

ANAIIS

EICTI 2017

6° Encontro de
Iniciação Científica

2° Encontro de Iniciação
ao Desenvolvimento
Tecnológico e Inovação

4 a 6 de outubro de 2017

Universidade Federal da Integração Latino-Americana (UNILA)
Av. Tarquínio Joslin dos Santos, nº 1000
Foz do Iguaçu, Paraná – Brasil



Realização:



Apoio:



ESTUDO ANALÍTICO E NUMÉRICO DE TRANSIÇÕES DE FASE EM SISTEMAS MAGNÉTICOS

OLIVO, Ana Paula.

Estudante do Curso de Engenharia Química, bolsista PIBIS-FA - ILATIT
- UNILA;

E-mail: ana.olivo@aluno.unila.edu.br;

LAPA, Rodrigo Santos da

Docente do curso de Engenharia Física – ILACVN – UNILA.

Email: rodrigo.lapa@unila.edu.br.

1 INTRODUÇÃO

O magnetismo de alguns materiais chamados ferromagnetos apesar de ser um fenômeno observado desde muito tempo atrás, as primeiras teorias para tentar explica-lo são relativamente recentes (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 (NOLTING; RAMAKANTH, 2009 – p.85). 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 com boa precisão as propriedades magnéticas de materiais ferromagnetos ou antiferromagnetos. Um destes modelos foi proposto por Wilhelm Lenz e Ernst Ising, que em 1925 apresentou 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, e é ainda hoje, um modelo que se aplica com muito sucesso para estudar não somente as propriedades magnéticas, mas também a alguns outros casos que exibem transições do tipo ordem-desordem (GENNES, 1963 – p.132).

Neste trabalho vamos estudar o modelo de Ising em duas dimensões numa rede quadrada com interações entre primeiros vizinhos, e a presença de um campo externo transversal à direção de fácil magnetização. Nosso interesse está em observar como este campo pode induzir desordem e conseqüentemente uma transição entre uma fase ordenada (ferromagnética) e uma fase desordenada (paramagnética) mesmo a temperatura nula.

2 METODOLOGIA

Para estudar a transição de fase mencionada anteriormente, foi utilizada uma teoria de campo efetivo associada à técnica do operador diferencial (KANEYOSHI, 1993 – p.703), e as propriedades termodinâmicas são obtidas utilizando o formalismo da física estatística. O objetivo central é o cálculo da função de partição, através da qual podemos obter as propriedades termodinâmicas do modelo. Em alguns casos esta função é impossível de ser calculada analiticamente. Atualmente existem diversos métodos, desde analíticos a numéricos destinados a esta função. A técnica do operador diferencial oferece uma simplificação considerável para este cálculo de acordo com a aproximação utilizada neste trabalho.

O trabalho é dividido em duas partes, primeiro os cálculos analíticos são realizados onde obtivemos um conjunto de equações de estado autoconsistentes. Estas equações são resolvidas numericamente utilizando algoritmos (em linguagem Fortran) e a partir disso obtivemos nossos resultados.

3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

O desenvolvimento da mecânica quântica e o estudo de sistemas microscópicos de muitas partículas permitiu construir teorias microscópicas e modernas do magnetismo como, por exemplo, a teoria de Weiss (WEISS, 1907 – p.661). Atualmente sabe-se que as propriedades magnéticas estão associadas aos momentos magnéticos (spins) localizados nos íons e tem origem i) devido aos spins localizados ou ii) devido aos spins dos elétrons em movimento na rede.

O modelo de Heisenberg (eq. (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 (spins paralelos) e singleto (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, isto dá origem à magnetização espontânea do material ferromagnético.

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

O modelo de Ising é mais simplificado e vamos estudá-lo no caso bidimensional numa rede quadrada com a presença de um campo externo transversal. O hamiltoniano é dado abaixo

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

onde σ_i e σ_j representam os spins i e j adjacentes que interagem com energia $J_{ij} > 0$, e a σ_i e σ_j é atribuído um valor $+1$ ou -1 (spin orientado para cima ou para baixo respectivamente). O campo externo tem magnitude B e é orientado na direção x . O fato de σ_i^z e σ_i^x não serem comutativos, implica que este modelo exibe características quânticas. Estamos interessados nessas características que podem ser capturadas com a técnica utilizada no presente trabalho.

4 RESULTADOS

De acordo com nossos cálculos tanto numéricos e analíticos, obtivemos três resultados principais importantes que são mostrados através dos gráficos abaixo.

