

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO

Centro de Ciências Exatas e da Terra

Departamento de Física

Dissertação de Mestrado



UFMT

Cuiabá

Dezembro - 2007

Livros Grátis

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

Milhares de livros grátis para download.

Devair Marcelo de Almeida

Comportamento Multicrítico de um Metamagneto em Campos Magnéticos Uniforme e Aleatório

*Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação
em Física da Universidade Federal de Mato Grosso
como parte dos requisitos para a obtenção do título
de Mestre em Física.*

Orientador:

Prof. Dr. Maurício Godoy

Co-orientador:

Prof. Dr. Alberto Sebastião de Arruda

Dezembro - 2007

Agradecimentos

- Aos professores Drs. Maurício Godoy e Alberto Sebastião de Arruda, importantes no desenvolvimento desse trabalho e também na minha formação durante o Mestrado;
- À minha esposa Rosely, pelo companheirismo e incentivo na busca de novas conquistas profissionais;
- Aos meus filhos Gustavo e Yasmin;
- Aos meus pais, Nelson e Badia, agradeço pelo apoio, principalmente no que se refere a educação e aos cuidados com o bem estar dos meus filhos;
- Aos colegas e amigos do grupo: Ademilso, Adriano, Aglezio, Alessandro Ferreira, Dorilson, Fanaia, França, João, Josiel, Jannaira, Max, Robson e Rogério;
- Aos meus grandes amigos: Ana Lacerda, Avelino (sogro), Carlos, Jordana, Nesão e Rosângela. Tenho certeza que estas pessoas sempre torceram pelo meu sucesso.
- Aos professores do Departamento de Física, principalmente ao professor Jorge Luiz Brito de Faria (Hulk), pois palavras de incentivo nunca estiveram distantes do seu vocabulário;
- Finalmente, agradeço a SEDUC pelo apoio financeiro estadual.

Resumo

O comportamento de um material metamagnético sujeito a ação de campos uniforme e aleatório é mostrado nesse trabalho fazendo-se uso de duas técnicas distintas: aproximações de Campo médio e método de Monte Carlo. Com a primeira técnica citada, obtemos o diagrama de fase (campo uniforme h x temperatura t) para diversos valores do parâmetro ϵ numa rede cúbica simples, e determinamos os pontos tricríticos com uma distribuição de probabilidade trimodal para o campo aleatório. Monte Carlo, que é um método de caráter estocástico, será utilizado num sistema metamagnético idealizado por uma rede quadrada, cuja distribuição de probabilidade para o campo aleatório é bimodal, e que também nos conduz a elaboração do diagrama de fase h x t . O nosso maior interesse é verificar a existência de transições de fase de primeira e segunda ordem, observando a localização dos pontos tricríticos a fim de analisar a resposta do metamagneto a aplicação de tais técnicas, sem perder de vista os dados experimentais que até então constam na literatura.

Abstract

The behavior of a metamagnetic material subject to action of uniform and random fields is shown in this work is making use of two different techniques: Mean Field approximations and Monte Carlo method. With the first technique above, we obtain the phase diagram (h uniform field versus temperature t) for various values of ϵ in a simple cubic lattice, and determined the tricritical points with a trimodal probability distribution for random field. Monte Carlo, which is a method of stochastic nature will be used in a metamagnetic system idealized by a lattice square, which for the probability distribution of random field is bimodal, and also leads in the preparation of the phase diagram $h \times t$. Our greatest interest is to verify the existence of first-order phase transition and second order, noting the location of the tricritical points to analyze the response of metamagnets the application of such techniques, without losing sight of the experimental data hitherto included in the literature.

Sumário

1	Estudos Preliminares das Transições de Fases Metamagnéticas	7
1.1	Transições de Fase e Fenômenos Críticos	7
1.1.1	Sistemas Magnéticos	8
1.1.2	A Teoria Fenomenológica de Landau	15
1.2	A Conexão com a Termodinâmica	17
1.3	Aplicação das Simulações Numéricas em Mecânica Estatística	18
1.3.1	Simulação Numérica	18
1.3.2	Simulações de Monte Carlo	20
1.3.3	Modelo de Ising 2D	22
2	Metamagneto na presença de Campos Magnéticos Uniforme e Aleatório - Aproximações de Campo Médio	28
2.1	Introdução	28
2.2	Definição do Modelo	30
2.3	Equações de Campo Médio	33
2.4	Expansão de Landau	38
2.5	Resultados e Discussões do Campo Médio	45
2.5.1	Caso $p = 0$	48
2.5.2	Caso $p = 0,5$	52
2.5.3	Caso puro: $p = 1$	55

3	Metamagneto na presença de Campos Magnéticos Uniforme e Aleatório - Simulações de Monte Carlo	57
3.1	Técnica do Modelo e da Simulação	58
3.1.1	Determinação da Linha de Primeira Ordem	59
3.1.2	Determinação da Linha de Segunda Ordem	62
3.2	Resultados e Discussões	63
4	Conclusões	66
4.1	Principais Resultados de Campo Médio	66
4.2	Principais resultados de Monte Carlo	70
4.3	Comparação entre as Aproximações de Campo Médio e o Método de Monte Carlo	71
A	Programa do Modelo de Ising Bidimensional	74

Lista de Figuras

1	<i>Diagrama de fase do composto $Dy_3Al_3O_{12}$ no plano $T-H$ [6]. A linha contínua representa os pontos críticos (transição de fase de segunda ordem) e a pontilhada a transição de fase de primeira ordem. O ponto em negrito denota o ponto tricrítico.</i>	2
2	<i>Diagrama de fase do metamagneto Ising no plano $H-T$ obtido via aproximação de campo médio. Sendo C um ponto crítico, T_t o ponto crítico terminal, J a interação antiferromagnética primeiros vizinhos e J' a interação ferromagnética segundos vizinhos, é definido o parâmetro adimensional $\epsilon = z'J'/zJ$ cuja variação resulta em diversos tipos de diagramas de fases e pontos tricríticos.</i>	3
1.1	<i>Parâmetro de ordem (magnetização espontânea) em função da temperatura para um ferromagneto de spin $1/2$.</i>	10
1.2	<i>Diagrama de fase no plano $h \times t$ do metamagneto com campo aleatório $h_a = 0,6$ e probabilidade $p = 0,5$, para um caso especial em que o parâmetro $\epsilon = 1$ [18].</i>	11
1.3	<i>Magnetização (m) versus campo magnético (H) para um paramagneto típico, com temperatura fixa.</i>	13

1.4	<i>Comportamento do ferromagneto uniaxial simples descrito pela parte singular do potencial termodinâmico de Landau em função da magnetização. Abaixo da temperatura crítica, o mínimo paramagnético passa a ser um máximo, surgindo dois mínimos simétricos.</i>	17
1.5	<i>Representação esquemática dos primeiros vizinhos do sítio (i, j).</i>	23
1.6	<i>calor específico c_v em função da temperatura T.</i>	26
1.7	<i>susceptibilidade χ_v em função da temperatura T.</i>	26
1.8	<i>Magnetização m contra temperatura T.</i>	27
2.1	<i>Rede bidimensional regular com spins $S_i = \pm 1$ formada por duas sub-redes equivalentes e interpenetrantes. Cada sub-rede contém n spins apontados na mesma direção ($N = 2n$) e está representada em tons diferentes. A sub-rede A está em tons claros e a sub-rede B, tons escuros.</i>	31
2.2	<i>Representação dos primeiros e segundos vizinhos do sítio (i, j) (localizado no centro do cubo), numa pequena porção da rede cúbica simples. Em cada vértice do cubo existe um spin apontado numa direção, porém mostramos somente os primeiros vizinhos (spins com círculos vazios) e os spins segundos vizinhos (spins com círculos pretos). As interações entre os spins primeiros vizinhos são antiferromagnéticas e entre segundos vizinhos são ferromagnéticas.</i>	32
2.3	<i>energia livre em função da magnetização staggered.</i>	46
2.4	<i>Campo magnético h contra temperatura t para $p = 0$ e $\epsilon = 0, 7$.</i>	49
2.5	<i>Campo magnético h contra temperatura t para $p = 0$ e $\epsilon = 1$, este diagrama foi obtido por Salinas et al. [20] e Weizenmann et al. [18].</i>	49

2.6	<i>Campo magnético h contra temperatura t para $p = 0$ e $\epsilon = 1, 4$.</i>	50
2.7	<i>Parâmetro ϵ em função da temperatura tricrítica T_t, com $p = 0$ e $h_A = 0$.</i>	51
2.8	<i>Campo magnético h contra temperatura t para $p = 0, 5$ e $\epsilon = 0, 8$.</i>	52
2.9	<i>Campo magnético h contra temperatura t para $p = 0, 5$ e $\epsilon = 1$.</i>	53
2.10	<i>Campo magnético h contra temperatura t para $p = 0, 5$ e $\epsilon = 1, 4$.</i>	53
2.11	<i>Parâmetro ϵ versus temperatura tricrítica T_t para $p = 0, 5$.</i>	54
2.12	<i>Campo magnético h contra temperatura t para $p = 1$ (caso puro) e diversos valores de ϵ (graficamente representado pela letra e).</i>	55
3.1	<i>Magnetização staggered m_S em função do campo magnético h, para $h_A = 0$ e $\epsilon = 1$ com valores $t = 1, 75$ e $t = 3$ para a temperatura.</i>	61
3.2	<i>Cumulante de Binder de quarta ordem U_L em função da tem- peratura t, para vários valores de L com campo aleatório $h_A =$ 0, $\epsilon = 0, 7$ e $h = 0$.</i>	63
3.3	<i>Campo magnético h versus temperatura t, para $\epsilon = 0, 7$.</i>	64
3.4	<i>Campo magnético h versus temperatura t, para $\epsilon = 1$.</i>	65
3.5	<i>Campo magnético h versus temperatura t, para $\epsilon = 1, 8$.</i>	65
4.1	<i>Campo magnético h contra temperatura t para $p = 0$, $h_A = 0$ e $\epsilon = 1, 4$. <i>AF</i> indica a fase antiferromagnética, <i>P</i> a fase paramagnética e <i>TCP</i> o ponto tricrítico.</i>	67
4.2	<i>Campo magnético versus temperatura para $p = 0$, $\epsilon = 0, 7(a)$, e $\epsilon = 1, 4(b)$.</i>	69
4.3	<i>Campo magnético versus temperatura para $p = 0, 5$, $\epsilon = 0, 8(a)$, e $\epsilon = 1, 4(b)$.</i>	69

4.4	<i>Campo magnético versus temperatura, $\epsilon = 0,7(a)$, e $\epsilon = 1,8(b)$.</i>	70
4.5	<i>Diagrama de fases do metamagneto para $h_A = 0$ e $\epsilon = 0$, com probabilidade bimodal para a distribuição do campo aleatório segundo o Método de Monte Carlo.</i>	72
4.6	<i>Diagrama de fases do metamagneto para $h_A = 0$ e $\epsilon = 0$, com probabilidade bimodal para a distribuição do campo aleatório segundo as aproximações de campo médio.</i>	72

Introdução

Estudos experimentais de materiais magnéticos confirmam a existência de diferentes tipos de transições de fases, cujos resultados foram obtidos de informações quantitativas do diagrama de fase e dos expoentes críticos que descrevem tais transições [1, 2]. Estas transições são explicadas através de modelos teóricos de sistemas magnéticos (Ising, Heisenberg, XY, etc), dos quais poucos podem ser resolvidos exatamente, é o caso do modelo de Ising em uma dimensão que apresenta transição de fase em $T = 0$ [3] e também em duas dimensões, onde a transição da fase ferromagnética para a fase paramagnética ocorre na temperatura crítica $T_c = 2,269185\dots$ (em unidade de J/k_B) [4]. Em outros casos no qual a solução exata não é conhecida, métodos aproximativos tais como aproximação de Campo Médio, Grupo de Renormalização ou expansão em série têm sido propostos, e o fato de se desconsiderar a complexidade que é relevante a um sistema magnético real, não necessariamente implica em resultados incoerentes, mas no mínimo são discutíveis pois passam uma visão global, porém qualitativa, do comportamento real dos diversos compostos magnéticos.

A fim de obtermos resultados rigorosos que permitam comparações com as propriedades em materiais magnéticos, métodos computacionais, como, por exemplo, Monte Carlo e Dinâmica Molecular são usados e considerados técnicas “exatas” numericamente, mas não analiticamente. Neste trabalho,

aplicaremos aproximação de Campo Médio e simulação de Monte Carlo para estudar diagrama de fase de um metamagneto na presença de campos uniforme e aleatório.

Um aspecto interessante no estudo de sistemas metamagnéticos é a discrepância aparente entre os resultados experimentais e teóricos a respeito da transição da fase verificada em diagramas com campo magnético H contra temperatura T . Experimentalmente [5], os materiais metamagnéticos indicam dois tipos de transição da fase, em altas temperaturas a transição entre as fases intercaladas e desordenadas é contínua e em baixas temperaturas é descontínua. Na Fig. 1 apresentamos os resultados experimentais

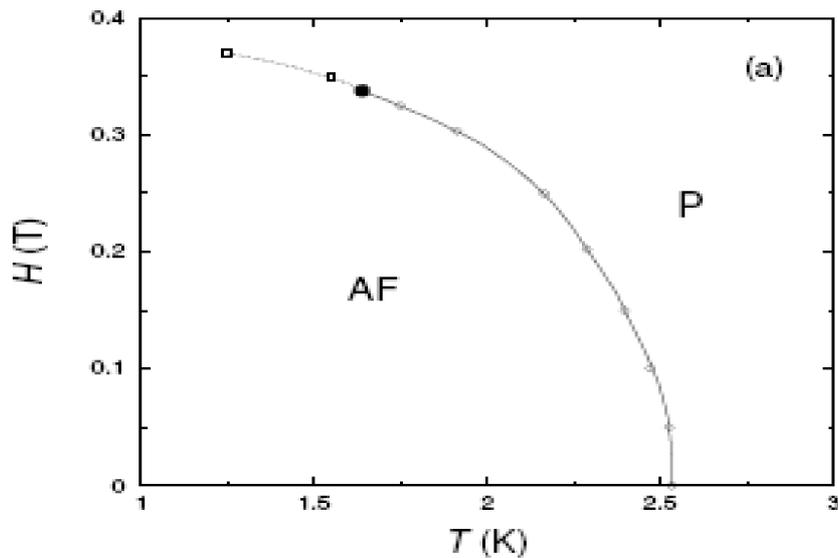


Figura 1: Diagrama de fase do composto $Dy_3Al_3O_{12}$ no plano T - H [6]. A linha contínua representa os pontos críticos (transição de fase de segunda ordem) e a pontilhada a transição de fase de primeira ordem. O ponto em negrito denota o ponto tricrítico.

do diagrama de fase no plano $H-T$ para o composto $Dy_3Al_3O_{12}$ obtido por Landau, Keen, Schneider e Wolf [6] contendo um ponto que separa estes dois comportamentos, o ponto tricrítico. Este ponto aparece em consequência da competição entre as interações de troca antiferromagnética e ferromagnética. Dependendo do valor da relação entre estes acoplamentos vemos que o diagrama de fase teórico pode exibir uma variedade de pontos críticos.

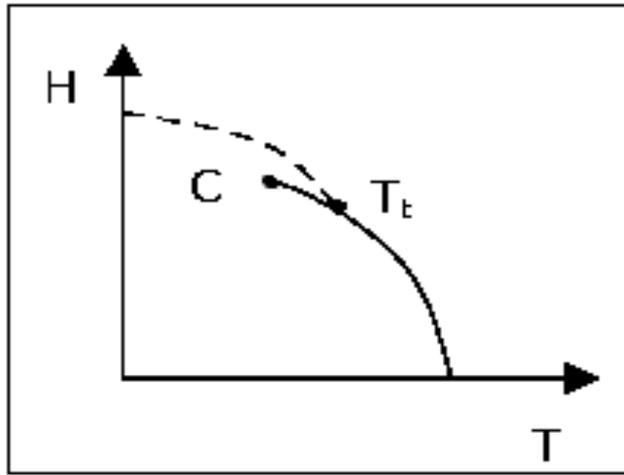


Figura 2: *Diagrama de fase do metamagneto Ising no plano $H - T$ obtido via aproximação de campo médio. Sendo C um ponto crítico, T_t o ponto crítico terminal, J a interação antiferromagnética primeiros vizinhos e J' a interação ferromagnética segundos vizinhos, é definido o parâmetro adimensional $\epsilon = z'J'/zJ$ cuja variação resulta em diversos tipos de diagramas de fases e pontos tricríticos.*

Na Fig. 2 mostramos possíveis resultados de Campo Médio no diagrama de fase no plano $H - T$ do metamagneto, que já foram perfeitamente discutidos inicialmente por Kincaid e Cohen por volta de 1974 [7], onde os pontos multicríticos (tricrítico, crítico terminal, etc) aparecem como uma dependência do parâmetro $\epsilon = J'z'/Jz$, de modo que $z(z')$ e $J(J')$ denotam,

respectivamente, o número de coordenação de primeiros (segundos) vizinhos e a interação de troca no plano (entre planos segundos vizinhos) da rede cúbica.

A nomenclatura de ponto tricrítico (TCP) foi introduzida por Griffiths (1970) [8], associando o termo a um ponto onde três linhas de transição de fase de segunda ordem se encontram. Ele mostrou que a mudança de uma transição no superfluido de primeira para segunda ordem em misturas *He* é um exemplo no qual observamos esse ponto multicrítico (TCP), e sugere que pontos tricríticos podem ocorrer com grande variedade em outros sistemas físicos, incluindo *metamagnetos* como *FeCl₂*. Em geral, nota-se a sustentação da experiência, embora haja um número de exceções importantes. Como um exemplo específico, no composto *FeCl₂* medidas ópticas precisas da magnetização próximo ao ponto tricrítico (T_t, H_t) *revelam resultados de campo médio*, sendo que medidas de difração de nêutron de natureza comparável rendem limites de coexistência assimétricos com uma margem inferior que exhibe o expoente $\beta \simeq \frac{1}{3}$ [9], melhor que o valor tricrítico em campo médio [8]. Esta discrepância permaneceu inexplicável por muitos anos. Nesse contexto considera-se *campos aleatórios* que são inevitavelmente gerados pelo campo magnético aplicado nos *cristais metamagnetos reais*. Portanto, mostramos neste trabalho, qual o efeito do campo aleatório sobre o diagrama de fase e através de cálculos teóricos estudamos o comportamento do metamagneto sujeito a ação de campos uniforme e aleatório para compararmos com os resultados das simulações de Monte Carlo.

No capítulo 1 apresentamos uma abordagem sobre os conceitos e técnicas utilizadas na elaboração e contextualização de um modelo metamagneto em campos uniforme e aleatório. Discutimos alguns sistemas magnéticos importantes para a compreensão do metamagnetismo, por exemplo o sistema

ferromagnético [10, 11]. Mostramos a importância do estudo das transições de fases [12, 13] verificando as condições em que essas transições ocorrem, e no caso específico das transições contínuas incrementamos a teoria fenomenológica de Landau. Diferenciar pontos críticos de pontos tricríticos [14] também é nosso interesse. Mostramos também as funções que viabilizam a conexão da Física Estatística com a Termodinâmica, descrevemos o método de Monte Carlo e em seguida implementamos, como exemplo, a aplicação deste método no modelo de Ising em duas dimensões [4] determinando a magnetização, a susceptibilidade e o calor específico, para discutirmos os resultados.

No capítulo 2 abordamos o surgimento do metamagnetismo [15, 16, 17, 7], e em seguida usamos as aproximações de Campo Médio para estudar o comportamento das propriedades magnéticas do modelo metamagneto na presença de campos magnéticos uniforme e aleatório [18, 19, 20]. Utilizamos para essa finalidade os princípios variacionais de Bogoliubov [12]. Ao fazermos uso da desigualdade de Bogoliubov, que envolve a energia livre, viabilizamos uma conexão da Mecânica Estatística com a Termodinâmica, e através da condição estacionária da energia livre, calculamos alguns parâmetros variacionais obtendo a energia por spin para um ponto estacionário.

Aplicamos a teoria fenomenológica de Landau no modelo metamagneto, que consiste em expandir a energia livre de Gibbs e encontramos os coeficientes analiticamente. Analisando esses coeficientes, importantíssimos na determinação dos pontos críticos, obtemos a linha de transição de fase de segunda ordem e os pontos tricríticos, e através da função energia livre obtemos a linha de primeira ordem.

No capítulo 3 encontramos o diagrama de fase do metamagneto na presença de campos uniforme e aleatório através das simulações de Monte

Carlo e discutimos os resultados. Como recurso utilizamos as Refs. [21, 22, 23, 24].

No capítulo 4 discutimos os nossos principais resultados estabelecendo as comparações entre as aproximações de Campo médio e o método de Monte Carlo (incluindo um caso particular da Ref. [25]), quando estes são aplicados ao sistema metamagnético. Em seguida fazemos as considerações finais destacando as perspectivas futuras em relação ao assunto desse trabalho.

