

JOSÉ ERINALDO DA FONSÊCA

**MODELO CONTÍNUO PARA GELOS DE SPINS
BIDIMENSIONAIS**

Orientador: André Luiz Mota

Dissertação apresentada à Universidade Federal de São João Del Rei - UFSJ, como parte das exigências do programa de Pós Graduação Multidisciplinar em Física, Química e Neurociência para a obtenção do título de Mestre em Física.

Agosto de 2010.

Livros Grátis

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

Milhares de livros grátis para download.

À Deus que é Pai e ama infinitamente.

“Sou reflexo do teu amor e espelho da tua beleza, Senhor. Nem as limitações ou minhas imperfeições, me impedirão de contemplar a tua face em mim.” *Toca de Assis.*

“Fui me confessar ao mar. E o que ele disse? Nada.” *Lygia Fagundes Teles.*

Agradecimentos

Graças, Pai, hoje venho te dar e prostrar-me aos teus pés. Somente para agradecer-te, somente para dar-te graças, pois não encontro outras palavras em meu ser.

Agradeço imensamente à toda minha família, em especial aos meus pais (Gilsa e Manoel) que são a essência da minha vida. Aos meus irmãos (Adalberto, Eder e Telma) que sempre acreditaram e apoiaram os meus sonhos. À minha cunhada (Débora) e a minha sobrinha (Raphaela) tão importante nas nossas vidas. Às minhas primas (Danusa e Idelma) e ao meu primo (Leivi) por me fazerem sorrir a cada momento juntos.

Ao André deixo a minha enorme gratidão. Nesse tempo de trabalho pude perceber o profissionalismo, o caráter, a dedicação e a simplicidade que o faz ser esse grande ser humano. A sua orientação e as suas aulas de física me fazem desejar e buscar ser esse profissional equilibrado que você é. Obrigado por tudo que me foi ensinado, pelo apoio que me foi concedido e pela experiência que eu pude vivenciar e que levarei por toda a minha vida. Valeu!!!!

À minha amiga Cida e toda sua família o meu muito obrigado. Acreditaram em mim e me permitiram ser parte de sua família. Cida, obrigado pela acolhida e por me ensinar em cada conversa valiosa que você me proporciona.

Aos professores do DCNAT meu agradecimento, principalmente ao Zeca (grande mestre) e o Samuel pela sabedoria que cada um me transmitiu.

Agradeço ao Lucas pela ajuda no latex e a generosidade em fazer ou consertar muitas das figuras dessa dissertação.

À todos os meus amigos meu imenso obrigado. Aos amigos do departamento, valeu pelos estudos e pelas conversas na rampa e no café (ofício de

cada dia!!!!). Aos amigos dos grupos de adoração, obrigado por cada oração, por cada palavra e pelo consolo quando necessário. Seremos sempre amigos pela fé. Enfim, a todos os meus amigos que aqui conquistei tenho a plena certeza que levarei em mim um pouco de cada.

Aos amigos que deixei em outros lugares, mas que sempre estiveram presente comigo me encorajando a seguir adiante, obrigado pelas conversas no *msn*, pelos recados no *orkut*, pelas mensagens nos *emails* e por se fazerem sempre perto de mim mesmo estando fisicamente distantes. Valeu pela amizade!!!!

Ao grupo de pesquisa, agradeço a cada um pela oportunidade de aprender um pouco mais.

Enfim, obrigado a todos que de uma certa forma participaram e estiveram próximos de mim nesse processo que foi, é e sempre será tão importante na minha vida. Tenho plena consciência que todos contribuíram para essa vitória...OBRIGADO!!!!

