04 Ferromagnetismo 20240408

April 9, 2024

1 Ferromagnetismo

1.1 Introdução

- Modelo de Heisenberg:
  - Considera apenas a interacção entre electrões desemparelhados.
  - Para simplificação vamos considerar apenas um electrão por nó da rede cristalina.
  - Podemos considerar uma interacção de curto alcance devida apenas aos spins dos electrões.

A energia de interacção entre dois electrões pode ser escrita como:

$E_{\pm} = I_0 \pm \frac{J}{2}$

com + para spins anti-paralelos e - para spins paralelos. I_0 deve-se à interacção de Coulomb e $J/2$ é o chamado integral de troca e que se deve à interacção spin-spin.

A diferença de energias entre um estado de spins paralelos e um anti-paralelos é:

$\Delta E = E_+ - E_- = J$

Se J > 0 então os estados paralelos têm menor energia, e tem-se ferromagnetismo, se J < 0 os estados anti-paralelos têm menor energia e tem-se anti-ferromagnetismo.

1.2 Modelo de Ising

Considerando o caso em que S = 1/2 a energia total vai ser dada por:

$E = -\frac{1}{2}\sum_{i,j} J_{i,j}\sigma_i\sigma_j - \mu B \sum_i \sigma_i$

com $\sigma_i = \pm 1$ e $\sigma_j = \pm 1$

Ou seja mesmo na ausência de campo externo o estado mínimo de energia correposnde a todos os spins alinhados e à produção de campo magnetico pelo próprio material.

Para efectuar a simulação segundo o modelo de Ising vamos produzir o seguinte programa:

1. Incialização da rede.
2. Em cada ponto da rede
   1. Calcula-se a variação de energia no caso de inversão de spin
   2. Se a variação de energia for negativa o spin é invertido.
   3. Se a variação de energia for positiva atribui-se uma probablidade à inversão de spin (*função de transição, w*).
   4. Produz-se um número aleatório, r. Se r < w há inversão de spin.

5. Termina o ciclo de Monte Carlo.

3. Calcula-se as grandezas físicas associadas à nova configuração da rede.

1.3 Função de transição

A variação de energia devido à inversão de um spin na componente spin-spin é dada por:

$\Delta\epsilon = J\left(\sigma_{iinicial}\sum_j \sigma_j - \sigma_{ifinal}\sum_j \sigma_j\right) = J\left(\pm 2\sum_j \sigma_j\right) = 2J\delta$

com $\delta = \pm\sum_j \sigma_j = -4; -2; 0; 2; 4$

Nas situações em que $\Delta\epsilon < 0 \implies w = 1$

Nas situações em que $\Delta\epsilon > 0 \implies w = e^{-\frac{2\delta}{t}}$ em que t é a temperatura reduzida.

Quando se tem campo magnetico externo a função de transição fica:

$w = \begin{cases} 1, \Delta\epsilon < 0 \\ e^{-\frac{\delta + \sigma_{iinicial} h}{t}}, \Delta\epsilon > 0 \end{cases}$

com h campo magnético reduzido

1.4 Variáveis reduzidas

Vamos usar as variáveis reduzidas:

$t = \frac{KT}{J}$

$h = \frac{\mu_B B}{J}$

Queremos observar o comportamento da rede a diferentes temperaturas e campos externos aplicados para as grandezas:

- Momento magnético, m. Devido a trocas de sentido perto da temperatura crítica vamos considerar o modulo do momento magnético.
- Energia média por ponto de rede.
- Susceptibilidade magnética.
- Capacidade calorífica.

1.4.1 Grandezas a analisar

- o momento magnético médio da rede e com o factor de ordem

$$m = \frac{||\overline{M}||}{L^2}$$

- energia média por ponto de rede

$$\overline{\epsilon} = \frac{\overline{E}}{L^2}$$

- susceptibilidade magnética

$$\chi = \frac{\sigma^2\left(M\right)}{t} L^2$$

- capacidade calorífica

$$C = \frac{\sigma^2\left(\epsilon\right)}{t^2 L^2}$$