



Propriedades Magnéticas do Modelo de Ising de Spins Mistos com Desordem Temperada

Dorílson Silva Cambuí

Orientador: Prof. Dr. Maurício Godoy

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Mato Grosso como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Física.

Cuiabá, março de 2007

Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

Dorílson Silva Cambuí

Propriedades Magnéticas do Modelo de Ising de Spins Mistos com Desordem Temperada

Dissertação apresentada ao Programa de
Pós-Graduação em Física da Universidade
Federal de Mato Grosso como requisito par-
cial para obtenção do título de Mestre em
Física.

Cuiabá, março de 2007

À Eni, Ray e Rô

Agradecimentos

Ao meu orientador Prof. Dr. Mauricio Godoy;

Ao Prof. Dr. Alberto Sebastião de Arruda;

Aos professores do curso de Pós - Graduação em Física;

A todos os colegas de pós-graduação;

A minha família;

Meus agradecimentos.

Conteúdo

Agradecimentos	ii
Lista de Figuras	v
Lista de Tabelas	viii
Resumo	ix
Abstract	x
1 Introdução	1
2 O método de Monte Carlo	3
2.1 Introdução	3
2.1.1 Métodos estocásticos	4
2.1.2 Processos de Markov	5
2.1.3 Matriz estocástica	7
2.1.4 A Equação Mestra	8
2.1.5 O Princípio do balanço detalhado	10
2.1.6 O Algoritmo de Metropolis	11
3 Cálculo Monte Carlo para o modelo de Ising	13
3.1 O modelo	13
3.2 Procedimento das simulações	15
3.3 Implementando o algoritmo de Metropolis	17

3.4	Resultado das simulações	19
4	Sistemas magnéticos desordenados	24
4.1	Sistemas ordenados ideais vs Sistemas desordenados	24
4.2	Tipos de defeitos	25
4.3	Distorções da ordem	28
4.3.1	Vidros de spin	31
4.4	As Ligas metálicas	31
4.4.1	Definição	31
4.4.2	Técnicas de tratamento	32
4.4.3	Aplicando o tratamento temperado em sistemas magnéticos	33
5	O modelo de Ising de spins mistos com desordem temperada	35
5.1	Introdução	35
5.2	Definição do modelo	36
5.3	Observáveis de interesse	36
5.4	Procedimentos	38
5.5	Resultados	39
6	Conclusões	45
	Referências bibliográficas	47

Lista de Figuras

3.1	Esquema representativo da energia de troca J entre spins primeiros vizinhos. Se $J > 0$ os spins se alinham em sentido contrário e a interação é antiferromagnética, se $J < 0$ os spins se alinham num mesmo sentido, neste caso a interação é ferromagnética.	14
3.2	Evolução da magnetização m_L em MCs. Após esse valor a magnetização tende a oscilar em torno de um valor médio. As simulação foram realizadas para tamanhos de rede $L = 80$ e $L = 96$	20
3.3	Comportamento da magnetização m_L em função da temperatura T para vários tamanhos de rede L indicados na figura.	20
3.4	Energia e_L em função da temperatura T para vários tamanhos de rede L indicados na figura.	21
3.5	Cumulante de Binder de quarta ordem U_L em função da temperatura T para vários tamanhos de rede L indicados na figura.	21
3.6	Susceptibilidade χ_L em função da temperatura T para vários tamanhos de rede L indicados na figura.	22
3.7	Calor específico c_L em função da temperatura T para vários tamanhos de rede L indicado na figura.	22
4.1	Representação esquemática de uma rede cristalina em que um átomo substitucional ocupa o espaço vazio deixado por outro átomo. . . .	26
4.2	Ilustração de uma rede cristalina com um átomo intersticial associado às imperfeições e localizado na região intersticial da rede . . .	26

4.3	Ilustração de uma rede cristalina que apresenta as diversas formas de impurezas. Os círculos cheios representam os átomos regulares em cada sítio da rede e os círculos vazios representam as impurezas. Figura retirada da referência [9]	27
4.4	Figura ilustrativa que apresenta um exemplo de defeitos planares numa rede cristalina. Define os contornos de um material que delimitam o material em regiões ou grãos	28
4.5	Figura ilustrativa representando, a) rede cristalina regular. b) desordem substitucional. c) desordem estrutural. Extraída da referência [11]	28
4.6	Figura ilustrativa em que um spin localizado na quina do triângulo recebe informações antagônicas dos outros dois vizinhos causando uma indefinição na sua orientação. Tal fenômeno é conhecido como efeito de frustração.	31
5.1	Comportamento da magnetização m_L em função da temperatura T para vários tamanhos de rede L indicados nas figuras e para diferentes concentrações p_c de spins σ . (a) $p_c = 0,0$. (b) $p = 0,25$. (c) $p = 0,50$. (d) $p = 0,75$. (e) $p = 1,0$	40
5.2	Cumulante de Binder de quarta ordem U_L em função da temperatura T para vários tamanhos de rede L indicados nas figuras e para diferentes concentrações p de spins σ . (a) $p = 0,0$ e $T_c = 1,69$. (b) $p = 0,25$ e $T_c = 1,33$. (c) $p = 0,50$. e $T_c = 1,00$. (d) $p = 0,75$ e $T_c = 0,7$. (e) $p = 1,0$ e $T_c = 0,5$	41
5.3	Susceptibilidade χ_L em função da temperatura T para vários tamanhos de rede L indicados nas figuras e para diferentes concentrações p_c de spins σ . (a) $p_c = 0,0$ (b). $p = 0,25$. (c) $p = 0,50$. (d) $p = 0,75$. (e) $p = 1,0$	43

5.4	Calor específico c_L em função da temperatura T para vários tamanhos de rede L indicado nas figuras e para diferentes concentrações p de spins σ . (a) $p = 0,0$. (b) $p = 0,25$. (c) $p = 0,50$. (d) $p = 0,75$. (e) $p = 1,0$	44
5.5	Diagrama de fases da temperatura crítica T_c e as diferentes concentrações p de spins σ	44

Lista de Tabelas

3.1	Tabela indicando os números de configurações a serem somadas na função de partição canônica. A primeira coluna indica o tamanho linear da rede. A segunda coluna indica o número total de spins na rede, ou seja, $N = l^2$, logo, a terceira coluna indica o número de configurações do sistema.	16
4.1	Tabela de alguns tipos de ligas mais comuns com suas respectivas composições e classificação.	33
5.1	Tabela dos resultados obtidos através do cumulante de Binder de quarta ordem U_L para diferentes concentrações p de spins σ	42

Resumo

Simulações de Monte Carlo foram usadas para determinar o diagrama de fases temperatura versus concentração p de spins σ de um modelo de Ising de spins mistos com desordem temperada numa rede quadrada. O modelo consiste de dois diferentes tipos de partículas com spins $\sigma = \frac{1}{2}$ (estados $\pm\frac{1}{2}$) e $S = 1$ (estados $\pm 1, 0$). Essas partículas são distribuídas de forma aleatória na rede e consideramos somente interações entre spins primeiros vizinhos do tipo ferromagnética ($J > 0$). Este modelo representa uma liga binária magnética (obtida através do esfriamento rápido de uma mistura líquida em altas temperaturas) do tipo A_pB_q ($p = 1 - q$). Empregamos simulações de Monte Carlo para vários tamanhos de rede L e para diferentes concentrações de spins σ na rede, com L variando de 12 a 48 e aplicando condições periódicas de contorno. O cumulante de Binder foi utilizado para calcular a temperatura crítica deste sistema para as várias concentrações p de spins σ . Determinamos o comportamento das grandezas termodinâmicas envolvidas como a temperatura versus magnetização, susceptibilidade, calor específico e o cumulante para diferentes tamanhos de redes bem como para diferentes concentrações de spins σ .

Abstract

Monte Carlo simulations were used to determine the phase diagram of temperature T versus concentration p of spins σ , of the quenched random mixed-spin Ising model on the square lattice. The model consists of two different particles with spins $\sigma = 1/2$ (states $\pm 1/2$) and $S = 1$ (states $\pm 1, 0$). These particles are randomly distributed on the lattice, and we considered only nearest-neighbor interactions. This model can represent a random magnetic binary alloy $A_x B_{1-x}$, obtained from the high temperature quenching of a liquid mixture. We performed Monte Carlo simulations for several lattice sizes, temperature, concentration p of the spins σ , and we found its critical temperature through the reduced fourth-order cumulant. We also determined the magnetization, the susceptibility and the specific heat as a function of temperature.

Capítulo 1

Introdução

Há, atualmente, dois métodos de simulação computacional utilizados na resolução de problemas físicos [1]. São os métodos de Monte Carlo e a Dinâmica molecular [2]. Em geral, são usados para resolução de problemas estatísticos que não possuem solução analítica exata, porém, apresentam características distintas. Enquanto o método de dinâmica molecular está associado a problemas de cunho determinísticos, via integração direta das equações de movimento do sistema. O método de Monte Carlo consiste num método de simulação computacional baseado na utilização de números aleatórios. A título de esclarecimento, o nome Monte Carlo é uma alusão à cidade de Monte Carlo no principado de Mônaco, famosa pelos seus cassinos e jogos de azar [1].

Este é o método que empregaremos neste trabalho. Em termos computacionais, não é possível obter um gerador de números verdadeiramente aleatórios. Usa-se então, geradores de números *pseudo-aleatórios*, pois a inicialização do processo de geração é realizada através de um valor determinado, *uma semente*. Os números gerados desta maneira são, podemos dizer, previsíveis e apresentam um ciclo de repetição finito. Este ciclo deve ser o maior possível, pois muitas vezes, em determinadas simulações, consome-se um número elevado ($\sim 10^6$) de números aleatórios. Neste trabalho utilizamos o gerador RAN1(idum) [3], que a partir de uma semente, nos fornece uma sequência de números pseudo-aleatórios (em geral

números inteiros, grandes, ímpares e negativos).

No capítulo 2, apresentamos os métodos estocásticos que oferecem suporte teórico ao método de Monte Carlo dando fundamental embasamento quanto a aplicabilidade das simulações de tal modo, que esclarecem e justificam as simulações [4]. Ainda neste capítulo estudamos os processos de Markov, a matriz estocástica, o princípio do balanço detalhado, a equação Mestra e o algoritmo de Metropolis.

Para melhor entendimento da aplicação do método Monte Carlo, no capítulo 3, apresentamos como exemplo os procedimentos de uma simulação para um modelo físico relativamente simples, o modelo de Ising. Calculamos as grandezas termodinâmicas como a magnetização, susceptibilidade, calor específico e o cumulante de Binder de quarta ordem.

Em seguida, no capítulo 4, discutimos o comportamento de sistemas desordenados devido presença de impurezas num cristal. Abordamos também as técnicas de tratamento temperado (*quenched*) e recozido (*annealed*), para obtenção de ligas metálicas, em particular as ligas binárias com propriedades magnéticas.

Finalmente, estudamos, no capítulo 5, o modelo de Ising de spins mistos com desordem temperada numa rede quadrada, que representa uma liga binária magnética. Através de simulação de Monte Carlo, utilizando o algoritmo de Metropolis, obtivemos os resultados esperados para as grandezas termodinâmicas e construímos o diagrama de fases do modelo no plano temperatura crítica T_c versus concentração p de spins σ .