“NA EFEMERIDADE DA VIDA, VIDA DE UM TEMPO FUGAZ,
TALVEZ DESCUBRAMOS O OFÍCIO DE ENCONTRAR O
ESSENCIAL. E O ESSENCIAL NOS DESAFIA A VIVER O DIA
INTENSAMENTE.” *Gabriel Chalita e Fabio de Melo*

Conteúdo

Resumo	viii
Abstract	ix
1 Introdução	1
2 Gelos de Spin	12
2.1 Descoberta do Gelo de Spin	12
2.2 Entropia residual do $Dy_2Ti_2O_7$ e $Ho_2Ti_2O_7$	16
2.3 Simulações de Monte Carlo e origem da regra do gelo	17
2.4 Gelos de Spin tridimensionais	19
3 Análogo Unidimensional para Gelos de Spins	26
4 Gelos de Spins Bidimensionais	32
4.1 Modelo Discreto para Gelos de Spins Bidimensionais	32
4.2 Modelo Contínuo para Gelos de Spins Bidimensionais	35
5 Conclusões	68
A Método do Gradiente	71
B Regra de Simpson	74
B.1 Fórmula Simples	75
B.2 Fórmula Composta	76

Resumo

José Erinaldo da Fonsêca, Universidade Federal de São João Del Rei, Agosto de 2010.
Modelo Contínuo para Gelos de Spins Bidimensionais. Orientador: André Luiz Mota.

Gelos de spins são materiais que possuem o estado fundamental frustrado. Estes materiais foram descobertos em um passado bem recente e mais recente ainda é a observação da formação de monopólos magnéticos emergentes em sistemas de gelos de spins tridimensionais e gelos de spins bidimensionais fabricados artificialmente. Neste trabalho, desenvolvemos um modelo de spin contínuo com interação local e estado fundamental frustrado para representar o gelo de spin bidimensional. Os estados do sistema contínuo podem ser mapeados sobre uma rede discreta, representando o sistema de gelo de spin bidimensional. Estados excitados são construídos através da implementação contínua de estados metaestáveis representados pela inversão do spin sobre o vértice da rede discreta de spin. Os estados excitados são localizados, e o comprimento e a energia da excitação podem ser computados através da minimização do hamiltoniano do sistema. Também foi estudado a emergência de monopólos magnéticos e o comportamento da energia total do sistema com a função de separação espacial dos monopólos.

Abstract

José Erinaldo da Fonsêca, Universidade Federal de São João Del Rei, Agosto de 2010.
Modelo Contínuo para Gelos de Spins Bidimensionais. Orientador: André Luiz Mota.

Spin ices are materials whose possess a frustrated ground state. Those materials were discovered only in a very recent past. It is also recent the observation of emergent magnetic monopoles formation on three and artificial two-dimensional spin ice systems. In this work, we develop continuous spin models with local interaction with frustrated ground states to represent the two-dimensional spin ice. The states of the continuous system can be mapped onto a discrete lattice, representing the two-dimensional spin ice system. Excited states are constructed by implementing continuous meta-stable states that represent spin flipping on the vertexes of the discrete lattice. The excited states are localized, and the excitation length can be computed by the minimization of the system Hamiltonian. We also study the emerging of magnetic monopoles and the behavior of the total energy of the system as a function of the spatial separation of the monopoles.

Capítulo 1

Introdução

Gelos de spin são materiais cujo comportamento dos momentos magnéticos no material é análogo ao comportamento dos prótons no gelo, exibindo a mesma entropia residual à temperatura zero que a observada no gelo. Apesar dos spins dos íons magnéticos desses materiais apresentarem acoplamento ferromagnético entre si, o que significa que existe uma tendência ao alinhamento desses spins, o estado fundamental do sistema é frustrado, ou seja, desordenado, com magnetização média nula. Materiais com esta característica foram descobertos apenas muito recentemente[1]. Mais recentemente, gelos de spins bidimensionais[2] artificiais foram construídos a partir de ilhas ferromagnéticas em escala nanométrica, e finalmente, em 2008, mostrou-se a presença de monopólos magnéticos emergentes em gelos de spin[3]. Ainda em 2008, Mól e colaboradores[4] sugeriram o estudo dos monopólos magnéticos em gelos de spins bidimensionais.

Neste projeto, propomos a construção de um modelo hamiltoniano contínuo para a descrição de gelos de spin bidimensionais, e analisamos o surgimento de monopólos magnéticos e o comportamento do sistema em função da separação entre estes monopólos. Até hoje não há observação experimental da existência de monopólos magnéticos como partículas elementares. Entretanto, foram realizadas a previsão e observação de monopólos magnéticos como excitações em sólidos magnéticos. Monopólos magnéticos podem existir como quasi-partículas emergentes em física da matéria con-

1. Introdução

densada, apesar de não serem observados como partículas elementares.