No apêndice A apresentamos o programa que calcula a susceptibilidade e o calor específico em função da temperatura para o Modelo de Ising Bidimensional.

Capítulo 1

Estudos Preliminares das Transições de Fases Metamagnéticas

1.1 Transições de Fase e Fenômenos Críticos

O estudo das teorias clássicas de transições de fase e fenômenos críticos se firmou a partir da década de 60, quando os conceitos básicos de universalidade e escala de funções termodinâmicas foram introduzidas por Windom [1]. No entanto, em 1873, van der Waals publicara a primeira teoria de sucesso sobre a “continuidade dos estados líquidos e gasosos da matéria” permanecendo como um instrumento importante para a análise do comportamento crítico em sistemas fluidos. Além disso, no início do século XIX, Pierre Curie já havia estudado experimentalmente a teoria fenomenológica (campo molecular) que posteriormente seria desenvolvida por Pierre Weiss [10].

De acordo com as teorias clássicas de transições de fase, diversas grandezas termodinâmicas (entre elas está o calor específico) apresentam

um comportamento peculiar na região crítica, com divergências assintóticas que foram caracterizadas através dos expoentes críticos. A descoberta importante sobre esse assunto envolve o comportamento crítico de grandezas termodinâmicas análogas, pois essas grandezas apresentam um caráter universal, caracterizado pelo mesmo valor do expoente crítico bem definido. As teorias clássicas para sistemas distintos também mostram esse caráter universal, fornecendo um conjunto de valores para os expoentes críticos. Entretanto, a existência da classe de universalidade que já se mostrava uma realidade entre os teóricos e os experimentais [10], era definida por poucos parâmetros (como a dimensionalidade dos sistemas considerados) cujo expoentes críticos são totalmente distintos do conjunto de expoentes clássicos.

1.1.1 Sistemas Magnéticos

A caracterização de uma transição de fase em um sistema revela singularidades em algumas funções termodinâmicas; em sistemas magnéticos, por exemplo, a energia livre e derivadas correspondentes estão associadas a magnetização e a susceptibilidade [13]. Nesse contexto, um parâmetro de ordem é extremamente importante para estudar as transições de fase, sendo definido para cada sistema. Nem sempre esse parâmetro é um escalar, podendo em sistemas mais complexos ser um vetor ou um tensor [10]. Em geral, o parâmetro de ordem é nulo na fase mais simétrica (desordenada ou que ocorre a altas temperaturas) e não nulo na fase menos simétrica (ordenada). Nos sistemas ferromagnéticos a magnetização é o parâmetro de ordem, enquanto nos sistemas antiferromagnéticos esse parâmetro é a magnetização de uma determinada sub-rede ou a diferença entre as magnetizações das duas sub-redes previamente estabelecidas. Dizemos que numa transição de fase magnética o sistema sofreu uma quebra espontânea de simetria.

O estabelecimento da ordem de uma transição de fase está associado a descontinuidade na derivada da energia livre, assim uma transição é de primeira ordem se a primeira derivada dessa energia for descontínua, a qual implica em uma magnetização descontínua (ou calor latente). Por outro lado, uma transição de segunda ordem aparece quando a segunda derivada da energia livre é descontínua, esse fato provoca a divergência da susceptibilidade em $T = T_c$, porém a magnetização vai a zero continuamente quando $T \rightarrow T_c^-$, isto é, por valores inferiores a T_c . Tal análise é válida para sistemas onde o campo é nulo. No caso da transição de primeira ordem temos a coexistência de duas fases distintas (ordenada e desordenada) no ponto em que o sistema sofre transição. No segundo caso, a fase ordenada se transforma na fase de altas temperaturas com $T \rightarrow T_c^-$ ou vice-versa quando $T \rightarrow T_c^+$, ocorrendo de maneira contínua.

Nota-se até então, um ponto de grande interesse na transição de fase, o ponto crítico. Sobre ele está o limite entre duas fases, cujo parâmetro de ordem torna-se nulo para uma das fases. A consequência direta de uma aproximação rumo a esse ponto é o ajuste do sistema em uma escala microscópica. Tais ajustes aparecem em forma de flutuações e tornam-se demasiadamente grande próximo ao ponto crítico, isto é, as grandezas termodinâmicas passam a se comportar de maneira singular. Estas flutuações podem ser identificadas, por exemplo, analisando a magnetização de um material ferromagnético - Fig. 1.1, que sofre uma queda brusca a medida que a temperatura crítica é alcançada.

Na Fig. 1.1 nota-se que a magnetização espontânea (magnetização existente no material ferromagnético mesmo na ausência de campo externo) vai a zero em T_c e adquire um valor máximo em $T = 0 K$. O ponto crítico indica, nesse caso, o limite entre a fase ferromagnética (à esquerda de T_c) e

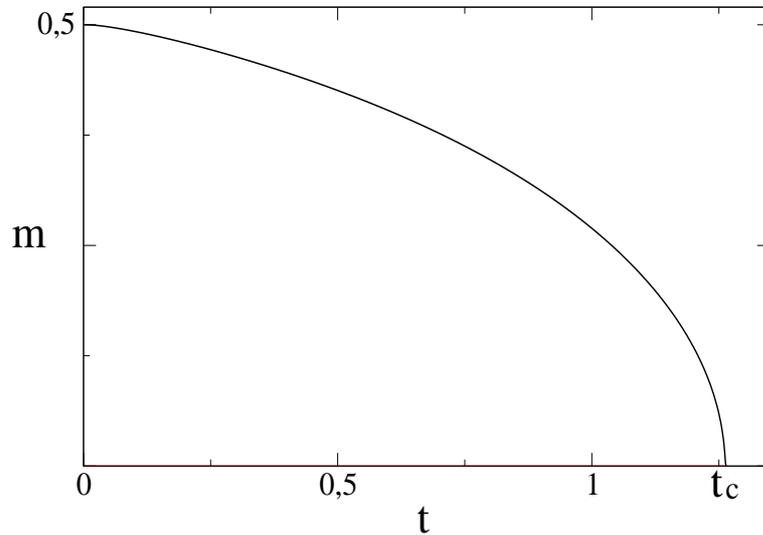


Figura 1.1: *Parâmetro de ordem (magnetização espontânea) em função da temperatura para um ferromagneto de spin 1/2.*

a fase paramagnética (à direita de T_c , isto é, em altas temperaturas).

Existe ainda um outro ponto extremamente importante no diagrama de fases em sistema magnéticos: é o ponto tricrítico. Este separa uma linha de transição de primeira ordem de uma linha de transição de segunda ordem, detectado em materiais metamagnéticos, em modelos teóricos de Blume e Capel, magneto diluído, Ising com campo aleatório [18, 20, 21], entre outros. Essas linhas contém os pontos críticos do sistema para determinados valores do campo uniforme aplicado. Na Fig. 1.2 mostramos o diagrama de fase do metamagneto contendo três pontos tricríticos e linhas de transição de fase de primeira e segunda ordem.

O parâmetro ϵ está relacionado com o número de spins primeiros e segundos vizinhos das sub-redes de um metamagneto, e também as interações entre esses spins pois $\epsilon = (J'z')/(Jz)$. Para $\epsilon = 1$ (Fig. 1.2), observamos uma transição de fase metamagnética para uma fase paramagnética ocorrendo de

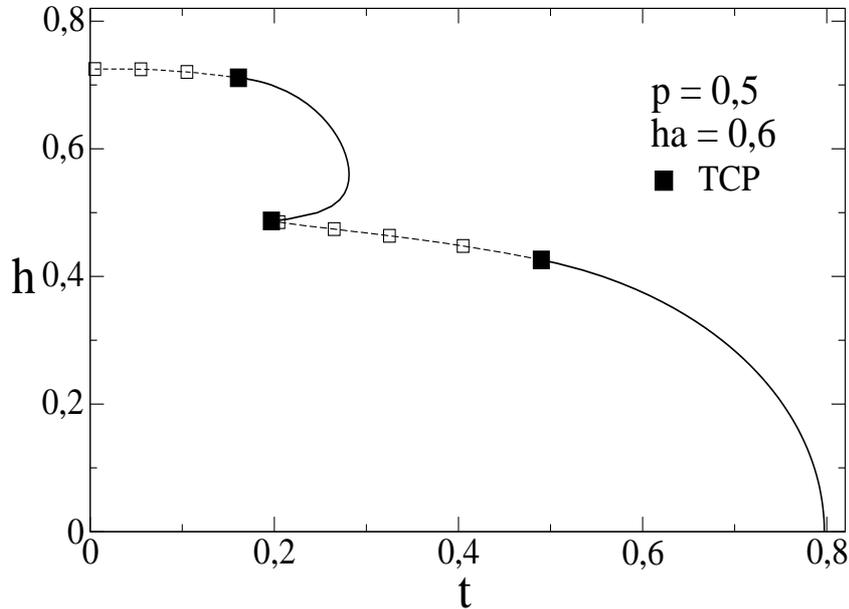


Figura 1.2: *Diagrama de fase no plano $h \times t$ do metamagneto com campo aleatório $h_a = 0,6$ e probabilidade $p = 0,5$, para um caso especial em que o parâmetro $\epsilon = 1$ [18].*

diferentes maneiras: a transição de segunda ordem é vista em altas temperaturas e baixo campo magnético uniforme, e também num intervalo $H = [0,48699999; 0,7113]$ com temperaturas próximas de 0,2. Por outro lado, vemos uma transição de primeira ordem sendo descrita em baixas temperaturas e campos superiores a 0,7113, e também em $T = [0,196836; 0,490]$. Nessa situação temos as seguintes temperaturas verificadas nos pontos tricríticos: 0,161; 0,196836 e 0,490. Esses resultados são obtidos usando as equações de campo médio.

Há pelo menos três comportamentos magnéticos que merecem comentários para uma expressiva compreensão do metamagnetismo. São eles: paramagnético, ferromagnético e antiferromagnético. Os dois últimos estados podem estar presentes individualmente em certos materiais, quando

esses se encontram a uma temperatura inferior à temperatura crítica, já o primeiro estado só estará presente nesses materiais (ferromagnéticos ou antiferromagnéticos) acima dessa temperatura.

Do ponto de vista macroscópico o estado paramagnético é caracterizado pela resposta a um campo magnético aplicado. Em campo nulo, uma amostra do material paramagnético não exhibe magnetização. Na presença do campo externo H , a amostra adquire uma magnetização diretamente proporcional a esse campo até um limite. Para pequenos valores de H esse comportamento é linear ($m = \chi_0 H$), cuja susceptibilidade χ_0 comporta-se de acordo com a lei de Curie, que implica em $\chi_0 > 0$, inversamente proporcional a temperatura T e dependente da constante C , isto é, $\chi_0 = C/T$. Aumentando-se o campo, o comportamento de m com H deixa de ser linear e para valores do campo suficientemente altos, a magnetização satura atingindo um máximo. Esse último comportamento é descrito pela equação de Langevin $m = m_0 L(x)$, onde m_0 denota a magnetização de saturação, $L(x) = \coth(x) - 1/x$. Toda análise macroscópica anterior resulta no diagrama da Fig. 1.3.

As características principais do paramagnetismo são: intersecção da curva com a origem e o fato de fenômeno ser reversível, além disso os materiais paramagnéticos possuem susceptibilidade positiva.

Microscopicamente, um material paramagnético ideal corresponde a um sistema composto de dipolos magnéticos atômicos que podem mudar de direção livremente, sem a influência de dipolos vizinhos. Esses dipolos só começam a se alinhar quando é aplicado um campo externo. À medida que o campo aumenta, a energia de interação entre os dipolos aumenta em relação à energia térmica, fazendo a ordem do sistema aumentar. No entanto, se fixarmos o campo, a agitação térmica aumenta, provocando uma queda

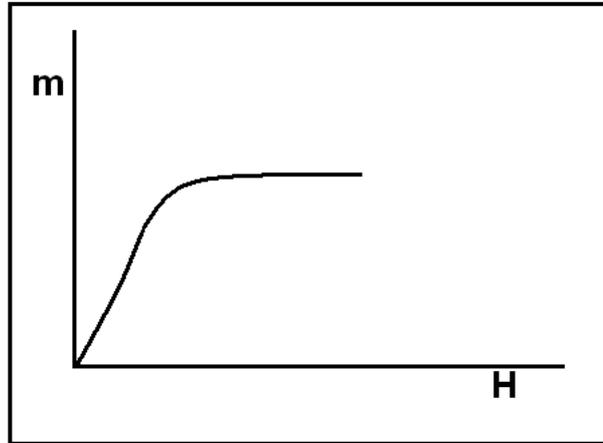


Figura 1.3: *Magnetização (m) versus campo magnético (H) para um paramagneto típico, com temperatura fixa.*

na suscetibilidade. Como exemplos de materiais paramagnéticos destacamos os isolantes e os sais paramagnéticos dos elementos do grupo do ferro. Experimentalmente, a constante C dos materiais paramagnéticos pode ser encontrada na referência [14], dentre eles está o MnF_3 cuja constante C vale 30,1.

O estado ferromagnético está presente em materiais cujos momentos de dipolos magnéticos tendem a se alinhar paralelamente abaixo da temperatura de Curie (T_C). Esses materiais, abaixo de T_C , apresentam magnetização espontânea mesmo na ausência de campo externo. Já acima da temperatura crítica a magnetização torna-se nula. Mais a diante descreveremos com maior precisão o ferromagnetismo usando simulações de Monte Carlo. Por enquanto é importante saber que a magnetização espontânea é formada em pequenas regiões chamadas domínios e resulta de uma interação entre os momentos vizinhos que tende a mantê-los alinhados, porém, analisando o material ferromagnético macroscopicamente vemos que a magnetização total

é próxima de zero. Portanto, para se observar a magnetização nesse material é necessário a aplicação de um campo externo. Exemplos de materiais ferromagnéticos: ferro, níquel, cobalto e disprósio.

O estado antiferromagnético está presente em alguns materiais formado por duas sub-redes entrelaçadas e interpenetrantes, por valores inferiores à temperatura Neel (fase antiferromagnética). O detalhe interessante dos materiais antiferromagnéticos simples é que as interações só ocorrem entre spins de sub-redes distintas (interações entre primeiros vizinhos). A magnetização total que predomina nesses materiais abaixo de T_N é praticamente nula, assim como na fase paramagnética (acima de T_N). Embora essa nulidade seja característica das duas fases há uma forma de diferenciá-las, visto que somente na fase antiferromagnética é possível obter uma magnetização espontânea em cada sub-rede, que aparece com auxílio dos átomos magnéticos. Como exemplo de antiferromagnetos podemos citar o cromo.

O comportamento de sistemas antiferromagnéticos na presença de campo externo difere bastante de sistemas ferromagnéticos. Um pequeno campo magnético aplicado num ferromagneto destrói a transição de fase [11], isso não acontece com o antiferromagneto pois a transição de fase somente é quebrada quando esse campo assume valores elevados. Os distintos comportamentos são consequências do papel do campo H relativamente ao parâmetro de ordem. Nos sistemas ferromagnéticos, H é o campo conjugado ao parâmetro de ordem, já nos antiferromagnéticos quem executa esse papel é o campo alternante H_A e não o campo externo H .

O que diferencia um antiferromagneto simples de um metamagneto? O metamagneto exibe também o antiferromagnetismo, porém, além das interações antiferromagnéticas verificadas em antiferromagnetos simples há um outro tipo de interação chamada ferromagnética, que ocorre entre os spins

(segundos vizinhos) de uma mesma sub-rede. O que efetivamente acontece em sistemas metamagnetos é uma expressiva competição entre as interações ferromagnéticas e antiferromagnéticas que juntamente com o campo aleatório viabiliza a elaboração do diagrama de fases (campo H versus temperatura T). Um exemplo de um composto metamagneto é o $Dy_3Al_5O_{12}$, cujo diagrama de fase foi obtido experimentalmente por Landau, Keen, Schneider e Wolf (1970) [14], mostrando uma linha de transição que separa a fase paramagnética da antiferromagnética e também os pontos tricríticos, além é claro, da existência de transições de fases de primeira e segunda ordem.

1.1.2 A Teoria Fenomenológica de Landau

Proposta na década de 30, a teoria de Landau para transições de fases contínuas tem sua base apoiada em duas ações: A elaboração do conceito parâmetro de ordem e a expansão da energia livre em termos das invariantes dessa grandeza. Tal energia deve ser uma função analítica nas vizinhanças da criticalidade onde as flutuações do sistema considerado são maiores [1].

Considerando um ferromagneto uniaxial, cujo parâmetro de ordem é a magnetização, o fato do sistema apresentar simetrias nos conduz, de forma simples, a escrever a função Landau para a energia livre $f(T, m)$, na qual os coeficientes são funções da temperatura T , isto é,

$$f(T, m) = f_0(T) + A(T)m^2 + B(T)m^4 + \dots \quad (1.1)$$

Sendo m a magnetização do sistema e H o campo magnético aplicado, obtemos a energia de Gibbs dada por $g(T, H, m) = f(T, m) - mH$ do seguinte modo:

$$g(T, H; m) = f_0(T) - Hm + A(T)m^2 + B(T)m^4 + \dots \quad (1.2)$$

No ponto crítico devemos ter $H = 0$ e $A(T) = 0$. Fazendo a análise na região da criticalidade temos

$$A(T) = a(T - T_c), \quad (1.3)$$

onde $a > 0$, $B(T) = b > 0$ e $f_0(T) \approx f_0(T_c)$.

Substituindo (1.3) e os coeficientes $B(T)$ e $f_0(T)$ na equação (1.2) obtemos

$$g(T, H; m) = f_0(T_c) - Hm + a(T - T_c)m^2 + bm^4. \quad (1.4)$$

Para $H = 0$, temos

$$g(T, m) = f_0(T_c) + a(T - T_c)m^2 + bm^4. \quad (1.5)$$

Portanto, designamos $g_s = g - f_0$ como a parte singular do sistema termodinâmico, em seguida reescrevemos a equação (1.5) da seguinte maneira:

$$g_s = a(T - T_c)m^2 + bm^4. \quad (1.6)$$

Para o cálculo das raízes temos

$$a(T - T_c)m^2 + bm^4 = 0 \implies m^2 [a(T - T_c) + bm^2] = 0,$$

nessas condições $m = 0$ ou

$$m = \pm \sqrt{\frac{a(T_c - T)}{b}}. \quad (1.7)$$

Se $T > T_c$, teremos somente a solução $m = 0$, visto que a equação anterior não possui valores reais para a magnetização m . Se $T < T_c$, encontramos além de $m = 0$ mais duas raízes simétricas entre si. Esses dois casos são verificados na Fig. 1.4.

Em outros casos, a expansão de Landau poderia ainda mostrar resultados bem mais complicados [10], é o que veremos em materiais metamagnéticos.

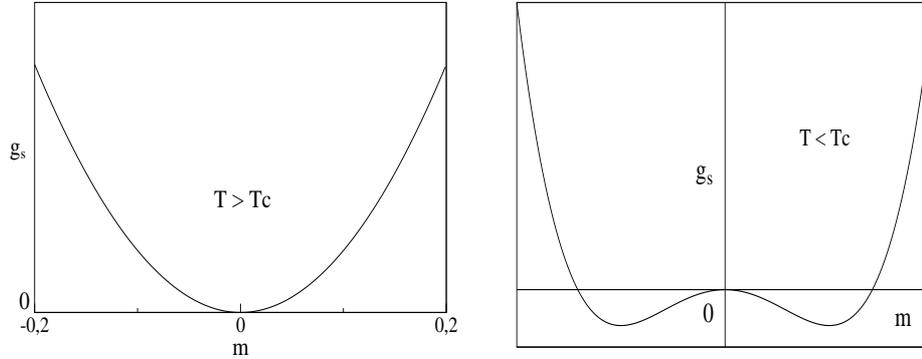


Figura 1.4: *Comportamento do ferromagneto uniaxial simples descrito pela parte singular do potencial termodinâmico de Landau em função da magnetização. Abaixo da temperatura crítica, o mínimo paramagnético passa a ser um máximo, surgindo dois mínimos simétricos.*

1.2 A Conexão com a Termodinâmica

Quando analisamos o comportamento de determinados sistemas em banho térmico fazemos uso de funções que viabilizam a conexão da Mecânica Estatística com a Termodinâmica. A função partição (que possibilita o cálculo da energia) é a principal delas e sua importância à Física Estatística no equilíbrio vai além, uma vez que possibilita escrever todas as grandezas físicas de interesse de um sistema.

A forma geral da função partição (Z) para um sistema clássico é dado por

$$Z = \sum e^{-\mathcal{H}/k_B T}, \quad (1.8)$$

onde o símbolo \mathcal{H} representa a Hamiltoniana do sistema, T a temperatura e k_B a constante de Boltzmann. A somatória é feita sobre todos os estados possíveis do sistema, de forma que a função Z (Zustandsumme) depende

do tamanho do sistema (número de partículas) e do número de graus de liberdade de cada partícula.