Capítulo 2

O método de Monte Carlo

2.1 Introdução

O método Monte Carlo está fortemente associado à conceitos relacionados à probabilidade e a estatística. Como, por exemplo, na aplicação em cálculos de valor médio de propriedades físicas, onde o valor médio de uma determinada grandeza física (como a magnetização e a energia, por exemplo), é definido por:

$$\langle x \rangle = \sum_j^M x_j P(x_j). \quad (2.1)$$

Esta equação nos mostra a dependência do valor médio $\langle x \rangle$ com a probabilidade P de ocorrência dos valores discretos x_j , onde

$$P(x_j) = \frac{1}{Z} \exp[-\beta E(x_j)], \quad (2.2)$$

e Z é a função de partição dada por:

$$Z = \sum_j^M \exp[-\beta E(x_j)], \quad (2.3)$$

sendo $E(x_j)$ a energia na j -ésima configuração x_j , e $\beta = 1/k_B T$. Analisando a eq. (3) percebe-se que o somatório é feito sobre todas as configurações do sistema,

portanto, como há um número enorme de graus de liberdade, torna-se praticamente impossível a realização da eq. (5.2).

Como alternativa, podemos efetuar o cálculo sobre uma fração pequena do total das configurações, mas, grande o suficiente para que se obtenha um resultado estatístico de boa qualidade. Desse modo, são consideradas somente as configurações mais relevantes, o que reduz satisfatoriamente o número de termos no cálculo das médias pretendidas.

Assim, transformamos a eq. (5.2), numa simples média aritmética sobre os M estados

$$\langle x \rangle = \frac{1}{M} \sum_j^M x_j. \quad (2.4)$$

O problema ainda consiste em saber que procedimentos devemos tomar para determinar essa amostragem por importância das M configurações mais relevantes. O método de Monte Carlo propicia a construção de algoritmos que geram seqüências de configurações sobre as quais são efetuadas as medidas das grandezas. Dentre os vários algoritmos, destacamos o algoritmo de Metropolis, que é o algoritmo que estaremos utilizando neste trabalho. [5]

2.1.1 Métodos estocásticos

Uma variável aleatória c , está fortemente associada a uma seqüência de experimentos aleatórios [6]. Tais experimentos, quando executados repetidamente e resguardadas as mesmas condições, fornecem diferentes valores para c , de maneira que não podemos precisar com segurança o seu valor em momentos anteriores ao experimento.

Podemos classificar uma variável aleatória como:

- ***Discreta*** \longrightarrow tal como no clássico exemplo do "dado", quando seus possíveis valores assumem valores discretos;
- ***Contínua*** \longrightarrow como na posição de uma partícula num movimento browni-

ano.

Neste contexto, definimos um processo estocástico como uma classe importante de variáveis aleatórias que depende do tempo, ou seja, cujo valor varia aleatoriamente com o tempo. Se tratamos de um conjunto de variáveis c que variam com o tempo, então as respectivas distribuições de probabilidades dos processos estocásticos também variam com o tempo, de modo que seus valores em dois instantes quaisquer t_1 e t_2 estão correlacionados, daí podemos tirar um conceito importante em física estatística que é a definição de probabilidade condicional.

Um processo estocástico é definido até o instante τ pela distribuição de probabilidades

$$P(x_0, x_1, \dots, x_\tau), \quad (2.5)$$

onde x possui o valor x_0 no instante $t = 0$, o valor x_1 no instante $t = 1, \dots$, e por fim o valor x_τ no instante $t = \tau$.

A probabilidade de que a variável estocástica x assuma o valor $x_{\tau+1}$, em $t = \tau + 1$, tendo anteriormente assumido x_0 no instante $t = 0$, x_1 em $t = 1, \dots$, e o valor x_τ no instante $t = \tau$ é:

$$P_{\tau+1}(x_{\tau+1}|x_0, x_1, x_2, \dots, x_\tau), \quad (2.6)$$

conhecida como probabilidade condicional.

2.1.2 Processos de Markov

Se consideramos o caso em que a variável estocástica x assuma o valor $x_{\tau+1}$ no instante $t = \tau + 1$, tendo assumido anteriormente o valor x_τ em $t = \tau$ de tal modo independente dos valores $x_0, x_1, \dots, x_{\tau-1}$, ou seja, quando as informações em tempos anteriores ao da última informação são irrelevantes para a distribuição de

probabilidades em tempos posteriores a esta, temos:

$$P_{\tau+1}(x_{\tau+1}|x_0, x_1, x_2, \dots, x_\tau) = P_{\tau+1}(x_{\tau+1}|x_\tau), \quad (2.7)$$

então o processo estocástico de evolução da variável x é um processo markoviano. Esta denominação é em homenagem ao matemático russo *Andrey Andreyevich Markov*, que apresentou os primeiros resultados do estudo deste tipo de processo estocástico em 1906.

Em simulação de Monte Carlo, usamos um processo de Markov repetidas vezes até gerar uma cadeia de Markov que produzirá uma sucessão de estados $x_0, x_1 \dots x_n$ de tal modo que o estado gerado $x_{\tau+1}$ depende somente do estado imediatamente anterior x_τ .

A probabilidade condicional $P_{\tau+1}(x_{\tau+1}|x_\tau)$ é fisicamente interpretada como sendo a probabilidade de transição do estado x_τ para o estado $x_{\tau+1}$. Como nos processos markovianos as probabilidades de transição não variam com o tempo, temos:

$$P_{\tau+1}(x_{\tau+1}|x_\tau) = P(x_{\tau+1}|x_\tau), \quad (2.8)$$

ou, usando uma outra notação,

$$W(x_{\tau+1}|x_\tau) = P(x_{\tau+1}|x_\tau) = P_{x_\tau}. \quad (2.9)$$

Vimos que um processo estocástico markoviano fica completamente definido a partir do momento em que conhecemos a probabilidade de transição $P_{x_\tau} = W(x_{\tau+1}|x_\tau)$ entre os estados.

De maneira que podemos reescrevê-la de uma forma simplificada:

$$P(n) = \sum_m W_{m \rightarrow n} P(m). \quad (2.10)$$

Para assegurar que os estados estão em equilíbrio termodinâmico, a probabili-

dade de transição para uma cadeia de Markov deve satisfazer as seguintes restrições:

i) **Positividade** $W_{m \rightarrow n} \geq 0$

ii) **Normalização** $\sum W_{m \rightarrow n} = 1$

iii) **Reversibilidade** $\sum_m W_{m \rightarrow n} P(m) = P(n)$

Além disso, qualquer estado m , deve ser acessível num número finito de transições, partindo de qualquer outro estado n ,

$$W_{n \rightarrow m} = \sum_{n_1} \sum_{n_2} \dots \sum_{n_n} W_{n \rightarrow n_1} W_{n_1 \rightarrow n_2} \dots W_{n_n \rightarrow m} > 0, \quad (2.11)$$

esta condição recebe o nome de ergodicidade.

Devemos escolher a probabilidade de distribuição tal que no limite termodinâmico a função de distribuição P_X dos estados gerados pelo processo de Markov tende ao equilíbrio, dessa forma:

$$P(x_\tau) = \frac{1}{Z} \exp \left[\left(\frac{-\mathcal{H}(x_\tau)}{k_B T} \right) \right]. \quad (2.12)$$

Uma condição para conseguir isto é através do princípio do balanço detalhado, como veremos mais adiante.

2.1.3 Matriz estocástica

Partindo da eq. (2.10) podemos reescrevê-la em forma de uma matriz T , a matriz estocástica, de modo que será:

$$P(n) = \sum_m T(n, m) P(m), \quad (2.13)$$

em que $T(n, m)$ é um elemento desta matriz e representa a probabilidade de transição do estado m , para o estado n , obedecendo a condição de normalização (ii).

Definindo a matriz P_l , cujos elementos são $P_l(n)$, podemos escrever a eq. (2.13) na forma de uma equação matricial, ou seja,

$$P_l = TP_{l-1}. \quad (2.14)$$

Se, num dado instante, conhecermos uma matriz coluna P_0 , após l passos poderemos obter P_l ,

$$P_l = T^l P_0, \quad (2.15)$$

portanto, para determinar $P_l(n)$ precisamos apenas calcular a l -ésima potência da matriz estocástica T . De forma que,

$$P_l(n) = \sum_m T^l(n, m) P_0(m), \quad (2.16)$$

onde $T^l(n, m)$ é o elemento da matriz e dá a probabilidade de transição do estado m para o estado n , em l passos.

2.1.4 A Equação Mestra

Suponhamos que um dado processo estocástico markoviano seja definido pela matriz T e que as transições entre dois estados quaisquer ocorram em um intervalo de tempo Δt e que os elementos da matriz estocástica sejam:

$$T(m, n) = \Delta t W(m, n), \quad (2.17)$$

e, a probabilidade do sistema estando no estado n , no passo l do processo, transitar para o mesmo estado n , no passo ($l = 1$), é

$$T(n, n) = 1 - \Delta t \mu(n), \quad (2.18)$$

lembrando também que:

$$\sum_m T(m, n) = 1,$$

é importante ressaltar que o somatório é sobre todos os valores possíveis de m , e substituindo as eq.(2.18 e 2.17) na expressão acima, temos:

$$\sum_{m \neq n} [\Delta t W(m, n) + (1 - \Delta t \mu(n))] = 1, \quad (2.19)$$

onde fizemos,

$$\mu(n) = \sum_{m \neq n} W_{m \rightarrow n}. \quad (2.20)$$

Temos ainda,

$$P(n, t + \Delta t) = \sum_{m \neq n} [T(n, m)P(m, t) + T(n, n)P(n, t)], \quad (2.21)$$

ou seja, a probabilidade do sistema estar no estado n em $t + \Delta t$ é dada pela probabilidade dele ir de um estado m para um estado n mais a probabilidade dele estar no estado n e permanecer no mesmo. Estudando a evolução temporal desta probabilidade, e sabendo que:

$$T(n, m) = \Delta t W_{m \rightarrow n}, \quad n \neq m,$$

e

$$T(n, n) = 1 - \Delta t \mu(n),$$

obtemos:

$$P(n, t + \Delta t) = \sum_{m \neq n} [\Delta t W_{n \rightarrow m} P(m, t) + P(n, t) - \Delta t \mu(n) P(n, t)] \quad (2.22)$$

reagrupando os termos, podemos escrever:

$$\frac{P(n, t + \Delta t) - P(n, t)}{\Delta t} = \sum_{m \neq n} [W_{m \rightarrow n} P(m, t) - \mu(n) P(n, t)]. \quad (2.23)$$

No limite $\Delta t \rightarrow 0$, o lado esquerdo da equação acima é a derivada temporal da probabilidade $P(n, t)$, ou,

$$\frac{d}{dt} P(n, t) = \sum_{m \neq n} [W_{n \rightarrow m} P(m, t) - \mu(n) P(n, t)], \quad (2.24)$$

usando a eq. (2.20), temos,

$$\frac{d}{dt} P(n, t) = \sum_{m \neq n} W_{n \rightarrow m} P(m, t) - W_{n \rightarrow m} P(n, t), \quad (2.25)$$

que é a equação mestra e representa a evolução da probabilidade $P(n, t)$ com que os estados são gerados.

