

Consequências termodinâmicas da quasiperiodicidade em sistemas magnéticos de spins localizados

Filipe Augusto de Souto Borges¹, Claudionor Gomes Bezerra²

¹Bolsista PIBIC/CNPq, ²Professor Orientador, Departamento de Física Teórica e Experimental, Universidade Federal do Rio Grande do Norte

Resumo

Estudamos o efeito da quasiperiodicidade dos acoplamentos de troca em cadeias de spins unidimensionais via modelos de Ising e Ashkin-Teller. Calculamos a função de partição canônica dos modelos estudados e, a partir desta, o calor específico associado. Encontramos os níveis de energia acessíveis e obtivemos resultados que ilustram os efeitos da quasiperiodicidade nas propriedades físicas do sistema.

Palavras-chave: Sistemas quasiperiódicos, Ising, Ashkin-Teller, Anomalia de Schottky

Abstract

We analyzed the effects of quasiperiodic exchange couplings in one-dimensional spin chains using Ising and Ashkin-Teller models. We calculated the canonical partition function of the aforementioned models, from which we obtained the associate specific heat. We also calculated the energy levels, and the results illustrate the effects of quasiperiodicity on the physical properties of the system.

Keywords: Quasiperiodic systems, Ising, Ashkin-Teller, Schottky Anomaly

Introdução

No início da década de 80 a descoberta de uma liga de Al-Mn que apresentava invariância rotacional, mas não apresentava invariância translacional (D. Shechtman *et al.* 1984.) chamou atenção dos físicos e abriu um novo campo de pesquisa: os quasicristais ou sistemas quasiperiódicos. Um quasicristal pode ser pensado, de maneira qualitativa, como um sistema que apresenta uma ordem intermediária entre um cristal perfeito e um sólido amorfo. Em particular, em uma dimensão, não há diferença entre um quasicristal e um arranjo incommensurável de períodos. Deste modo, a utilização de seqüências quasiperiódicas de letras, como por exemplo, Fibonacci, Double-period, Thue-Morse, etc, vem sendo feita pelos físicos para simular o arranjo quasicristalino em sistemas de baixa dimensionalidade em matéria condensada, a saber, super-redes e multicamadas. Super-redes quasiperiódicas começaram a ser obtidas experimentalmente a partir de 1985 (Merlin *et al.*, 1985). Mais recentemente, seqüências quasiperiódicas de letras vêm sendo utilizadas em sistemas de *spins* localizados para simular desordem no acoplamento de troca entre sítios vizinhos (Pinho *et al.*, 2003).

O *modelo de Ising* (Ising, 1925) - também chamado por alguns autores de *modelo de Lenz-Ising* (Brush, 1967) – foi proposto pelo famoso *Herr Professor* Wilhelm Lenz ao seu aluno de doutorado Ernst Ising na década de 20 e recebeu este nome em homenagem ao próprio Ising, que resolveu analiticamente o modelo em uma dimensão. O modelo é definido como uma coleção discreta de *spins* que podem assumir os valores +1 ou -1, e não se limita apenas a sistemas em matéria condensada: a literatura apresenta várias aplicações do modelo em outros tipos de sistema, como por exemplo, o gás de rede (T.D. Lee e C.N. Yang, 1952). No modelo de Ising os *spins* σ_i interagem aos pares. A energia E – que representa o Hamiltoniano – resulta da interação entre os spins e é dada por

$$E = - \sum J_{ij} \sigma_i \sigma_j. \quad (1)$$

A expressão acima leva em conta uma interação apenas entre primeiros vizinhos. O parâmetro J define o tipo de interação entre os spins. Quando positivo, representa uma interação ferromagnética; se negativo, representa uma interação antiferromagnética. Nesse estudo, tomamos $J > 0$. Esse parâmetro será distribuído na cadeia de acordo com uma regra quasiperiódica. Por sua vez, o modelo de Ashkin-Teller (J. Ashkin e E. Teller, 1943), inicialmente proposto para descrever ligas quaternárias, é composto pela superposição de dois modelos de Ising e um termo de interação de quatro spins. No modelo de Ashkin-Teller, a expressão para a energia é:

$$E = - \sum [J_2(\sigma_i\sigma_j + \tau_i\tau_j) + J_4\sigma_i\sigma_j\tau_i\tau_j]. \quad (2)$$