Uma vez estabelecida a função de partição podemos determinar a probabilidade P_i de encontrar o sistema no estado i do seguinte modo:

$$P_i = \frac{e^{-\mathcal{H}_i/k_B T}}{Z}, \quad (1.9)$$

no qual \mathcal{H}_i representa a Hamiltoniana do sistema quando este se encontra no estado i .

Podemos obter, através da função partição, a energia livre de Helmholtz,

$$F = -k_B \ln Z. \quad (1.10)$$

Conhecendo F obtemos todas as outras quantidades termodinâmicas.

A entropia pode ser assim definida:

$$S = -k_B \ln P, \quad (1.11)$$

onde P é a probabilidade de ocorrência de um estado. Podemos ainda escrevê-la em termos da energia livre:

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{V,N}. \quad (1.12)$$

As funções aqui definidas serão utilizadas significativamente no estudo do modelo metamagneto em campos uniformes e aleatório.

1.3 Aplicação das Simulações Numéricas em Mecânica Estatística

1.3.1 Simulação Numérica

Atualmente nota-se, na física teórica, o uso contínuo de métodos de simulações numéricas capazes de promover a resolução numérica de equações

que determinam o estado de um sistema. Esses métodos normalmente estão associados a um modelo, que simula o comportamento de um sistema obtido através da discretização das variáveis dinâmicas do sistema original. Em geral, essas simulações constituem notáveis experimentos computacionais, que viabilizam uma explicação exata sobre o comportamento do modelo simplificado, com uma vantagem em relação ao experimento real, um visível controle das condições microscópicas do sistema.

O cálculo dos valores médios de observáveis “ A ” dado por

$$\langle A \rangle_p = \sum_{\alpha} A_{\alpha} p_{\alpha}, \quad (1.13)$$

onde α representa todos os possíveis estados microscópicos do sistema e p a probabilidade de ocorrência do estado α .

Sabemos que um sistema físico possui um número de partículas da ordem 10^{23} , o que efetivamente impossibilita a aplicação da simulação computacional, visto que o tempo de resposta seria superior a idade do Universo. Além disso, um modelo somente exibe uma transição de fase no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$. Frente a esses obstáculos, temos que encontrar qual a melhor alternativa para se obter resultados coerentes, os quais revelem o que realmente acontece com o sistema. A saída é dada através do uso de um sistema com um número de partículas N suficientemente grande e computacionalmente viável, cujo comportamento em torno do ponto crítico, numa certa precisão, corresponde ao sistema infinito. Esta é portanto, a suposição básica de toda simulação numérica de fenômeno crítico.

A seguir, revelaremos o método usado no capítulo 3 que envolve simulações numéricas, seguido de uma aplicação específica no modelo de Ising Bidimensional.

1.3.2 Simulações de Monte Carlo

Entre as simulações numéricas, Monte Carlo se destaca como uma técnica computacional largamente utilizada em sistemas físicos e matemáticos, que através de instrumentos numéricos, viabilizam a descrição do comportamento desses sistemas. Essa técnica é aplicada tanto em problemas de natureza probabilística como determinística, sendo assim verificamos a sua aplicação em métodos estocásticos geralmente usando números aleatórios (ou, mais precisamente números pseudo-aleatórios).

A grande vantagem do uso das simulações de Monte Carlo em relação a outros métodos é verificada quando há um aumento na dimensão do sistema, pois os resultados desse método revelam-se mais precisos. O recurso que possibilita aplicação do método implica no uso da *cadeia de Markov* e do conceito *amostragem por importância*.

A finalidade de uma cadeia de Markov é gerar estados mais prováveis. A idéia de amostragem por importância é identificar principalmente os estados que possuem maiores probabilidades de acontecer, de tal forma que uma maior contribuição aos cálculos de grandezas físicas é estabelecida. Portanto, queremos encontrar configurações de spins onde o fator de Boltzmann $\exp[-\mathcal{H}(x)/k_B T]$ tem um pico. A princípio não sabemos onde tais regiões se encontram, no entanto, partindo do pressuposto que poderíamos criar um processo de geração de estados, onde uma contribuição desses estados para a magnetização (ou a qualquer outro observável) é priorizada, estaríamos assim construindo um processo de Markov.

De modo geral, o que consideramos é uma configuração inicial y contendo N spins, a partir dela geramos uma cadeia de Markov (y_1, y_2, \dots, y_n) através do conceito de amostragem por importância, de modo que a configuração y_i dependa simplesmente da configuração y_{i-1} imediatamente ante-

rior. É importante que o sistema considerado atinja o equilíbrio para que sejam computadas as grandezas físicas de interesse, assim, exames devem ser feitos constantemente para sabermos se essa condição foi alcançada.

Para uma melhor compreensão desse processo, realizamos os seguintes procedimentos: Suponha que restringimos o tratamento as tentativas de virar um único spin S_i . Admita que ao mudar um spin de S para $-S$ perdemos energia, e sendo essa a preferência do modelo devemos aceitá-la com uma certa probabilidade. Portanto, no caso em que a variação de energia $\Delta\mathcal{H}$ é negativa, $\Delta\mathcal{H} = \mathcal{H}(x_{NOVA}) - \mathcal{H}(x_{ANTIGA}) < 0$, temos $W(x_{ANTIGA}|x_{NOVA})=1$, isto é, a probabilidade W de aceitação da mudança do sinal do spin é máxima. Entretanto, seguindo sempre dessa forma certamente cairíamos em um mínimo local de energia, o que definitivamente deve ser contornado pois o modelo fica à mercê de um ponto, podendo ficar preso a ele. Para evitar esse problema aceitamos os movimentos que levantam a energia com baixa probabilidade. Se, por outro lado, a variação da energia for pequena, isto é, a energia das configurações antiga e nova forem próximas, aceitamos o movimento com uma probabilidade elevada. Deste modo podemos escalar fora do mínimo local de energia rumo a condição de equilíbrio.

O recurso, que nos referimos anteriormente, usado pelo método de Monte Carlo é Algoritmo de Metropolis. Este último tem por objetivo estimar médias das grandezas termodinâmicas sobre um conjunto de configurações gerado por meio de varreduras aleatórias do sistema. Cada varredura equivale a 1 passo de Monte Carlo e é realizada n vezes (número de spin da rede) com a intenção de obter um valor mínimo de energia para o sistema. Para a utilização desse método é importante que a temperatura, o volume e o número de partículas permaneçam constantes, deste modo é interessante

ressaltarmos as seguintes etapas que obrigatoriamente devem ser seguidas e que regem o Algoritmo de Metropolis:

1. estabelecimento de uma configuração inicial aleatória;
2. cálculo de $\Delta E = E_{FINAL} - E_{INICIAL}$ invertendo um spin escolhido;
3. se $\Delta E < 0$, aceitar a mudança e ir para o passo 7;
4. se $\Delta E > 0$, calcular $w = \exp[-\beta\Delta E]$;
5. gerar um número aleatório r em $[0, 1]$;
6. se $w \geq r$, aceitar a mudança, senão, manter o estado atual;
7. repetir os passos de (2) à (6) até o sistema atingir o equilíbrio ;
8. repetir os passos de (2) à (6) milhares de vezes durante o equilíbrio, colhendo amostras para o cálculo das quantidades físicas de interesse.

Uma vez estabelecido este algoritmo para um determinado modelo a ser estudado, basta montar um programa computacional capaz de executar essas tarefas. Em seguida, através dos resultados obtidos, construir os diagramas das quantidades físicas, tais como, a susceptibilidade e o calor específico, com as quais podemos verificar uma possível transição de fase. Lembramos que o tempo que um sistema leva para entrar em equilíbrio termodinâmico varia conforme a complexidade e obviamente depende do tamanho considerado.

1.3.3 Modelo de Ising 2D

O método de Monte Carlo será aplicado ao modelo de Ising Bidimensional [4], portanto vamos considerar a Hamiltoniana

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - h \sum_i S_i, \quad (1.14)$$

onde J representa a interação entre spins primeiros vizinhos e h o campo magnético externo aplicado ao sistema. Para $J > 0$ o sistema exibe o fer-

romagnetismo (presente em materiais que possuem alta magnetização espontânea abaixo da temperatura de Curie (T_C), cujos dipolos magnéticos alinham-se paralelamente entre si) e para $J < 0$ temos o antiferromagnetismo (semelhante ao ao primeiro, porém, os dipolos magnéticos se alinham antiparalelamente entre si abaixo de T_N). A variável S denota um spin de valores $+1$ ou -1 . Nessa abordagem nos limitamos a uma rede quadrada onde o símbolo $\langle i, j \rangle$ significa os vizinhos mais próximos do sítio (i, j) mostrados na Fig. 1.5.

	(i-1 , j)	
(i , j-1)	(i , j)	(i , j+1)
	(i+1 , j)	

Figura 1.5: *Representação esquemática dos primeiros vizinhos do sítio (i, j) .*

A configuração aleatória inicial será representada por uma matriz quadrada (ordem L), de modo que cada elemento dessa matriz simboliza um spin ($S_i = 1$ indica um spin apontado para cima e $S_i = -1$ para baixo). Usaremos x para nomear essa configuração, a partir daí geramos uma cadeia de Markov (x_1, x_2, \dots, x_n) por meio da amostragem por importância. Aqui todo o processo é executado pelo Algoritmo de Metropolis e a probabilidade de começar a configuração x_{i+1} a partir de x_i é dada pela taxa de transição $W(x_{i+1}|x_i)$.

A probabilidade que estamos usando no modelo de Ising **2D** é a taxa de Metropolis dada por

$$W(x_{i+1}|x_i) = \min \left[1, \exp \left(-\frac{\Delta \mathcal{H}}{k_B T} \right) \right]. \quad (1.15)$$

Existem outras escolhas para a probabilidade de transição, a função Glauber

$$W(x_{i+1}|x_i) = \frac{1}{2} \left[1 - \tanh \left(-\frac{\Delta\mathcal{H}}{k_B T} \right) \right] \quad (1.16)$$

é uma delas.

Uma vez ajustada a cadeia de Markov e passado o processo denominado termalização (onde as grandezas vão rumo ao equilíbrio termodinâmico), computamos a magnetização de uma configuração da seguinte maneira:

$$M_i = \sum_{j=1}^{L^2} s_j, \quad (1.17)$$

e a magnetização por spin será dada por

$$m_i = M_i/L^2. \quad (1.18)$$

Outra grandeza importante a ser calculada é a magnetização média por spin $\langle m \rangle$, que é a média aritmética sobre todas as configurações;

$$\langle m \rangle = \frac{1}{N} \sum_i^N m_i. \quad (1.19)$$

A energia por spin e a energia média por spin são obtidas de forma análoga à magnetização. A susceptibilidade χ_V e o calor específico c_V do modelo cujo volume V é constante são dados por:

$$\chi_V = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{Nk_B T}, \quad (1.20)$$

$$c_V = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{Nk_B T^2}, \quad (1.21)$$

onde E indica a energia de todas as configurações de equilíbrio e N denota o número de spins da rede.

A configuração de spins aleatórios corresponde ao estado com temperatura infinita ($T = \infty$) com magnetização espontânea igual a zero. A temperatura que nos interessa está abaixo da temperatura crítica, de modo que haja uma magnetização espontânea não nula. A partir daí, deixamos o sistema evoluir no tempo por meio do Algoritmo de Metropolis. Deste modo estaremos saindo de uma região de desordem para uma região ordenada do diagrama de fases. Faremos gradativamente exames para longos tempos até que o sistema atinja o equilíbrio, removemos então, nessa etapa, o excesso de energia da configuração. Finalmente estabelecido o equilíbrio, podemos encontrar a temperatura crítica do sistema para o modelo Ising Bidimensional que de acordo com Onsager [4] vale exatamente:

$$T_c = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} = 2.269185 \dots \quad (1.22)$$

Para aplicação de Monte Carlo no modelo de Ising **2D**, resolvemos montar um programa na linguagem FORTRAN capaz de simular o comportamento do modelo. Introduzimos condições de contorno, de modo que o programa consiga reconhecer quais são os primeiros vizinhos de um spin. Por exemplo, ao sortearmos o último spin da primeira linha numa rede 128 x 128, temos os seguintes primeiros vizinhos: (1 , 127), (1 , 1), (2 , 128) e (128 , 128).

As curvas que mostraremos nas figuras (1.8), (1.6) e (1.7) (referentes ao modelo Ising Bidimensional) foram obtidas fazendo as seguintes considerações: Usamos uma rede quadrada (128 x 128) cujos spins foram distribuídos aleatoriamente; o valor do campo magnético externo h é nulo e $J = 1$ (ferromagnetismo); as quantidades termodinâmicas têm unidades J/k_B ; descartamos os $3 \cdot 10^4$ passos de Monte Carlo iniciais até o sistema atingir o equilíbrio, e depois computamos as quantidades de físicas de interesse nos próximos 10^4 passos seguintes.

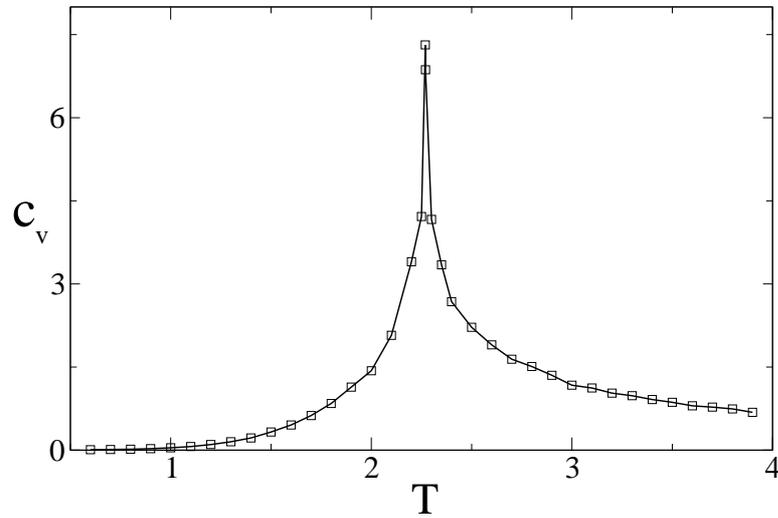


Figura 1.6: *calor específico c_v em função da temperatura T .*

Na Fig. 1.6, o pico em c_v está associado a existência de um ponto crítico que no gráfico se verifica em $T = 2,2692$. Esses resultados revelam a eficiência do método de Monte Carlo indicando grandes flutuações em torno da temperatura Curie e principalmente assinalando uma temperatura T_c muito próxima a de Onsager.

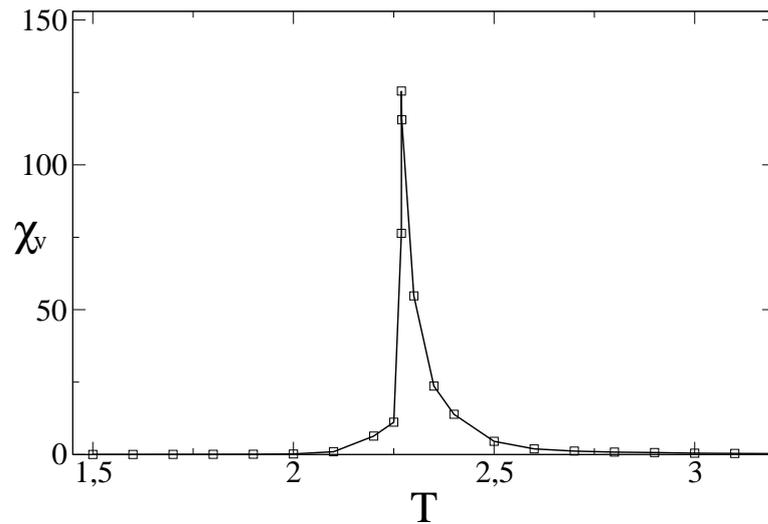


Figura 1.7: *susceptibilidade χ_v em função da temperatura T .*

Na Fig. 1.7, as flutuações de χ_v próximas de T_c são maiores que do calor específico c_v verificado anteriormente, o que é esperado.

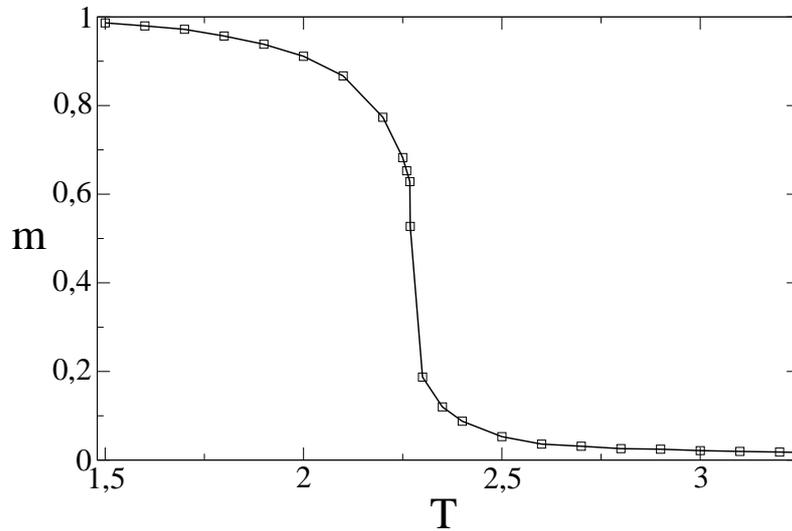


Figura 1.8: *Magnetização m contra temperatura T .*

A Fig. 1.8 revela valores esperados: (I) Em baixas temperaturas $m \rightarrow 1$; (II) para um valor crítico da temperatura ($T_c \simeq 2,26$) há uma queda brusca na magnetização; (III) para temperaturas elevadas ($T > T_c$), $m \approx 0$; (IV) As flutuações máximas estão nas proximidades do ponto crítico e diminuem a medida que afasta-se dele (no caso de $T > T_c$ a queda é mais lenta).

Capítulo 2

Metamagneto na presença de Campos Magnéticos Uniforme e Aleatório - Aproximações de Campo Médio

2.1 Introdução

O conceito da ordem antiferromagnética foi proposta independentemente por Neel [15] e Landau [16] por volta de 1932. Ambos procuravam explicar o comportamento anômalo em baixa temperatura da susceptibilidade magnética de determinados materiais, tais como, os metais (*Cr* e o *Mn* - no caso de Néel), os isolantes (como os cloretos de Cromo), o *Fe* bivalente, o *Co* e o *Ni* (no caso de Landau). Duas sugestões foram apontadas: Néel sugeriu a existência de sub-redes interpenetrantes no Cromo e no manganês com magnetização oposta, e Landau previu a existência de camadas ferromagneticamente intercaladas, cuja magnetização alterna de camada para camada.

Ambos estavam corretos em suas análises, de modo que nos dois casos, a magnetização espontânea total se mostrava nula. Assumindo intercamadas se acoplando de forma frágil, Landau concluiu que um campo magnético relativamente pequeno seria suficiente para modificar a orientação mútua dos momentos em cada camada. Isto conduz aos desvios da dependência linear do momento total no campo, isto é, há um aumento anômalo da susceptibilidade, e finalmente, para campos elevados, ocorre uma saturação da magnetização. Tal comportamento tinha sido observada por Becquerel e por van den Handel [17] no carbonato do Fe e do magnésio em baixas temperaturas. Não tendo conhecimento dos trabalhos de Landau ou de Néel, Becquerel e van den Handel não poderiam explicar suas observações em termos do ferromagnetismo e do paramagnetismo, deste modo sugeriram para esse novo estado o nome metamagnetismo.

De outra forma podemos dizer que, o metamagnetismo é um estado induzido da matéria descrito por um aumento superlinear da magnetização numa pequena faixa do campo magnético aplicado. Os sólidos que exibem tal comportamento foram designados por Kramers [7] como metamagnetos e são distintos de outros materiais devido ao seu caráter não ortodoxo, comportando-se ora como ferromagnetos e ora como antiferromagnetos.

Alguns metamagnetos são listados a seguir com a sua respectiva temperatura Néel. São eles: $CoCl_2$ (723), $MnTe$ (323), $CrCl_2$ (20), $FeCl_2$ (24) e $CoCl_2$ (25) [14]. Esses materiais são compostos por uma sucessão de camadas ferromagnéticas que se alternam em sinais.