2.1.5 O Princípio do balanço detalhado

Considerando a eq. (2.25), $W_{m \rightarrow n}$ é a taxa de transição do estado m para o estado n e, no equilíbrio,

$$\frac{d}{dt} P(n, t) = 0, \quad (2.26)$$

e para isso é suficiente (mas não necessário) que:

$$W_{m \rightarrow n} P(m, t) = W_{n \rightarrow m} P(n, t), \quad (2.27)$$

a expressão acima é comumente conhecida como balanço detalhado e representa a condição suficiente para que a probabilidade de distribuição seja de equilíbrio.

2.1.6 O Algoritmo de Metropolis

O algoritmo de metropolis [5] consiste em gerar um sequência de configurações $x_1, x_2, \dots, x_\tau, x_{\tau+1}, \dots, x_M$, independentes de tal forma, que a configuração $x_{\tau+1}$ seja gerada a partir de x_τ , através da probabilidade de transição $P(x_{\tau+1}|x_\tau)$. O algoritmo deve gerar cada nova configuração a partir da configuração anterior, criando uma sequência de configurações através do processo de Markov de tal maneira que conduza o sistema à distribuição de equilíbrio,

$$P_{eq}(x_\tau) = \frac{1}{Z} \exp[-\beta E(x_\tau)], \quad (2.28)$$

e a condição suficiente para que se atinja o estado de equilíbrio é dada pela eq.(2.27), ou seja, o princípio do balanço detalhado.

Podemos escrever o algoritmo de Metropolis como:

1. Especificar uma configuração inicial x_τ ;
2. Gerar uma nova configuração $x_{\tau+1}$;
3. Calcular a diferença de energia $\Delta E = E(x_{\tau+1}) - E(x_\tau)$ entre a configuração inicial x_τ e a configuração gerada $x_{\tau+1}$;
4. Se $\Delta E \leq 0$, aceita esta nova configuração e retorna ao passo 2;
5. Se não, calcular $\exp[-\Delta E/k_B T]$;
6. Gerar um número aleatório $R \in [0, 1]$;
7. Se $R \leq \exp[-\Delta E/k_B T]$, aceitar a nova configuração e retornar ao passo 2;
8. Caso contrário, a configuração anterior passa a ser a nova configuração e, daí, retorna-se ao passo 2.

Desse modo a probabilidade de transição pode esquematicamente ser escrita da forma como segue:

$$\omega_{m \rightarrow n} = \left\{ \begin{array}{ll} 1 & \text{se } \Delta E \leq 0 \\ \exp(-\beta \Delta E) & \text{se } \Delta E > 0 \end{array} \right\} \quad (2.29)$$

Capítulo 3

Cálculo Monte Carlo para o modelo de Ising

3.1 O modelo

Um dos fenômenos que tem sido objeto de avançados estudos na física do estado sólido é o ferromagnetismo, onde observa-se que parte dos spins se polariza espontaneamente na mesma direção, ou seja, os momentos magnéticos estão orientados numa mesma direção e sentido, dando lugar a um campo magnético macroscópico. Este comportamento é observado em alguns metais como o ferro e o níquel. Isto ocorre, entretanto, quando a temperatura é menor que uma certa temperatura característica que recebe o nome de temperatura de Curie. Acima desta temperatura de Curie os spins se orientam aleatoriamente, ou seja, há um desarranjo nos momentos magnéticos, de modo a não produzir um campo magnético intrínseco. Dizemos, neste caso, que o material "sofre" uma transição de fases na temperatura de Curie T_c .

Quanto a transição, esta pode ser caracterizada como sendo de primeira ou segunda ordem. A transição de primeira ordem dá-se pela descontinuidade da magnetização, enquanto que para uma transição de segunda ordem a magnetização vai a zero continuamente à medida que a temperatura se aproxima da temperatura

crítica, ($T \rightarrow T_c$), conforme podemos observar pela figura 3.3.

Para simular substâncias ferromagnéticas, um dos modelos mais simples (e mais usado) é o de Ising, que consiste em um sistema de N pontos fixos dando forma a uma rede periódica D -dimensional. Mais especificamente, o sistema considerado é um conjunto de momentos magnéticos (spins) fixos nos N sítios de uma rede. A estrutura geométrica da rede pode ser cúbica ($D = 3$), quadrada ($D = 2$), linear ($D = 1$), hexágona, triangular, etc. Associada a cada sítio da rede está uma variável de spin $S(i = 1, 2, \dots, N)$ que pode assumir unicamente dois estados possíveis: $S_i = +1$ (*spin up*) e $S_i = -1$ (*spin down*). A energia de uma dada configuração de spins é definida pelo Hamiltoniano de Ising [4]:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - H \sum_i S_i, \quad (3.1)$$

onde $\langle ij \rangle$ indica que a soma é feita sobre todos os pares de spins primeiros vizinhos, H é um campo magnético externo e J é a constante de acoplamento ferromagnético, comumente conhecida como energia de troca. Para ($J > 0$) temos o estado ferromagnético e para ($J < 0$) temos o antiferromagnetismo.

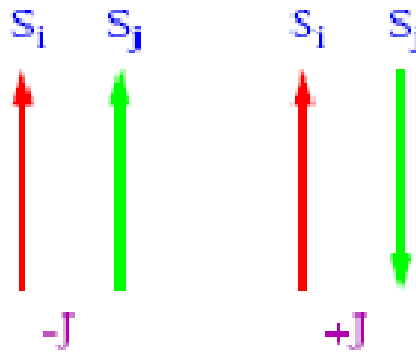


Figura 3.1: Esquema representativo da energia de troca J entre spins primeiros vizinhos. Se $J > 0$ os spins se alinham em sentido contrário e a interação é antiferromagnética, se $J < 0$ os spins se alinham num mesmo sentido, neste caso a interação é ferromagnética.

Como podemos perceber, o primeiro termo da soma na eq.(3.1) representa as

energias de interação entre spins primeiros vizinhos. O segundo termo envolve as interações entre um campo magnético externo aplicado H e o sistema de spins.

Atualmente, existem vários métodos para se estudar o modelo de Ising, dentre os quais, destacamos:

- Métodos Analíticos: Teoria de Campo Médio (TCM), expansões em séries, teorias de campo efetivo, grupo de renormalizações, etc.
- Métodos Numéricos: método simulacional de Monte Carlo.

Para o modelo de Ising em $D = 3$, não existe solução analítica exata (ainda), porém, através de simulações temos condições de conhecer as características desse sistema.

Neste trabalho utilizamos simulações de Monte Carlo no modelo de Ising bidimensional, como um exemplo de aplicações de métodos numéricos em física.

3.2 Procedimento das simulações

Estudamos, agora, o método de Monte Carlo aplicado ao modelo de Ising. A magnetização m do sistema para uma configuração $\{S_i\}$ é definida por:

$$m(S_i) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i, \quad (3.2)$$

onde N é o número de spins. Então a magnetização média é definida por:

$$\langle m \rangle = \sum_{S_i} P(\{S_i\}) m(\{S_i\}). \quad (3.3)$$

Sabendo que $\{S_i\}$ é uma configuração microscópica do sistema, a soma é normalizada sobre todas estas configurações e $P(\{S_i\})$ é a distribuição de Boltzmann, dada por:

$$P(\{S_i\}) = \frac{1}{Z} \exp(-E(\{S_i\})/k_B T), \quad (3.4)$$

l	N	2^N
5	25	3.4×10^7
10	100	1.3×10^{30}
32	1024	10^{300}

Tabela 3.1: Tabela indicando os números de configurações a serem somadas na função de partição canônica. A primeira coluna indica o tamanho linear da rede. A segunda coluna indica o número total de spins na rede, ou seja, $N = l^2$, logo, a terceira coluna indica o número de configurações do sistema.

com $Z = \sum_{\{S_i\}} \exp(-E(\{S_i\})/k_B T)$, Z é chamada de função de partição e $\beta = 1/k_B T$. Todas as propriedades físicas, tais como magnetização, calor específico, susceptibilidade magnética, entre outras, podem ser obtidas a partir dela [4], logo, uma solução exata para um modelo depende da obtenção de uma expressão analítica para a função de partição.

Observando a definição de Z , observa-se que a soma é sobre todas as *configurações do sistema*, de modo que é praticamente inviável realizar essa soma, pois em uma rede de N sítios, teremos 2^N diferentes configurações, uma vez que cada spin tem dois estados. O número total de estados cresce exponencialmente com o número de spins na rede, como se pode ver na tabela (3.1).

Analizando a tabela acima, suponha que queremos calcular Z numericamente, para uma rede 32×32 , onde o número de configurações da soma é igual a $2^{32 \times 32} \simeq 10^{300}$. Suponha que um computador tenha uma frequência de clock (frequência de operação do processador) $f = 10 \text{ GHz}$ ou 10^{10} Hz . O que equivale a 10^{10} pulsos de clock por segundo. Se o hipotético computador em questão gastar apenas um pulso de clock para gerar a configuração $\{S_i\}$, aplicar os cálculos necessários para se calcular $E(\{S_i\})$ e introduzir $\exp[-E(\{S_i\})/k_B T]$ em Z , o tempo que ele gastará para calcular a função de partição será:

$$t_Z = \frac{10^{300} \text{ config}}{10^{10} \text{ config/seg}} \simeq 10^{282} \text{ anos.}$$

Sabemos que a idade média estimada para o universo é de 10 bilhões de anos ou

10^{10} anos. Mesmo que houvesse muitos processadores ou que a frequência de clock fosse muito maior que as atuais, o número acima mostra que o cálculo direto da função de partição Z continuaria inviável.

3.3 Implementando o algoritmo de Metropolis

Dessa forma, não é possível fazer a soma sobre todas as configurações do sistema, mas somente sobre algumas configurações. O procedimento a ser adotado neste caso é comumente designado por *Amostragem por Importância*. Observando a eq. (3.4), vemos que os estados de menor energia apresentam maior probabilidade de ocorrência. No entanto, se num processo de simulação sortearmos configurações com nível de energia muito alta, a exponencial $\exp[-E(\{S_i\})/k_B T]$ tenderá a zero e portanto o termo somado se tornará insignificante. Por outro lado, se um sistema de Ising se encontra à baixa temperatura, os estados mais prováveis são aqueles próximos ao estado fundamental.

Portanto, num processo de simulação computacional, usando a técnica de Monte Carlo, ao adotarmos o procedimento da amostragem por importância, não escolhemos todas as configurações possíveis do sistema, mas apenas algumas que serão "sorteadas". E este sorteio se dará segundo a distribuição de Boltzmann $P(\{S_i\}) = \exp[-E(\{S_i\})/k_B T]$, que é o princípio básico do conhecido algoritmo de Metrópolis.

Portanto, a eq. (3.3) pode ser reescrita como:

$$\langle m \rangle = \frac{1}{M} \sum_{(\{S_i\})=1}^M m(\{S_i\}), \quad (3.5)$$

que é uma média aritmética simples sobre os M estados escolhidos durante a simulação.

Neste presente trabalho, simulamos o modelo de Ising através do método de Monte Carlo, para isso, vamos considerar uma rede quadrada de tamanho linear L , com valores de L variando de $L = 16$ a 96 . Em nosso modelo o campo magnético

externo é $H = 0$, as interações são do tipo ferromagnética ($J > 0$), e aplicamos condições periódicas de contorno. Em relação a configuração inicial do sistema, escolhemos uma em que $T \rightarrow \infty$, ou seja, configuração de spins completamente descorrelacionados, orientando-se aleatoriamente ora para cima ora para baixo. Uma nova configuração é gerada a partir de uma anterior pelo processo de Markov, respeitando a condição de ergodicidade e do balanço detalhado. As novas configurações são geradas com uma probabilidade de transição que depende da diferença de energia ΔE entre as duas configurações. Para mudar de um estado para outro, escolhemos um spin aleatoriamente na rede e computamos a variação da energia ΔE caso esse spin tenha seu sinal trocado. Geramos um número aleatório R entre zero e um. Se $R \leq \exp[-\beta\Delta E]$, trocamos o sinal do spin. Caso contrário, mantemos a configuração anterior.

