

INTRODUÇÃO AOS SISTEMAS DE MOMENTOS LOCALIZADOS INTERAGENTES

Hanna Bartholdy Vieira, Ben Hur Bernhard

INTRODUÇÃO

O surgimento da ordem magnética em um sistema de momentos localizados pode ser descrito através de três abordagens alternativas. Na teoria de Weiss, a interação entre os spins é levada em conta através de um “campo molecular” \mathbf{B}_m atuando sobre cada spin devido à interação com os outros spins na sua vizinhança. Em presença de um campo magnético externo \mathbf{B} , o campo efetivo será dado pela soma $\mathbf{B}_{\text{eff}} = \mathbf{B} + \mathbf{B}_m$. Ao supor o campo molecular proporcional à magnetização \mathbf{M} , surge a possibilidade de uma solução autoconsistente com magnetização não nula, correspondendo à fase ordenada, mesmo na ausência de campo aplicado.

A teoria fenomenológica de Landau baseia-se na expansão da energia livre g na forma de uma série de potências na magnetização m , que é o parâmetro característico da fase ferromagnética. Os valores estáveis de m são aqueles que minimizam a energia livre de Landau. As soluções não nulas de m representam a fase ferromagnética com magnetização espontânea.

O modelo de Ising é um modelo microscópico, que foi introduzido como um caso simplificado do modelo de Heisenberg, onde a interação entre spins é descrita através de produtos de operadores de spin $S_i S_j$. No modelo de Ising, os spins estão distribuídos sobre uma rede cristalina, podendo estar em 2 estados, com spin apontando para cima ou para baixo. Na fase ordenada, que ocorre a baixa temperatura, todos os spins estão alinhados numa mesma direção, enquanto, na fase desordenada, a alta temperatura, a magnetização líquida é nula. Essas fases são delimitadas por uma temperatura crítica T_c . Na aproximação de campo médio, o produto das variáveis de spin são desacoplados na forma $S_i S_j = \langle S_i \rangle S_j + \langle S_j \rangle S_i$. O cálculo autoconsistente de $\langle S_i \rangle$ produz uma solução não nula, que corresponde à mesma solução descrita na teoria de Weiss e na teoria de Landau. Neste trabalho, exploramos a equivalência entre essas 3 abordagens.

Por outro lado, ao utilizarmos aproximações mais rigorosas para o modelo de Ising do que a aproximação do campo médio, os resultados divergem. Isso foi investigado através de programas utilizando o método de simulações de Monte Carlo, que fornecem resultados mais próximos das soluções exatas do modelo de Ising. Isso pode ser evidenciado nas curvas obtidas para a magnetização e o calor específico do modelo em função da temperatura.

DESENVOLVIMENTO

Na teoria de Weiss, é introduzido o conceito de campo molecular B_m , onde os momentos magnéticos são alinhados devido a esse campo, atuando em cada spin individual, produzido devido a interação com os outros spins na sua vizinhança. Assumindo essa hipótese, o campo molecular será proporcional a magnetização \mathbf{M} , que definimos como o valor médio do momento magnético por unidade de volume, dado por $B_m = \lambda M$ onde λ é uma constante em que parametriza a força do campo molecular como uma função da magnetização.

A resposta magnética ao campo magnético externo \mathbf{B} descrita pela susceptibilidade magnética χ , que é definida por $\mu_0 M = \chi B$

Na presença do campo molecular, temos o campo efetivo dado por

$$B_{\text{eff}} = B + B_m$$

de modo que podemos escrever a magnetização do campo efetivo como

$$\mu_0 M = \chi_p B_{\text{eff}}$$

Usando as equações acima obtemos,

$$\chi^{-1} = \chi_p^{-1} - \frac{\lambda}{\mu_0}$$

Utilizando a lei de Curie $\chi_p(T) = \frac{C}{T}$, temos a lei de Curie-Weiss, dada por,

$$\chi(T) = \frac{C}{T - T_C}$$

onde C é a constante de Curie, e a temperatura de Curie é dada por $T_C = \frac{C\lambda}{\mu_0}$.

A tendência de alinhamento dos spins pela ação do campo molecular compete com a agitação térmica dos átomos, que aumenta com a temperatura. A temperatura de Curie T_C separa a fase magnética ordenada, que acontece quando $T_C > T$, da fase desordenada, quando $T_C < T$.

A descrição microscópica do ferromagnetismo é dada pelo modelo de Heisenberg, que descreve o comportamento de um sistema de spins através do hamiltoniano

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} S_i \cdot S_j + g \mu_B \sum_i S_i \cdot B,$$

onde o S_i é o operador de momento angular dos spins, e $J_{ij} > 0$ favorece um alinhamento paralelo entre os spins nos sítios i e j .

