

## **Estudo analítico e numérico de transições de fase em sistemas magnéticos**

### **Analytical and numerical study of phase transitions in magnetic systems**

### **Estudio analítico y numérico de transiciones de fase en sistemas magnéticos**

Ana Paula Olivo<sup>1</sup>  
Rodrigo Santos da Lapa<sup>2</sup>

**Resumo:** Dentre os diversos modelos utilizados para o estudo das propriedades magnéticas, o modelo de Ising é muito conhecido pela simplicidade e capacidade de resolver problemas como a transição de fase do tipo ordem e desordem em materiais ferromagnéticos, foco desta pesquisa. O modelo foi estudado em duas dimensões, para compreender a influência de um campo externo nesta transição de fase quântica, sendo que este se mostrou um agente perturbador da ordem.

**Palavras chave:** Campo externo. Temperatura Crítica. Ferromagnético. Paramagnético.

**Abstract:** Among the several models used for the study of magnetic properties, the Ising model is known for the simplicity and capacity to resolve problems as the phase transitions of order disorder type in ferromagnetic materials, objective of this search. The model was studied in two dimensions to understand the influence of an external field in this quantum phase transition, which has proved to be a disturbing agent of the order.

**Keywords:** External field. Critical temperature. Ferromagnetic. Paramagnetic.

**Resumen:** Entre los diversos modelos utilizados para el estudio de las propiedades magnéticas, el modelo de Ising es muy conocido por la simplicidad y capacidad de resolver problemas como la transición de fase del tipo orden y desorden en materiales ferromagnéticos, foco de esta investigación. El modelo fue estudiado en dos dimensiones, para comprender la influencia de un campo externo en esta transición de fase cuántica, siendo que éste se mostró un agente perturbador del orden.

**Palabras clave:** Campo externo. Temperatura crítica. Ferromagnético. Paramagnético.

Envio 02/03/2018

Revisão 09/03/2018

Aceito 09/04/2018

<sup>1</sup> Graduanda. Universidade Federal da Integração Latino-Americana. E-mail: ana.olivo@aluno.unila.edu.br

<sup>2</sup> Doutor. Universidade Federal da Integração Latino-Americana. E-mail: rodrigo.lapa@unila.edu.br

## Introdução

O magnetismo espontâneo de alguns materiais chamados ferromagnetos, apesar de ser um fenômeno observado desde muito tempo atrás, as primeiras teorias para tentar explicá-lo são relativamente recentes, surgiram em meados do século XIX. As leis do eletromagnetismo clássico não são capazes de fornecer uma previsão para tal fenômeno, como foi mostrado pelo teorema de Bohr - van Leeuwen (Leeuwen, 1921, p. 361 e Nolting; Ramakanth, 2009). Somente com o desenvolvimento da mecânica quântica e o conceito de spin é que foi possível ter uma compreensão completa e coerente sobre o fenômeno, o que desencadeou um grande desenvolvimento desta área da física.

Atualmente existem diversos modelos teóricos, que descrevem de forma clara as propriedades magnéticas de materiais ferromagnetos ou antiferromagnetos. Um destes modelos foi proposto por Wilhelm Lenz e Ernst Ising, que em 1925 apresentaram resultados importantes sobre suas propriedades termodinâmicas em uma dimensão (Ising, 1925, p. 253). O modelo de Ising, como ficou conhecido desde então, tornou-se de grande interesse, sendo ainda hoje um modelo que se aplica de maneira satisfatória, para estudar não somente as propriedades magnéticas, mas também alguns outros casos que exibem transições do tipo ordem-desordem (Gennes, 1963, p. 132).

O modelo de Ising permite um estudo de spins que é capaz de fornecer inúmeras informações para diferentes modalidades de pesquisa. Mesmo sendo um modelo classificado como simples, os resultados obtidos por meio deste são compensatórios, como já foi comprovado por vários pesquisadores que optaram por este método de pesquisa ao decorrer de seus desenvolvimentos. Considerando estes fatores, esta pesquisa teve como suporte o modelo de Ising no seu embasamento.

