \lambda) + 1) - 2e^{-\beta D} \sinh\beta(JS_0 + \lambda)] = 0, \quad (7.16)$$

que resolvida para a rede de spins $S = 0 \pm 1$, fornece equação transcendental λ na forma

$$\beta\lambda = \ln \left\{ \frac{\alpha + \alpha'}{[1 + 2e^{-\beta D} \cosh(\beta\lambda)]^{q-1}} + e^{-\beta\lambda} \right\}, \quad (7.17)$$

em que

$$\alpha = [2e^{\beta(-D-J-\lambda)} + 1][2e^{-\beta D} \cosh\beta(J + \lambda) + 1]^{q-1}, \quad (7.18)$$

e

$$\alpha' = [-2e^{\beta(-D-J+\lambda)} - 1][2e^{-\beta D} \cosh\beta(-J + \lambda) + 1]^{q-1}. \quad (7.19)$$