As partículas elementares do nosso universo são divididas em Férmions e Bósons e elas podem ser classificadas da forma mostrada nas figuras (1.1) e (1.2).

Férmions					
Leptons $spin = 1/2$			Quarks $spin = 1/2$		
Flavor	Mass GeV/c^2	Electric charge	Flavor	Approx. Mass GeV/c^2	Electric charge
ν_l lightest neutrino*	$(0-0.13)\times 10^{-9}$	0	u up	0.002	2/3
e electron	0.000511	-1	d down	0.005	-1/3
ν_μ middle neutrino*	$(0.009-0.13)\times 10^{-9}$	0	c charm	1.3	2/3
μ muon	0.106	-1	s strange	0.1	-1/3
ν_τ heaviest neutrino*	$(0.04-0.14)\times 10^{-9}$	0	t top	173	2/3
\tau tau	1.777	-1	b bottom	4.2	-1/3

Figura 1.1: Partículas fermiônicas[5].

Os léptons são partículas que interagem por meio das interações eletromagnética e fraca. Há três famílias de léptons, cada uma composta por um lépton carregado que interage eletromagneticamente e fracamente, e por um neutrino que interage, apenas fracamente. Já os quarks são partículas que interagem por meio das interações eletromagnética, fraca e forte, e possuem carga elétrica fracionária ($+2/3$ e $-1/3$), além das “cargas de cor” relativas a interação forte. Eles formam os hádrons (três quarks ou um quark e um antiquark) e permanecem confinados dentro deles, não sendo observados em estado livres.

Os bósons são as partículas mediadoras. Para a interação eletromagnética temos o fóton (γ) que são partículas sem massa ou carga, e são responsáveis pela transmissão da interação entre as partículas eletricamente carregadas. A interação gravitacional atua sobre todas as partículas e seria intermediada pelo gráviton (G). No entanto, no mundo subatômico, ela não tem nenhuma influência já que ela é muito menor que as outras três interações. A interação fraca é intermediada pelos bósons carregados W^+ e W^- e pelo bóson neutro Z^0 . A interação fraca é de curtíssimo alcance, agindo

1. Introdução

Unified Electroweak spin = 1			Strong (color) spin = 1		
Name	Mass GeV/c ²	Electric charge	Name	Mass GeV/c ²	Electric charge
γ photon	0	0	g gluon	0	0
W^-	80.39	-1			
W^+	80.39	+1			
W bosons					
Z^0 Z boson	91.188	0			

spin = 0, 1, 2,...

Figura 1.2: Partículas bosônicas[5].

em distâncias 1.000 vezes menores que o núcleo atômico, sendo 10.000 vezes mais fraca que a interação eletromagnética. No caso da interação forte temos o glúon (g), que são trocados entre partículas que possuem “cargas de cor” como os quarks. A interação forte é 100 vezes mais intensa que a interação eletromagnética e seu alcance não vai além do núcleo atômico.

Tais partículas estão presentes em tudo que existe no nosso universo e como observado, possuem características próprias de maneira que somos capazes de detectá-las e catalogá-las, elas são objetos de estudo da Física de Partículas Elementares. Em geral, as partículas carregam quantidades quantizadas de energia, momento, carga elétrica e spin. Entretanto, até hoje nunca foi observado em nenhuma partícula conhecida uma propriedade cuja existência sempre nos pareceu evidente: uma carga magnética isolada. Sabemos que cortando um ímã em duas partes e repetindo o processo até quando pudermos levará inevitavelmente ao elétron, que também é um pequeno ímã (Figura 1.3). Isso representa uma certa assimetria já que não temos uma carga magnética isolada como observado na eletricidade, que possui carga elétrica isolada. Como é sabido, a simetria exerce um papel fundamental na física já que ela está relacionada as leis de conservação como por exemplo a conservação do momento linear (homogeneidade do espaço), conservação do momento angular (isotropia do espaço) e conservação da energia (simetria temporal).