Neste caso, temos uma “combinação” de dois modelos de Ising (representada pelo primeiro termo: *spins* σ e τ) e um termo de interação de 4 spins, cuja constante J_4 será distribuída quasiperiodicamente. Neste trabalho, investigamos cadeias unidimensionais magnéticas, descritas através dos modelos de Ising e Ashkin-Teller, onde nosso objetivo é o estudo do calor específico associado a estas cadeias unidimensionais, e as possíveis conseqüências do arranjo quasiperiódico no comportamento do calor específico.

As regras que usamos para representar a quasiperiodicidade são chamadas “regras de inflação”. Funcionam da seguinte forma: associamos uma letra a cada parâmetro que queremos estudar e utilizamos regras pré-definidas para gerar cadeias mais longas. A regra de Fibonacci, por exemplo, estabelece que $A \rightarrow AB$, $B \rightarrow A$. Assim, para gerarmos uma dada cadeia, teríamos

N = 1	A,
N = 2	AB,
N = 3	ABA,
N = 4	ABAAB,
N = 5	ABAABABA,

e assim sucessivamente, com o número N indicando a N -ésima “geração” da cadeia. Essa sequência poderia indicar, por exemplo, o crescimento de um material através da deposição de vários filmes nanométricos dos tipos A e B, de acordo com a regra citada acima. Em particular, utilizamos quatro sequências (geradas por distintas regras de inflação): Fibonacci ($A \rightarrow AB, B \rightarrow A$); Double-Period ($A \rightarrow AB, B \rightarrow AA$); Thue-Morse ($A \rightarrow AB, B \rightarrow BA$); e Rudin-Shapiro ($A \rightarrow AC, B \rightarrow DC, C \rightarrow AB, D \rightarrow DB$). Observe que esta última representa uma quasiperiodicidade com 4 parâmetros. Dentre as quatro sequências citadas, a de Fibonacci é a mais conhecida e mais estudada. Por isso, vamos expor apenas os resultados obtidos para essa sequência, por questão de espaço e pelo fato de o resultado obtido para as outras sequências ser qualitativamente semelhante.

Cálculos Analíticos

Em nossa abordagem utilizamos o *ensemble* canônico da Física Estatística para realizar os cálculos dos observáveis físicos. A função de partição de um sistema é dada por

$$Z = \sum_i e^{-E_i/kT}. \quad (3)$$

Sendo E_i a energia do i -ésimo estado, k a constante de Boltzmann e T a temperatura absoluta. Substituindo a expressão da energia do modelo de Ising, obtemos

$$Z = \sum e^{\sum J_i \sigma_i \sigma_{i+1}/kT}. \quad (4)$$

Como o somatório é realizado sobre todos os estados, podemos substituí-lo por um somatório sobre todas as energias “ E ”, desde que incluamos um fator de

degenerescência (no caso de vários estados possuírem a mesma energia). Assim, fazendo as mudanças de variável

$$\sigma_i \sigma_{i+1} \rightarrow S_i,$$

$$\frac{1}{kT} = \beta,$$

e adicionando um fator de degenerescência 2 (pois para cada par de sítios existem duas combinações de *spins* que resultam num mesmo S), obtemos

$$Z = 2 \sum_{\{S\}} e^{(\sum_i J_i S_i) \beta}. \quad (5)$$

Aqui J_i pode assumir os valores J_A ou J_B de acordo com a sequência quasiperiódica. O resultado acima representa um somatório sobre todas as combinações possíveis da variável S . Realizando o somatório para uma cadeia de Fibonacci de geração N , obtemos

$$Z_N = 2^{F_{N+1} + 1} [\cosh(J_A \beta)]^{F_N} [\cosh(J_B \beta)]^{F_{N-1}}, \quad (6)$$

com F_N representando o N -ésimo termo da série de Fibonacci. A partir desta expressão, é possível obter a energia interna do sistema, uma vez que

$$U_N = - \frac{\partial [\ln(Z_N)]}{\partial \beta}. \quad (7)$$

Conhecendo a expressão para a energia interna, podemos calcular o calor específico, pois

$$C_N = \frac{\partial U_N}{\partial T}. \quad (8)$$

Nas expressões acima, o número N representa a “geração”, ou seja, quantas vezes aplicamos a regra de geração para montar a cadeia.