Portanto, o trabalho foi baseado no modelo de Ising, em duas dimensões numa rede quadrada, sendo que, as interações levadas em consideração foram entre primeiros vizinhos. O objetivo do trabalho tem como propósito entender de que forma um campo externo transversal ao eixo de fácil magnetização, influenciará na transição de fase entre o ordenamento ferromagnético e paramagnético.

### **Fundamentação Teórica**

O magnetismo desde sempre se apresentou como uma área da física que fascina as pessoas, já que este podia ser visto no dia a dia, como por exemplo em imãs, ou servir como orientação, no caso das bússolas. Partindo de tanta curiosidade e mistérios, que ainda rondavam a magnetização de materiais, o magnetismo começou a ser estudado de forma mais aprofundada, tanto no nível macroscópico quanto no nível microscópico.

O primeiro tratado, que teve o nome de “De Magnete”, foi escrito por Gilbert, que ganhou o título de “Pai do Magnetismo”, ele foi o primeiro a dizer que Terra era uma espécie de grande magneto. Posteriormente novas teorias foram realizadas até o surgimento do conhecimento de que o magnetismo tinha sua origem devido á correntes microscópicas (Novak, 1999, p.1).

Ao final do século XIX, Faraday, que foi o primeiro a citar o termo campo magnético, introduziu a lei da indução e a caracterização de materiais conforme o comportamento magnético. Outro grande nome foi Maxwell, que formulou matematicamente as descobertas de Faraday, dando origem a base da eletrodinâmica, com seus equacionamentos (Novak, 1999, p. 2).

Somente no século XX, surgiu a mecânica quântica, um pensamento mais moderno que impulsionou o estudo do magnetismo. O desenvolvimento desta área de pesquisa foi efetuado de maneira direta com a mecânica estatística e com as propriedades da termodinâmica quântica, que do ponto de vista clássico deram origem a duas grandes teorias, sendo a primeira delas a teoria moderna do magnetismo, que consiste no conceito de campo molecular de Weiss e a Lei de Curie-Weiss, e a segunda o Teorema de Van Leeuwen, na qual descreve que o magnetismo não era capaz de ser explicado pela física clássica, era exclusivamente quântico (Novak, 1999, p. 2).

A mecânica quântica antiga foi capaz de explicar os momentos magnéticos atômicos, com o auxílio do modelo de Bohr. Já a mecânica quântica nova, se apresentou básica para a aplicabilidade em sólidos e na mecânica estatística, tendo como um de seus colaboradores um homem renomado até os dias atuais, Heisenberg.

Para se aprofundar no assunto, alguns conceitos são de extrema importância e devem ser citados e discutidos, pois tendo esse maior conhecimento sobre o assunto, fica mais compreensível algumas discussões do ramo de estudo da pesquisa, que serão tomados adiante.

Um desses conceitos são os polos magnéticos, que consistem em cargas elétricas, definidas por meio da lei de Coulomb. Essa força se mostra proporcional ao campo ou intensidade do campo magnético. Já os dipolos magnéticos ou momentos magnéticos, são reais e quando situados em um campo estão sujeitos a sofrer a ação de um torque. Na prática os trabalhos são realizados em tamanhos macroscópicos, ou seja, compostos por vários dipolos magnéticos (Novak, 1999, p. 3).

Outro conceito de grande relevância é a susceptibilidade magnética que caracteriza um material magnético por meio de sua resposta a um campo magnético aplicado. Quando o material sofre alteração pela aplicação do campo, dizemos que a susceptibilidade é alterada. Este termo depende de forma direta com a temperatura, campo e a posição na amostra. As principais tipologias de comportamentos magnéticos conhecidos são o diamagnético, paramagnético, ferromagnético, ferrimagnético e antiferromagnético (Novak, 1999, p. 4).