Aplicando uma aproximação de campo médio ao produto de operadores de spin, obtemos um hamiltoniano efetivo

$$H_{\text{ef}} = g \mu_B \sum_i S_i \cdot (B + B_m),$$

com um campo molecular dado por

$$B_m = \frac{-1}{g \mu_B} \sum_{i,j} J_{ij} \langle S_j \rangle.$$

A magnetização é dada por

$$M = -n g \mu_B \langle S^z \rangle k$$

onde o valor médio $\langle S^z \rangle$ pode ser calculado utilizando os métodos da Mecânica Estatística.

Na teoria de Landau, a energia livre F é expressa como uma série de potências na magnetização M (até quarta ordem):

$$F(M, T) = F_0 + a(T) M^2 + b M^4 - \mu_0 H M$$

onde F_0 e b são constantes, sendo que $b > 0$. O termo $a(T)$ muda o sinal na condição em que $T = T_C$, assim podemos considerar que $a(T) = a_0(T - T_C)$, a_0 será uma constante positiva. Para calcular $m(T, H)$ minimiza-se F impondo $\left(\frac{\partial F}{\partial M} \right)_T = 0$, analisando o estado de equilíbrio. Isso implica que

$$\mu_0 H = 2 a_0 (T - T_C) M + 4 b M^3$$

Na ausência de campo, temos as seguintes soluções para a equação:

$$M=0 \text{ ou } M=\pm\sqrt{\frac{a_0}{2b}}(T-T_c)^{\frac{1}{2}}$$

A solução não magnética torna-se instável a uma temperatura abaixo da temperatura crítica, onde $\left(\frac{\partial^2 g}{\partial m^2}\right)_T = 0$, de modo que o mínimo de $F(M, T)$ é dado pela solução com $M \neq 0$, para $T_c > T$.

A susceptibilidade magnética é dada por,

$$\chi_p = \frac{M}{H} = \frac{\mu_0}{2a_0(T-T_c)}$$

Se compararmos com a lei de Curie-Weiss, obtemos o coeficiente $a_0 = \frac{\mu_0}{2C}$, onde C é a constante de Curie,

Quando $T = T_c$, temos uma isotérmica crítica, assim $a=0$ e a magnetização fica,

$$M = \left(\frac{\mu_0}{4b}\right)^{1/3} H^{1/3}$$

o que fornece uma linha reta num diagrama $M^2 \times (H/M)$ (traçado de Arrott).

O modelo de Ising considera variáveis de spin $s_i = \pm 1$ posicionadas nos sítios i de uma rede cristalina, onde cada spin interage com os outros spins da rede. A energia total de uma configuração $\{s_i\}$ sem campo externo é dada por:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j.$$

Na aproximação de campo médio, o efeito dos outros spins da rede é descrito por um campo efetivo proporcional à magnetização $\langle S \rangle$. Isso gera a equação autoconsistente:

$$\langle S \rangle = \tanh(4\beta J \langle S \rangle)$$

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

Para encontrar a temperatura crítica T_c fazemos uma expansão para $\langle S \rangle \approx 0$, obtendo

$$\langle S \rangle \approx 4\beta J \langle S \rangle \Rightarrow 4\beta_c J = 1 \Rightarrow T_c = \frac{4J}{k_B}$$

A energia média por sítio é dada por:

$$\langle E \rangle = -2J \langle S \rangle^2$$

Para obter o calor específico C , derivamos $\langle E \rangle$ em relação à temperatura:

$$C = \frac{d\langle E \rangle}{dT} = -4J \langle S \rangle \cdot \frac{d\langle S \rangle}{dT}$$

O modelo de Ising também pode ser abordado através de simulações de Monte Carlo, que fornecem resultados mais rigorosos do que o campo médio. A dinâmica do sistema costuma ser descrita através do algoritmo de Metropolis, que funciona da seguinte forma. Inicialmente, é gerada uma configuração inicial para o sistema, que fornece um dado valor de energia E e magnetização M . Em seguida, escolhe-se, aleatoriamente, um dado sítio da rede, onde devemos decidir se o spin desse sítio deve ser invertido ou não. Tal decisão é tomada da seguinte forma: se a inversão do spin reduzir a energia total do sistema ($\Delta E < 0$), ele será invertido (probabilidade 1). Porém, se a inversão aumentar a energia total do sistema ($\Delta E > 0$), a inversão ainda poderá ocorrer com uma dada probabilidade

$$A = \exp(-\beta \Delta E),$$

Nesse caso, um valor aleatório $0 < r < 1$ é gerado, e, se $r < A$, o spin é invertido. A energia e a magnetização do sistema vão sendo atualizados durante a simulação.