Calculamos, dessa forma, as seguintes quantidades termodinâmicas: a magnetização m_L , a energia e_L , o calor específico c_L , a susceptibilidade χ_L e o cumulante de Binder U_L de quarta ordem (que nos dará o valor da temperatura crítica), definidos abaixo:

$$m_L = \frac{1}{N} \left\langle \left| \sum_{i=1}^N S_i \right| \right\rangle, \quad (3.6)$$

$$e_L = \frac{1}{N} \langle \mathcal{H} \rangle, \quad (3.7)$$

$$c_L = N (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2), \quad (3.8)$$

$$\chi_L = N (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2), \quad (3.9)$$

$$U_L = 1 - \frac{\langle m_L^4 \rangle}{3 \langle m_L^2 \rangle^2}. \quad (3.10)$$

Nas expressões acima $\langle \dots \rangle$ denota as médias térmicas.

3.4 Resultado das simulações

No processo de simulação de Monte Carlo, na implementação do algoritmo de Metropolis, a configuração aleatória, com que se inicia a cadeia de Markov não corresponde a um estado de equilíbrio do sistema. Então, descartamos as primeiras configurações geradas pela simulação, já que estas se apresentam fora do equilíbrio termodinâmico. Para que isso ocorra, percorremos a rede várias vezes aceitando ou rejeitando as configurações geradas, segundo a prescrição de Metropolis, até que se atinja um estágio onde se configure uma rede termalizada. Tendo o sistema entrado em equilíbrio termodinâmico, a magnetização do sistema começa a flutuar em torno de um valor médio e a partir daí, passaremos a gerar novas configurações e então estimar os valores das quantidades físicas de interesse [1]. O tempo necessário para percorrer toda a rede é chamado de passo de Monte Carlo MCs, ou seja, "visitar" $L \times L$ spins na rede. A figura (3.2), mostra a evolução da magnetização m_L em função do número de passos de Monte Carlo MCs. Por exemplo, para $L = 80$ a magnetização é zero para MCs = 0 e a medida que o tempo passa ela flutua aleatoriamente até um valor MCs = 12000. Observe como a magnetização tende a oscilar em torno de um valor médio.

Logo, aguardamos em torno de 2×10^5 MCs para que o sistema atingisse o regime estacionário para todos os tamanhos de rede. Usamos mais 2×10^5 MCs para calcularmos as médias das quantidades de interesse, para qualquer tamanho de rede. Estes resultados são para o modelo de Ising de spins 1/2.

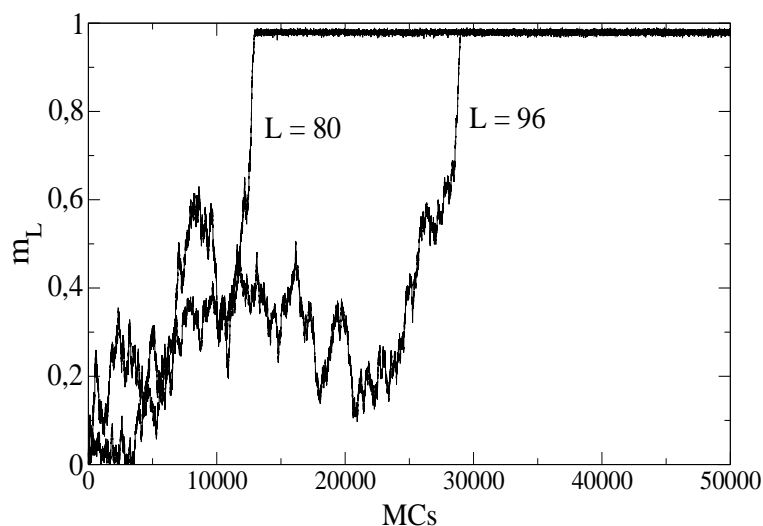


Figura 3.2: Evolução da magnetização m_L em MCs. Após esse valor a magnetização tende a oscilar em torno de um valor médio. As simulação foram realizadas para tamanhos de rede $L = 80$ e $L = 96$.

Em nossa simulação é possível verificar o comportamento de várias quantidades termodinâmicas como a magnetização m_L , dada pela figura 3.3, em que obtemos diversas curvas de magnetização em função da temperatura T , para diferentes valores de rede L . Analisando o gráfico abaixo, é fácil perceber que a magnetização diminui com o aumento da temperatura e anula-se acima de T_c , o que indica a ocorrência de uma transição de fases.

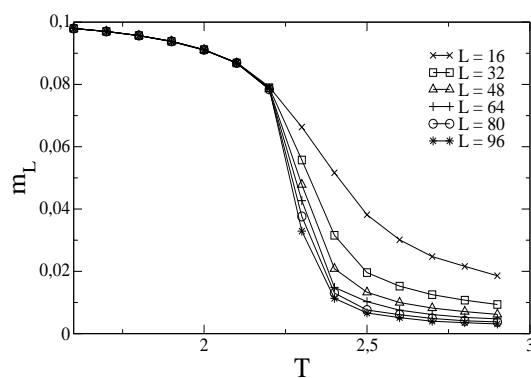


Figura 3.3: Comportamento da magnetização m_L em função da temperatura T para vários tamanhos de rede L indicados na figura.

Na figura 3.4, temos o gráfico da energia e_L interna por spin em função da temperatura T .

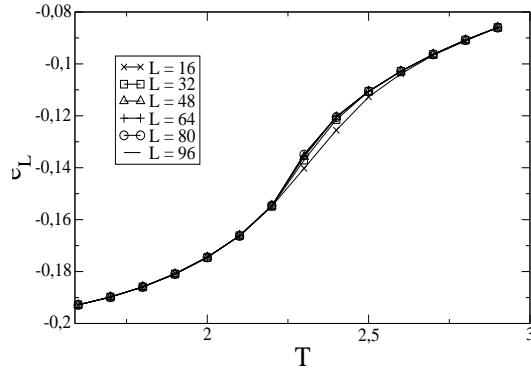


Figura 3.4: Energia e_L em função da temperatura T para vários tamanhos de rede L indicados na figura.

Para uma melhor determinação da temperatura crítica T_c , usamos a propriedade de que os cumulantes de quarta ordem [19] para diferentes tamanho de rede L se interceptam no ponto crítico. Na figura 3.5, temos o cumulante de Binder U_L de quarta ordem, em função da temperatura T para vários tamanhos de rede L . O valor exato da temperatura crítica do modelo de Ising é $T_c = 2.269J/k_B T$ [1]. Em nossa simulação obtivemos um valor aproximado em torno de $T_c = 2.2J/k_B T$ que está de acordo na literatura [1].

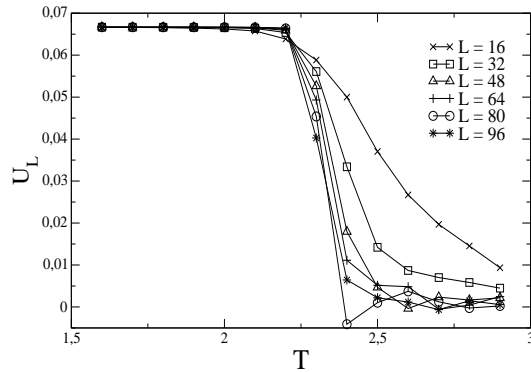


Figura 3.5: Cumulante de Binder de quarta ordem U_L em função da temperatura T para vários tamanhos de rede L indicados na figura.

A susceptibilidade χ_L em função da temperatura T , é mostrada na figura 3.6. Sabemos que a susceptibilidade magnética χ_L em sistemas finitos apresenta como característica um pico em torno da temperatura crítica T_c , como podemos observar. À medida em que aumenta a dimensão linear da rede L , notamos que a susceptibilidade varia com o pico aumentando em altura.

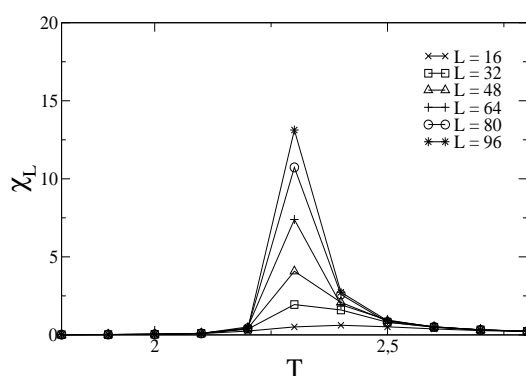


Figura 3.6: Susceptibilidade χ_L em função da temperatura T para vários tamanhos de rede L indicados na figura.

A figura 3.7, nos mostra o gráfico do calor específico c_L em função da temperatura T para vários tamanhos de rede L ; diferentemente da susceptibilidade, os picos observados nas curvas do calor específico apresentam uma fraca dependência com a dimensão linear da rede L , ou seja, diverge muito lentamente em torno da temperatura crítica T_c ,

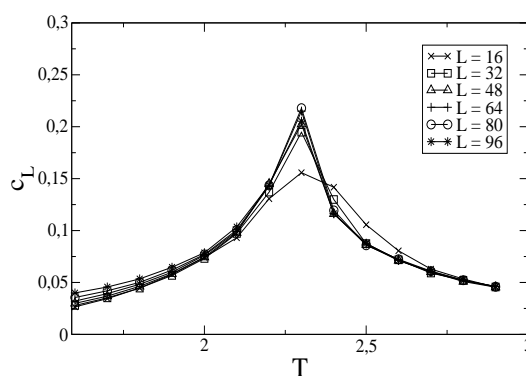


Figura 3.7: Calor específico c_L em função da temperatura T para vários tamanhos de rede L indicado na figura.

Empregamos simulações de Monte Carlo para vários tamanhos de rede L , para spins σ (estados $\pm\frac{1}{2}$), com L variando de 16 a 96. O cumulante de Binder foi utilizado para calcular a temperatura crítica. Determinamos o comportamento das grandezas termodinâmicas envolvidas como a temperatura versus magnetização, susceptibilidade, e o calor específico para diferentes tamanhos de redes L .

Capítulo 4

Sistemas magnéticos desordenados

4.1 Sistemas ordenados ideais vs sistemas desordenados

Didaticamente, para tratarmos de sistemas desordenados, é necessário fazermos uma analogia com os sistemas ordenados ideais [7]. Tais sistemas apresentam uma propriedade intrínseca que é a invariância translacional, originada pela regularidade espacial de todos os pontos da rede e pela regularidade na distribuição dos diferentes tipos de átomos, e que por sua vez está diretamente relacionada, quanto a ordem, a dois aspectos essenciais:

- ***Ordem Translacional*** → manifestada pela regularidade da distribuição espacial de todos os pontos da rede.
- ***Ordem Composicional*** → caracterizada pela regularidade na distribuição dos diferentes tipos de átomos.

Generalizando, a ordem de um sistema ideal representa a regularidade de distâncias interatômicas, direção das ligações, números de primeiros vizinhos, simetrias e tipos de átomos ligados. Tais configurações, garantem, por si só, um arranjo

cristalino bem definido.