O diamagnetismo é uma propriedade que materiais com cargas em movimento demonstram quando expostos a um campo externo. A susceptibilidade para este tipo de material é pequena, negativa e independente da temperatura, em outras palavras, a magnetização advinda de um campo externo é contrária e proporcional ao campo (Novak, 1999, p. 5).

No caso do paramagnetismo a susceptibilidade é pequena e negativa, e a dependência com a temperatura depende da origem do material. Este tipo de comportamento magnético presume a existência dos momentos magnéticos. Já os materiais ferromagnéticos possuem uma magnetização espontânea, quando a temperatura se encontra abaixo da temperatura crítica, ou seja, da temperatura de transição de fase (Novak, 1999, p. 5).

A magnetização espontânea dos materiais ditos ferromagnéticos só é possível na presença de alguma interação entre os momentos magnéticos atômicos, capaz de os ordenar em uma direção de forma que o momento magnético total obtenha um resultado diferente de zero. As principais interações que podem existir são o dipolo-dipolo clássica, a interação de troca direta, a interação de troca indireta, ou de supertroca, a interação de troca indireta do tipo RKKY e a interação de troca indireta em semicondutores (Novak, 1999, p. 7).

Já no ferrimagnetismo os materiais que são vistos como ferromagnéticos, com a magnetização espontânea em temperaturas abaixo da temperatura crítica, acabam não correspondendo a magnetização de saturação, ao qual é esperado em íons paramagnéticos, respondendo a forma paralela quando a temperatura tende a zero. Para o antiferromagnetismo os materiais não tem magnetização espontânea, na visão macroscópica, a temperaturas inferiores, sendo que, em temperaturas menores que a temperatura crítica, tanto a magnetização quanto a susceptibilidade, diminuem juntamente com a temperatura que tende a zero. Porém, quando a temperatura se mostra acima da temperatura crítica, o comportamento é similar ao de um paramagneto com uma temperatura de Curie Weiss abaixo de zero (Novak, 1999, p. 9).

O foco do presente estudo é em materiais ferromagnéticos, que possuem os momentos magnéticos praticamente alinhados, microscopicamente, quando a temperatura está abaixo da temperatura crítica. É importante lembrar que quando o material apresenta uma magnetização espontânea, este não está exposto a um campo externo, ou seja, está em um campo nulo, já a magnetização de saturação acontece quando existe a presença de um campo alto (Novak, 1999, p. 11).

66

Tendo conhecimento das teorias que serviram e servem como base e os principais conceitos do magnetismo, é possível se fazer uma análise sobre os modelos e desempenhar de forma mais avançada o propósito da pesquisa, sendo que nela se faz necessário o entendimento de diversos modelos, como de Ising e de Heisenberg, dois grandes pensadores que de certa forma simplificaram os estudos sobre o magnetismo, e possibilitaram o avanço das pesquisas nesta grande área da ciência.

Usufruindo do desenvolvimento da mecânica quântica e do estudo de sistemas microscópicos de muitas partículas que permitiram construir teorias microscópicas e modernas do magnetismo, sabe-se que as propriedades magnéticas estão associadas aos momentos magnéticos (spins) localizados nos íons e tem origem devido aos spins localizados ou devido aos spins dos elétrons em movimento na rede (Weiss, 1907, p. 661).

O modelo de Heisenberg, que pode ser visto na Equação 1, é um exemplo de modelo que descreve a interação entre estes spins através do princípio de exclusão de Pauli. A energia de interação, conhecida também interação de troca  $J_{ij}$ , é a diferença entre os níveis de energia dos elétrons no estado tripleto, estado esse em que os spins se encontram paralelos, e singleto,

estado com os spins anti-paralelos. Quando o estado de menor energia entre os elétrons é o tripleto, então eles se alinham paralelamente. Quando isto acontece num material com muitos spins, dá origem à magnetização espontânea do material ferromagnético (Líbero 2000 p. 346).