No Brasil, um dos primeiros trabalhos consistentes que envolve metamagnetos submetidos a campos magnéticos uniformes e aleatórios foi publicado por Silvio R. A. Salinas [20] em 1998. O seu objetivo foi a obtenção do diagrama de fase no espaço campo externo H versus temperatura T , usando

diferentes distribuições de probabilidade para o campo aleatório (a bimodal e a Gaussiana), numa rede cúbica simples com técnicas de Campo Médio. Em seguida houve a publicação de outro artigo (autor - Weizenmann [18]) envolvendo o mesmo tema e usando a mesma técnica, porém com outra distribuição de probabilidade, a trimodal. Ambos utilizaram o parâmetro $\epsilon = 1$ e conseguiram obter linhas de transição de fase de primeira e segunda ordem e pontos tricríticos. Nosso objetivo é dar continuidade a esses trabalhos, variando o valor de ϵ , usando além da técnica de campo médio, a Monte Carlo, e principalmente verificando até que ponto podemos obter linhas de transição de fase de primeira e segunda ordem e os pontos tricríticos.

Os cálculos mostrados a seguir são válidos tanto para uma rede quadrada como para uma rede cúbica simples. Em campo médio isso é possível, pois as interações entre os spins primeiros e segundos vizinhos e o número de coordenação da rede serão embutidos no parâmetro ϵ . Sendo assim, mostraremos a disposição dos spins numa rede quadrada, e também a representação dos primeiros e segundos vizinhos de um spin numa pequena porção da rede cúbica simples.

2.2 Definição do Modelo

Considere uma rede bidimensional regular composta por N sítios onde os spins têm valores $S_i = \pm 1$. Podemos então dividí-la em duas sub-redes (A e B), equivalentes e interpenetrantes Fig. 2.1. O mesmo pode ser feito se considerarmos uma rede cúbica simples. Vejamos então a representação dos primeiros e segundos vizinhos de um spin dessa última rede através da Fig. 2.2.

Nos dois casos, um spin de uma sub-rede tem os seus z' spins segundos

vizinhos (nnn) localizados na mesma sub-rede, e os seus z spins primeiros vizinhos (nn) pertencem a outra sub-rede. A Hamiltoniana do sistema é dada por

$$\mathcal{H} = J \sum_{nn} S_i S_j - J' \sum_{nnn} S_i S_j - \sum_i (H + H_i) S_i . \quad (2.1)$$

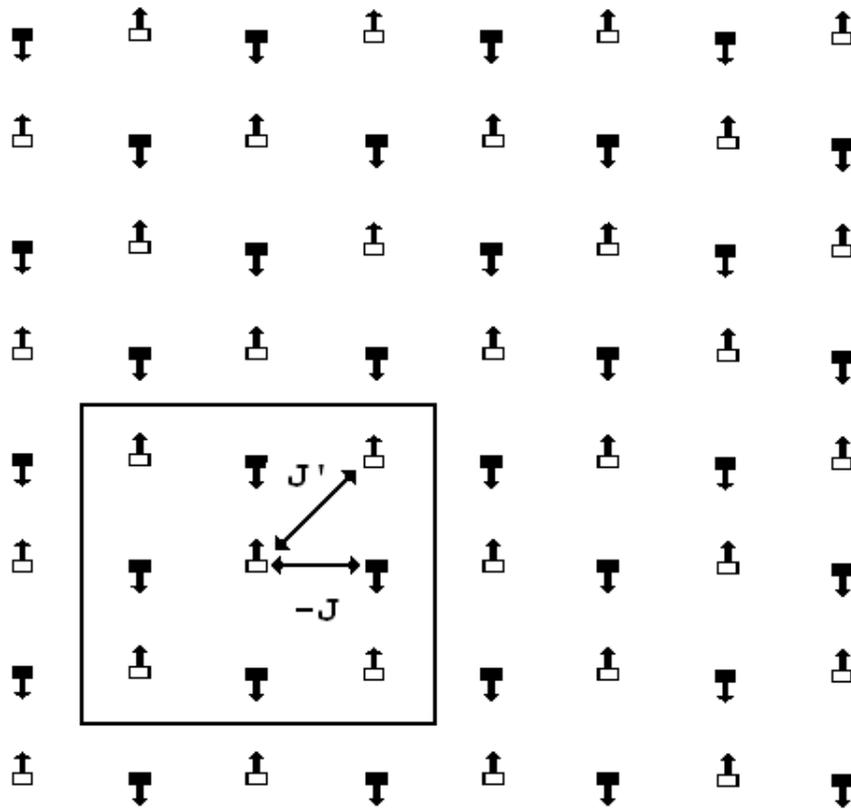


Figura 2.1: Rede bidimensional regular com spins $S_i = \pm 1$ formada por duas sub-redes equivalentes e interpenetrantes. Cada sub-rede contém n spins apontados na mesma direção ($N = 2n$) e está representada em tons diferentes. A sub-rede A está em tons claros e a sub-rede B, tons escuros.

Nesse modelo, J e J' são as constantes de acoplamento entre os spins primeiros vizinhos (nn) e entre spins segundos vizinhos (nnn) respectiva-

mente. A somatória \sum_{nn} é aplicada sobre todos os pares de spins nn e a somatória \sum_{nnn} sobre todos os pares de spins nnn . O parâmetro H indica intensidade do campo uniforme externo e H_i é a intensidade do campo aleatório local. Nessa abordagem, as interações entre os primeiros vizinhos nn são antiferromagnéticas, ou seja $-J$ (com J positivo), e as interações entre segundos vizinhos nnn são ferromagnéticas ($J' > 0$), os campos aleatórios locais H_i não estão correlacionados e usamos a mesma probabilidade para cada sítio.

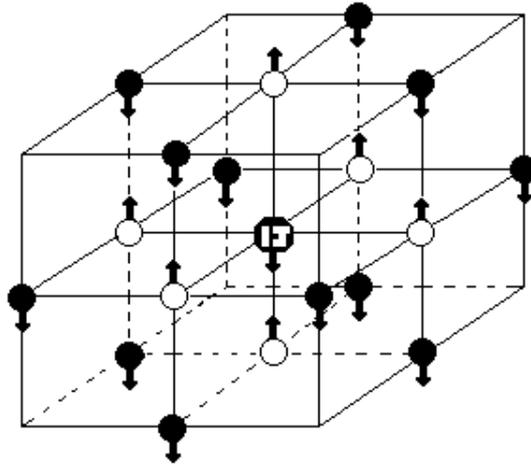


Figura 2.2: *Representação dos primeiros e segundos vizinhos do sítio (i, j) (localizado no centro do cubo), numa pequena porção da rede cúbica simples. Em cada vértice do cubo existe um spin apontado numa direção, porém mostramos somente os primeiros vizinhos (spins com círculos vazios) e os spins segundos vizinhos (spins com círculos pretos). As interações entre os spins primeiros vizinhos são antiferromagnéticas e entre segundos vizinhos são ferromagnéticas.*

2.3 Equações de Campo Médio

De acordo o princípio variacional de Bogoliubov [1] temos:

$$\langle F \rangle_{av} \leq \langle F_t \rangle_{av} + \langle \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_t \rangle_t \rangle_{av} , \quad (2.2)$$

onde F é a energia livre de Helmholtz, \mathcal{H} é a Hamiltoniana do nosso sistema, \mathcal{H}_t é a Hamiltoniana Tentativa da qual conhecemos a solução exata, $\langle \dots \rangle_{av}$ denota a média sobre a distribuição do campo aleatório e $\langle \dots \rangle_t$ é a média térmica referente a \mathcal{H}_t .

Definimos a seguinte Hamiltoniana tentativa:

$$\mathcal{H}_t = - \sum_i (H + H_i) S_i - \eta_A \sum_{i \in A} S_i - \eta_B \sum_{i \in B} S_i , \quad (2.3)$$

onde η_A e η_B são parâmetros variacionais e a Hamiltoniana tentativa para cada sub-rede são escritas como

$$\mathcal{H}_{t_A} = - \sum_{i \in A} (H + H_i) S_i - \eta_A \sum_{i \in A} S_i \quad (2.4)$$

e

$$\mathcal{H}_{t_B} = - \sum_{i \in B} (H + H_i) S_i - \eta_B \sum_{i \in B} S_i . \quad (2.5)$$

Para resolvermos a Eq. (2.2) vamos inicialmente usar a função partição canônica abaixo para as sub-redes A e B respectivamente.

$$Z_A = Tr e^{-\beta \mathcal{H}_A} , \quad Z_B = Tr e^{-\beta \mathcal{H}_B} , \quad (2.6)$$

onde $\beta = \frac{1}{k_B T}$ e Tr é o traço sobre a Hamiltoniana. Substituindo (2.4) em (2.6) determinamos Z_A .

$$Z_A = Tr \exp \beta \left\{ \sum_{i \in A} (H + H_i) S_i + \eta_A \sum_{i \in A} S_i \right\} , \quad (2.7)$$

$$Z_A = \sum_{\{S_i\}} \exp [(H + H_1)S_1 + \dots + (H + H_n)S_n + \eta_A(S_1 + \dots + S_n)] , \quad (2.8)$$

$$Z_A = \sum_{\{S_i\}} e^{\beta(H+H_1+\eta_A)S_1} \cdot e^{\beta(H+H_2+\eta_A)S_2} \dots e^{\beta(H+H_n+\eta_A)S_n} , \quad (2.9)$$

$$Z_A = \sum_{\{S_i\}} \prod_{i=1}^n \exp \beta(H + H_i + \eta_A)S_i = \prod_{i=1}^n \sum_{\{S_i\}} \exp \beta(H + H_i + \eta_A)S_i , \quad (2.10)$$

e tomando o valor $S_i = \pm 1$, reescrevemos a Eq. anterior do seguinte modo:

$$Z_A = \prod_{i=1}^n [e^{\beta(H+H_i+\eta_A)} + e^{-\beta(H+H_i+\eta_A)}] , \quad (2.11)$$

onde n é o número de spins da sub-rede A. Sendo N o número total de spins da rede ($N = 2n$) e admitindo que os campos aleatórios locais são iguais ($H_1 = H_2 = \dots = H_n$), então reescrevemos a Eq. (2.11) como

$$Z_A = [e^{\beta(H+H_i+\eta_A)} + e^{-\beta(H+H_i+\eta_A)}]^{\frac{N}{2}} , \quad (2.12)$$

e substituindo (2.5) em (2.6) determinamos Z_B de forma análoga a Z_A , sendo assim

$$Z_B = [e^{\beta(H+H_i+\eta_B)} + e^{-\beta(H+H_i+\eta_B)}]^{\frac{N}{2}} . \quad (2.13)$$

Podemos reescrever as duas equações anteriores usando a definição

$$\frac{e^x + e^{-x}}{2} = \cosh x , \quad (2.14)$$

ou seja,

$$Z_A = [2\cosh \beta(H + H_i + \eta_A)]^{\frac{N}{2}} \quad (2.15)$$

e

$$Z_B = [2\cosh \beta(H + H_i + \eta_B)]^{\frac{N}{2}} . \quad (2.16)$$

Fazendo a conexão com a termodinâmica, temos a seguir a energia livre das sub-redes A e B , respectivamente escritas como:

$$F_{t_A} = -k_B T \ln Z_A \quad \text{e} \quad F_{t_B} = -k_B T \ln Z_B ,$$

e substituindo Z_A em F_{t_A} e Z_B em F_{t_B} obtemos

$$F_{t_A} = -\frac{k_B T N}{2} \ln [2 \cosh \beta (H + H_i + \eta_A)] \quad (2.17)$$

e também

$$F_{t_B} = -\frac{k_B T N}{2} \ln [2 \cosh \beta (H + H_i + \eta_B)] . \quad (2.18)$$

Escrevendo a energia livre de Helmholtz da Hamiltoniana tentativa em função da energia livre de cada sub-rede temos

$$\langle F_t \rangle_{av} = \langle F_{t_A} \rangle_{av} + \langle F_{t_B} \rangle_{av} , \quad (2.19)$$

e substituindo (2.17) e (2.18) em (2.19) encontramos

$$\begin{aligned} \langle F_t \rangle_{av} &= -\frac{N}{2\beta} \langle \ln [2 \cosh \beta (H + H_i + \eta_A)] \rangle_{av} \\ &\quad - \frac{N}{2\beta} \langle \ln [2 \cosh \beta (H + H_i + \eta_B)] \rangle_{av} . \end{aligned} \quad (2.20)$$

Para o cálculo de $\langle \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_t \rangle_t \rangle_{av}$ vamos primeiramente subtrair (2.1) de (2.3), isto é,

$$\mathcal{H} - \mathcal{H}_t = J \sum_{nn} S_i S_j - J' \sum_{nnn} S_i S_j + \eta_A \sum_{i \in A} S_i + \eta_B \sum_{i \in B} S_i ; \quad (2.21)$$

e depois desenvolver separadamente cada termo do segundo membro.

As interações de primeiros vizinhos ocorrem entre spins de sub-redes diferentes, da qual cada um dos $\frac{N}{2}$ spins de uma sub-rede tem z spins primeiros vizinhos apontados na mesma direção. Sendo S_A um spin da rede A e S_B um spin da rede B, temos

$$J \sum_{nn} S_i S_j = \frac{J}{2} \left[\frac{N}{2} z S_A S_B + \frac{N}{2} z S_B S_A \right] = \frac{JzN}{2} S_A S_B . \quad (2.22)$$

As interações de segundos vizinhos ocorrem entre spins da mesma sub-rede, portanto

$$J' \sum_{nnn} S_i S_j = \frac{J}{2} \left[\frac{N}{2} z' S_A S_A + \frac{N}{2} z' S_B S_B \right] = \frac{J' z' N}{4} (S_A S_A + S_B S_B) . \quad (2.23)$$

Calculando os dois últimos termos da Eq. (2.21), e nela substituindo as equações (2.22) e (2.23) com o uso das propriedades envolvendo médias obtemos

$$\begin{aligned} \langle \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_i \rangle_t \rangle_{av} &= \frac{JzN}{2} \langle S_A \rangle \langle S_B \rangle - \frac{J' z' N}{4} [\langle S_A \rangle \langle S_A \rangle \\ &+ \langle S_B \rangle \langle S_B \rangle] + \frac{\eta_A N}{2} \langle S_A \rangle + \frac{\eta_B N}{2} \langle S_B \rangle . \end{aligned} \quad (2.24)$$

Definindo $\langle S_A \rangle \equiv m_A$ e $\langle S_B \rangle \equiv m_B$ e substituindo (2.20) e (2.24) em (2.2) encontramos

$$\begin{aligned} \langle F \rangle_{av} \leq & - \frac{N}{2\beta} \langle \ln [2 \cosh \beta (H + H_i + \eta_A)] \rangle_{av} \\ & - \frac{N}{2\beta} \langle \ln [2 \cosh \beta (H + H_i + \eta_B)] \rangle_{av} + \frac{JzN}{2} m_A m_B \\ & - \frac{J' z' N}{4} (m_A^2 + m_B^2) + \frac{N}{2} \eta_A m_A + \frac{N}{2} \eta_B m_B . \end{aligned} \quad (2.25)$$

As magnetizações de cada sub-rede são determinadas por

$$m_A = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \eta_A} \ln Z'_A \quad (2.26)$$

e

$$m_B = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \eta_B} \ln Z'_B , \quad (2.27)$$

na qual denominamos

$$Z_A = (Z'_A)^{\frac{N}{2}} , \quad Z_B = (Z'_B)^{\frac{N}{2}} . \quad (2.28)$$

Comparando as equações (2.28), (2.15) e (2.16) determinamos Z'_A e Z'_B e substituindo esses resultados nas Eqs. (2.26) e (2.27) obtemos

$$m_A = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \eta_A} \ln [2 \cosh \beta (H + H_i + \eta_A)] \quad (2.29)$$

e

$$m_B = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \eta_B} \ln [2 \cosh \beta (H + H_i + \eta_B)] , \quad (2.30)$$

isto é,

$$m_A = \langle \tanh \beta (H + H_i + \eta_A) \rangle_{av} \quad (2.31)$$

e

$$m_B = \langle \tanh \beta (H + H_i + \eta_B) \rangle_{av} . \quad (2.32)$$

De acordo com a condição estacionária da energia livre de Helmholtz temos

$$\frac{\partial}{\partial \eta_A} \langle F \rangle_{av} = 0 , \quad (2.33)$$

derivamos então a Eq. (2.25) em relação a η_A (note que $m_A = f(\eta_A)$), isto é,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \eta_A} \langle F \rangle_{av} &= -\frac{N}{2} \tanh \beta (H + H_i + \eta_A) \\ &+ \frac{JNz}{2} m_B \beta \operatorname{sech}^2 \beta (H + H_i + \eta_A) + \frac{N}{2} m_A \\ &- \frac{J'Nz'}{2} m_A \beta \operatorname{sech}^2 \beta (H + H_i + \eta_A) + \frac{N}{2} \beta \eta_A \operatorname{sech}^2 \beta (H + H_i + \eta_A) . \end{aligned} \quad (2.34)$$

Vemos que o primeiro e o terceiro termo do segundo membro da equação anterior se anulam, portanto usando a Eq. (2.33) temos

$$\beta \operatorname{sech}^2 \beta (H + H_i + \eta_A) [Jz m_B - J'z' m_A + \eta_A] = 0 ; \quad (2.35)$$

nessas condições concluímos:

$$\eta_A = -Jz m_B + J'z' m_A , \quad (2.36)$$

e de forma análoga

$$\eta_B = -Jz m_A + J'z' m_B . \quad (2.37)$$

Inserindo os respectivos valores de η_A e η_B nas equações (2.31) e (2.32) obtemos

$$m_A = \langle \tanh\beta (H + H_i - Jzm_B + J'z'm_A) \rangle_{av} \quad (2.38)$$

e

$$m_B = \langle \tanh\beta (H + H_i - Jzm_A + J'z'm_B) \rangle_{av}. \quad (2.39)$$

Finalmente, após o cálculo de η_A e η_B , podemos obter a energia livre por spin (f), substituindo (2.36) e (2.37) em (2.25) e dividindo a equação resultante pelo número total de spins da rede, sendo assim, temos

$$\begin{aligned} f = & - \frac{1}{2\beta} \langle \ln [2\cosh\beta(H + H_i - Jzm_B + J'z'm_A)] \rangle_{av} \quad (2.40) \\ & - \frac{1}{2\beta} \langle \ln [2\cosh\beta(H + H_i - Jzm_A + J'z'm_B)] \rangle_{av} \\ & - \frac{Jz}{2} m_A m_B + \frac{J'z'}{4} (m_A^2 + m_B^2). \end{aligned}$$

2.4 Expansão de Landau

No estudo da transição de fase do sistema usaremos a expansão de Landau, a qual perto do ponto crítico o potencial termodinâmico é expandido em potência do parâmetro de ordem. Para realizar a expansão vamos definir magnetização total M e o parâmetro de ordem m_S como:

$$M = \frac{m_A + m_B}{2} \quad (2.41)$$

e

$$m_S = \frac{m_A - m_B}{2}. \quad (2.42)$$

Ao substituirmos (2.38) e (2.39) em (2.41) encontramos

$$\begin{aligned} 2M &= \langle \tanh\beta (H + H_i - Jzm_B + J'z'm_A) \rangle_{av} \quad (2.43) \\ &+ \langle \tanh\beta (H + H_i - Jzm_A + J'z'm_B) \rangle_{av}; \end{aligned}$$

somando (2.41) e (2.42) obtemos

$$m_A = M + m_S , \quad (2.44)$$

e subtraindo (2.41) de (2.42) temos

$$m_B = M - m_S . \quad (2.45)$$

Podemos substituir (2.44) e (2.45) em (2.43) reorganizando a equação resultante da seguinte forma:

$$\begin{aligned} 2M &= \langle \tanh\beta [H + H_i + M(-Jz + J'z') + m_S(Jz + J'z')] \rangle_{av} \quad (2.46) \\ &+ \langle \tanh\beta [H + H_i - M(-Jz + J'z') - m_S(Jz + J'z')] \rangle_{av} . \end{aligned}$$

Colocando em evidência $Jz + J'z'$ antes dos colchetes, passamos a utilizar as quantidades reduzidas

$$t = \frac{1}{\beta(Jz + J'z')} , \quad h = \frac{H}{Jz + J'z'} \quad e \quad h_i = \frac{H_i}{Jz + J'z'} ,$$

além do parâmetro

$$\sigma = \frac{-Jz + J'z'}{Jz + J'z'} = \frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 1} ,$$

onde

$$\epsilon = \frac{J'z'}{Jz} \geq 0 .$$

Obtemos então

$$\begin{aligned} M &= \frac{1}{2} \langle \tanh \frac{1}{t} (h + h_i + \sigma M + m_S) \rangle_{av} \quad (2.47) \\ &+ \frac{1}{2} \langle \tanh \frac{1}{t} (h + h_i + \sigma M - m_S) \rangle_{av} , \end{aligned}$$

e de forma análoga escrevemos

$$\begin{aligned} m_S &= \frac{1}{2} \langle \tanh \frac{1}{t} (h + h_i + \sigma M + m_S) \rangle_{av} \quad (2.48) \\ &- \frac{1}{2} \langle \tanh \frac{1}{t} (h + h_i + \sigma M - m_S) \rangle_{av} . \end{aligned}$$

