

# "MAGNETOELASTICIDADE E COMPORTAMENTO CRÍTICO EM CADEIAS DE ISING"

ANDRÉ T. OTA<sup>a</sup>  
SILVIO R.A. SALINAS<sup>b</sup>

## RESUMO

Consideramos duas maneiras distintas de introduzir graus de liberdade de natureza elástica no modelo de Ising unidimensional. Levando em conta apenas o efeito médio das vibrações elásticas, o hamiltoniano efetivo de spin no ensemble das pressões apresenta interações de longo alcance, dando origem a transições de primeira ordem. Flutuações locais das posições cristalinas, no entanto, produzem um hamiltoniano efetivo com interações de curto alcance, sem qualquer anomalia termodinâmica em uma dimensão.

**PALAVRAS-CHAVE:** Modelo de Ising; Vibrações elásticas, hamiltoniano efetivo de spin, Ensemble das pressões; interações de longo alcance, transições de primeira ordem, interações de curto alcance.

## 1 - INTRODUÇÃO

O modelo de Ising do ferromagnetismo, introduzido por Lenz e Ising na década de vinte, tem sido objeto de inúmeros estudos<sup>1, 2</sup>. Trata-se de um problema estatístico de muitos corpos interagentes, razoavelmente simples mas absolutamente não trivial, dando origem a um comportamento termodinâmico de grande riqueza. Usualmente o modelo é definido pelo hamiltoniano.

(1.1)

$$H = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i=1}^N \sigma_i$$

onde  $J$  é um parâmetro positivo,  $\sigma_i = \pm 1$  é a variável de spin associada ao sítio  $i$  de uma rede cristalina,  $h$  é o campo magnético aplicado em unidades convenientes e  $N$  é o número de sítios. A primeira soma — que contém os termos não triviais de interação — é efetuada sobre todos os pares de sítios vizinhos mais próximos. A segunda soma, sobre todos os sítios, constitui a parte livre, trivial, que representa a interação entre o campo magnético e os spins. O termo de interação spin-spin,  $J$  de curto alcance e natureza coulombiana, é explicado através do mecanismo quântico de justaposição e intercâmbio de funções de onda eletrônicas.

Resolver o modelo de Ising consiste em calcular a função de partição canônica.

(1.2)

$$Z(T, h, N) = \sum_{\langle \sigma \rangle} \exp \left[ -\beta H \right],$$

onde a soma é sobre todas as configurações de spins,  $\sigma = \{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \dots, \sigma_N\}$ ,  $\beta = (K_B T)^{-1}$ ,  $K_B$  é a constante de Boltzmann e  $T$  a temperatura absoluta. O comportamento termodinâmico do sistema está contido na energia livre por spin.

(1.3)

$$g(T, h) = -\frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \frac{1}{N} \ln Z(T, h, N) \right\}$$

Evidentemente, qualquer anomalia ou singularidade só aparece no limite termodinâmico ( $N \rightarrow \infty$ ), pois a função de partição é uma soma bem comportada de funções exponenciais de  $T$  e  $h$ . Em uma dimensão o modelo foi resolvido exatamente por Ising em 1925. A energia livre é uma função analítica de  $T$  e  $h$ , não apresentando nenhuma anomalia termodinâmica. A magnetização por spin,  $m(T, h) = -\frac{\partial g}{\partial h}$ , tende a zero para  $h \rightarrow 0$ , indicando a inexistência de ferromagnetismo. Em duas dimensões, no entanto, é possível provar a existência de magnetização espontânea para temperaturas suficientemente baixas. Em 1944 Onsager publicou a sua famosa solução do modelo de Ising bidimensional, em campo nulo, mostrando que o calor específico apresenta uma divergência logarítmica numa deter-

<sup>a</sup>. Departamento de Física — CCE/Universidade Estadual de Londrina.