$$H = \sum_{ij} J_{ij} \bar{\sigma}_i \cdot \bar{\sigma}_j \quad (1)$$

O modelo de Ising é mais simplificado, nele as interações acontecem em pares de spins, mas os resultados produzidos condizem com o todo, demonstrando efeitos coletivos. Este modelo, que apesar de ser simples é capaz de produzir inúmeras informações, será aplicado no caso bidimensional, numa rede quadrada com a presença de um campo externo transversal. O hamiltoniano é dado abaixo (Strecka; Jascur, 2015, p. 1):

$$H = \sum_{ij} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - B \sum_i \sigma_i^x \quad (2)$$

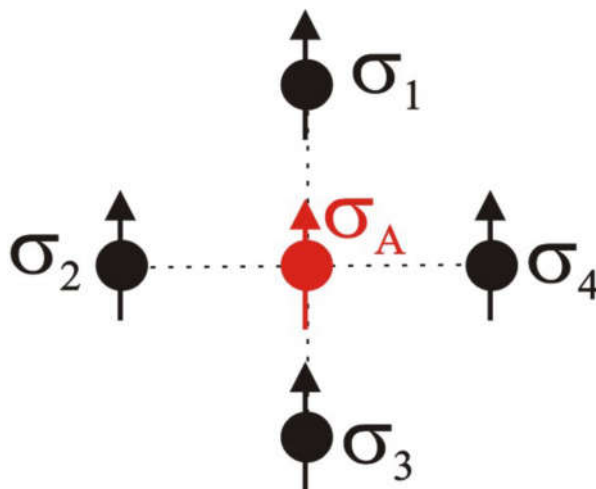
Em que  $\sigma_i$  e  $\sigma_j$  representam os spins  $i$  e  $j$  adjacentes, que interagem com energia  $J_{ij} > 0$ , e a  $\sigma_i$  e  $\sigma_j$  é atribuído um valor +1 ou -1 (spin orientado para cima ou para baixo, respectivamente).

A energia  $J_{ij}$  no Hamiltoniano pode ser expressa com sinal positivo ou negativo, sendo que o ordenamento ferromagnético possui valor maior que zero, já que seu estado fundamental tem todos os spins ordenados de forma paralela na rede cristalina, enquanto o ordenamento antiferromagnético, tem seu valor menor que zero, com seus spins, no estado fundamental, de maneira antiparalela.

O campo externo tem magnitude  $B$  e é orientado na direção  $x$ . O fato de  $\sigma_i^z$  e  $\sigma_i^x$  não serem comutativos, implica que este modelo exhibe características quânticas. O interesse é exatamente nessas características do modelo que podem ser capturadas com a técnica utilizada neste trabalho.

Neste trabalho o estudo é baseado no modelo de Ising, em duas dimensões numa rede quadrada com interações entre primeiros vizinhos, modelo este que pode ser visualizado e melhor entendido pela Figura 1. O interesse está em observar como este campo pode induzir na desordem e conseqüentemente na transição entre uma fase ordenada (ferromagnética) e uma fase desordenada (paramagnética) mesmo a temperatura nula, ou seja, sem interferência das flutuações térmicas.

Figura 1 – Ilustração das interações entre primeiros vizinhos numa rede quadrada.



Fonte: Lapa, 2009, p.33

### Metodologia

Para estudar a transição de fase quântica, do tipo ordem desordem, foi utilizada uma teoria de campo efetivo associada à técnica do operador diferencial, que já foi empregada em vários modelos de spins. Nesta técnica, é calculada a magnetização  $m$ , por meio da Equação 3, na qual,  $\alpha_x = \cosh(KDx)$  e  $\beta_x = \text{sen}(KDx)$  (Cabral Neto, 2005, p. 56).

$$m = \langle \prod (\alpha_x + \sigma \beta_x) \rangle F(x)|_{x=0} \quad (3)$$

No caso da Figura 1, se tem uma rede quadrada e  $\{\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4\}$  sendo os primeiros vizinhos do spin central ( $\sigma_A$ ) do aglomerado. Apesar da técnica ser uma forma de simplificação dos cálculos, ao decorrer de seu desenvolvimento são necessários algumas manipulações matemáticas, e é encontrado várias equações de correlações entre funções, sendo necessário o desacoplamento destas para se obter o completo desenvolvimento do cálculo da magnetização.