Agora, vamos multiplicar a Eq. (2.40) por βt implementando o mesmo parâmetro e as mesmas quantidades reduzidas anteriores e substituindo o valor de m_A e m_B em destaque nas equações (2.44) e (2.45). Obtemos a equação

$$\begin{aligned} \beta t f = & - \frac{t}{2} \langle \ln [2 \cosh \frac{1}{t} (h + h_i + \sigma M + m_S)] \rangle_{av} \\ & - \frac{t}{2} \langle \ln [2 \cosh \frac{1}{t} (h + h_i + \sigma M - m_S)] \rangle_{av} \\ & - \frac{Jz\beta t}{2} (M^2 - m_S^2) + \frac{J'z'\beta t}{4} [(M + m_S)^2 + (M - m_S)^2] . \end{aligned} \quad (2.49)$$

Chamando de Q a soma dos dois últimos termos da equação anterior temos

$$Q = \frac{(-Jz + J'z')M^2 + (Jz + J'z')m_S^2}{2(Jz + J'z')} = \frac{\sigma M^2 + m_S^2}{2} , \quad (2.50)$$

logo,,

$$\begin{aligned} \frac{f}{Jz + J'z'} = & - \frac{t}{2} \langle \ln [2 \cosh \frac{1}{t} (h + h_i + \sigma M + m_S)] \rangle_{av} \\ & - \frac{t}{2} \langle \ln [2 \cosh \frac{1}{t} (h + h_i + \sigma M - m_S)] \rangle_{av} + \frac{\sigma M^2}{2} + \frac{1}{2} m_S^2 . \end{aligned} \quad (2.51)$$

Tomaremos a magnetização uniforme como $M = m + M_0$, onde M_0 é a solução paramagnética dada pela equação

$$M_0 = \langle \tanh \frac{1}{t} (h + h_i + \sigma M_0) \rangle_{av} , \quad (2.52)$$

sendo assim substituiremos M na Eq. (2.47) de tal forma que

$$\begin{aligned} M_0 + m = & \frac{1}{2} \langle \tanh \frac{1}{t} (h + h_i + \sigma M_0 + \sigma m + m_S) \rangle_{av} \\ & + \frac{1}{2} \langle \tanh \frac{1}{t} (h + h_i + \sigma M_0 + \sigma m - m_S) \rangle_{av} . \end{aligned} \quad (2.53)$$

Denominando

$$\Upsilon = \frac{1}{t} (h + h_i + \sigma M_0) \quad , \quad a_+ = \frac{1}{t} (\sigma m + m_S) \quad , \quad a_- = \frac{1}{t} (\sigma m - m_S)$$

e substituindo (2.52) no primeiro membro da Eq. (2.53) escrevemos

$$m + \tanh\Upsilon = \frac{1}{2} [\tanh(\Upsilon + a_+) + \tanh(\Upsilon + a_-)] , \quad (2.54)$$

ou ainda

$$m = \frac{1}{2} [\tanh(\Upsilon + a_+) - \tanh\Upsilon] + \frac{1}{2} [\tanh(\Upsilon + a_-) - \tanh\Upsilon] . \quad (2.55)$$

Designando

$$m_+ = \frac{1}{2} [\tanh(\Upsilon + a_+) - \tanh\Upsilon] \quad (2.56)$$

e

$$m_- = \frac{1}{2} [\tanh(\Upsilon + a_-) - \tanh\Upsilon] , \quad (2.57)$$

podemos expandir primeiramente m_+ no ponto $a_+ = 0$ da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} m_+ &= \frac{1}{2t} \operatorname{sech}^2 \Upsilon (\sigma m + m_S) \\ &- \frac{1}{2t^2} \operatorname{sech}^2 \Upsilon \tanh \Upsilon (\sigma m + m_S)^2 \\ &+ \frac{1}{2t^3} \operatorname{sech}^2 \Upsilon \left[\tanh^2 \Upsilon - \frac{1}{3} \right] (\sigma m + m_S)^3 \\ &- \frac{1}{2t^4} \operatorname{sech}^2 \Upsilon \left[\tanh^3 \Upsilon - \frac{2}{3} \tanh \Upsilon \right] (\sigma m + m_S)^4 \\ &+ \frac{1}{2t^5} \operatorname{sech}^2 \Upsilon \left[\tanh^4 \Upsilon - \frac{3}{3} \tanh^2 \Upsilon + \frac{6}{45} \right] (\sigma m + m_S)^5 \\ &- \frac{1}{2t^6} \operatorname{sech}^2 \Upsilon \left[\tanh^5 \Upsilon - \frac{4}{3} \tanh^3 \Upsilon + \frac{17}{45} \tanh \Upsilon \right] (\sigma m + m_S)^6 \\ &+ \frac{1}{2t^7} \operatorname{sech}^2 \Upsilon \left[\tanh^6 \Upsilon - \frac{5}{3} \tanh^4 \Upsilon + \frac{33}{45} \tanh^2 \Upsilon - \frac{17}{315} \right] (\sigma m + m_S)^7 , \end{aligned} \quad (2.58)$$

que na forma reduzida é escrita como

$$m_+ = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} A_n (\sigma m + m_S)^n . \quad (2.59)$$

Considerando

$$T_n = \tanh^n \Upsilon , \quad (2.60)$$

podemos escrever os cinco primeiros coeficientes A_n a seguir:

$$A_1 = -\frac{1}{t} (T_2 - 1) , \quad (2.61)$$

$$A_2 = \frac{1}{t^2} (T_3 - T_1) , \quad (2.62)$$

$$A_3 = -\frac{1}{3t^3} (3T_4 - 4T_2 + 1) , \quad (2.63)$$

$$A_4 = \frac{1}{3t^4} (3T_5 - 5T_3 + 2T_1) , \quad (2.64)$$

e

$$A_5 = -\frac{1}{15t^5} (15T_6 - 30T_4 + 17T_2 - 2) . \quad (2.65)$$

Obtendo m_- de forma análoga à m_+ , podemos substituir esses resultados na Eq. (2.55) e teremos

$$m = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} A_n [(\sigma m + m_S)^n + (\sigma m - m_S)^n] . \quad (2.66)$$

Usando o mesmo processo aplicado para m , encontramos analogamente m_S .

Portanto,

$$m_S = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} A_n [(\sigma m + m_S)^n - (\sigma m - m_S)^n] . \quad (2.67)$$

Podemos notar que $m = f(m_S)$ é uma função par que satisfaz as duas equações anteriores, logo podemos supor que

$$m = \sum_{P=1}^{\infty} a_P m_S^{2P}, \quad (2.68)$$

onde P é um inteiro. Vamos então substituir (2.68) no segundo membro da Eq. (2.66) colocando $(m_S)^n$ em evidência antes dos colchetes, isto é,

$$m = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} A_n m_S^n \left[\left(\sigma \sum_{p=1}^{\infty} a_P m_S^{2P-1} + 1 \right)^n + \left(\sigma \sum_{p=1}^{\infty} a_P m_S^{2P-1} - 1 \right)^n \right] \quad (2.69)$$

Designando

$$x = \sigma \sum_{P=1}^{\infty} a_P m_S^{2P-1}, \quad (2.70)$$

obtemos a equação

$$m = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} A_n m_S^n [(x+1)^n + (x-1)^n]. \quad (2.71)$$

Se n for par, os termos ímpares da expressão $(x+1)^n + (x-1)^n$ se anulam, logo

$$(x+1)^n + (x-1)^n = 2 \left[\binom{n}{0} + \binom{n}{2} x^2 + \binom{n}{4} x^4 + \dots + \binom{n}{n} x^n \right],$$

e se n for ímpar, são os termos pares que se anulam nessa expressão, pois

$$(x+1)^n + (x-1)^n = 2 \left[\binom{n}{1} x + \binom{n}{3} x^3 + \binom{n}{5} x^5 + \dots + \binom{n}{n} x^n \right].$$

Podemos utilizar a análise anterior para desenvolvemos a somatória em n da Eq. (2.69), com n assumindo valores $1, 2, 3, 4, \dots$. Deste modo podemos escrevê-la como

$$\begin{aligned} m &= A_1 m_S x + A_2 m_S^2 + A_2 m_S^2 x^2 + 3 A_3 m_S^3 x + A_3 m_S^3 x^3 \quad (2.72) \\ &+ A_4 m_S^4 + 6 A_4 m_S^4 x^2 + A_4 m_S^4 x^4 + 5 A_5 m_S^5 x \\ &+ 10 A_5 m_S^5 x^3 + A_5 m_S^5 x^5 + A_6 m_S^6 + \dots \end{aligned}$$

Lembramos que

$$x = \sigma \sum_{P=1}^{\infty} a_P m_S^{2P-1},$$

ou seja, $x = \sigma a_1 m_S + \sigma a_2 m_S^3 + \sigma a_3 m_S^5 + \dots$.

Após a substituição de x da Eq. (2.72), igualamos a princípio os termos de segunda ordem (m_S^2) dessa equação com os respectivos termos da Eq. (2.68) obtendo

$$a_1 m_S^2 = \sigma a_1 A_1 m_S^2 + A_2 m_S^2, \quad (2.73)$$

nesse caso

$$a_1 = \frac{A_2}{1 - \sigma A_1}. \quad (2.74)$$

Igualamos em seguida os termos de quarta ordem,

$$a_2 m_S^4 = \sigma A_1 a_2 m_S^4 + \sigma^2 A_1^2 m_S^4 + 3\sigma A_3 a_1 m_S^4 + A_4 m_S^4, \quad (2.75)$$

e obtemos

$$a_2 = \frac{\sigma^2 A_2^3}{(1 - \sigma A_1)^3} + \frac{3\sigma A_2 A_3}{(1 - \sigma A_1)^2} + \frac{A_4}{1 - \sigma A_1}. \quad (2.76)$$

Por último, igualamos os termos de sexta ordem,

$$\begin{aligned} a_3 m_S^6 &= \sigma A_1 a_3 m_S^6 + 2\sigma^2 A_2 a_1 a_2 m_S^6 + 3\sigma A_3 a_2 m_S^6 \\ &+ \sigma^3 A_3 a_1^3 m_S^6 + 6\sigma^2 A_4 a_1^2 m_S^6 + 5\sigma A_2 a_1 m_S^6 + A_6 m_S^6, \end{aligned} \quad (2.77)$$

e calculamos a_3 ;

$$\begin{aligned} a_3 &= \frac{2\sigma^4 A_2^5}{(1 - \sigma A_1)^5} + \frac{10\sigma^3 A_2^3 A_3}{(1 - \sigma A_1)^4} + \frac{9\sigma^2 A_2 A_3^2}{(1 - \sigma A_1)^3} \\ &+ \frac{8\sigma^2 A_2^2 A_4}{(1 - \sigma A_1)^3} + 5\frac{\sigma A_2 A_5}{(1 - \sigma A_1)^2} + \frac{3\sigma A_3 A_4}{(1 - \sigma A_1)^2} + \frac{A_6}{1 - \sigma A_1}. \end{aligned} \quad (2.78)$$

Repetindo o mesmo processo para m_S temos

$$\begin{aligned} m_S &= A_1 m_S + 2 A_2 m_S^2 x + A_3 m_S^3 + A_3 m_S^3 x^2 + 4 A_4 m_S^4 x \\ &+ 4 A_4 m_S^4 x^3 + A_5 m_S^5 + 10 A_5 m_S^5 x^2 + 10 A_5 m_S^4 + \dots, \end{aligned} \quad (2.79)$$

ou seja,

$$\begin{aligned} (1 - A_1) m_S &- (2\sigma A_2 a_1 + A_3) m_S^3 \\ &- (2\sigma A_2 a_2 + \sigma^2 A_3 a_1^2 + A_5) m_S^5 + \dots = 0. \end{aligned} \quad (2.80)$$

Substituindo na equação anterior os valores de a_1 e a_2 , calculamos os coeficientes a , b e c obtendo

$$a = 1 - A_1, \quad (2.81)$$

$$b = \frac{2\sigma A_2^2}{\sigma A_1 - 1} - A_3 \quad (2.82)$$

e

$$c = \frac{2\sigma^3 A_2^4}{(\sigma A_1 - 1)^3} - \frac{9\sigma^2 A_2^2 A_3}{(\sigma A_1 - 1)^2} + \frac{6\sigma A_2 A_4}{\sigma A_1 - 1} - A_5. \quad (2.83)$$

Agora que determinamos os coeficientes de Landau (a , b e c) e encontramos a equação para a energia livre de Helmholtz, passamos para a próxima seção usando esses dados para a construção do diagrama de fase do modelo.

2.5 Resultados e Discussões do Campo Médio

Podemos destacar três pontos importantes a serem explorados no diagramas de fases campo externo H contra temperatura T :

- linha de transição de fase de segunda ordem - para determinar o conjunto de pontos que formam essa linha é necessário usar os coeficientes de Landau. Para isso devemos descobrir quais são os pares ordenados $(H; T)$ que satisfazem as condições: $a = 0$ e $b > 0$;
- pontos tricríticos - esses pontos são determinados usando as seguintes condições: $a = b = 0$ e $c > 0$;
- linha de transição de fase de primeira ordem - nesse caso usamos a função energia livre de Helmholtz. Para isso construímos gráficos da energia livre f em função de m_S (Fig. 2.3). Verificamos para quais pares ordenados $(H; T)$, f apresenta um mínimo (ou máximo) central ($m_S = 0$) e pelo menos dois mínimos (ou máximos) simétricos de modo que $f(m_S) = f(-m_S) = f(0)$.

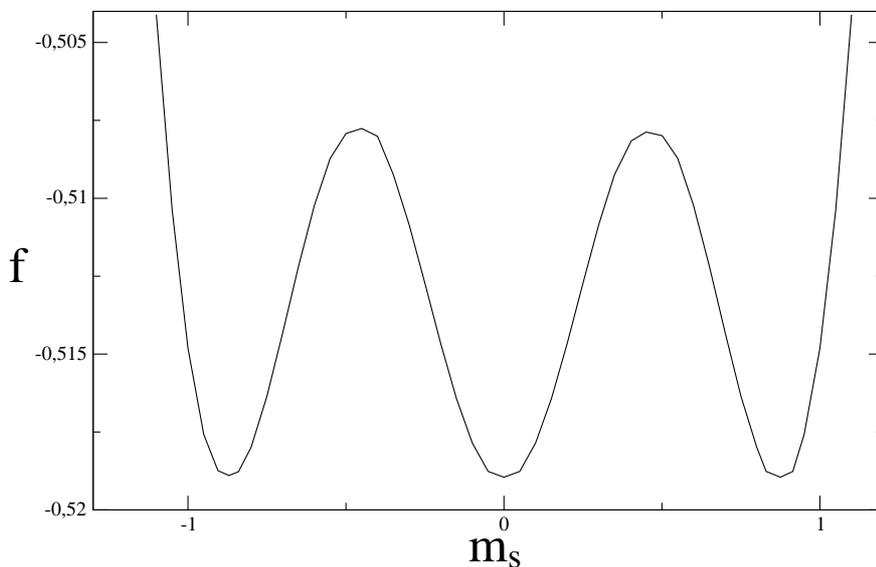


Figura 2.3: *energia livre em função da magnetização staggered.*

A distribuição de probabilidade trimodal para os campos magnéticos aleatórios é definida como

$$P(h_i) = p\delta(h_i) + \frac{1}{2}(1-p) [\delta(h_i - h_A) + \delta(h_i + h_A)] , \quad (2.84)$$

onde $P(h_i)$ distribui os campos aleatórios da seguinte forma;

- $\frac{1}{2}(1-p)$ - para o campo aleatório apontar na direção de h_A ;
- $\frac{1}{2}(1-p)$ - para o campo aleatório apontar na direção $-h_A$;
- p - para o campo aleatório assumir o valor zero;

Vemos, nesse caso, que cada spin é submetido a um campo aleatório $h_i = 0$ ou $h_i = \pm h_A$ com uma certa probabilidade. Dizemos então que h_A denota um campo efetivo que caracteriza a amplitude do campo aleatório h_i definido pelo modelo, e os sinais + ou - nos dá a orientação desse campo (para cima ou para baixo respectivamente).

Para obtermos o efeito do campo aleatório no diagrama de fases é preciso determinar a média sobre a desordem. No nosso caso o campo aleatório aparece na função T_K cuja valor médio é

$$T_K = \left\langle \tanh^K \frac{1}{t} (h + h_i + \sigma M_0) \right\rangle_{av} , \quad (2.85)$$

sendo assim podemos desenvolver essa média da seguinte forma:

$$T_K = \int P(h_i) \left[\tanh^K \frac{1}{t} (h + h_i + \sigma M_0) \right] dh_i , \quad (2.86)$$

$$\begin{aligned} T_K &= \int p\delta(h_i) \left[\tanh^K \frac{1}{t} (h + h_i + \sigma M_0) \right] dh_i \\ &+ \int \frac{1}{2}(1-p) \delta(h_i - h_A) \left[\tanh^K \frac{1}{t} (h + h_i + \sigma M_0) \right] dh_i \\ &+ \int \frac{1}{2}(1-p) \delta(h_i + h_A) \left[\tanh^K \frac{1}{t} (h + h_i + \sigma M_0) \right] dh_i . \end{aligned} \quad (2.87)$$

Nessa última equação, a primeira integral é reduzida a apenas um termo, que tem valor significativo quando $\delta(h_i) = 1$, ou seja $h_i = 0$, assim

$$\int p \delta(h_i) f(h_i) dh_i = pf(0) . \quad (2.88)$$

A segunda integral possuirá um termo não nulo, porém isso ocorre quando $h_i = h_A$ e a terceira integral possuirá o termo em que $h_i = -h_A$. Deste modo, obtemos a seguinte expressão para T_K :

$$\begin{aligned} T_K &= p \tanh^K \frac{1}{t} (h + \sigma M_0) \\ &+ \frac{1}{2} (1 - p) \tanh^K \frac{1}{t} (h + h_A + \sigma M_0) \\ &+ \frac{1}{2} (1 - p) \tanh^K \frac{1}{t} (h - h_A + \sigma M_0) . \end{aligned} \quad (2.89)$$

Nas seções seguintes discutiremos vários diagramas de fase para alguns valores do parâmetro p .

2.5.1 Caso $p = 0$

Para o caso $p = 0$, a distribuição de probabilidade trimodal para o campo aleatório torna-se bimodal. Podemos verificar isso substituindo $p = 0$ na Eq. (2.84) e teremos

$$P(h_i) = \frac{1}{2} [\delta(h_i - h_A) + \delta(h_i + h_A)] . \quad (2.90)$$

Assim cada spin da rede pode experimentar um campo aleatório \mathbf{h}_A com probabilidade $p = 1/2$ de apontar para cima ou para baixo.

Apresentamos a seguir, os diagramas de fases do metamagneto nas aproximações de Campo Médio, com $p = 0$ e campo aleatório no intervalo $[0; 1]$ para três valores de ϵ (0,7, 1 e 1,4). Neste trabalho, usamos figuras planas na cor preta para representar os pontos tricríticos em Campo Médio.