Para obtermos as expressões relativas ao modelo de Ashkin-Teller, basta substituímos a expressão para a energia deste modelo (Eq. 2) na expressão geral da função de partição canônica (Eq. 3). Ao somarmos sobre todos os estados acessíveis ao sistema, obtemos

$$Z = \sum e^{\left(\frac{\sum [J_2(\sigma_i \sigma_{i+1} + \tau_i \tau_{i+1}) + J_{4i} \sigma_i \sigma_{i+1} \tau_i \tau_{i+1}]}{kT} \right)}. \quad (9)$$

Perceba que agora o parâmetro variante está somente no segundo termo da energia, que pode assumir os valores J_{4A} ou J_{4B} , representando a quasiperiodicidade do sistema. Podemos fazer um procedimento similar ao feito para o modelo de Ising, adotando

$$\sigma_i \sigma_{i+1} \rightarrow S_i,$$

$$\tau_i \tau_{i+1} \rightarrow \theta_i, \frac{1}{kT} = \beta,$$

e adicionando um fator de degenerescência que neste caso é igual a 4 (degenerescência 2 para cada variável S e θ). Assim, obtemos

$$Z = 4 \sum_{\{S, \theta\}} e^{\left(\sum_i [J_2 (S_i + \theta_i) + J_4 S_i \theta_i] \right) \beta}, \quad (10)$$

com a soma realizada sobre todas as possibilidades de S e θ . Após realizar o somatório, obtemos a função de partição para a N -ésima geração do modelo de Ashkin-Teller seguindo a sequência de Fibonacci,

$$Z_N = 8^{F_{N+1}} \left[e^{\beta J_{4A}} + e^{-\beta J_{4A}} \cosh(2\beta J_2) \right]^{F_N} \left[e^{\beta J_{4B}} + e^{-\beta J_{4B}} \cosh(2\beta J_2) \right]^{F_{N-1}}. \quad (11)$$

Resultados Numéricos

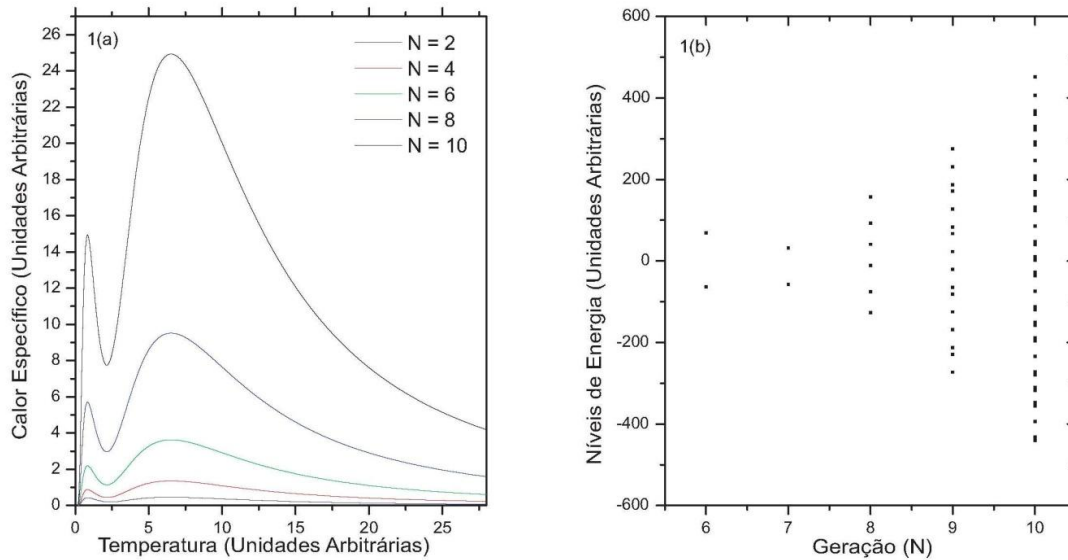


Figura 1: Os gráficos para (a): calor específico e (b): níveis de energia do modelo de Ising quasiperiódico na sequência de Fibonacci.