A transição de fase de um dado sistema é caracterizada por funções termodinâmicas particulares, que para o caso de sistemas magnéticos é associada a susceptibilidade e a magnetização. Nos sistemas magnéticos do tipo ferromagnético, a magnetização é vista como um parâmetro de ordem, e a temperatura e o campo magnético são fatores externos que podem afetar a ordenamento do sistema (Cabral Neto, 2005, p. 28).

Alguns dos exemplos mais comuns de propriedades termodinâmicas dos sistemas magnéticos são a magnetização total e de subrede, a susceptibilidade total e de subrede, a energia interna e o calor específico. A presença de um campo externo pode afetar de forma significativa o comportamento dessas propriedades, levando assim a uma transição de fase. Dessa forma, o cálculo para a obtenção das propriedades termodinâmicas é de extrema importância para o desenvolvimento do estudo.

Para se obter as propriedades termodinâmicas foi utilizado o formalismo da física estatística. O objetivo central é o cálculo da função de partição, através da qual pode-se obter as propriedades termodinâmicas do modelo. Esta função é expressa pela Equação 4, em que,  $Tr$  é o funcional traço,  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ , sendo  $k_B$  a constante de Boltzmann e  $T$  a temperatura absoluta, e  $H$  o hamiltoniano, que é capaz de descrever o sistema físico estudado (Cabral Neto, 2005, p. 38).

$$Z = Tr[e^{-\beta H}] \quad (4)$$

Em alguns casos esta função é impossível de ser calculada analiticamente, dessa forma, os métodos numéricos se fazem necessários. Atualmente, existem diversos métodos analíticos e numéricos destinados a esta função. A técnica do operador diferencial ofereceu uma simplificação considerável para este cálculo, de acordo com a aproximação utilizada neste trabalho, que se fez necessária devido ao fato de o cálculo da função de partição possuir um número infinito de configurações, o que torna difícil se encontrar uma solução exata para o problema.

O trabalho é dividido em duas partes, primeiramente são realizados os cálculos analíticos, onde se obtém um conjunto de equações de estado autoconsistentes. Posteriormente estas equações são resolvidas de forma numérica, utilizando algoritmos (em linguagem Fortran) e a partir disso se faz possível obter os resultados, que são expressos por meio de gráficos.

### Resultados e Discussões

De acordo com os cálculos tanto numéricos quanto analíticos, foram concluídos quatro resultados principais e importantes que podem ser demonstrados por meio de gráficos.

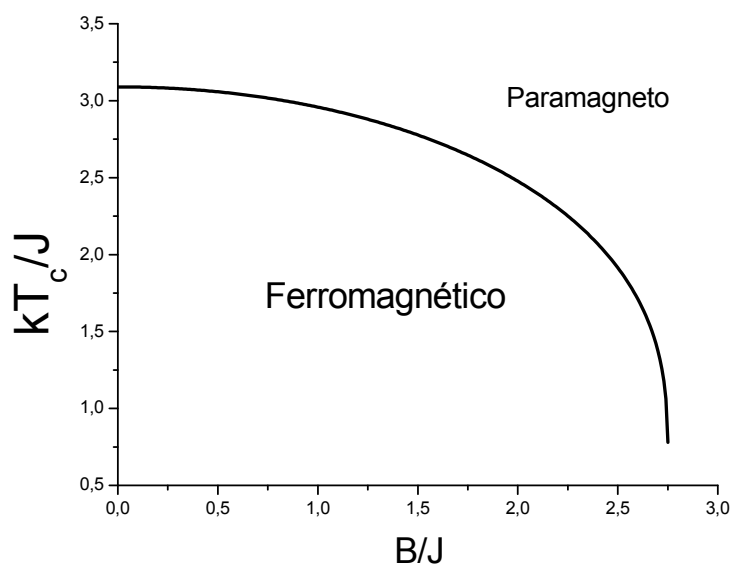
No primeiro gráfico, é possível verificar a diminuição da temperatura crítica ( $T_c$ ) com o campo externo, temperatura essa que demonstra uma mudança de fase do tipo ordem