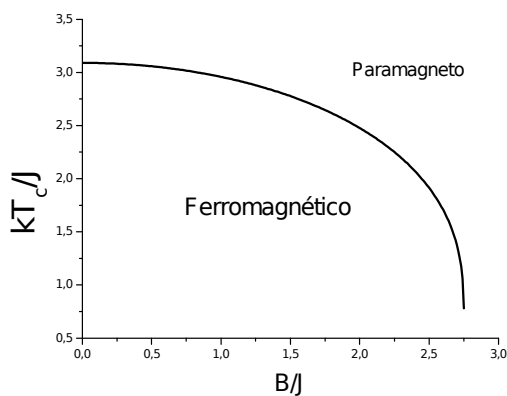


Gráfico 1: Temperatura de Curie em função do campo externo.

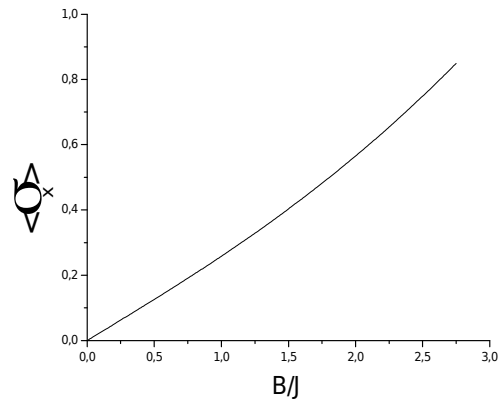


Gráfico 2: Grau de desordem em função do campo externo.

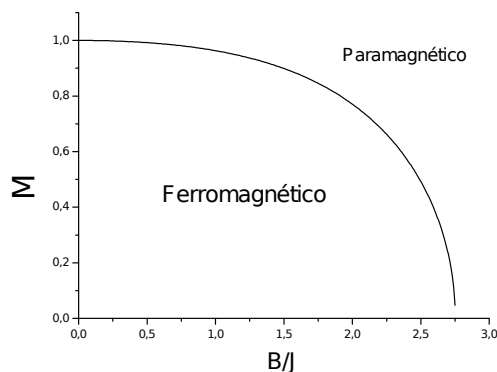


Gráfico 3: Magnetização em função do campo externo.

No gráfico 1 é possível verificar a diminuição da temperatura T_c com o campo externo, tal que quando o campo atinge um certo valor crítico B_c , a temperatura vai a zero. Para valores de $B < B_c$ a fase tem ordenamento ferromagnético. Para $B > B_c$, mesmo a temperatura zero, a fase é desordenada ou paramagnética. Então podemos concluir que o campo externo é um agente perturbativo que destrói a ordem do sistema. Esta transição de fase a temperatura zero pode ser considerada uma transição de fase quântica onde as flutuações quânticas provenientes do campo externo são o único agente causador desta, já que não existem flutuações térmicas neste caso.

No gráfico 2 podemos observar o “grau de desordem” através do cálculo de $\langle \sigma_x \rangle$, que cresce juntamente com o aumento do campo, atingindo seu valor máximo para B_c .

No gráfico 3 podemos observar o comportamento da magnetização em função do campo externo para temperatura nula. Esta figura representa um diagrama de fase quântico, pois mostra que o parâmetro de ordem vai a zero caracterizando uma transição de fase sem flutuações térmicas.

5 CONCLUSÕES

Diante dos resultados podemos constatar que de fato o campo externo transversal atua como um agente de desordem. Fica evidente também que a técnica conseguiu capturar as principais características do modelo. Portanto o desenvolvimento do projeto até o momento tem sido um sucesso.

Pretendemos ainda estender nossos estudos para calcular outras quantidades relevantes como entropia e calor específico, para obtermos informações mais completas sobre as propriedades termodinâmicas do modelo.

6 PRINCIPAIS REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

E. Ising – *Beitragzur Theorie des Ferromagnetismus*; Z. Phys. 31 (1) pp. 253-258 (1925).

P. G. de Gennes, *Solid State Communications* 1, 132 pp. 132-137 (1963).

P. Weiss, L'Hypothese du champ Moleculaire et de la Propriete Ferromagnetique, J. de Phys. 6, (1907) pp. 661-690.

T. Kaneyoshi, *Acta Physica Polonica A* 6, 83 pp.703-738 (1993).

W. Nolting and A. Ramakanth – *Quantum theory of Magnetism*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2009.