<sup>b</sup>. Instituto de Física — USP/São Paulo.

minada temperatura crítica<sup>1, 2, 3</sup>. Na presença de um campo, bem como em três dimensões, não há soluções exatas, mas existem excelentes esquemas de aproximação, inclusive as modernas técnicas do grupo de renormalização, que nos permitem conhecer muito bem as características do comportamento termodinâmico do modelo. Atualmente as anomalias das diversas grandezas termodinâmicas são caracterizadas por certos números, denominados expoentes críticos, que assumem valores universais, dependendo de poucos aspectos dos sistemas físicos<sup>1, 3, 4</sup>. Esta universalidade dos expoentes críticos tem acentuado a importância de sistemas simples, como o modelo de Ising, cujos expoentes correspondem a situações de interesse experimental.

Há muitas tentativas de introduzir graus de liberdade adicionais no contexto do modelo magnético de Ising. Por exemplo, pode-se pensar na introdução de impurezas ou de interações adicionais, de natureza competitiva. No presente trabalho vamos considerar um modelo de Ising ferromagnético, em uma dimensão, na presença de graus de liberdade de caráter elástico, representados pelas vibrações da rede cristalina<sup>5</sup>. Há várias maneiras de introduzir os efeitos das vibrações elásticas<sup>6</sup>. Podemos, por exemplo, supor que o parâmetro J seja uma função do espaçamento médio entre os sítios da rede. Este modelo elástico de campo médio exibe uma transição de primeira ordem mesmo no caso unidimensional. Por outro lado, podemos levar em conta os efeitos locais das vibrações cristalinas, considerando o parâmetro J como uma função local do espaçamento entre os sítios. Este modelo de Ising com flutuações elásticas locais não exibe qualquer tipo de anomalia termodinâmica em uma dimensão<sup>5</sup>. Na Secção II, a título de ilustração vamos apresentar a solução exata do modelo de Ising rígido em uma dimensão, através da técnica da matriz de transferência<sup>1, 2</sup>. Na Secção III vamos definir e resolver exatamente o modelo elástico de campo médio. Finalmente, na Secção IV, vamos mostrar que as flutuações elásticas locais, em uma dimensão, destroem a transição de primeira ordem. Os modelos de Ising compressíveis podem, portanto, apresentar um comportamento crítico radicalmente diferente dependendo da forma como são tratadas as vibrações da rede cristalina.

2 - O MODELO DE ISING UNIDIMENSIONAL

Em uma dimensão o modelo de Ising é definido pelo hamiltoniano.

$$H = - J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} - h \sum_{i=1}^N \sigma_i,$$

onde estamos adotando a condição periódica de contorno  $\sigma_{N+1} = \sigma_1$ . A função canônica de partição pode ser escrita como

$$Z = \sum_{\langle \sigma \rangle} \exp \left[ \beta J \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{\beta h}{2} \sum_i (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right] = \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N} \prod_{i=1}^N T_{\sigma_i, \sigma_{i+1}} \tag{2.2}$$

onde  $T_{\sigma_i, \sigma_{i+1}} = \exp \left[ \beta J \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{\beta h}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right]$  (2.3)

A função de partição pode então ser interpretada como o traço do produto de N matrizes idênticas, de ordem 2X2, cujo elemento genérico é dado pela equação (2.3). Assim temos

$$Z = \text{Tr} ( T )^N = \lambda_1^N + \lambda_2^N, \tag{2.4}$$

onde os autovalores da matriz T são dados por

$$\lambda_{1,2} = e^{\beta J} \text{ch } \beta h \pm \left[ e^{2\beta J} \text{ch}^2 \beta h - 2 \text{sh } 2\beta J \right]^{1/2}. \tag{2.5}$$

Como  $\lambda_1 > \lambda_2$ , exceto para T = h = 0, temos

$$g(T, h) = - \frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z = - \frac{1}{\beta} \ln \lambda_1, \tag{2.6}$$

que é uma função analítica de T e h. A magnetização por spin é dada por

$$m(T, h) = - \frac{\partial g}{\partial h} = \frac{\text{sh } \beta h}{\left[ \text{sh}^2 \beta h + \exp(-4\beta J) \right]^{1/2}}. \tag{2.7}$$

Portanto,  $m(T, h = 0) = 0$ , indicando a inexistência de magnetização espontânea. Em campo nulo, temos

$$g(T, h = 0) = - \frac{1}{\beta} \ln ( 2 \text{ch } \beta J ), \tag{2.8}$$

que é uma função bem comportada para temperaturas finitas.