desordem, tal que, quando o campo atinge um certo valor crítico ( $B_c$ ), a temperatura vai a zero. Para valores de campo externo menores que o campo externo crítico ( $B < B_c$ ), a fase tem ordenamento ferromagnético. Para valores de campo externo maiores que o campo externo crítico ( $B > B_c$ ), mesmo a temperatura zero, o ordenamento da fase se dá como paramagnética.

Dessa forma, pode-se concluir que o campo externo é um agente perturbador que destrói a ordem do sistema magnético. Esta transição de fase que ocorre a temperatura zero, pode ser considerada uma transição de fase quântica, em que as flutuações quânticas provenientes do campo externo são o único agente causador, já que não existem flutuações térmicas neste caso.

Gráfico 1 – Comportamento da temperatura de Curie em função do campo externo.

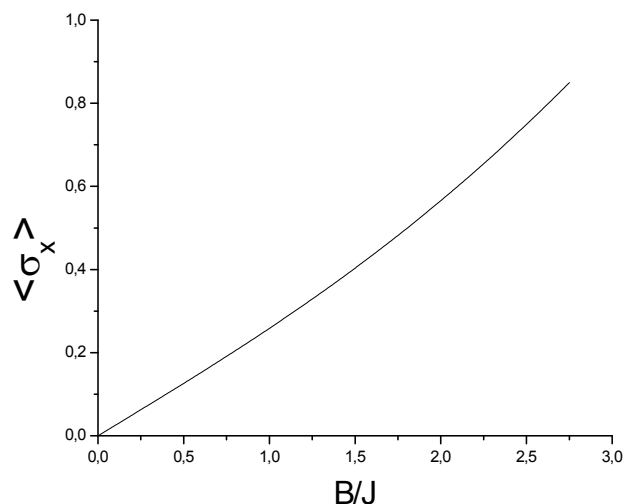


Fonte: Autoria própria, 2017.

Ao observar o Gráfico 2, pode-se notar o “grau de desordem” por meio do cálculo de  $\langle \sigma_x \rangle$ , que cresce juntamente com o aumento do campo externo, atingindo seu valor máximo para o campo externo crítico. É visível a interferência do campo externo no grau de desordem, que cresce gradativamente com o aumento do valor do campo.

O gráfico serve como uma afirmação de que o campo aplicado transversal à direção de fácil magnetização realmente atua como um agente perturbador da ordem do sistema.

Gráfico 2 - Grau de desordem em função do campo externo.



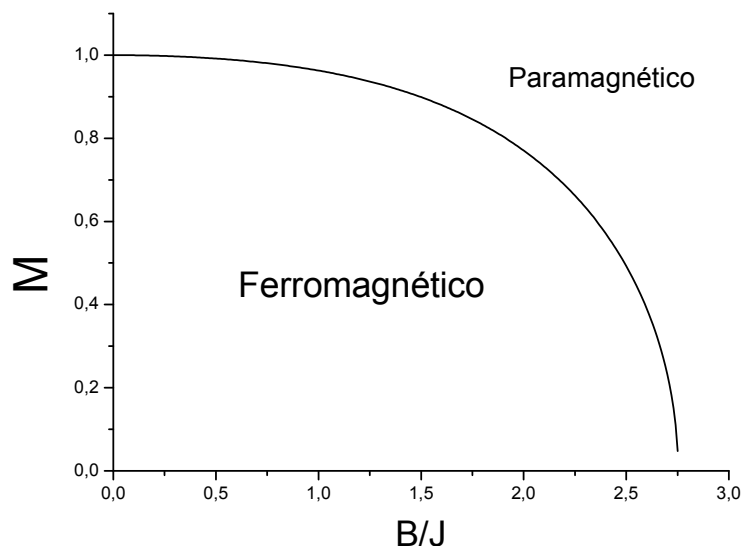
Fonte: Autoria própria, 2017.

