

Implicações da conectividade finita no modelo de Blume-Capel

Aluno: Matheus Di Giorgio Amorim

Orientador: Sérgio Garcia Magalhães

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Introdução

O modelo magnético de Blume-Capel é uma extensão do modelo de Ising de três estados, cujo hamiltoniano é dado por

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - \sum_{i=1}^N \theta_i \sigma_i + \sum_{i=1}^N D_i \sigma_i^2,$$

com o primeiro, segundo e terceiro termos sendo, respectivamente, a contribuição da interação entre spins, com um campo magnético externo e com um campo cristalino, ambos os campos dados por uma distribuição binomial.

Utilizando a aproximação de campo médio consegue-se obter o diagrama de fases do modelo à temperatura zero, disposto na figura 1. Nesse método, a conectividade, ou seja, o número de spins com que cada spin interage é infinita, i.é., cada spin interage com todos os outros spins através de um campo médio.

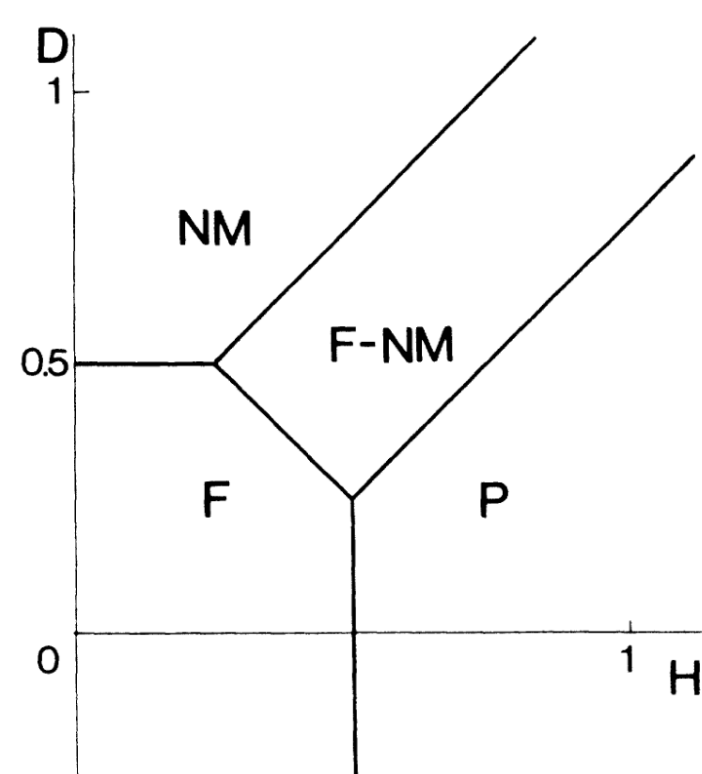


Figura 1 – A imagem mostra transições de fase de primeira ordem entre os possíveis estados ferromagnético (F), paramagnético (PM), não-magnéticos (NM) e ferromagnético-não-magnético (F-NM), no limite de conectividade infinita e temperatura zero.

Entre os objetivos em aplicar a conectividade finita ao modelo está a verificação de como as transições se comportam em conectividade baixa, ou seja, se há mudança de ordem ou variação na localidade dos valores de transição em relação ao diagrama obtido no limite de conectividade infinita.

Conectividade finita

Para utilizar conectividade finita no modelo desenvolveu-se receitas, algoritmos para calcular numericamente, pelo método de dinâmica populacional, os parâmetros de ordem, tal como magnetização, energia livre e ocupação a partir das equações obtidas por meio da técnica de réplicas. Dessa forma, em posse dos parâmetros de ordem, ficou possível determinar as transições de fases para um valor determinado de conectividade c , campo cristalino D à temperatura zero (figura 2). No caso de $c = 25$, nota-se facilmente a presença de histereses indicando a presença de transições de primeira ordem, não ocorrendo para $c = 10$.