Porém, na natureza, materiais reais não apresentam características de um sistema ideal.

Frequentemente encontramos na literatura estudos variados e complexos, tanto sob a ótica experimental quanto pela análise teórica, de modelos magnéticos desordenados. Podemos definir um sistema desordenado como a inexistência de ordem de longo alcance na distribuição dos átomos em uma rede cristalina.

Se considerarmos um pedaço de material com 1cm^3 teremos cerca de 10^{23} átomos. Seguindo essa linha de raciocínio é altamente provável que todos os átomos dessa amostra estejam, quanto a suas posições, desalinhados na rede cristalina. Desse modo, conclui-se que materiais reais apresentam imperfeições da rede tais como:

- defeitos;
- distorções da ordem.

4.2 Tipos de defeitos

Os tipos mais frequentes de defeitos são:

1. defeitos pontuais: estão associados a existência de impurezas no cristal. Estas impurezas podem ser do tipo substitucional, (aquelas que ocupam um lugar antes ocupado por um átomo), e do tipo intersticial, (se refere àquela que ocupa um lugar entre os átomos da rede). A região circunvizinha à impureza é distorcida e o grau de distorção depende do tipo de átomo de impureza e da sua posição. Enquanto os átomos intersticiais são imperfeições causadas pela presença de átomos estranhos nos interstícios da rede cristalina, átomos substitucionais são defeitos provocados pela existência de átomos estranhos na rede, em substituição aos átomos que deveriam estar ali se não existissem

vacâncias. Como podemos observar nas figuras¹ (4.1 e 4.2).

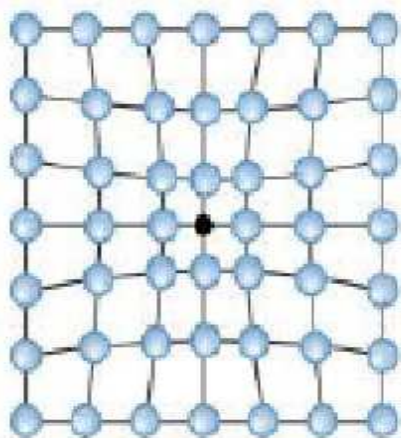


Figura 4.1: Representação esquemática de uma rede cristalina em que um átomo substitucional ocupa o espaço vazio deixado por outro átomo.

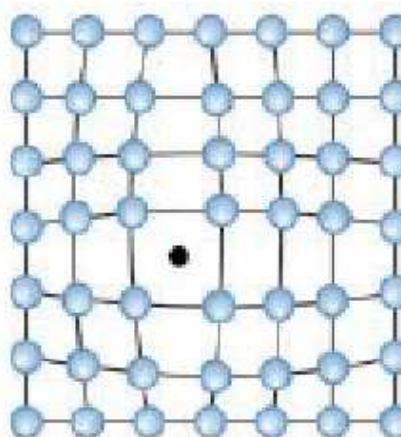


Figura 4.2: Ilustração de uma rede cristalina com um átomo intersticial associado às imperfeições e localizado na região intersticial da rede

Outro tipo de defeito pontual está relacionado a ausência de um átomo ou íon, configurando em espaços vazios na rede, chamados de vacância, conhecido como *defeito Schottky*[8]. É possível criar um defeito Schottky em um cristal perfeito transferindo um átomo do interior da rede até um sítio da rede na superfície do cristal. Há também, em relação à vacância, o *defeito*

¹Figuras extraídas do endereço eletrônico: wwwp.fic.unesp.br/~betog/web/2006

de Frenkel[8] em que um átomo é transferido de um sítio da rede para um interstício, deixando um espaço vazio na sua posição original. Neste caso, também pode ser criado se sujeitarmos a amostra a altas temperaturas.

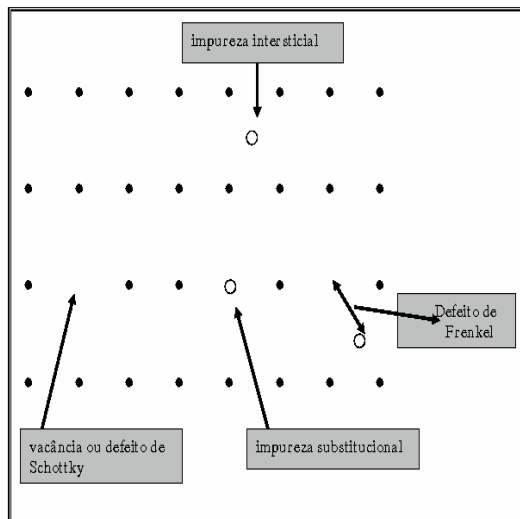


Figura 4.3: Ilustração de uma rede cristalina que apresenta as diversas formas de impurezas. Os círculos cheios representam os átomos regulares em cada sítio da rede e os círculos vazios representam as impurezas. Figura retirada da referência [9] .

2. defeitos lineares: também chamada de deslocação, é uma linha de átomos fora de sua posição correta numa rede cristalina.
3. defeitos planares: ou de superfície são os contornos que separam o material em regiões, com a mesma estrutura cristalina, porém, com diferentes orientações. Estas regiões são chamadas de grãos. Cada grão é visto como pequeno volume com ordem cristalina perfeita. Em cada fronteira entre os grãos o cristal sofre uma mudança na sua orientação de maneira brusca, de modo que toda a fronteira age como um defeito de superfície. Na figura² 4.4 ilustramos com um exemplo os defeitos planares numa rede cristalina.

²Figura extraída do endereço eletrônico: www.poli.usp.br/d/pmt2100/Aula03 – 2005.201p.pdf



Figura 4.4: Figura ilustrativa que apresenta um exemplo de defeitos planares numa rede cristalina. Define os contornos de um material que delimitam o material em regiões ou grãos .

4.3 Distorções da ordem

Quanto aos desvios que apresentam, ou seja as distorções da ordem, podemos classificar os sistemas desordenados em desordem substitucional e estrutural [10]. Abaixo apresentamos um breve resumo destas duas classes de desordem.

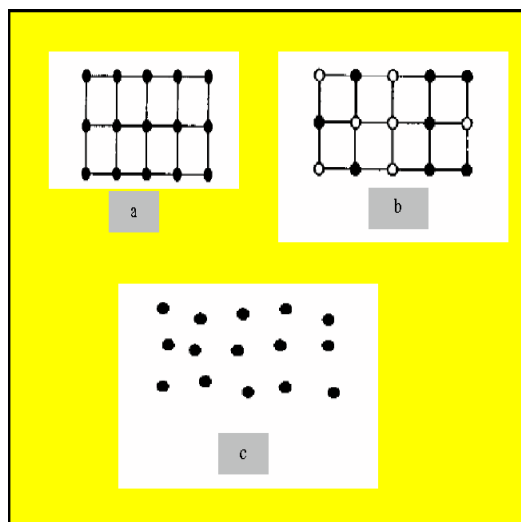


Figura 4.5: Figura ilustrativa representando, a) rede cristalina regular. b) desordem substitucional. c) desordem estrutural. Extraída da referência [11]

Desordem Estrutural → Corresponde ao grau mais alto de desordem. Não

apresenta regularidade na distribuição das posições dos átomos. Apresenta somente uma classe de átomos que possui o mesmo número de coordenação. Como exemplo citamos os materiais amorfos.

Desordem Substitucional \longrightarrow também definida como composicional, apresenta uma estrutura periódica como o observado em redes cristalinas, porém se verifica, na configuração dos átomos, uma irregularidade na sua distribuição. O exemplo mais simples, que apresenta apenas duas espécies de átomos ou partículas, é uma liga binária [12], cuja desordem é causada devido aos sítios da rede serem ocupados por diferentes partículas com probabilidade p , onde alguns átomos do cristal são substituídos por átomos de outra espécie. Para uma liga binária as probabilidades são p e $(1 - p)$. No nosso caso as ligas são do tipo A_pB_q ($p + q = 1$) que representam uma liga binária magnética onde p é a probabilidade de concentração da partícula A no sistema.

Na figura 4.5 apresentamos um desenho ilustrando uma rede cristalina regular e os dois tipos de distorções da ordem, a desordem substitucional e estrutural respectivamente.

É importante salientar que em sistemas onde se configura a desordem composicional, a substituição de um átomo magnético por outro, não altera a estrutura periódica da rede, neste caso se as duas partículas possuem anisotropia distintas, é possível estudar o efeito da competição entre elas. Isto para o caso de composto ferromagnético. No caso de compostos antiferromagnéticos, estas interações competitivas levam ao efeito de frustração do sistema magnético, proporcionando o aparecimento de um fenômeno bem interessante conhecido como vidros de spin [13].

Há várias formas de se criar defeitos na rede. Destacamos o método conhecido como implantação iônica onde átomos de impureza podem ser introduzidos na rede cristalina pelo processo de aceleração dos íons da impureza até a energia de cerca de 100 KeV para assim penetrar a distâncias aproximadamente de $1\mu m$ e parar nos sítios da rede ou nos interstícios.

Mas qual o objetivo de se manipular as imperfeições de uma amostra?

Simplesmente porque, controlando essas imperfeições é possível criar, com características próprias, o que é mais importante, as chamadas ligas metálicas. Dentre as quais, em particular, as ligas binárias.

4.3.1 Vidros de spin

Dentre os sistemas magnéticos desordenados que mais tem sido objeto de estudo, destacam-se os vidros de spins e o modelo de Ising num campo aleatório [13, 14, 15]. Os vidros de spins apresentam uma propriedade bastante intrigante, a frustração, que surge quando, numa rede de spins, estes estão arranjados de tal forma que impede a interação global, ou seja, a interação entre todos os spins simultaneamente. O caso mais simples consiste de um grupo de três spins acoplados de tal forma que se configura em um sistema antiferromagnético, embora não se trate de um sistema antiferromagnético, já que é observado uma magnetização local. Um exemplo que ilustra este fenômeno de spin frustrado é dado pela figura (4.6).

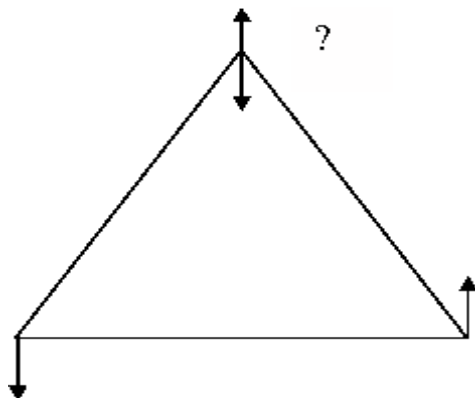


Figura 4.6: Figura ilustrativa em que um spin localizado na quina do triângulo recebe informações antagônicas dos outros dois vizinhos causando uma indefinição na sua orientação. Tal fenômeno é conhecido como efeito de frustração.

4.4 As Ligas metálicas

4.4.1 Definição

Neste Seção, iremos estudar as técnicas de preparação de ligas metálicas, mas reteremos, entretanto, dentro da proposta desta dissertação, ao que se refere especificamente às ligas do tipo binárias. Abordaremos os conceitos físicos das técnicas de tratamento temperado (*Quenched*) e recozido (*annealed*).