71

No entanto, ao analisar o Gráfico 3, se pode ter uma ideia do comportamento da magnetização em função do campo externo para temperatura nula. Este gráfico representa um diagrama de fase quântico, pois mostra que o parâmetro de ordem vai a zero, caracterizando uma transição de fase sem flutuações térmicas, ou seja, sem a influência da temperatura.

Novamente se tem a confirmação da desordem causada pelo campo externo no sistema magnético, já que quanto maior o campo externo aplicado no sistema, menor a magnetização que este apresenta. O fato ocorre até o ponto em que a magnetização se anula, ou seja, até o campo externo crítico, que é capaz de tornar o ordenamento paramagnético.

Gráfico 3 - Comportamento da magnetização em função do campo externo.

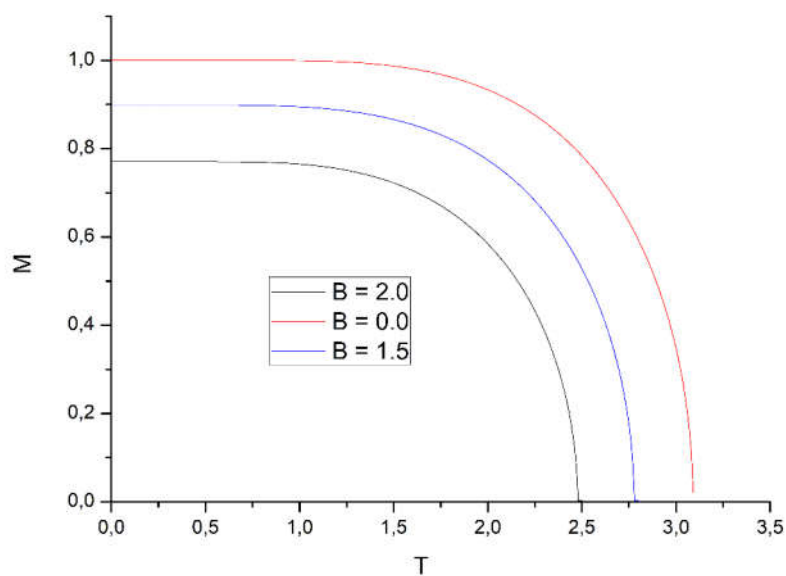


Fonte: Autoria própria, 2017.

Já no último gráfico deixa evidente a relação da magnetização, temperatura e campo externo, em que, ao submeter um campo igual a zero, se tem um valor máximo de magnetização e uma temperatura crítica próxima as encontradas em literaturas, para um sistema que não sobre interferência de um campo externo.

No entanto, quando se propõe um aumento no valor do campo externo, tanto a magnetização quanto a temperatura têm seus valores reduzidos. Esse comportamento acontece até ser alcançado o valor do campo crítico, já que quando incorporados campos com valores maiores que o campo crítico a magnetização se apresenta nula, ou seja, o gráfico apresenta uma reta para a magnetização, demonstrando um ordenamento paramagnético. Portanto, este gráfico serve como uma confirmação de que os resultados obtidos anteriormente foram adequados.

Gráfico 4: Magnetização em função da Temperatura para diferentes valores do campo externo.



Fonte: Autoria própria, 2017.