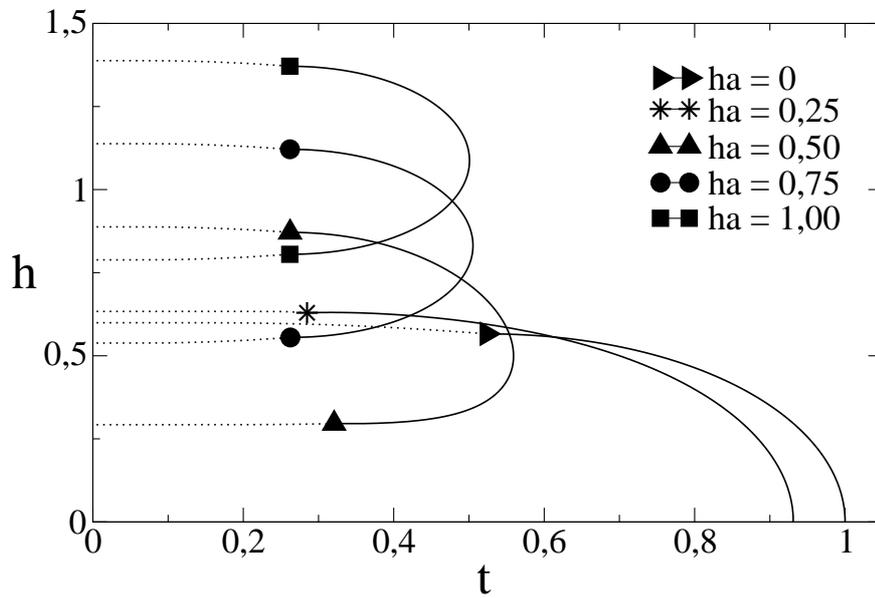


Figura 2.4: *Campo magnético h contra temperatura t para $p = 0$ e $\epsilon = 0,7$.*

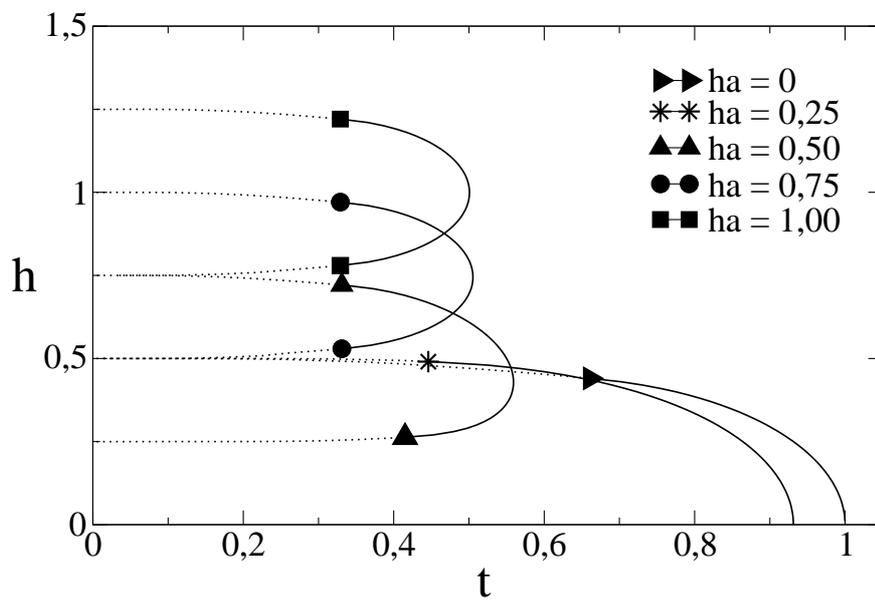


Figura 2.5: *Campo magnético h contra temperatura t para $p = 0$ e $\epsilon = 1$, este diagrama foi obtido por Salinas et al. [20] e Weizenmann et al. [18].*

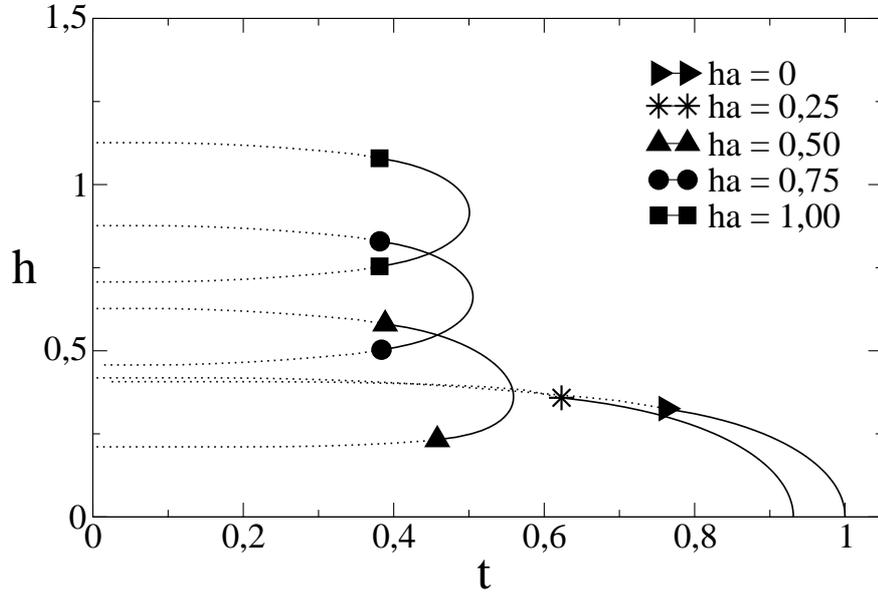


Figura 2.6: *Campo magnético h contra temperatura t para $p = 0$ e $\epsilon = 1,4$.*

As Figs. 2.4, 2.5 e 2.6 mostram a existência dos três aspectos citados anteriormente: há linhas de transição de fase de primeira ordem (linhas pontilhadas), linhas de segunda ordem (linhas contínuas) e pontos tricríticos (representados por figuras planas na cor preta). Essas linhas separam a fase antiferromagnética da fase paramagnética (que ocorre em altas temperaturas). Observe que usamos vários valores para o campo aleatório ($0 \leq h_A \leq 1$) com probabilidade $p = 0$ e notamos:

- Quanto maior o valor de ϵ mais longas são as linhas de primeira ordem e menores são as linhas de segunda ordem.
- Os pontos tricríticos sofrem deslocamentos conforme a variação de ϵ e também conforme a mudança do campo aleatório.

A maioria dessas observações são esperadas uma vez que a variação do valor de ϵ implica na variação das interações J e J' , e como essas interações estão imediatamente ligada ao comportamento dos spins na rede,

fortes indícios apontavam para uma mudança no diagrama de fases em que cada ϵ assume valores diferentes. A reentrância, no entanto, é um fato existente em Campo Médio que aparece devido as competições entre as interações de troca e o campo magnético aleatório. Resta-nos saber, através da variação de ϵ , se há um ponto em que uma das linhas (primeira ou segunda ordem) passa a não mais existir, prevalecendo a outra.

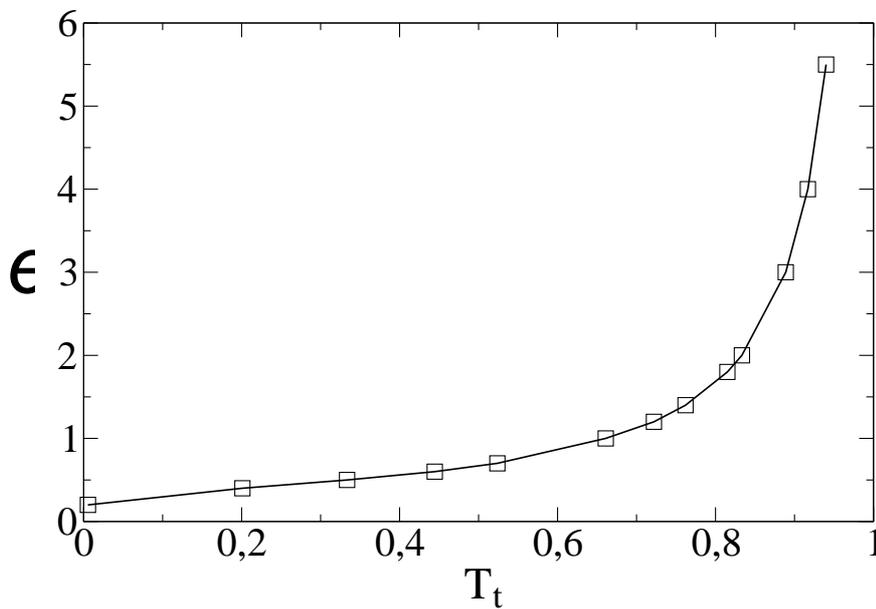


Figura 2.7: *Parâmetro ϵ em função da temperatura tricrítica T_t , com $p = 0$ e $h_A = 0$.*

No caso particular $p = 0$ e $h_A = 0$, podemos analisar através da Fig. 2.7 o comportamento dessas linhas. Essa figura mostra o valor da temperatura T_t (temperatura tricrítica) para cada ϵ . Esse valor indica que, no diagrama de fase, à esquerda de T_t há linhas de primeira ordem e à direita de T_t há linhas de segunda ordem. Somente em situações extremas esse fato não acontece ($\epsilon = 0,02$ e $\epsilon = 5,5$). Para $\epsilon = 0,02$, encontramos $T_t \approx 0$, portanto a linha de segunda ordem terá um comprimento máximo quando

$p = 0$, $h_A = 0$ e $\epsilon = 0,02$. Para $\epsilon = 5,5$, encontramos $T_t = 0,94$. A partir desse valor de ϵ , a linha de segunda ordem praticamente não existe e a linha de primeira ordem atingirá o seu comprimento máximo. Esses resultados nos levam a crer que para os demais casos ($p = 0$ e $0 < h_A \leq 1$) existem outros valores de ϵ que determinam o comprimento máximo de uma dessas linhas.

2.5.2 Caso $p = 0,5$

Para o caso $p = 0,5$ consideramos três valores de ϵ (0,8; 1 e 1,4) com diferentes campos aleatórios h_A (0; 0,5 e 1). Notamos as mesmas observações feitas para $p = 0$ e se aumentarmos o valor de ϵ , o ponto tricrítico sofre um deslocamento para direita (altas temperaturas) e na direção do eixo t (baixos campos). Esse aumento, verificado através Figs. 2.8, 2.9 e 2.10, favorece as interações de segundos vizinhos (ferromagnéticas) e em consequência disso há uma destruição gradativa da linha de segunda ordem.

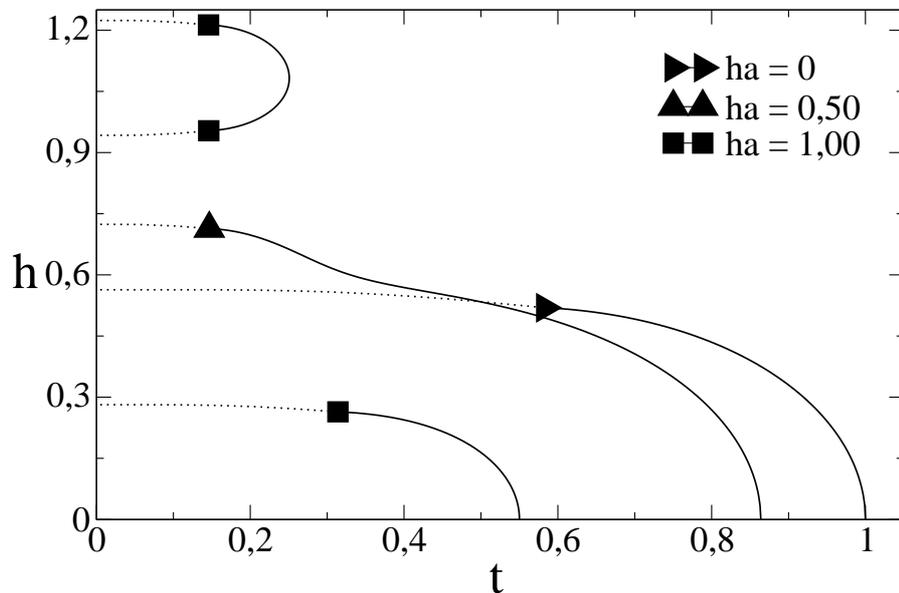


Figura 2.8: *Campo magnético h contra temperatura t para $p = 0,5$ e $\epsilon = 0,8$.*

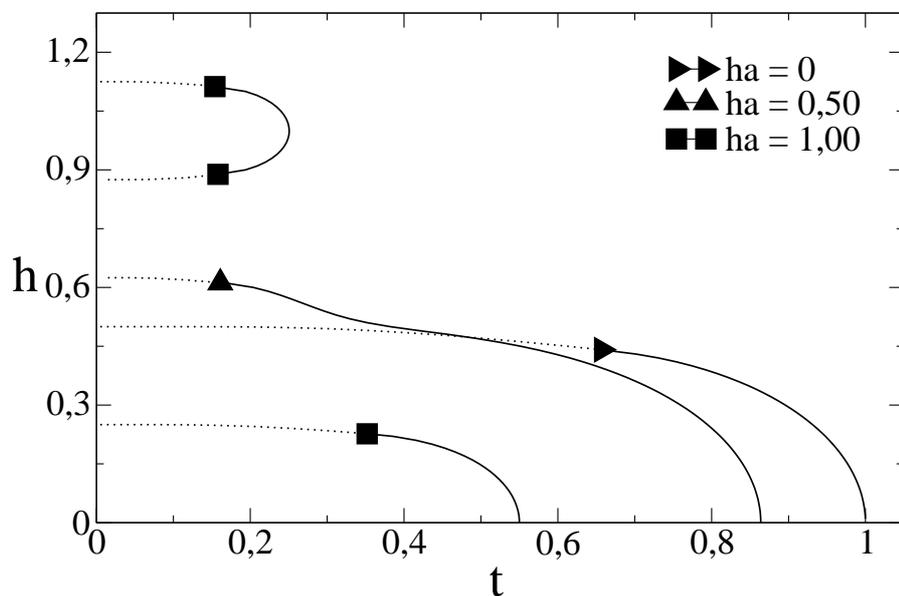


Figura 2.9: *Campo magnético h contra temperatura t para $p = 0,5$ e $\epsilon = 1$.*

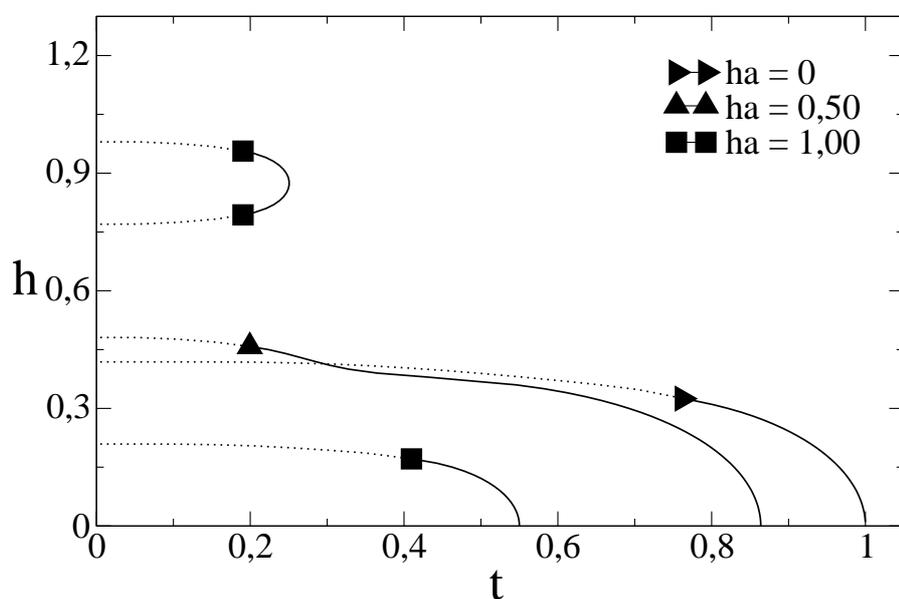


Figura 2.10: *Campo magnético h contra temperatura t para $p = 0,5$ e $\epsilon = 1,4$.*

Na Fig. 2.11 mostramos como o metamagneto sujeito a campo aleatório e campo uniforme se comporta segundo a variação de ϵ , pela análise da lo-

calização dos pontos tricríticos obtidos. Usamos dois casos particulares:

1. $p = 0,5$ com $h_A = 0$;
2. $p = 0,5$ com $h_A = 0,5$.

O primeiro caso particular ($p = 0,5$ com $h_A = 0$) corresponde ao caso $p = 0$ com $h_A = 0$. Essa informação pode ser confirmada fazendo uma análise da Eq. (2.89) em termos da probabilidade e do campo aleatório. O segundo caso particular apresenta um fato interessante: A partir de $\epsilon \approx 3$ a linha de segunda ordem sofre uma diminuição drástica e logo após $\epsilon = 5,7$ ela praticamente não existe. Nesse caso prevalece a linha de primeira ordem em todo intervalo de $[0; 0,86]$. Em relação ao limite inferior de ϵ encontramos $0,03$, com esse valor a linha de primeira ordem têm comprimento nulo e a linha de segunda ordem atinge o seu máximo.

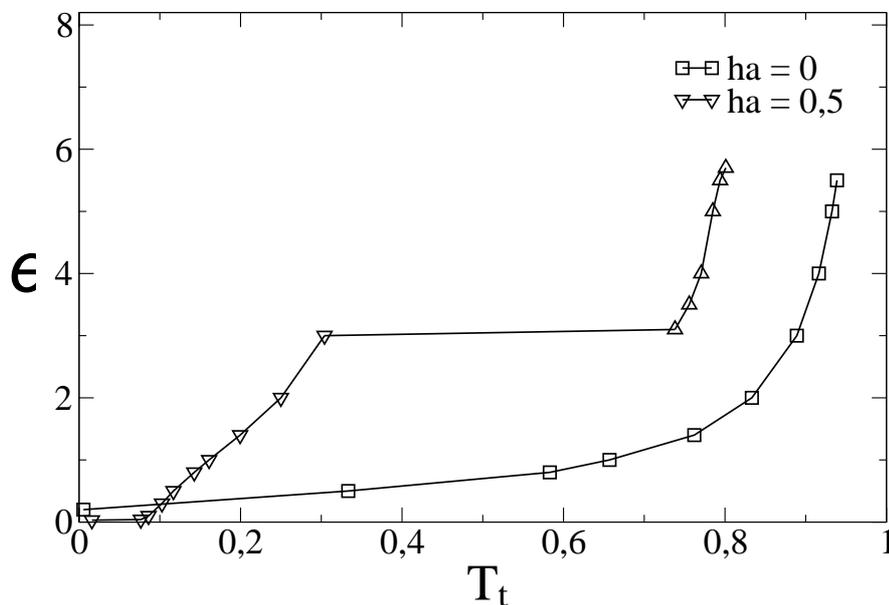


Figura 2.11: *Parâmetro ϵ versus temperatura tricrítica T_t para $p = 0,5$.*

2.5.3 Caso puro: $p = 1$

O caso puro é aquele em que o metamagneto não sente a ação do campo aleatório, ou seja, qualquer valor atribuído a h_A não modifica diagrama de fase (isso é válido quando não variamos o valor de ϵ). Também podemos dizer que esse caso corresponde ao caso particular $p = 0$ com $h_A = 0$. Vejamos então através da Fig. 2.12 o comportamento do metamagneto para vários valores de ϵ no caso puro.

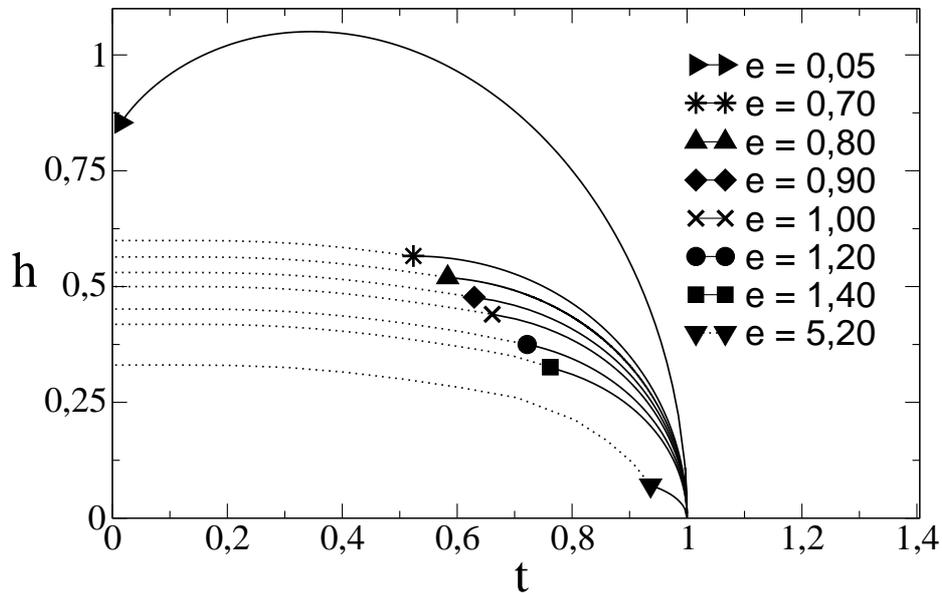


Figura 2.12: *Campo magnético h contra temperatura t para $p = 1$ (caso puro) e diversos valores de ϵ (graficamente representado pela letra e).*

O caso puro mostra claramente o que a Fig. 2.7 ($p = 0$ e $h_A = 0$) retrata: existe um ponto (para um determinado ϵ) em que a linha de primeira ou segunda ordem atinge seu comprimento máximo. A Fig. 2.12 mostra qual a localização aproximada desses dois pontos e mostra também uma posição diferente do ponto tricrítico para cada ϵ . Um detalhe interessante a ser observado é que independente do valor ϵ a linha de segunda ordem começa

sempre em $t = 1$, isso acontece porque o sistema é normalizado e só modifica a posição inicial dessa linha se houver uma variação de h_A com $p \neq 1$.

Estes são os nossos principais resultados em campo médio para o metamagneto.

Capítulo 3

Metamagneto na presença de Campos Magnéticos Uniforme e Aleatório - Simulações de Monte Carlo

Recentemente, campos magnéticos aleatórios têm sido considerado em sistemas metamagnetos [18, 20, 23]. Inicialmente, nesses sistemas apenas a competição entre o ordenamento ferromagnético e antiferromagnético despertava interesse, no entanto, a aplicação simultânea de um campo magnético uniforme e um campo aleatório caracteriza o aparecimento de um novo fenômeno e um maior comportamento crítico torna-se possível. A partir desse momento, passamos a investigar esse comportamento utilizando as simulações de Monte Carlo para uma análise completa do diagrama de fase do metamagneto.