Há na natureza uma grande variedade de metais. Os metais tem uma estrutura cristalina, onde os átomos estão arranjados de maneira ordenada. Há ainda, em relação às propriedades de ionização e de ligação, outros elementos quimicamente distinguíveis como os não-metais e semimetais. Como exemplo de metais citamos o aço, cobre, alumínio, ouro, níquel e titânio. Quanto aos não-metais temos o carbono, nitrogênio, oxigênio, cloro, fósforo, bromo, entre outros, e, exemplos de semimetais são o boro, silício, arsênico, polônio, etc. Na tabela³ 4.1, damos alguns exemplos de ligas e suas respectivas composições.

Do ponto de vista da siderurgia industrial, entretanto, a maioria dos metais não é empregada em seu estado puro, mas em ligas, cujas propriedades foram alteradas em relação ao material original. Podemos definir as ligas metálicas como sendo materiais que possuem propriedades metálicas e, dada suas características, possuem dois ou mais elementos em sua composição, sendo, porém, que pelo menos um destes elementos é metal. Existem basicamente três tipos de ligas, as que são formadas por:

- metais e não-metais
- metais e metais
- metais e semimetais

Vale ressaltar que elementos ferromagnéticos como o ferro, o níquel e o cobalto, industrialmente nunca são utilizados em seu estado puro, e sim sob a forma de ligas.

4.4.2 Técnicas de tratamento

Há, basicamente, dois tipos de tratamentos térmicos utilizados para a obtenção de ligas. Tais técnicas são conhecidas como temperado (*quenched*) e recozido (*annealed*).

Temperado *Quenched*, é o tratamento dado a uma amostra em que esta é submetida a um aquecimento, com altíssimas temperaturas, e subitamente resfriada.

³Figura extraída do endereço eletrônico: www.rossetti.eti.br/ligas-metalicas.asp

liga	composições	classificação
aço	ferro e carbono	binária
latão	cobre e zinco	binária
amálgama	mercúrio, prata e estanho	ternária
ouro 18 quilates	ouro e cobre	binária
Alnico	Aço, alumínio, níquel e cobalto	quaternária

Tabela 4.1: Tabela de alguns tipos de ligas mais comuns com suas respectivas composições e classificação.

Estes sistemas representam uma liga binária magnética do tipo A_pB_{1-p} [16], que após o resfriamento, os átomos A e B permanecem imóveis. Vale ressaltar que a altas temperaturas o sistema está numa fase de desordem espacial. Este procedimento garante que o sistema seja independente da temperatura, já que não passa pelas diversas etapas de equilíbrio.

Recozida, é o mesmo procedimento do sistema temperado, porém a amostra não é resfriada subitamente, mas lentamente. Neste caso, o sistema passa pelas diversas etapas de equilíbrio; é dependente da temperatura.

4.4.3 Aplicando o tratamento temperado em sistemas magnéticos

A hamiltoniana, que exprime a aleatoriedade nas interações entre os spins (como veremos no próximo capítulo), pode ser escrita como [17]:

$$\mathcal{H}(\mathbf{S}, c) = -\mathbf{J} \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j c_i c_j, \quad (4.1)$$

onde \mathbf{S}_i e \mathbf{S}_j representam os vetores spins nos sítios i e j respectivamente. \mathbf{J} é a constante de acoplamento e c_i denota as variáveis relacionadas às desordens. Tomando a média configuracional de c_i , temos

$$\langle c_i \rangle = p, \quad (4.2)$$

em que p é a concentração de spins σ_i .

Sabemos que a energia livre é dada por

$$\xi = -\frac{1}{\beta} \ln \mathcal{Z}, \quad (4.3)$$

onde $\beta = \frac{1}{k_B T}$ e \mathcal{Z} é a conhecida função de partição, definida por

$$\mathcal{Z} \{c_i\} = \text{Tr}_{\{S\}} (e^{-\beta \mathcal{H}}). \quad (4.4)$$

Como o nosso sistema está a baixas temperaturas e por conseguinte há uma fraca mobilidade entre os spins, consideramos as impurezas fixas no tempo, ou, "congeladas". Deste modo, devemos realizar o cálculo da energia livre para cada configuração.

$$\xi_{c_i} = -\frac{1}{\beta} \langle \ln \mathcal{Z} \rangle, \quad (4.5)$$

Portanto, a energia livre do sistema será equivalente a média temperada, que deve ser feita sobre a energia livre de todas as configurações do sistema. Sendo assim,

$$\langle \xi \rangle = \sum_{\{c_i\}} \mathbf{P}_{\{c_i\}} \xi_{\{c_i\}}, \quad (4.6)$$

$\mathbf{P}_{\{c_i\}}$ é a função de distribuição de probabilidades para as variáveis aleatórias. É dada por:

$$\mathbf{P}(c_i) = p\delta(c_i - 1) + (1 - p)\delta(c_i). \quad (4.7)$$

Descrevemos o sistema temperado em particular, pois no objeto de estudo desta dissertação, empregamos este sistema para estudar uma liga binária. Como veremos no próximo capítulo, esta liga apresenta dois diferentes tipos de partículas e a partir dela determinamos o comportamento das grandezas envolvidas tais como, a magnetização, susceptibilidade, calor específico e o cumulante de Binder.

Capítulo 5

O modelo de Ising de spins mistos com desordem temperada

5.1 Introdução

No capítulo anterior fizemos um estudo dos sistemas desordenados e ordenados, caracterizando a ordem translacional e substitucional nos dois sistemas. Descrevemos sobre os tipos de imperfeições existentes numa rede e apresentamos as implicações entre estes conceitos e as ligas magnéticas binárias. Apresentamos também a obtenção destas ligas via tratamento térmico conhecido como temperado.

Tais abordagens, nos permite, agora, estudar as propriedades magnéticas de um modelo de Ising de spins mistos com desordem temperada.

Este capítulo está organizado da seguinte forma: na seção 5.2 fazemos uma definição do modelo descrevendo o modelo de Ising de spins mistos com desordem temperada; na seção 5.3 definimos alguns observáveis de interesse; na seção 5.4 apresentamos alguns detalhes referentes aos procedimentos das simulações e finalmente na seção 5.5 apresentamos os resultados obtidos.

5.2 Definição do modelo

Nesta seção, consideramos o modelo de Ising de spins mistos com desordem temperada (*quenched*) definido em uma rede quadrada de tamanho linear L . A hamiltoniana para este modelo é definida como:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \{c_i c_j \sigma_i \sigma_j + (1 - c_i)(1 - c_j) S_i S_j + c_i(1 - c_j) \sigma_i S_j + c_j(1 - c_i) S_i \sigma_j\}, \quad (5.1)$$

onde $S_i = \pm 1, 0$ e $\sigma_j = \pm 1/2$, e a interação entre spins vizinhos mais próximos é ferromagnética, $J > 0$. Associamos a cada sítio i da rede uma variável de ocupação c_i , tal que se $c_i = 1$ o sítio está ocupado por uma partícula com spin $\sigma = 1/2$ e se $c_i = 0$ está ocupado por uma partícula com spin $S = 1$. Os sítios são ocupados de forma independente uns dos outros, e podemos escrever uma distribuição de probabilidades para as variáveis de ocupação da seguinte forma

$$P(c_i) = p[\delta_{c_i,0} + (1 - p)\delta_{c_i,1}] \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (5.2)$$

5.3 Observáveis de interesse

Calculamos algumas quantidades termodinâmicas de interesse como, a magnetização m_L , energia e_L , a susceptibilidade χ_L , o calor específico c_L e o cumulante de binder de quarta ordem U_L , por spin definidos abaixo como:

$$m_L = \left[\frac{1}{N} \left\langle \left| \sum_{i=1}^N \{(1 - c_i) s_i + c_i \sigma_i\} \right| \right\rangle \right], \quad (5.3)$$

$$e_L = \frac{1}{N} [\langle \mathcal{H} \rangle], \quad (5.4)$$

$$c_L = N([\langle E^2 \rangle] - [\langle E \rangle^2]), \quad (5.5)$$

$$\chi_L = N([\langle m^2 \rangle] - [\langle m \rangle^2]), \quad (5.6)$$

$$U_L = 1 - \frac{[\langle m_L^4 \rangle]}{3 [\langle m_L^2 \rangle]^2}, \quad (5.7)$$

Nas expressões acima $[\dots]$ denota a média sobre as amostras e $\langle \dots \rangle$ denota a média térmica.

5.4 Procedimentos

Técnicas de simulação computacional tem sido amplamente aplicadas a sistemas magnéticos desordenados [18]. Para o estudo do modelo de Ising de spins mistos com desordem temperada, usamos a técnica de simulação de Monte Carlo [19]. Em relação à rede do sistema, consideramos várias redes de tamanho linear L , cujo valores variam de $L = 12$ a $L = 48$, e consideramos as condições periódicas de contorno.

O sistema foi preparado com distribuição aleatória de spins na rede [20], onde um determinado sítio pode estar ocupado por spins σ ou S . A concentração de spins não é constante, ou seja, consideramos diferentes concentrações p de spins σ na rede L , e, utilizamos a prescrição de metrópolis para cada mudança de estado de um determinado spin [21]:

$$w(\alpha \rightarrow \alpha') = \min\{1, \exp(-\beta\Delta E)\}$$

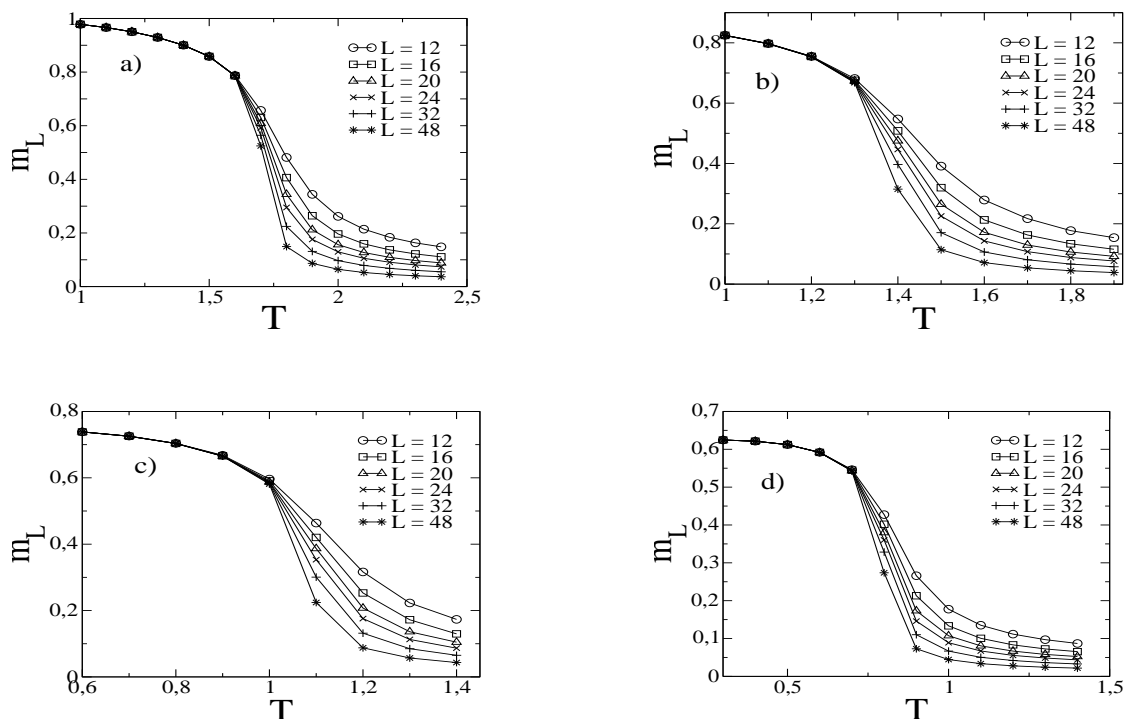
onde $\Delta E = E_{\alpha'_i} - E_{\alpha_i}$ é a variação de energia e $\beta = 1/k_B T$,

Durante a simulação, para atingir o regime de equilíbrio e (a partir daí) estimar as médias das grandezas envolvidas, tomamos alguns procedimentos, descritos abaixo,

- descartamos 2×10^5 MCs, onde MCs são os passos de Monte Carlo,
- consideramos 2×10^5 MCs, para calcular as médias das quantidades de interesse, e
- realizamos 100 amostras independentes para redes no intervalo de ($12 \leq L \leq 48$)

5.5 Resultados

Construimos os gráficos da magnetização por spin m_L em função da temperatura T para todas as redes L , cujo valores de L variam de $L = 12$ a $L = 48$. Analisando a figura (5.1) percebemos que na medida em que há acréscimo na temperatura T , a magnetização, conseqüentemente, tende a zero, o que nos leva a concluir que tal comportamento caracteriza a existência de uma transição de fase. Vale registrar que a temperatura é medida em unidades de $J/k_B T$.