O valor da temperatura crítica de aproximadamente 3,08 Kelvin, na ausência de campo externo, confirmado pelo primeiro e pelo último gráfico, pode ser comparada com o resultado obtido por Cabral Neto (2005), que desempenhou sua tese de doutorado sobre sistemas magnéticos, e obteve um resultado de 3,09 Kelvin, para o caso de uma rede quadrada bidimensional, muito similar ao encontrado neste trabalho. Cabe ressaltar ainda que, como os resultados foram expostos em gráficos, este valor se trata de uma aproximação, ou seja, o resultado se torna ainda mais compatível com o já existente.

Tendo os quatro gráficos com resultados coerentes, quando comparados entre si e entre bibliografias do ramo de estudo, já citadas anteriormente, se pode concluir o comportamento da magnetização quando um campo externo é incorporado num sistema magnético, sendo que este se torna um perturbador da ordem, fazendo com que o material ferromagnético sofra uma transição de fase e passe para o ordenamento paramagnético.

### Considerações Finais

Diante dos estudos efetuados se conclui que ao se aplicar um campo externo transversal em um material magnético, o mesmo interfere de tal modo que minimiza a magnetização e tende a diminuir a temperatura da transição de fase, temperatura crítica ( $T_c$ ). Ou seja, o ponto onde o parâmetro de ordem se cancela e dá espaço a um novo ordenamento, no caso deste sistema magnético, torna o material ferromagnético para paramagnético. Sendo assim, este tende a desordem dos sistemas magnéticos, desalinhando a configuração microscópica dos momentos magnéticos.

O resultado obtido através dos gráficos, de aproximadamente 3.08 Kelvin, para a temperatura de Curie, ou seja, temperatura crítica, se aproxima do valor já existente em bibliografias deste campo de estudo, o que indica um resultado satisfatório. Cabe ressaltar também, a boa aceitação dos métodos escolhidos para o desenvolvimento da pesquisa, tendo em vista que estes, se apresentaram capazes de concluir o projeto de pesquisa com resultados coerentes.

Dessa forma, fica evidente que a técnica e o modelo utilizados foram ferramentas de extrema importância para concluir informações relevantes, sobre as propriedades físicas do modelo de Ising, numa rede quadrada, quando comparado com outras técnicas disponíveis.

### Referências

- CABRAL NETO, J.S. **Estudo sistemático das propriedades termodinâmicas e criticalidade de filmes finos e super-redes magnéticas**. São Carlos: UFSCar, 2005. Disponível em: <<https://repositorio.ufscar.br/bitstream/handle/ufscar/4968/TeseJSCN.pdf?sequence=1>>. Acesso em: 05 de fev. de 2018.
- GENNES, P. G. **Solid State Communications**. 1, 132, 1963.p. 132-137.
- ISING, E. **Theorie des Ferromagnetismus**; Z. Phys. 31 (1).1925. p. 253-258.
- LAPA, R.S. **Modelo de Heisenberg Quântico Ferromagnético Frustrado numa Rede Quadrada Anisotrópica**. Universidade Federal do Amazonas: Manaus, 2009.
- LEEUWEN, V.; JOHANNA H. **Problèmes de la théorie électronique du magnétisme**. J. de Physique et le Radium. 2 (12), 1921. p. 361-377.

LÍBERO, V. L. **Revista Brasileira de Ensino de Física** 22, 346, 2000.

NOLTING .W.; RAMAKANTH, A. **Quantum theory of Magnetism**. Springer - Verlag Berlin Heidelberg 2009.

NOVAK, M.A. **Introdução ao Magnetismo**. IF - UFRJ - II Escola Brasileira de Magnetismo 1999.

STRECKA, J.; JASCUR, M. **A brief account of the ising and ising-like models mean-field, effective-field and exact results**. Institute of Physics, SAS, Bratislava, Slovakia, nov., 2015, p.1-133.

WEISS, P. **Hypothese du champ Moleculaire et de la Propriete Ferromagnetique**. J. de Phys.- 6. 1907.p. 661 - 690.