Na figura 1, mostramos o calor específico e os níveis de energia que o sistema pode assumir para cadeias descritas pelo modelo de Ising. Analisando o espectro de energia, podemos perceber a presença de “gaps” - ou intervalos proibidos de energia - entre os níveis acessíveis ao sistema, com intervalos não constantes entre os estados. A presença destes estados proibidos, distribuídos de maneira não uniforme, ocasiona oscilações no calor específico do sistema, que são mais intensas na região de baixa temperatura. A explicação para estas oscilações é a chamada *anomalia de Schottky*. Em temperaturas mais baixas, o sistema absorve energia à medida que a temperatura aumenta. Entretanto, para certos intervalos de temperatura esta taxa de absorção - que é medida pelo calor específico - diminui, uma vez que não há estados de energia permitidos que possam ser ocupados pelo sistema. Posteriormente, em temperaturas mais altas, o sistema consegue suplantar o “gap” e alcançar estados permitidos e novamente absorver energia. Assim, a taxa de absorção volta a aumentar. Para temperaturas altas o calor específico diminui assintoticamente, indicando que o sistema atingiu o nível de energia mais alto (pois há um valor máximo de energia permitido), portanto não é mais capaz de absorver energia.

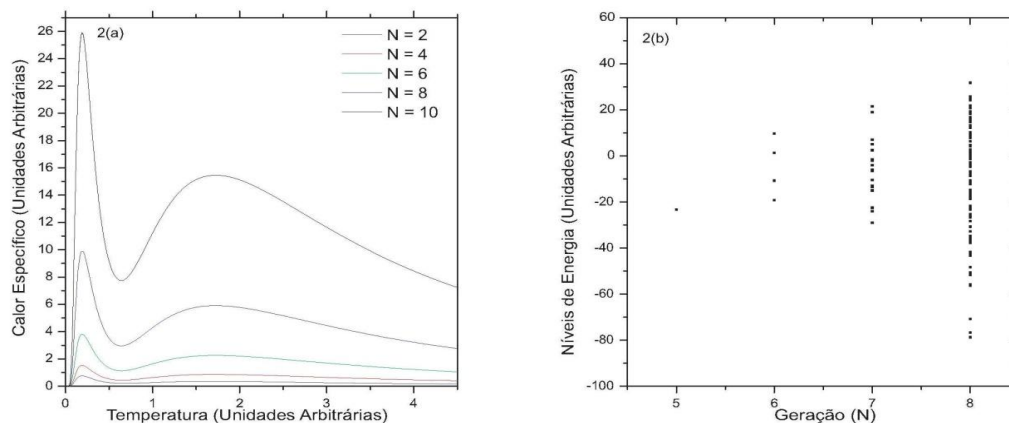


Figura 2: Os gráficos para (a): calor específico e (b): níveis de energia do modelo de Ashkin-Teller quasiperiódico na sequência de Fibonacci.

No caso das cadeias de Ashkin-Teller (veja figura 2), o comportamento é qualitativamente semelhante ao observado no modelo de Ising. A explicação para as oscilações é mais uma vez atribuída à presença de “gaps” e à *anomalia de Schottky*. Contudo, no caso do Ashkin-Teller há um fato mais interessante: para baixas energias (ou seja, baixas temperaturas), existe uma assimetria na distribuição dos níveis de energia. Essa assimetria está ilustrada na figura 2(a) através de um pico acentuado no calor específico para temperaturas próximas de zero. Se observarmos a figura 2(b), podemos notar esta assimetria na distribuição dos níveis em torno de $E = 0$. É possível fornecer uma explicação interessante através de uma análise mais cuidadosa do Hamiltoniano (Eq. 2) do sistema. No caso do modelo de Ising, as energias $+J$ e $-J$ são acessíveis ao sistema uma a partir da outra através do “flip”, isto é, da inversão de um spin (de $+1$ para -1 ou de -1 para $+1$). Já no caso do modelo de Ashkin-Teller, embora a energia $-2J_2 - J_4$ possa ser obtida, sua contrapartida $2J_2 + J_4$ não é acessível ao sistema. Isso está bem representado no diagrama de níveis da figura 2, no qual podemos ver que os níveis com energia negativa predominam quando N cresce. Finalmente, de modo similar ao que ocorre para cadeias de Ising e para sistemas com um número finito de estados acessíveis, o calor específico vai a zero quando $T \rightarrow \infty$, representando a situação física em que o sistema está ocupando o estado de maior energia. Vale salientar que resultados análogos para o calor específico foram obtidos em outro contexto para sistemas nanoestruturados (Bezerra *et al.*, 2001, Albuquerque *et al.*, 2004).