As próprias equações de maxwell, que resumem todo o eletromag-

1. Introdução

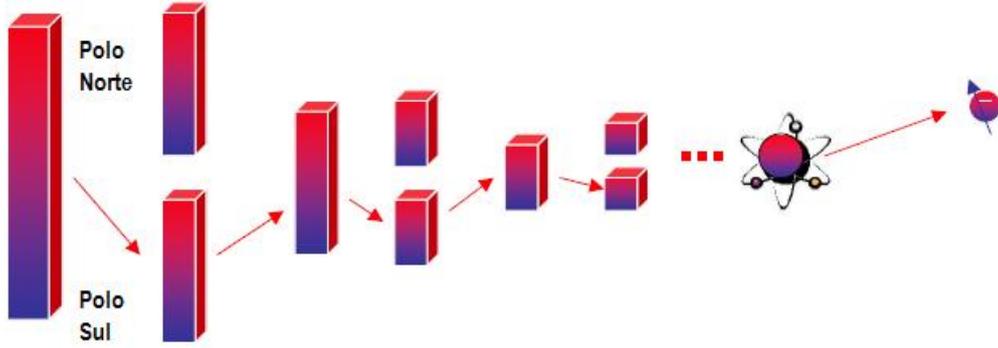


Figura 1.3: Divisões de um ímã até chegar ao elétron[6].

netismo, não são simétricas. Analisando cuidadosamente as equações podemos ver que elas incluem as cargas elétricas mas não prevêem as cargas magnéticas.

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \vec{E} = 4\pi\rho \\ \nabla \cdot \vec{B} = 0 \\ \nabla \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \\ \nabla \times \vec{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \vec{J} \end{array} \right. \quad (1.1)$$

Para tornar as equações de Maxwell completamente simétricas devemos assumir que existem os monopólos magnéticos. Portanto, existem cargas magnéticas e conseqüentemente existe também densidade de corrente magnética. As equações de Maxwell passariam a ser:

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \vec{E} = 4\pi\rho \\ \nabla \cdot \vec{B} = 4\pi\rho_m \\ \nabla \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} - \frac{4\pi}{c} \vec{J}_m \\ \nabla \times \vec{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \vec{J} \end{array} \right. \quad (1.2)$$

Não há ainda evidência experimental da existência de monopólos magnéticos em física de partículas. No entanto, Dirac contribuiu para o assunto ao tentar explicar a quantização da carga elétrica [7]. Dirac mostrou que se um pólo magnético isolado existe em algum lugar do universo, a carga elétrica deve ser quantizada em todo lugar. Ele presumiu que um átomo

1. Introdução

excitado tende a decair para um estado de energia mais baixo abruptamente, emitindo seu excesso de energia na forma de fóton. Além da energia, o fóton também carrega alguma parte do momento angular do átomo. Entre o fim do século XIX e início do XX, J.J. Thomson, sugeriu aos seus alunos que determinassem o momento angular do campo eletromagnético de um estado consistindo de uma carga elétrica e de uma carga magnética interagindo. A solução revelou que o momento angular do sistema depende do produto da carga elétrica q e da carga magnética m , mas independe da distância entre elas. Em outras palavras, as cargas podem estar separadas por distâncias da ordem do raio do átomo ou do raio do universo e mesmo assim o momento angular do campo eletromagnético será igual.

No entanto, sabe-se hoje que o momento angular de qualquer sistema desse tipo é quantizado, ou seja, a menor quantidade não-nula de momento angular na natureza é $\hbar/2$. Desta forma, o produto qm deve ser proporcional a $\hbar/2$ ($qm \propto \hbar/2$) e se m tem um valor definido, então a carga elétrica q também deveria ser fixa. Dirac, então, mostrou matematicamente que se existe a carga magnética, a carga elétrica deve ser quantizada, isto que dizer que: $q = 2\pi\hbar/\mu_0 m$.