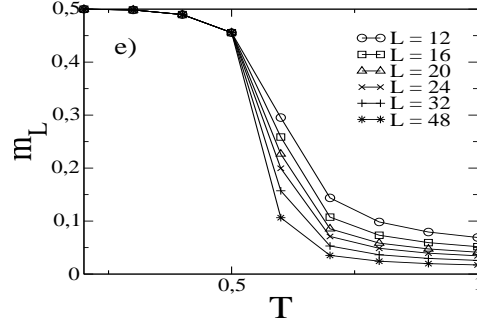
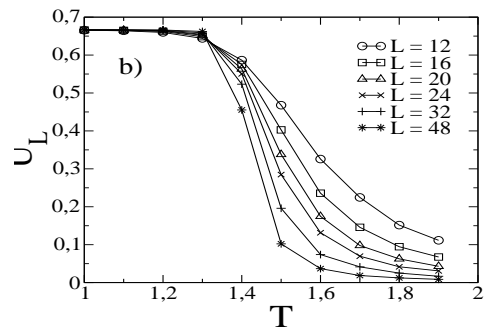
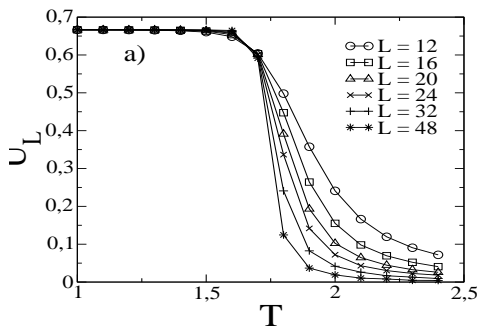


Figura 5.1: Comportamento da magnetização m_L em função da temperatura T para vários tamanhos de rede L indicados nas figuras e para diferentes concentrações p_c de spins σ . (a) $p_c = 0,0$. (b) $p = 0,25$. (c) $p = 0,50$. (d) $p = 0,75$. (e) $p = 1,0$.

No cumulante de Binder, há uma região de intersecção onde todas as redes se cruzam. Para estudar a transição mais detalhadamente, calculamos os cruzamentos dos cumulantes de Binder de quarta ordem U_L exatamente nesta região, para estimar o valor da temperatura T na qual a transição ocorre.

Para localizarmos o ponto crítico, utilizamos o cumulante de Binder U_L de quarta ordem, dado pela eq. 5.7. Encontramos as seguintes temperaturas críticas T_c por concentrações p de spins σ para vários tamanhos de rede L : a) $T_c = 1,69$ para $p = 0,0$, figura 5.2a. b) $T_c = 1,33$ para $p = 0,25$, figura 5.2b. c) $T_c = 1,00$ para $p = 0,50$, figura 5.2c. d) $T_c = 0,7$ para $p = 0,75$, figura 5.2d. e) $T_c = 0,5$ para $p = 1,0$ figura 5.2e.



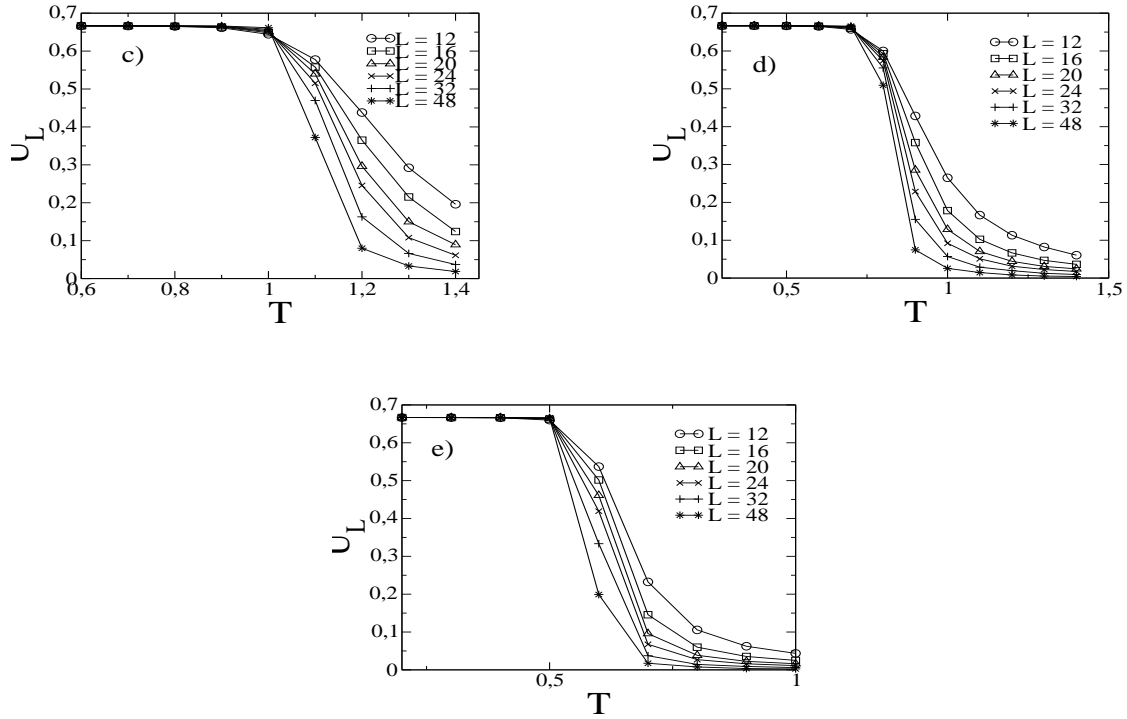


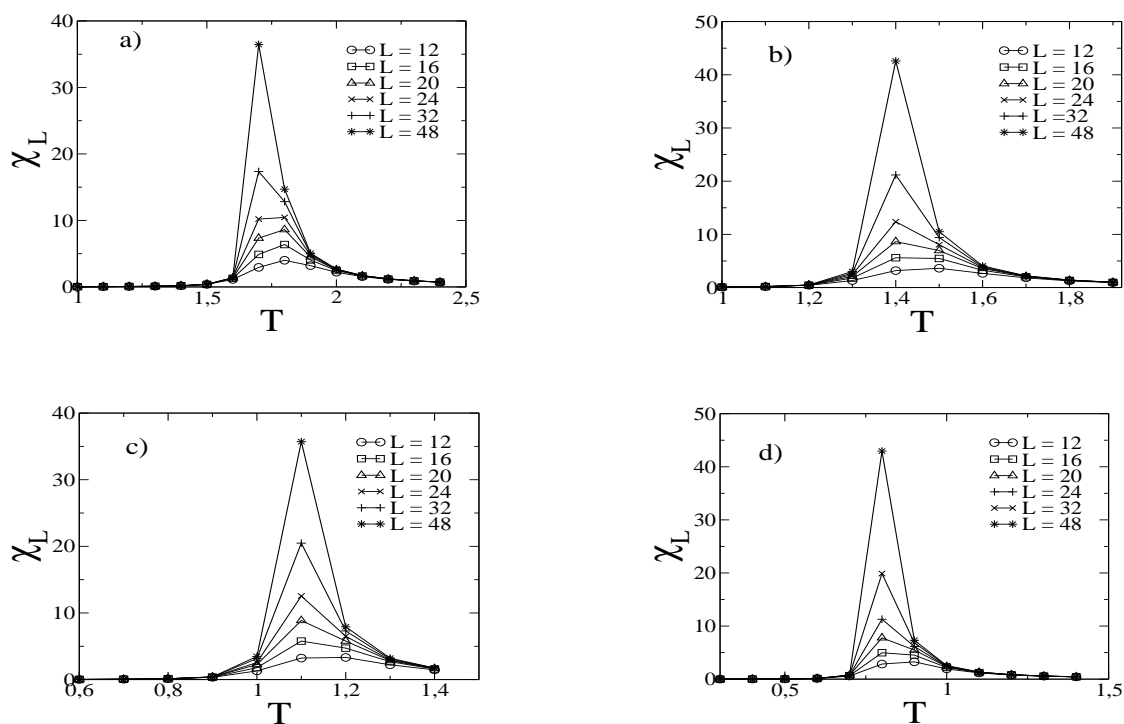
Figura 5.2: Cumulante de Binder de quarta ordem U_L em função da temperatura T para vários tamanhos de rede L indicados nas figuras e para diferentes concentrações p de spins σ . (a) $p = 0,0$ e $T_c = 1,69$. (b) $p = 0,25$ e $T_c = 1,33$. (c) $p = 0,50$. e $T_c = 1,00$. (d) $p = 0,75$ e $T_c = 0,7$. (e) $p = 1,0$ e $T_c = 0,5$.

Na tabela 5.1 temos o valor da temperatura crítica T_c para as diferentes concentrações p de spins σ , obtidas através do cumulante de Binder de quarta ordem U_L , bem como também as respectivas margens de erros. Observando as figuras correspondentes, percebemos que cada concentração p de spins σ corresponde a vários tamanhos de rede L , nos fornecendo um valor da temperatura crítica T_c .

Figura	p	T_c	Erro
5.2a	0,0	1,69	0,01
5.2b	0,25	1,33	0,03
5.2c	0,50	1,00	0,01
5.2d	0,75	0,70	0,02
5.2e	1,00	0,50	0,003

Tabela 5.1: Tabela dos resultados obtidos através do cumulante de Binder de quarta ordem U_L para diferentes concentrações p de spins σ .

A susceptibilidade magnética χ_L em sistemas finitos apresenta como característica um pico em torno da temperatura crítica T_c . Observando as figuras abaixo, notamos que à medida em que aumenta a dimensão linear da rede L , a susceptibilidade varia com o pico aumentando em altura.