3 - O MODELO ELÁSTICO DE CAMPO MÉDIO

O modelo elástico de campo médio é definido pelo hamiltoniano

$$H_M = J(a) \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} - h \sum_i \sigma_i + N\phi(a), \tag{3.1}$$

onde, por simplicidade,  $\phi(a)$  é uma função quadrática e  $J(a)$  é uma função linear do espaçamento interatômico médio a. Vamos então definir

$$(3.2)$$

$$\phi(a) = \phi_0 + \frac{1}{2} \phi_2 (a - a_0)^2$$

$$e \quad (3.3)$$

$$J(a) = J_0 - J_1 (a - a_0)$$

onde  $\phi_0, J_0$  e  $J_1$  são parâmetros quaisquer, mas  $\phi_2$  e  $a_0$  são parâmetros estritamente positivos.

No ensemble canônico temos

$$Z(T, a, h, N) = \quad (3.4)$$

$$\sum_{\langle \sigma \rangle} \exp \left[ \beta J(a) \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} + \beta h \sum_i \sigma_i - \beta N \phi(a) \right]$$

Para analisar a possível ocorrência de uma transição de fases, é muito mais interessante trabalhar no ensemble em que as variáveis termodinâmicas independentes tenham um caráter intensivo, isto é, sejam campos, como a temperatura, o campo magnético ou a pressão. Quando duas fases termodinâmicas coexistem, os campos são idênticos, embora as densidades sejam diferentes em cada fase. Vamos então passar para o ensemble das pressões, dado pela função de partição.

$$\Psi(T, p, h, N) = \int_0^{+\infty} \exp(-\beta p N a) Z(T, a, h, N) d(Na). \quad (3.5)$$

Para  $N$  grande, a integração no espaçamento  $a$  se reduz à consideração de uma mera forma gaussiana. Então podemos escrever

$$\Psi = \exp[-\beta N g_0(T, p)] \sum_{\langle \sigma \rangle} \exp(-\beta H_{\text{eff}}). \quad (3.6)$$

onde  $g_0(T, p)$  é uma função suave, e o hamiltoniano efetivo no ensemble das pressões é dado por

$$H_{\text{eff}} = \quad (3.7)$$

$$- \left( J_0 + \frac{J_1 p}{\phi_2} \right) \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} - \frac{J_1^2}{2N\phi_2} \left( \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} \right)^2 - h \sum_i \sigma_i$$

Qualquer anomalia termodinâmica será, portanto, detectada através de uma análise deste hamiltoniano efetivo de spin.

Para estudar a função de partição associada ao hamiltoniano efetivo de spin, vamos utilizar a identidade gaussiana

$$e^{-a^2} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2 + 2ax} dx. \quad (3.8)$$

Então temos

$$\sum_{\langle \sigma \rangle} \exp(-\beta H_{\text{eff}}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} \quad (3.9)$$

$$\sum_{\langle \sigma \rangle} \exp \left[ \left[ \beta \left( J_0 + \frac{J_1 p}{\phi_2} \right) + 2x \left( \frac{\beta J_1^2}{2N\phi_2} \right)^{1/2} \right] \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} + \beta h \sum_i \sigma_i \right]$$

A campo nulo, utilizando os resultados da Secção anterior, temos

$$(3.10)$$

$$\sum_{\langle \sigma \rangle} \exp(-\beta H_{\text{eff}}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-x^2} Z_I(K_{\text{eff}}),$$

$$\text{onde} \quad (3.11)$$

$$Z_I(K_{\text{eff}}) = (2 \operatorname{ch} K_{\text{eff}})^N$$

é a função de partição de um modelo de Ising unidimensional rígido com o acoplamento efetivo

$$K_{\text{eff}} = \beta \left( J_0 + \frac{J_1 p}{\phi_2} \right) + 2x \left( \frac{\beta J_1^2}{2N\phi_2} \right)^{1/2}. \quad (3.12)$$