Uma outra razão importante para a existência dos monopólos está relacionada a teoria da unificação. São teorias que em altas temperaturas preveem a unificação das forças eletromagnética, nuclear forte e força fraca em um só campo. São chamadas também da “teoria de tudo” que tentam explicar todas as interações da natureza a partir de um só campo, uma só força fundamental.

Enfim, vários esforços têm sido realizados para encontrar os verdadeiros monopólos. O problema é, onde estão os monopólos? Vários pesquisadores já procuraram no espaço sideral, em raios cósmicos, em aceleradores de partículas e até mesmo em rochas lunares [8, 9, 10]. Até hoje o resultado é nulo, ou seja, ninguém encontrou o monopólo magnético.

Será que os monopólos podem existir num sólido? Pesquisas recentes em matéria condensada tem obtido descobertas teóricas, e já há resultados experimentais, que podem levar alguma luz à pesquisa sobre monopólos magnéticos. Nos materiais da Física da Matéria Condensada, encontramos

1. Introdução

essencialmente elétrons e íons que estão aglomerados em grande quantidade e muitas vezes interagem fortemente e se comportam coletivamente.

De fato, para uma explicação simples, lembramos que em um cristal a baixas temperaturas, excitações acima do estado fundamental frequentemente se comportam como partículas elementares, “carregando” quantidades quantizadas de energia, momentum, carga elétrica e spin. Vários desses objetos surgem como resultado do comportamento coletivo dos muitos elétrons e íons em determinado material e tal comportamento coletivo é mais efetivamente descrito em termos de frações das partículas originais.

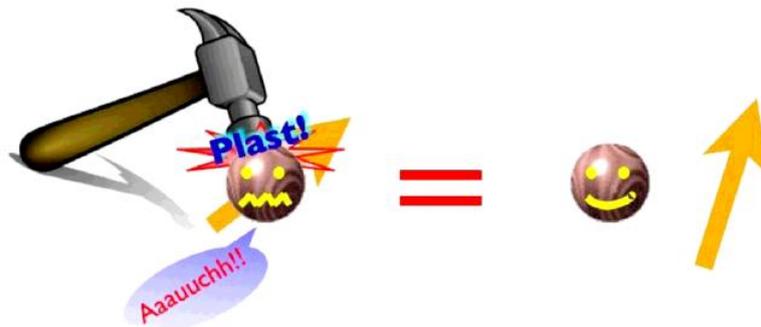


Figura 1.4: Fracionalizando um elétron[6].

A “emergência” dessas excitações é um exemplo do fenômeno conhecido como “fracionalização” (Figura 1.4). Números quânticos fracionários formam um tópico relativamente novo em Física da Matéria Condensada.

Grosseiramente falando, é como se pudéssemos “quebrar” um elétron em dois objetos distintos, um carregando apenas o seu spin e o outro carregando apenas a sua carga elétrica. Esse evento é frequentemente associado a defeitos topológicos e é bastante comum em uma dimensão espacial (nanotubos, poliacetileno e etc.)[6].

A idéia por trás da separação spin-carga é que os elétrons se comportam diferentemente quando sua possibilidade de movimentação fica restrita a uma única dimensão. Enfileirados, as forças repulsivas entre suas cargas se tornam amplamente dominantes. Esse efeito coletivo é suficientemente forte para quebrar a informação de spin e carga de um único elétron.

Para explicar este comportamento coletivo nos sólidos podemos pen-

1. Introdução

sar na vibração dos átomos num material devido a agitação térmica. Quando você esquentar um material os átomos vibram de forma coordenada, o qual podemos associar a este comportamento uma onda. A onda, como é sabido, carrega energia e pode também carregar momento, carga e spin. E assim, dizemos que quem carrega a energia na onda é uma quasi-partícula (grosseiramente falando, neste caso as quasi-partículas são os fônons). Ou seja, os fônons são quasi-partículas ou partículas emergentes que estão associadas ao movimento coletivo dos íons na rede devido a agitação térmica.

Essas quasi-partículas podem se comportar como frações da partícula original, ou seja, essa quasi-partícula que é associada ao elétron pode se comportar como se tivesse apenas a carga ou apenas o spin. Um exemplo bidimensional é o Efeito Hall Fracionário, onde tem-se uma quasi-partícula carregando $1/3$ da carga do elétron[11].