Conclusão

Nesse trabalho, calculamos analiticamente a função de partição e o calor específico para cadeias unidimensionais, descritas pelos modelos de Ising e Ashkin-Teller, nos quais os acoplamentos de troca são distribuídos quasiperiodicamente. A partir da função de partição, calculamos o calor específico associado e investigamos os efeitos da quasiperiodicidade no comportamento do mesmo. Para ilustrar nossos resultados escolhemos a sequência quasiperiódica de Fibonacci, a qual é a mais

conhecida e estudada. Nossos resultados mostram a presença de oscilações no calor específico no regime de baixas temperaturas. Associamos estas oscilações à *Anomalia de Schottky*, e observamos que este comportamento é qualitativamente análogo a resultados conhecidos na literatura que reportam o calor específico de sistemas nanoestruturados.

A *Anomalia de Schottky*, comumente observada em sistemas cuja energia é limitada, é caracterizada por um (ou vários) pico(s) no calor específico. Estes picos ocorrem quando há um “gap” entre dois níveis de energia e o sistema ocupa o estado de menor energia enquanto não tem energia suficiente para ir para o próximo estado, o que é representado pela diminuição na taxa de absorção de energia e, portanto, no calor específico. Após essa energia necessária ser atingida, o sistema passa para o próximo estado provocando um aumento no calor específico. Além disso, também observamos que no caso do modelo de Ashkin-Teller a oscilação apresenta certa assimetria em relação ao ponto máximo, a qual é associada à assimetria na distribuição dos níveis de energia do modelo em torno do valor $E=0$.

Agradecimentos

Agradecemos ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), ao Departamento de Física Teórica e Experimental (DFTE) e à Universidade Federal do Rio Grande do Norte (UFRN) pelo apoio financeiro e institucional.

Referências Bibliográficas

SHECHTMAN, D. et al. Metallic Phase with Long-Range Orientational Order and no Translational Symmetry. **Physical Review Letters**, v. 53, n. 20, p. 1951-1954, 1984.

MERLIN, R. et al. Quasiperiodic GaAs-AlAs Heterostructures. **Physical Review Letters**, v. 55, n. 17, p. 1768 – 1770, 1985.

PINHO, S.T.R., e ANDRADE, R.F.S. Break of universality for an Ising model with aperiodic Rudin-Shapiro interactions. **The European Physical Journal B**, v. 34, p. 343 – 350, 2003.

ISING, E. **Z. Phys.**, v. 31, p. 235, 1925.

BRUSH, S. G. History of the Lenz-Ising Model. **Reviews of Modern Physics**, v. 39, n. 4, p. 883 – 893, 1967.

LEE, T.D., e YANG, C.N. Statistical Theory of Equations of State and Phase Transitions. II. Lattice Gas and Ising Model. **Physical Review**, v. 87, p. 410-419, 1952.

ASHKIN, J., e TELLER, E. Statistics of Two-Dimensional Lattices with Four Components. **Physical Review**, v.64, n.5-6, p178-184, 1943.

BEZERRA, C. G. et al. *m*Spin wave specific heat in quasiperiodic Fibonacci structures. **Physica A**, v. 294, p. 415-423, 2001.

ALBUQUERQUE, E. L et al. Oscillatory behavior of the specific heat at low temperature in quasiperiodic structures. **Physica A**, v. 344, p. 366 – 371, 2004.

Filipe Augusto de Souto Borges

Endereço eletrônico: filipe@dfte.ufrn.br

Base de pesquisa: *Física e Estatística de Sistemas Cooperativos*

Endereço postal: Departamento de Física Teórica e Experimental, Centro de Ciências Exatas e da Terra, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Campus Universitário, 59078-970, Natal/RN – Brasil.