Introduzindo a nova variável  $y$ , definida pela relação

$$2x \left( \frac{\beta J_1^2}{2N\phi_2} \right)^{1/2} = \frac{\beta J_1^2}{\phi_2} y, \quad (3.13)$$

temos

$$\sum_{\langle \sigma \rangle} \exp(-\beta H_{\text{eff}}) = \int_{-\infty}^{+\infty} dy \exp[-\beta N g(y)], \quad (3.14)$$

com

$$g(y) = \frac{J_1^2}{2\phi_2} y^2 - \frac{1}{\beta} \ln 2 - \frac{1}{\beta} \ln \left[ \operatorname{ch} \left( \beta J_0 + \beta \frac{J_1 p}{\phi_2} + \beta \frac{J_1^2}{\phi_2} y \right) \right]. \quad (3.15)$$

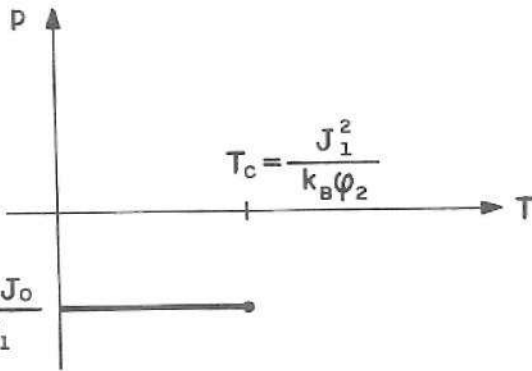
Fixados  $T$  e  $p$ , os extremos de  $g(y)$  serão dados pela famosa equação de campo médio

$$y = \operatorname{tgh} \left[ \beta \left( J_0 + \frac{J_1 p}{\phi_2} \right) + \beta \frac{J_1^2}{\phi_2} y \right]. \quad (3.16)$$

Para  $p = -\phi_2 J_0 / J_1$ , sempre existe uma solução  $y = 0$ . No entanto, para  $\beta J_1 / \phi_2 > 1$ , podem existir também duas outras

soluções  $\pm y_0 \neq 0$ , que acabam correspondendo aos mínimos de  $g(y)$ . Esta análise nos conduz ao diagrama de fases da Fig. 1, onde a linha de transições de primeira ordem termina no ponto crítico, dado por  $P_c = -\frac{\phi_2 J_0}{J_1}$  e

$$K_B T_c = \frac{J_1^2}{\phi_2}$$



4 - MODELO DE ISING COM FLUTUAÇÕES ELÁSTICAS LOCAIS

O modelo elástico de campo médio certamente está sujeito a críticas por inibir as flutuações microscópicas das posições dos sítios da rede cristalina. Incluindo explicitamente estas flutuações locais, vamos considerar o hamiltoniano.

$$H_F = - \sum_{i=1}^N J(x_{i+1} - x_i) \sigma_i \sigma_{i+1} + \sum_{i=1}^N \phi(x_{i+1} - x_i), \tag{4.1}$$

onde  $x_i$  designa a posição do  $i$ -ésimo sítio da rede unidimensional e  $\phi(x)$  e  $J(x)$  são definidos novamente pelas equações (3.2) e (3.3).

A função de partição canônica pode ser escrita como

$$Z(T, a, N) = \left[ \prod_i \int dx_i \right] \sum_{\langle \sigma \rangle} \exp(-\beta H_F), \tag{4.2}$$

onde  $x_{N+1}$  e  $x_1$  são fixos, e o comprimento  $Na$  é dado por

$$Na = x_{N+1} - x_1 = \sum_{i=1}^N (x_{i+1} - x_i). \tag{4.3}$$

No ensemble das pressões temos

$$\Psi(T, p, N) = \int_0^\infty e^{-\beta p Na} Z(T, a, N) d(Na). \tag{4.4}$$

Levando em conta a equação (4.3), podemos escrever

$$\Psi = \left[ \prod_i \int dx_i \right] \sum_{\langle \sigma \rangle} \exp \left\{ \sum_{i=1}^N \left[ \beta J(x_{i+1} - x_i) \sigma_{i+1} \sigma_i - \beta \phi(x_{i+1} - x_i) - \beta p(x_{i+1} - x_i) \right] \right\}, \tag{4.5}$$