3.1 Técnica do Modelo e da Simulação

O nosso modelo consiste de um sistema metamagneto submetido a ação de campos uniforme e aleatório, o qual será representado por duas sub-redes equivalentes e interpenetrantes, juntas contendo N spins. As interações entre spins primeiros vizinhos são antiferromagnéticas ($J < 0$) e entre spins segundos vizinhos são ferromagnéticas ($J > 0$).

O sistema a ser estudado é o metamagneto de Ising de spin $1/2$ descrito pela Hamiltoniana

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_1 S_i S_j - \sum_{\langle i,k \rangle} J_2 S_i S_j - \sum_i (h - h_i) S_i, \quad (3.1)$$

onde $S_i = \pm 1$, $J_1 < 0$, $J_2 \geq 0$, h é o campo magnético aplicado ao sistema e h_i representa o campo aleatório. Usaremos a distribuição de probabilidade bimodal para campo aleatório h_i dada por

$$P(h_i) = \frac{1}{2} [\delta(h_i - h_A) + \delta(h_i + h_A)], \quad (3.2)$$

onde h_A é a intensidade do campo aleatório que age sobre cada spin.

Para simular a rede do sistema metamagneto consideramos uma matriz composta de \mathbf{L} linhas e de \mathbf{L} colunas, onde cada elemento dessa matriz consiste de uma variável de spin S que pode assumir valores ± 1 . Usando a notação $A(i, j)$ para denotar o spin no sítio (i, j) , obtemos duas sub-redes interagentes e interpenetrantes da seguinte maneira: se $i + j$ for par, o spin pertence à sub-rede A, caso contrário, ele pertence à sub-rede B.

De acordo com o Algoritmo de Metropolis podemos escolher uma configuração aleatória inicial, portanto fazemos isto sorteando um estado inicial (± 1) para cada spin com auxílio de um gerador de números aleatórios. Pode-se usar um gerador computacional no programa estabelecido ou usar o próprio gerador que a linguagem FORTRAN disponibiliza.

O campo aleatório h_i é um campo local que age individualmente sobre cada spin com uma intensidade h_A cujo sentido é para cima ou para baixo. Esse campo também está associado a uma matriz de tamanho idêntico à matriz que representa o metamagneto, sendo assim, novos sorteios devem ser feitos para a criação da matriz dos campos aleatórios locais. Como a distribuição de probabilidade desses campos é bimodal, metade dos spins experimentam a um campo local $+h_A$ e a outra metade $-h_A$ distribuídos aleatoriamente.

Antes de aplicarmos efetivamente o Método de Monte Carlo devemos introduzir as condições de contorno, pois faremos sorteios para selecionar um spin da rede e calcular a energia da configuração antes e depois da inversão desse spin. É importante que os seus primeiros e segundos vizinhos estejam bem caracterizados para que não haja erros no momento da análise da inversão do estado desse spin, só assim podemos determinar com segurança as linhas de primeira e segunda ordem do metamagneto.

3.1.1 Determinação da Linha de Primeira Ordem

A linha de primeira ordem pode ser determinada fazendo a análise do comportamento da magnetização *staggered* m_S em função do campo magnético uniforme h . Para isso necessitamos obter a magnetização de cada sub-rede. Sendo m_A e m_B as respectivas magnetizações por spin das sub-redes A e B definidas como

$$m_A = \left[\frac{1}{N_1} \left\langle \sum_{i \in A} \sigma_i \right\rangle \right]_{h_A} \quad (3.3)$$

e

$$m_B = \left[\frac{1}{N_2} \left\langle \sum_{i \in B} \sigma_i \right\rangle \right]_{h_A}, \quad (3.4)$$

então podemos obter a magnetização staggered da seguinte maneira:

$$m_S = \frac{m_A - m_B}{2}, \quad (3.5)$$

onde N_1 e N_2 indicam respectivamente o número de spins das sub-redes A e B.

O nosso sistema tem a princípio 4 variáveis (t, h, h_A, ϵ) , onde $\epsilon = J_2/J_1$. O que efetivamente fazemos é manter constante as duas últimas para obtermos o diagrama $h \times t$. Se considerarmos que o conjunto de pontos desse diagrama contenha os pares $(t_1, h_1), (t_2, h_2), \dots, (t_n, h_n)$, então para determinar o valor das coordenadas de cada par, procedemos da seguinte maneira: para a temperatura t_1 , por exemplo, construímos o diagrama $m_S \times h$ (semelhante a Fig. 3.1) verificando se existe um valor de h a partir do qual a magnetização *staggered* vai instantaneamente a zero [23]. Se isso acontecer esse valor será a coordenada h_1 , portanto temos aí o primeiro ponto do diagrama de fase $h \times t$. Em seguida aplicamos o mesmo processo para t_2, t_3 e assim sucessivamente até obtermos o n -ésimo ponto desejado.

A Fig. 3.1 mostra duas curvas no plano $m_S \times h$ cujo campo aleatório h_A é nulo e $\epsilon = 1$. Uma delas, $t = 1,75$, nos revela um ponto da linha de primeira ordem (de coordenadas $(3,9; 1,75)$), pois a partir de $h = 3,9$ a magnetização staggered torna-se praticamente nula. Entretanto, não podemos dizer o mesmo em relação a outra curva, pois para $t = 3$ o metamagneto exibe uma magnetização staggered que cai suavemente com o aumento do campo externo h .

Toda informação contida na Fig. 3.1 somente é obtida quando o sistema atinge o equilíbrio, assim todo o processo usado no modelo de Ising 2D também é aplicado nesse modelo, ou seja, devemos efetuar N sorteios de spins para que 1 passo de Monte Carlo seja estabelecido. Em cada sorteio devemos analisar a energia da configuração antes e depois da inversão

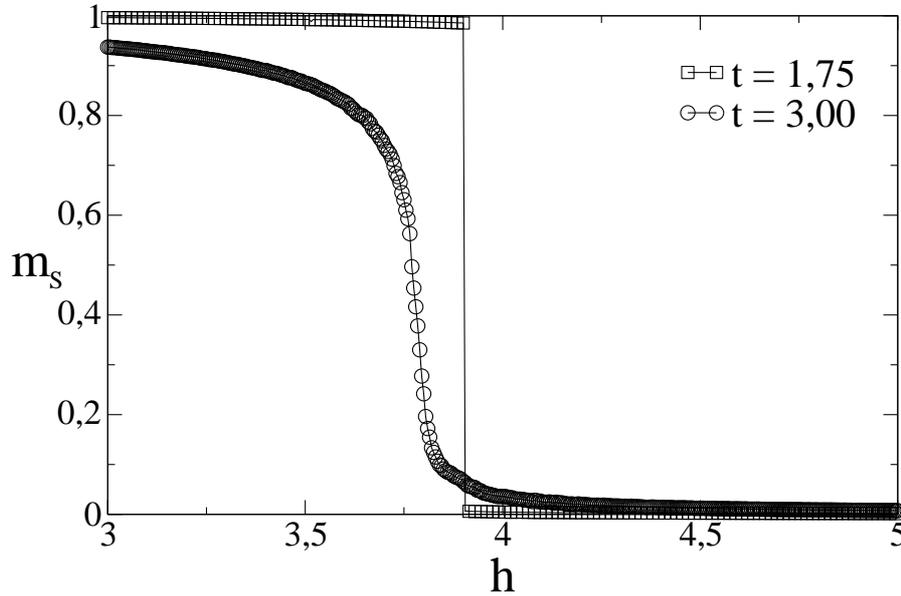


Figura 3.1: Magnetização staggered m_S em função do campo magnético h , para $h_A = 0$ e $\epsilon = 1$ com valores $t = 1,75$ e $t = 3$ para a temperatura.

do spin. Se a variação da energia $\Delta\mathcal{H}$ for negativa, aceitamos a inversão, caso contrário calculamos a probabilidade $w = \exp(-\Delta\mathcal{H}/t)$ e geramos um número aleatório \mathbf{r} entre zero e 1. Há uma segunda chance para aceitarmos essa inversão, isso ocorrerá se $w \geq \mathbf{r}$.

Nosso sistema atinge o equilíbrio após 2×10^5 passos de Monte Carlo. Em cada passo, a partir deste, colhemos uma amostra (m_S) para adicioná-la as magnetizações staggered dos passos seguintes, em seguida efetuamos uma média por passo de Monte Carlo obtendo um valor m_{S0} . Essa magnetização é obtida para um determinado valor campo magnético (h_0), portanto o par $(h_0; m_{S0})$ faz parte do diagrama $m_S \times h$. Daí por diante, consideramos novos valores de h e determinamos novos valores de m_S até que o diagrama esteja completo. Ao final, obtemos através desse diagrama, apenas 1 ponto da linha de primeira ordem, portanto o processo deve ser repetido pelo menos k vezes

para que se possa obter k pontos dessa linha.

3.1.2 Determinação da Linha de Segunda Ordem

Para obtermos os pontos que formam a linha de segunda ordem usamos o cumulante de Binder de quarta-ordem definido por

$$U_L = 1 - \frac{[\langle m_S^4 \rangle]_{h_A}}{3 [\langle m_S^2 \rangle^2]_{h_A}}, \quad (3.6)$$

onde $[\dots]_{h_A}$ denota a média sobre as amostras e $\langle \dots \rangle$ denota a média térmica. Sendo assim, consideramos duas ou mais redes de comprimentos distintos e determinamos para cada uma delas a curva U_L x t cujo valor de h fixado chamaremos de h_0 . Plotamos essas curvas num mesmo diagrama (como o da Fig. 3.2) e verificamos se há um ponto de cruzamento dos cumulantes, caso isso ocorra anotamos o valor da temperatura t_0 no ponto de intersecção das curvas, ficando caracterizado $P_0(t_0; h_0)$ como o primeiro ponto da linha de segunda ordem [23] do diagrama de fases h x t .

Nesse modelo, as informações contidas em diagramas U_L x t são obtidas somente após o estabelecimento do equilíbrio e a análise feita para o primeiro ponto será estendida para outros pontos através da variação do campo externo h , assim podemos obter toda linha de segunda ordem. Vejamos então através da Fig. 3.2 a variação do cumulante de Binder de quarta ordem em função da temperatura, com $h_A = 0$, $\epsilon = 0,7$, $h = 0$ e comprimento L da rede variando de 16 à 96. Observe que para $h = 0$ encontramos $t_0 = 4,41$ como a abscissa do ponto de cruzamento dos cumulantes, sendo assim o par ordenado $(4,41; 0)$ pertence a linha de segunda ordem. Após coletarmos todos os pontos dessa linha e também da linha de primeira ordem, notamos que uma delas começa no limite em que a outra termina, a esse limite associamos um ponto designado como *ponto tricrítico*.

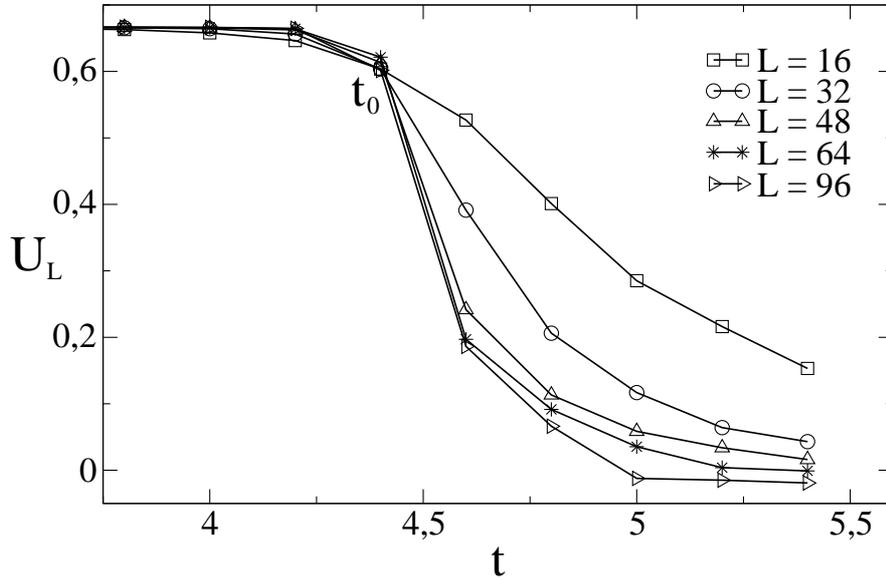


Figura 3.2: *Cumulante de Binder de quarta ordem U_L em função da temperatura t , para vários valores de L com campo aleatório $h_A = 0$, $\epsilon = 0,7$ e $h = 0$.*

3.2 Resultados e Discussões

Temos nas Figs. 3.3, 3.4 e 3.5 o diagrama de fases do metamagneto no plano do campo uniforme h versus temperatura t , para campos aleatórios $h_A = 0$ e $h_A = 0,5$. Os diagramas mostram linhas de transição de fase de primeira ordem (linhas pontilhadas), linhas de segunda ordem (linhas contínuas) e os pontos tricríticos obtidos (círculo escuro). A Fig. 3.4 mostra um diagrama obtido com $\epsilon = 1$ cujas coordenadas dos pontos tricríticos concordam com os da referência [23], pois para $h_A = 0$ encontramos $t = 2,5$ e $h = 3,9$, e para $h_A = 0,5$ as coordenadas obtidas são $t = 2,4$ e $h = 3,89$. No caso da Fig. 3.3, $\epsilon = 0,7$, encontramos para $h_A = 0$ o ponto tricrítico representado pelo par ordenado $(1,6; 3,95)$, e para $h_A = 0,5$ obtivemos $(1,5; 3,94)$. Na Fig. 3.5, $\epsilon = 1,8$, encontramos para $h_A = 0$ o par

ordenado $(4, 15; 3, 88)$, e para $h_A = 0,5$ temos o par $(3, 95; 3, 87)$ indicando as coordenadas do ponto tricrítico obtido.

Em geral, a presente simulação de Monte Carlo para um modelo metamagneto submetido a ação de campo uniforme e de campo aleatório mostra diagramas de fase $h \times t$ com as seguintes características:

- O aumento no valor do parâmetro ϵ determina um aumento no comprimento da linha de primeira ordem.
- Para cada ϵ estabelecido encontramos um ponto tricrítico (TCP) diferente, de modo que a diminuição no valor desse parâmetro implica num deslocamento de TCP rumo ao eixo h .

Embora ainda não determinamos os limites de existência das linhas de primeira e segunda ordem segundo Monte Carlo, temos informações suficientes para estabelecermos comparações entre essa técnica e as aproximações de campo médio, faremos isso no capítulo seguinte.

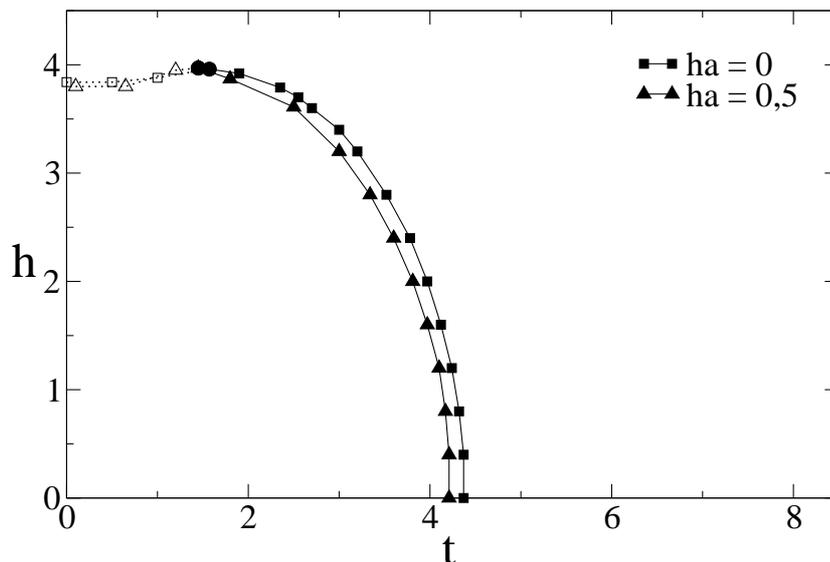


Figura 3.3: *Campo magnético h versus temperatura t , para $\epsilon = 0,7$.*

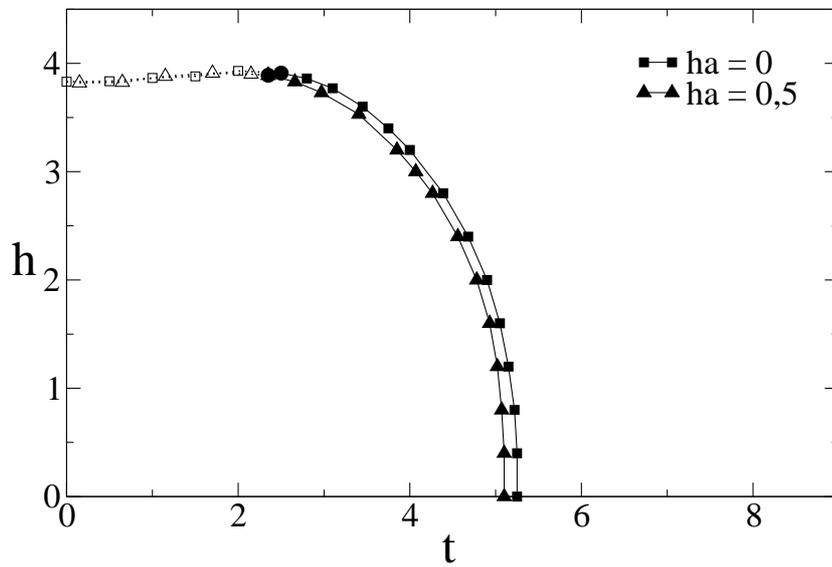


Figura 3.4: *Campo magnético h versus temperatura t , para $\epsilon = 1$.*

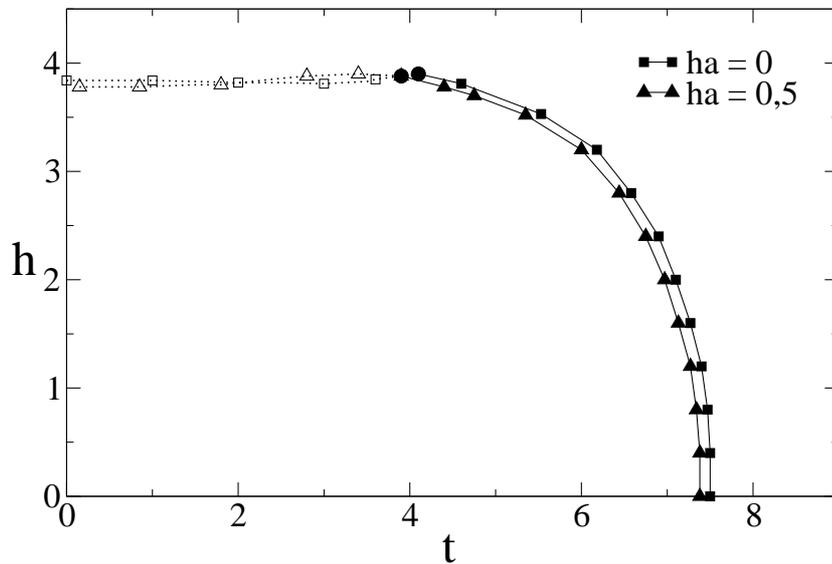


Figura 3.5: *Campo magnético h versus temperatura t , para $\epsilon = 1,8$.*

Capítulo 4

Conclusões

Para verificarmos os pontos positivos dos dois métodos estudados nesse trabalho (Campo médio e Monte Carlo), vamos fazer algumas comparações interessantes. No caso particular “ $p = 0$, $h_A = 0$ e $\epsilon = 0,8$ ” das aproximações de Campo Médio, obtemos um diagrama de fase (Fig. 4.1) idêntico ao caso $\epsilon = 0,8$ da Ref. [25], mostrando a existência de um ponto tricrítico cujas coordenadas $(0,5834; 0,5967)$, linhas de primeira ordem (pontilhadas) e de segunda ordem (contínuas). A referência citada também utiliza a expansão de Landau para um modelo matamagneto fazendo aproximações de Campo Médio, porém em sua abordagem é considerado um modelo puro, já no nosso caso temos o modelo de Ising em campo aleatório, por isso consideramos para efeitos comparativos, $p = 0$ e $h_A = 0$.