RESULTADOS

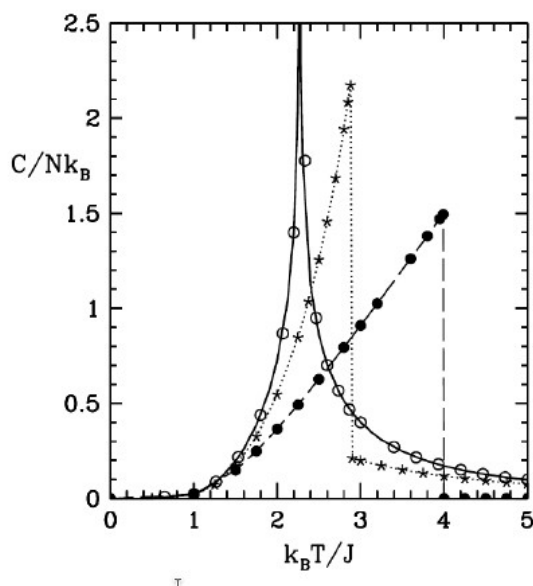
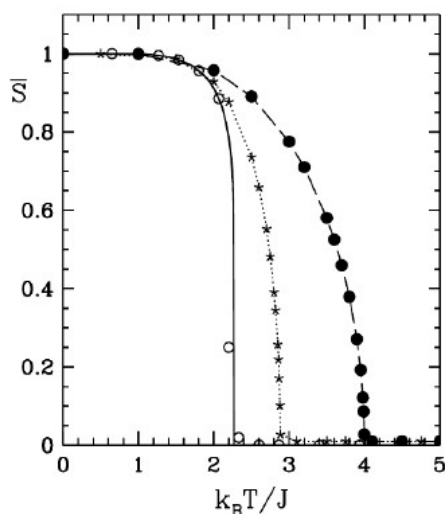
A seção anterior apresenta uma série de resultados obtidos através das teorias de Weiss, de Landau e de Heisenberg (ou de Ising), que permitem uma comparação direta entre os parâmetros envolvidos em cada descrição. Os resultados das simulações de Monte Carlo aproximam-se melhor das soluções exatas do modelo de Ising, que são conhecidas para alguns sistemas, por exemplo, no caso da rede quadrada. A comparação entre as aproximações pode ser visualizada nas figuras abaixo.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Os resultados confirmam a coerência entre os diferentes quadros teóricos, Weiss, Landau e Heisenberg (ou Ising) em campo médio, na descrição do ferromagnetismo e das transições de fase de segunda ordem. Todos capturam os mesmos expoentes críticos para a magnetização, o calor específico e a isoterma crítica, fornecendo uma descrição qualitativa coerente e intuitiva das transições de fase. No entanto, ao confrontá-los com os resultados experimentais de diferentes materiais magnéticos, e com a solução exata do modelo em 2D, percebem-se algumas limitações da aproximação de campo médio, em particular, na descrição quantitativa de T_C e dos expoentes críticos. Assim, para descrever com maior fidelidade algumas propriedades observadas nos sistemas magnéticos reais, os modelos microscópicos de Ising e de Heisenberg têm sido abordados através de diferentes métodos além do campo médio, como, por exemplo, simulações de Monte Carlo ou soluções exatas em sistemas finitos.

Palavras-chave: Ferromagnetismo; Modelo de Ising; Teoria de Landau; Modelo de Weiss; Parâmetro de ordem; Temperatura crítica; Calor específico; Magnetização; Transições de fase; Teoria de campo médio.

ILUSTRAÇÕES



Magnetização e calor específico do modelo de Ising sobre uma rede quadrada segundo a aproximação de campo médio (●), o método de Monte Carlo (○), a solução exata (linha cheia), e a aproximação de Bethe (★)

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] BLUNDELL, Stephen. Magnetism in Condensed Matter. Oxford University Press, 2001.
- [2] SALINAS, Sílvio R. A. Introdução à Física Estatística. 2. ed. São Paulo: Edusp, 2005.
- [3] J. PALANDI, R. M. C. de ALMEIDA, J. R. IGLESIAS, e M. KIWI, Cellular Automaton for the Order-Disorder Transition, Journal of Computational Physics, v. 6, p. 439–445, 1995.
- [4] LÍBERO, Valter. *From Ising to Metropolis*, Revista Brasileira de Ensino de Física, v. 22, n. 3, p. 346–352, 2000.

DADOS CADASTRAIS

BOLSISTA: Hanna Bartholdy Vieira

MODALIDADE DE BOLSA: PROBIC/UDESC (IC)

VIGÊNCIA: 04/09/2024 a 18/07/2025 - Total: 11 meses

ORIENTADOR(A): Ben Hur Bernhard

CENTRO DE ENSINO: CCT

DEPARTAMENTO: Departamento de Física

ÁREAS DE CONHECIMENTO: Ciências Exatas e da Terra / Física

TÍTULO DO PROJETO DE PESQUISA: Descrição teórica de materiais magnéticos

Nº PROTOCOLO DO PROJETO DE PESQUISA: NPP3228-2020