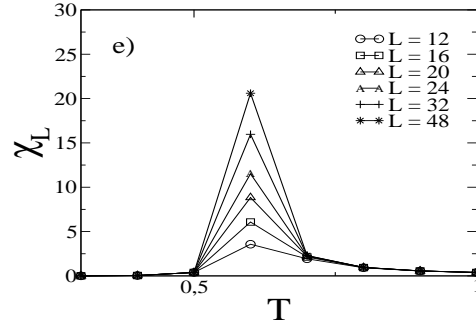
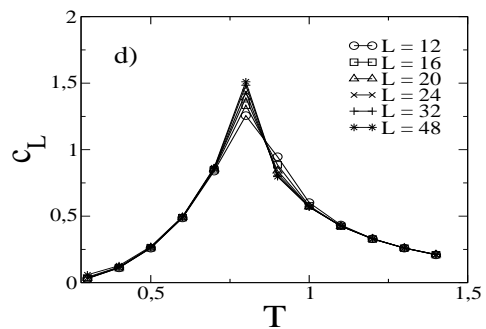
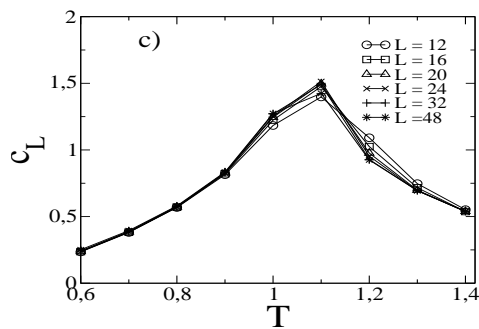
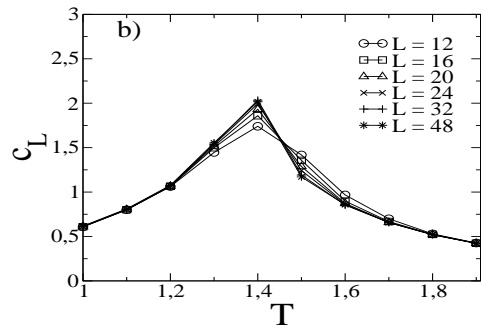
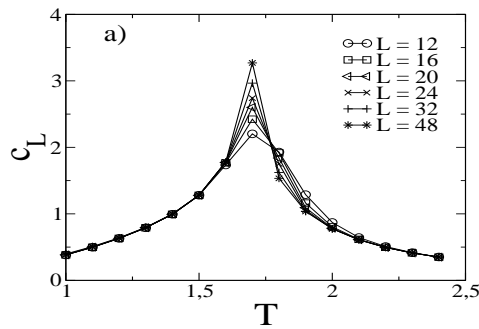


Figura 5.3: Susceptibilidade χ_L em função da temperatura T para vários tamanhos de rede L indicados nas figuras e para diferentes concentrações p_c de spins σ . (a) $p_c = 0,0$ (b). $p = 0,25$. (c) $p = 0,50$. (d) $p = 0,75$. (e) $p = 1,0$.

Analisando os gráficos abaixo relativos ao calor específico c_L , percebemos que, se os compararmos com a susceptibilidade magnética χ_L , cujo pico varia em altura conforme o tamanho da rede L , os picos observados nas curvas do calor específico apresentam uma fraca dependência com o tamanho do sistema. Outro dado importante em relação tanto ao calor específico c_L quanto a susceptibilidade χ , é que, segundo a referência [22] as posições dos picos das referidas grandezas podem definir uma temperatura pseudocrítica $T^{max}(L)$, que se aproxima de T_c à medida que $L \rightarrow \infty$.



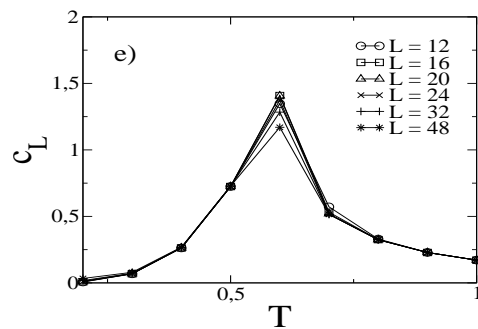


Figura 5.4: Calor específico c_L em função da temperatura T para vários tamanhos de rede L indicado nas figuras e para diferentes concentrações p de spins σ . (a) $p = 0,0$. (b) $p = 0,25$. (c) $p = 0,50$. (d) $p = 0,75$. (e) $p = 1,0$.

Através da simulação de Monte Carlo e argumentos de escala de tamanho finito determinamos o diagrama de fases do modelo no plano da temperatura crítica T_c em função das diferentes concentrações p de spins σ . Verificamos que o diagrama de fases apresenta duas fases, a ordenada e a desordenada, separadas por uma linha de transição.

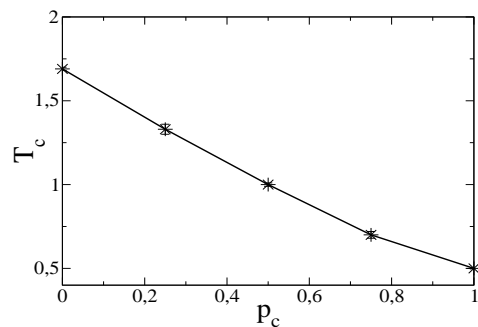


Figura 5.5: Diagrama de fases da temperatura crítica T_c e as diferentes concentrações p de spins σ .

Capítulo 6

Conclusões

Nesta dissertação inicialmente fizemos uma análise dos importantes conceitos inerentes a técnica de simulação computacional de Monte Carlo, dissecando sobre os processos de Markov, amostragem por importância e o algoritmo de Metropolis sem perder o foco dos fundamentos da física estatística.

Estudamos também, através da técnica de Monte Carlo, o modelo de Ising sem campo magnético externo aplicado, com spins de magnitude $\sigma = 1/2$, com estados ($\pm 1/2$) e interações ferromagnéticas localizados numa rede quadrada. Extraímos dessa simulação os valores das grandezas termodinâmicas envolvidas tais como a magnetização, o calor específico, a susceptibilidade magnética, a energia interna e o cumulante de Binder de quarta ordem, utilizado para obtenção da temperatura crítica T_c . O valor exato da temperatura crítica do modelo de Ising é $T_c = 2.269J/k_B T$ [1], em nossa simulação obtivemos um valor aproximado em torno de $T_c = 2.2J/k_B T$ que está de acordo na literatura [1].

Em seguida discutimos o comportamento de sistemas desordenados, manifestado pela presença de impurezas num cristal. Abordamos também as técnicas de tratamento temperado e recozido, para obtenção de ligas metálicas, em particular as ligas binárias com propriedades magnéticas. Este estudo preliminar sobre as composições de ligas binárias magnéticas serviu como base para nos dar o suporte necessário para o cabal entendimento do objeto de pesquisa desta dissertação.

Finalmente, estudamos o modelo de Ising com spins mistos com desordem temperada numa rede quadrada. O modelo consiste de dois diferentes tipos de partículas com spins $\sigma = 1/2$ (estados $\pm 1/2$) e $S = 1$ (estados $\pm 1, 0$). Estas partículas são distribuídas aleatoriamente na rede, e consideramos somente interações entre spins primeiros vizinhos do tipo ferromagnética ($J > 0$). Este modelo representa uma liga binária magnética (obtida através do esfriamento rápido de uma mistura líquida em altas temperaturas) do tipo $A_p B_q$ ($p = 1 - q$), onde p é a concentração de partículas A . Através de simulação de Monte Carlo, utilizando o algoritmo de Metropolis, obtivemos os resultados esperados para as grandezas termodinâmicas e plotamos os respectivos gráficos. Determinamos também, utilizando argumentos de escala de tamanho finito, o diagrama de fases do modelo no plano temperatura crítica T_c versus concentração p de spins σ . Mostramos que o diagrama de fases possui duas fases, a ordenada e a desordenada, separadas por uma linha de transição contínua.

Em trabalhos futuros pretendemos também através dessas simulações, encontrar os valores dos expoentes críticos estáticos ν , β e γ , determinar a variância relativa das médias térmicas das quantidades físicas como a magnetização e a susceptibilidade no ponto crítico com o objetivo de verificar o comportamento dessas grandezas diante do fenômeno conhecido como auto-mediação.

Referências Bibliográficas

- [1] M. E. J Newman and G. T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, (Oxford, New York, 1999).
- [2] D. W. Heermann, *Computer Simulation Methods in Theoretical Physics* 2nd ed.
- [3] W. H. Press...[et al.]. Edição, 2nd ed. *Numerical Recipes in Fortran 77 and Fortran*, Editora: Cambridge Univ Pr.
- [4] S. R. Salinas, *Introdução à Física Estatística*, (Editora da Universidade de São Paulo, São Paulo, 1997).
- [5] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N, Rosenbluth, A. H. Teller and E. Teller, *J. Chem. Phys.* **20**, 1087 (1953).
- [6] T. Tomé e M. J. de Oliveira, *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade* (Editora da Universidade de São Paulo, São Paulo, 2001).
- [7] R. B. Stinchcombe in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, edited by C. Domb and J. L. Lebowitz (Academic, London, 1983), Vol. 7.
- [8] N. W. Ashcroft and N. David Mermin, *Solid State Physics*, New York, 1976.
- [9] R. M. Caetano; Tese de Doutorado, Instituto de Física, Universidade Estadual de Campinas, (2003).
- [10] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, New York, 4th edition, 1971.

- [11] R.R.R.Gonzalez; Tese de Doutorado, Instituto de Física, Universidade Estadual de Campinas, (1998).
- [12] M. J. Oliveira; *Termodinâmica*, (Editora Livraria da Física, SP) 2005.
- [13] M. Mézard, G. Parisi, and M. A. Virasoro, in *Spin Glasses Theory and Beyond*, (World Scientific, Singapore, 1987).
- [14] A. P. Young, J. Phys. C: Solid State Phys., **9**, 2103 (1976).
- [15] A. Weizenmann; M. Godoy; Arruda, A. S. *Monte Carlo study of the metamagnet Ising model in a random and uniform field*. Brazilian Journal of Physics, v. 36, n. 2, p. 645-647, 2006.
- [16] Plascak, J. A. *Multicritical Points In The Ferromagnetic Binary Ising Model*. PHYSICA A, holanda, v. 198, p. 655-665, 1993.
- [17] P. H. L. Martins. Tese de Doutorado, Departamento de Física, UFMG (2004)
- [18] D. P. Belanger, in *Spin Glasses and Random Fields*, edited by A. P. Young (World Scientific, Singapore, 1998); R. J. Birgeneau, J. Magn.Magn. Mater. 177, 1 (1998).
- [19] K. Binder and D. W. Heermann, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics. An Introduction*, 3rd ed. (Springer, Berlin, 1997).
- [20] M. Godoy, Tese de Doutorado, Departamento de Física, UFSC (2004)
- [21] D. P. Landau and K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics* (Cambridge University Press, United Kingdom, 2000).
- [22] V. Privman, ed., *Finite-Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems*(World Scientific, Singapore, 1990).

Livros Grátis

(<http://www.livrosgratis.com.br>)

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)
[Baixar livros de Matemática](#)
[Baixar livros de Medicina](#)
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)
[Baixar livros de Meteorologia](#)
[Baixar Monografias e TCC](#)
[Baixar livros Multidisciplinar](#)
[Baixar livros de Música](#)
[Baixar livros de Psicologia](#)
[Baixar livros de Química](#)
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)
[Baixar livros de Serviço Social](#)
[Baixar livros de Sociologia](#)
[Baixar livros de Teologia](#)
[Baixar livros de Trabalho](#)
[Baixar livros de Turismo](#)