4.1 Principais Resultados de Campo Médio

Nesta seção fazemos um resumo dos principais resultados obtidos segundo as aproximações de Campo Médio. Inicialmente, consideramos um sistema matamagneto idealizado por uma rede cúbica simples ou ainda por

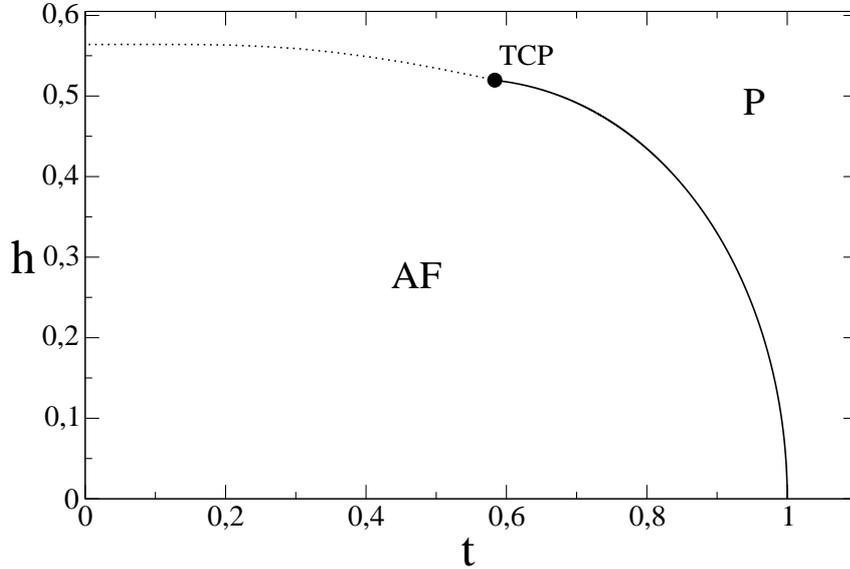


Figura 4.1: *Campo magnético h contra temperatura t para $p = 0$, $h_A = 0$ e $\epsilon = 1,4$. AF indica a fase antiferromagnética, P a fase paramagnética e TCP o ponto tricrítico.*

uma rede quadrada. Usamos a Hamiltoniana

$$\mathcal{H} = J \sum_{nn} S_i S_j - J' \sum_{nnn} S_i S_j - \sum_i (H + H_i) S_i, \quad (4.1)$$

onde J e J' acoplam respectivamente os spins primeiros vizinhos antiferromagneticamente e os segundos vizinhos ferromagneticamente. A competição entre J e J' existe e favorece o alinhamento antiparalelo dos spins de sub-redes adjacentes e a introdução do campo aleatório aumenta ainda mais essa competição.

O campo aleatório é governado pela distribuição trimodal

$$P(h_i) = p\delta(h_i) + \frac{1}{2}(1-p) [\delta(h_i - h_A) + \delta(h_i + h_A)], \quad (4.2)$$

de modo que para obtermos o efeito do campo aleatório no diagrama de fase,

calculamos a média sobre a desordem, resultando em

$$\begin{aligned}
T_K &= p \tanh^K \frac{1}{t} (h + \sigma M_0) \\
&+ \frac{1}{2} (1 - p) \tanh^K \frac{1}{t} (h + h_A + \sigma M_0) \\
&+ \frac{1}{2} (1 - p) \tanh^K \frac{1}{t} (h - h_A + \sigma M_0) .
\end{aligned} \tag{4.3}$$

Fazendo uma análise dos coeficientes de Landau a , b e c , obtemos

1. as linhas de segunda ordem, que implica em $a = 0$ e $b > 0$.
2. os pontos tricríticos, com $a = 0$, $b = 0$ e $c > 0$.

Também obtemos linhas de transição de fase de primeira ordem utilizando a energia livre.

Os principais resultados, mostrados nas figs. 4.2 e 4.3, apresentam as seguintes características:

- Aumentando-se o valor do parâmetro ϵ , nota-se um aumento no comprimento da linha de primeira ordem e uma diminuição da linha de segunda ordem.
- Para cada ϵ estabelecido encontramos um ponto tricrítico (TCP) diferente, de modo que a diminuição no valor desse parâmetro implica num deslocamento de TCP rumo ao eixo h .
- Para um determinado valor de ϵ , o aumento da intensidade do campo aleatório provoca o aparecimento do fenômeno denominado reentrância, isso ocorre em baixas temperaturas e campos suficientemente elevados, de modo que a partir de um certo valor do campo magnético h o fenômeno deixa de estar presente no material.

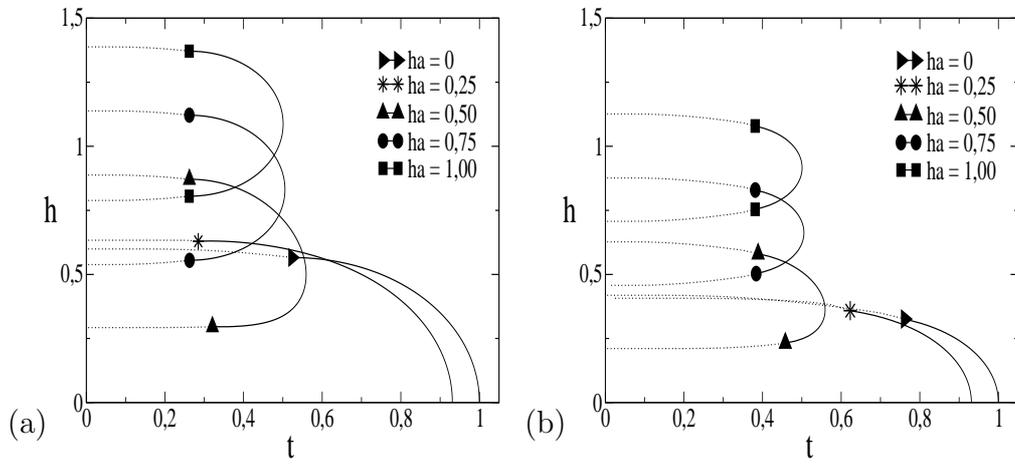


Figura 4.2: *Campo magnético versus temperatura para $p = 0$, $\epsilon = 0,7(a)$, e $\epsilon = 1,4(b)$.*

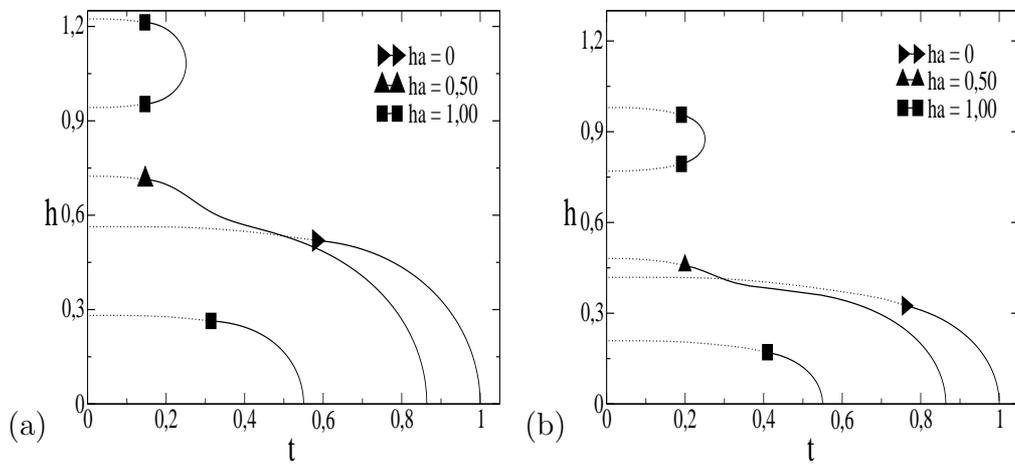


Figura 4.3: *Campo magnético versus temperatura para $p = 0,5$, $\epsilon = 0,8(a)$, e $\epsilon = 1,4(b)$.*

4.2 Principais resultados de Monte Carlo

No capítulo anterior, obtemos linhas de transição de fase de primeira e segunda ordem e pontos tricríticos para vários valores de ϵ escolhidos. Fizemos também uma abordagem mostrando o procedimento utilizado para determinar as linhas de transição de fase. No entanto, existem outros recursos que podem ser usados para se obter a linha de segunda ordem. Um exemplo é o calor específico, pois o seu valor máximo determina a temperatura crítica obtida quando é aplicado um campo externo ao metamagneto.

Para podermos efetuar uma comparação entre os dois métodos discutidos nesta dissertação, consideramos o caso particular $p = 0$ da distribuição de probabilidade trimodal para o campo aleatório usada em campo médio, que equivale a distribuição bimodal usada em Monte Carlo..

Destacamos a seguir os principais resultados obtidos pela aplicação do Método de Monte Carlo.

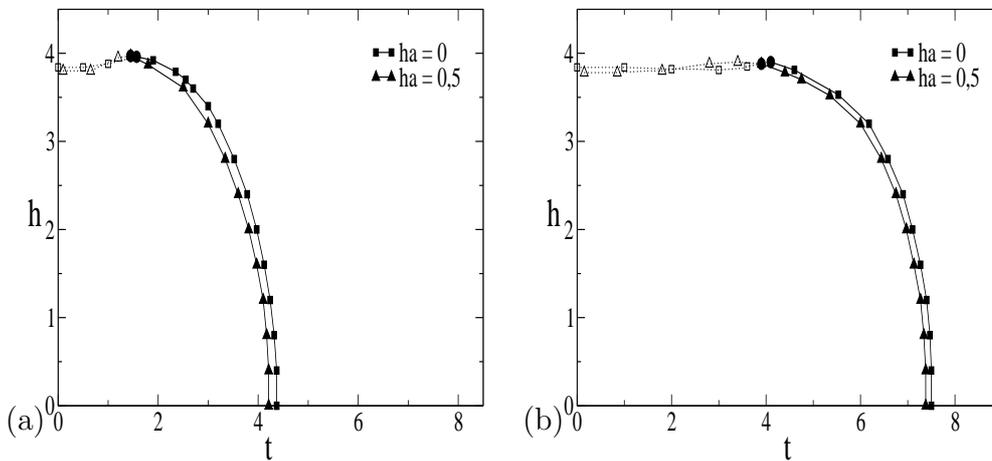


Figura 4.4: *Campo magnético versus temperatura*, $\epsilon = 0,7(a)$, $\epsilon = 1,8(b)$.

O comportamento do metamagneto para diferentes valores de ϵ não

muda muito, no entanto, se diminuirmos ϵ drasticamente a tendência é que não haja mais linhas de primeira ordem, pois as interações ferromagnéticas tornam-se praticamente nulas.

4.3 Comparação entre as Aproximações de Campo Médio e o Método de Monte Carlo

Entre as aproximações de Campo Médio e o Método de Monte Carlo podem ser feitas algumas comparações qualitativas:

- Os dois métodos indicam a existência de pontos tricríticos, porém com diferentes coordenadas quando o parâmetro ϵ sofre variações.
- Nas situações aqui estudadas, mostramos que tanto nas aproximações de Campo Médio quanto no Método de Monte Carlo, se ϵ tende a zero, a temperatura tricrítica também tende a zero, o que leva a predominância da linha de segunda ordem no diagrama de fase do metamagneto, separando a fase antiferromagnética da fase paramagnética. Na situação extrema, $\epsilon = 0$ cuja probabilidade é bimodal, concluímos que o material é antiferromagnético simples, ou seja, não temos interações ferromagnéticas atuando no sistema e nem linhas de primeira ordem. A prova disso são os diagramas mostrados nas Figs. 4.5 e 4.6.

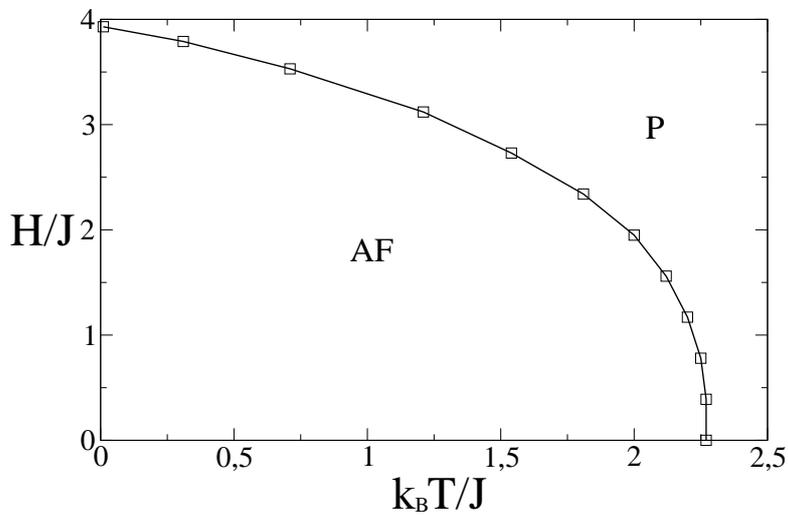


Figura 4.5: Diagrama de fases do metamagneto para $h_A = 0$ e $\epsilon = 0$, com probabilidade bimodal para a distribuição do campo aleatório segundo o Método de Monte Carlo.

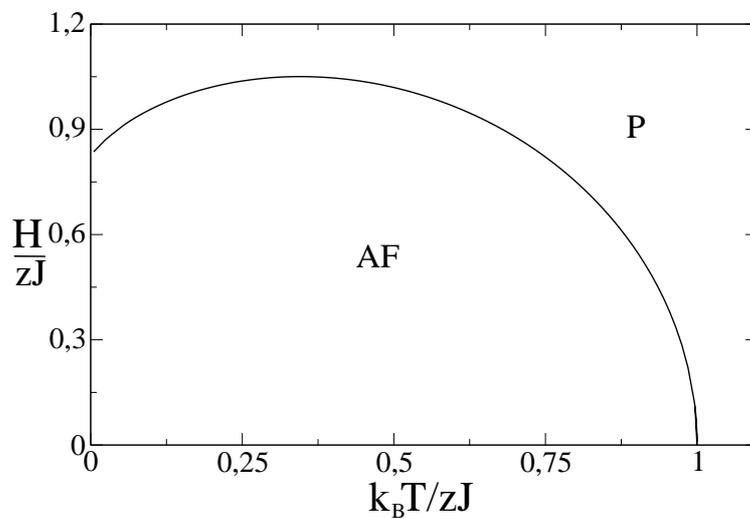


Figura 4.6: Diagrama de fases do metamagneto para $h_A = 0$ e $\epsilon = 0$, com probabilidade bimodal para a distribuição do campo aleatório segundo as aproximações de campo médio.

Em nosso estudo notamos que o tamanho da rede e até seu formato (cúbica ou quadrada) é irrelevante segundo as aproximações de Campo Médio, pois embutimos as interações ferromagnéticas, as antiferromagnéticas e a coordenação da rede no parâmetro ϵ . Não podemos dizer o mesmo em relação Método de Monte Carlo pois os seus resultados mostram-se mais precisos para redes maiores.

Vimos neste trabalho que as aproximações de Campo médio e o Método de Monte Carlo são instrumentos importantes no estudo de transições de fase contínuas e descontínuas. Quantitativamente, notamos uma certa discrepância entre os resultados obtidos pelas duas técnicas, por outro lado vemos que qualitativamente os pontos abordados até então mostram-se de acordo.

Estamos seguros em relação aos resultados obtidos, procuramos inicialmente reproduzir os resultados dos outros autores. O Campo Médio, por exemplo, foi utilizado por Salinas e por Weizenmamm, e nós conseguimos acompanhar toda a construção do modelo metamagneto reproduzindo-o para $\epsilon = 1$. Em seguida, com uma roupagem própria construímos nosso modelo implementando outros valores de ϵ e novas probabilidades. O mesmo foi feito em relação a Monte Carlo, onde tomamos como base a referência [23].

Seria interessante usar outras distribuições de probabilidades nas aproximações de Campo Médio quando variamos ϵ . No caso do Método de Monte Carlo, o fato do tempo ser o maior empecílio para a obtenção dos resultados deixa a porta aberta para a realização de novas simulações considerando outros valores de ϵ , para finalmente serem feitas novas comparações com outras técnicas, tais como a aproximação de pares e o grupo de Renormalização.

Apêndice A

Programa do Modelo de Ising Bidimensional

```
XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX
program ising2D
implicit double precision (a-h,m-z)
integer ip(128),im(128),EP,EA,mp,n
double precision A(128,128)
XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX
Write(*,*)'entre com o valor de L par (tamanho da rede)'
read(*,*)L
XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX
do 400 T=0.6,5.,0.1
  sms = 0.
  sms2 = 0.
  ses = 0.
  ses2 = 0.
XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX
```

```

do 10 i=1,L
do 10 j=1,L
if(rand()).le.0.5) then
A(i,j)= 1.0
else
A(i,j)= -1.0
end if
10 continue
XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX
do 20 i=1,L
ip(i)=i+1
im(i)=i-1
20 continue
ip(L)=1
im(1)=L
XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX
istart=20000
imcsmax=30000
do 300 imcs=1,imcsmax
XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX
do 30 i=1, L*L
r=rand()
j=1+r*L*0.9999
r=rand()
k=1+r*L*0.9999
s=A(j,k)
EA=-s*(A(j,im(k))+A(im(j),k)+A(ip(j),k)+A(j,ip(k)))

```

```

de=-2.*EA
if(de.le.0) then
A(j,k)=-s
else
w=exp(-de/T)
r=rand()
if (w.ge.r) then
A(j,k)=-s
endif
endif
30 continue

XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX
if (imcs.le.istart) GOTO 300
mp=0.
do 40 i=1, L
do 40 j=1, L
mp = mp + A(i, j)
40 continue
ms=abs (mp)
XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX
EP=0.
do 50 i=1, L
do 50 j=1, L
EP = EP - A(i, j) *( A(i, ip(j)) + A(ip(i), j) )
50 continue
es=abs(EP)/float(L*L)
XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX

```

```

XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX
sms = sms + ms
ms2 = ms*ms
sms2 = sms2 + ms2
ses = ses + es
es2 = es*es
ses2 = ses2 + es2
300 continue
XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX
n = imcsmax - istart
mms = sms / float (n)
mms2 = sms2 / float (n)
mes = ses / float (n)
mes2 = ses2 / float (n)
xv = (abs (mms2 - mms*mms)) / (T*L*L)
cv = (abs (mes2 - mes*mes)) / (T*T*L*L)
XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX
write(9,*)T,xv
write(10,*)T,cv
400 continue
stop
end
XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX

```

Ao final temos calculado a susceptibilidade (xv) e o calor específico (cv) para cada temperatura do Modelo de Ising 2D.

Referências Bibliográficas

- [1] H.E. Stanley, *Introdution to Phase Transitions and Critical Phenomena*, (Oxford University Press, New York) (1971).
- [2] D.P. Landau, *Chinese Jornal of physics* **15**, 116 (1977).
- [3] E. Ising, *Zeitschrift für Physik* **31**, 253 (1925).
- [4] L. Onsager, *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944).
- [5] E. Stryjewski e N. Giordano, *Adv. Phys.* **26**, 487 (1977).
- [6] D.P. Landau, B.E. Keen, B. Schneider e W.P. Wolf, *Phys. Rev. B* **3**, 2310 (1970).
- [7] J.M. Kincaid e E. Cohen, *Phys. Rep.* **22c**, 1 (1975).
- [8] R.B. Griffiths, *Phys. Rev.* **24**, 715 (1970).
- [9] R.J. Birgeneau e A.N. Berker, *Phys. Rev. B.* **26**, 3751 (1982).
- [10] S.R.A. Salinas, *Introdução a Física Estatística*, (Editora da Universidade de São Paulo, São Paulo) (1999).
- [11] R.M.V. de Souza, *Dissertação de Mestrado*, (Universidade Federal de Mato Grosso, Cuiabá) (2007).

- [12] H.E. Stanley e T.A. Kaplan, *Phys. Rev.* **16**, 981 (1966).
- [13] L. Sergio e A. de Queiroz, *Revista Brasileira de Ensino de Física* **22**, 339 (2000).
- [14] M.J. de Oliveira, *Termodinâmica*, (Editora Livraria da Física, São Paulo) (2005).
- [15] L. Néel, *Ann. Phys.* **18**, 5 (1932).
- [16] L.D. Landau, *Phys. Z. Sowjetunion* **4**, 675 (1933).
- [17] J. Becquerel e J. van den Handel, *J. Phys. Radium* **10**, 10 (1939).
- [18] A. Weizenmann, M. Godoy, A.S. de Arruda, D.F. de Albuquerque e N.O. Moreno, *Physica B* **398**, 297 (2007).
- [19] A. Weizenmann, *Dissertação de Mestrado*, (Universidade Federal do Ceará, Fortaleza) (2005).
- [20] C.Y.S. Galam e S. Salinas, *Phys. Rev. B* **57**, 8370 (1998).
- [21] Y. Shapin, *Recent Progress in Random Magnets*, (World Scientific, Singapore) (1992).
- [22] M.G. et. al., *Phys. Rev. B* **53**, 6362 (1996).
- [23] A. Weizenmann, M. Godoy, e A.S. de Arruda, *Brazilian of Physics* **36**, 645 (2006).
- [24] K. Binder e D.W. Hermann, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics. An Introduction* 3rd ed. (Springer, Berlin, 1997).
- [25] A.F.S. Moreira, W. Figueiredo e V.B. Henriques, *Eur. Phys. J. B* **27**, 155 (2002).

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](#)