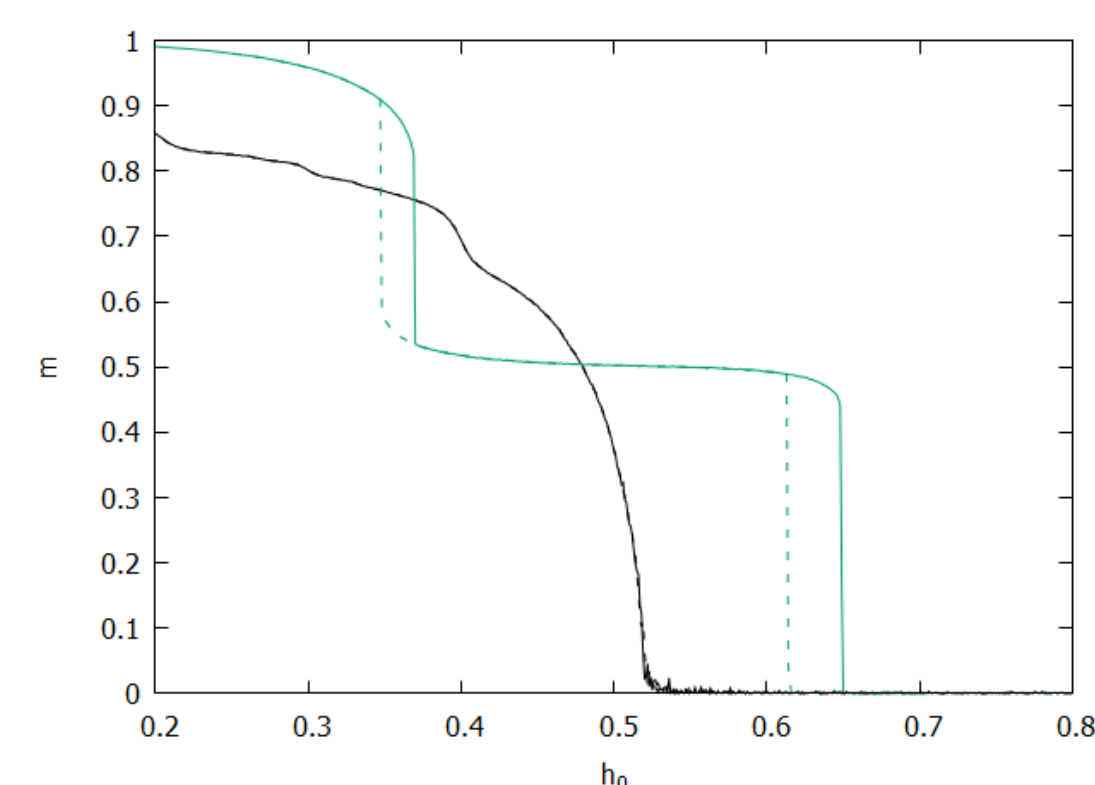


Figura 2 – Linha de magnetização em função do termo de campo aleatório, fixado o termo de campo cristalino em $D = 0.4$. As linhas em verde representam o resultado para conectividade $c = 25$ e em preto para $c = 5$. A linha cheia e a tracejada são produtos do cálculo feito no sentido crescente e decrescente de h_0 , respectivamente.

Resultados

A reprodução para diversos valores de conectividade e varrendo toda a região de interesse dos campos cristalino e aleatório, resulta em um diagrama para algumas conectividades conforme mostra na figura 3.

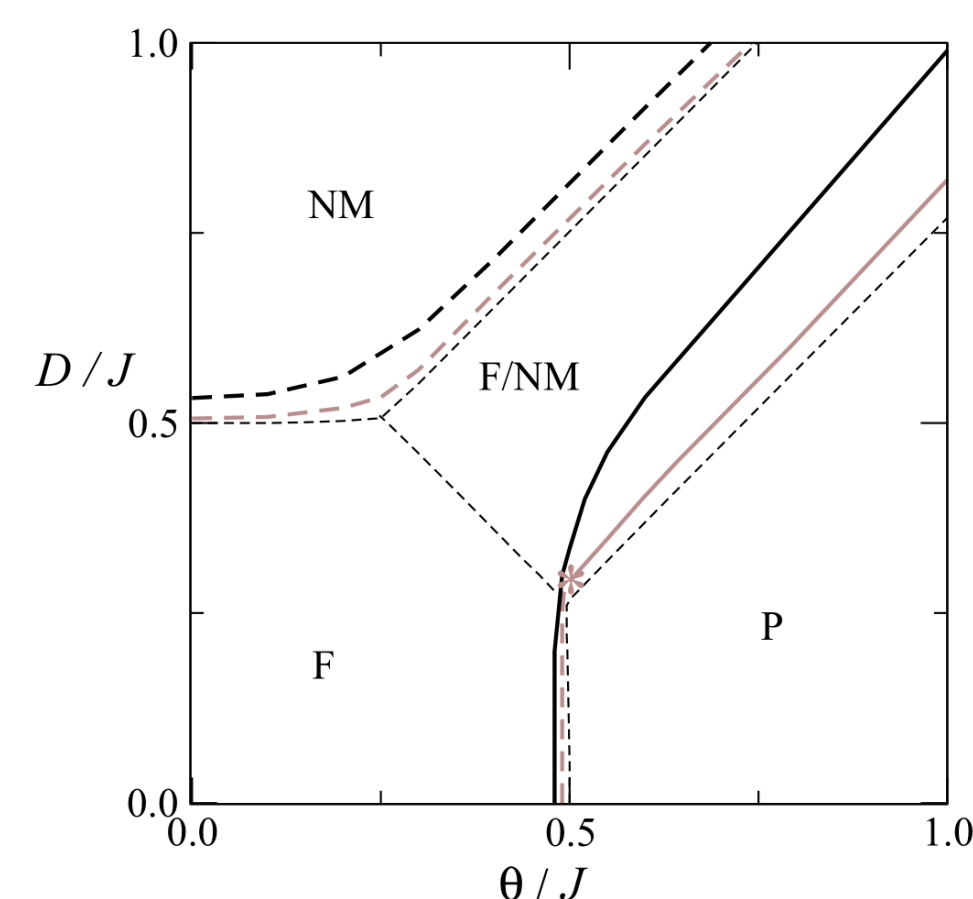


Figura 3 – Diagrama de fase à temperatura zero para conectividade $c = 5$ (linhas em preto forte), $c = 15$ (linhas marrom forte) e $c = 25$ (linhas preto fraco). Representando transições de primeira e segunda ordem por linhas tracejadas e contínuas, respectivamente.

Pela figura 3, para um valor de $c = 25$ o diagrama de fases preserva todas as transições mantendo-as de primeira ordem, porém com o decréscimo da conectividade pode-se observar que a transição entre a fase ferromagnética e a mista é quebrada em algum ponto. Com isso em mente, varreu-se diversos valores de conectividade e a quebra dessa transição ocorre para valores de c menores que 18.

Outro efeito na conectividade é visto na alteração de ordem das transições entre as fases ferromagnética e mista com a paramagnética. Novamente, varrendo os valores de c , essa mudança na ordem da transição foi observada ocorrer para valores de c menores que 16.

Conseqüentemente, também é observada a perda do ponto tricrítico no diagrama no caso de conectividade baixa.