onde  $x_i$  permanece fixo, mas a integração deve ser efetuada também sobre  $x_{N+1}$ . Fazendo a mudança de variáveis

$$x_{i+1} - x_i = y_{i+1} \tag{4.6}$$

temos

$$\Psi(T, p, N) = \left[ \prod_i \int dy_i \right] \tag{4.7}$$

$$\left\{ \sum_{\langle \sigma \rangle} \exp \left[ \beta J(y_{i+1}) \sigma_i \sigma_{i+1} - \beta \phi(y_{i+1}) - \beta p y_{i+1} \right] \right\}$$

O problema agora se reduz à solução de um conjunto de integrais gaussianas independentes. É fácil mostrar que

$$\Psi(T, p, N) = \tag{4.8}$$

$$\exp \left[ -\beta N \tilde{g}_0(T, p) \right] \sum_{\langle \sigma \rangle} \exp(-\beta H_{\text{eff}}),$$

onde  $\tilde{g}_0(T, p)$  é uma função bem comportada e o hamiltoniano efetivo de spin no ensemble das pressões é dado por

$$H_{\text{eff}} = - \left( J_0 + \frac{J_1 p}{\phi_2} \right) \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1}. \tag{4.9}$$

Como vimos na Secção II, este hamiltoniano não conduz a qualquer tipo de anomalia termodinâmica<sup>1,2</sup>. Neste caso, as vibrações da rede apenas contribuem para modificar o valor do parâmetro de intercâmbio.

5 - CONCLUSÕES

Consideramos duas maneiras distintas de introduzir graus de liberdade elásticos no modelo de Ising unidimensional. No modelo elástico médio as flutuações microscópicas de posição são totalmente ignoradas. No ensemble das pressões, encontramos um hamiltoniano efetivo envolvido interações de quatro spins, de longo alcance, que acabam produzindo no diagrama de fases T-p uma linha de transições de primeira ordem. Num modelo mais realístico, levando em conta as flutuações locais das posições atômicas, encontramos no ensemble das pressões de hamiltoniano efetivo com interações spin-spin de curto alcance que não conduz a nenhuma anomalia termodinâmica. Não é difícil generalizar o estudo destes modelos para duas ou três dimensões. No entanto, fica muito complicado considerar o modelo bi ou tridimensional com a inclusão de flutuações elásticas locais de cisalhamento.

## ABSTRACT

*We consider two distinct ways of introducing elastic degrees of freedom in the one-dimensional Ising model. Taking into account the average effect of elastic vibrations, the effective spin hamiltonian in the pressure ensemble displays long-range interactions which give rise to a first-order phase transition. However, local fluctuations of the crystalline positions lead to an effective spin hamiltonian with short-range interactions and without any thermodynamic anomaly in one dimension.*

**KEY WORDS:** *Ising model; Elastic vibrations; Effective spin hamiltonian; Pressure ensemble; Short-range interactions; First-order phase transitions; Long-range interactions.*

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- |   |   |
|---|---|
| <p>1 – BRUSH, S.G. <i>Hystory of the Lenz-Ising model. Rev. Mod. Phys.</i> 34, 883, 1967.</p> <p>2 – HUANG, K. <i>Statistical Mechanics</i>. 2a. ed. Wiley, 1987. Capítulos 14-18.</p> <p>3 – MCCOY, B.M. &amp; WU, T.T. <i>The two-dimensional Ising Model</i>. Harward Univ. Prass, 1973.</p> | <p>4 – STANLEY, H.E. <i>Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena</i>. Oxford Univ. Press, 1971.</p> <p>5 – SALINAS, S.R. <i>On the one-dimensional compressible Ising model. J. Phys. A</i>, 6, 1527, 1973.</p> <p>6 – HENRIQUES, V.B. &amp; SALINAS, S.R. <i>Effective spin hamiltonian compressible Ising MOdels. J. Phys. C</i>. 20, 2415, 1987.</p> |
|---|---|

Recebido para publicação em 31/10/89