Com todas essas informações, Castelnovo e colaboradores então se perguntaram: Será que podem existir excitações de dipolos magnéticos que sejam fracionalizados e se comportem como monopólos? E foi justamente o que eles propuseram no artigo publicado em 2009[3], afirmando que existem uma fracionalização de dipolos em três dimensões em materiais chamados de gelos de spins. Estes materiais foram intitulados de gelos de spins devido possuírem um estado fundamental frustrado, apresentarem uma entropia residual e respeitarem regras geométricas em seu arranjo semelhante à do gelo da água. Este material de gelos de spins tridimensionais tem a estrutura pirocloro na qual íons magnéticos de terras raras formam uma rede tetraédrica[12] (Fig.1.5). Para minimizar a energia de interação spin-spin (neste caso, interação ferromagnética) as regras do gelo são manifestadas, ou seja, dois spins apontam para dentro e dois spins apontam para fora de cada tetraedro. Essas regras do gelo tem origem das mesmas regras do gelo da água quando foi observado que para cada oxigênio existem dois hidrogênios próximos e dois hidrogênios mais distantes e que existe precisamente 1 átomo de hidrogênio em cada ligação de hidrogênio.

É importante também explicar dois tópicos de muita relevância para o entendimento desse trabalho: frustração geométrica e anisotropia. Analisando o primeiro tópico, podemos dizer que em materiais magnéticos a

1. Introdução

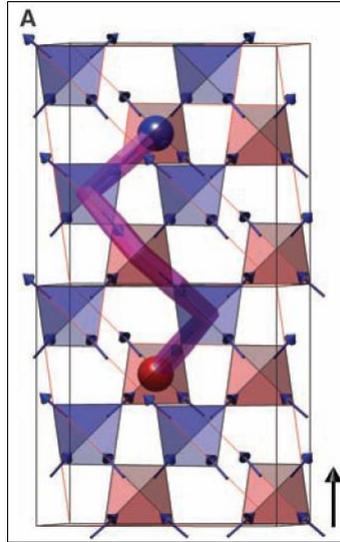


Figura 1.5: Gás de monopólos magnéticos deconfinados. Os spins estão restritos a apontar ao longo da direção conectando o centro dos dois tetraedros que eles pertencem. A menor energia para o tetraedro é obtida obedecendo a regra do gelo.[12].

frustração geométrica está relacionada com a incapacidade do sistema em minimizar todas as interações entre pares de spins. Essa frustração de origem geométrica surge quando esta incapacidade é resultado direto da geometria da rede de spins[13, 14, 15]. Na figura 1.6 temos rede quadrada, triangular e tetraédrica com spins acoplados ferromagneticamente. Considerando que os spins estão restritos a apontar somente para a vertical (spins Ising), podemos notar que somente na rede quadrada é possível posicionar todos os spins satisfazendo todas as interações entre primeiros vizinhos. Enquanto que na rede triangular encontramos pelo menos uma interação não satisfeita, ou seja, frustrada. E na tetraédrica encontramos pelo menos duas interações frustradas. Um outro tópico importante é a anisotropia, um dos parâmetros mais importantes que a engenharia magnética pode utilizar para melhorar a performance de seus materiais. As curvas de magnetização podem mudar drasticamente segundo a direção do campo magnético aplicado. Nos materiais magnéticos existem interações que selecionam uma direção particular, conhecida como eixo fácil, ao longo da qual o momento magnético prefere

1. Introdução

direcionar-se. Estas interações são conhecidas na literatura como energia de anisotropia, ou simplesmente, anisotropia. Esta anisotropia decorre de diversos fatores: estrutura cristalina, forma da amostra, stress interno e temperatura.

Estes materiais denominados de gelos de spins apresentam uma forte anisotropia devido ao campo cristalino que força os spins a se alinharem ao longo das direções que unem os vértices ao centro de cada tetraedro. Por tal motivo e devido a própria geometria do material dizemos que estes possuem frustrações geométricas mesmo apresentando um acoplamento ferromagnético.

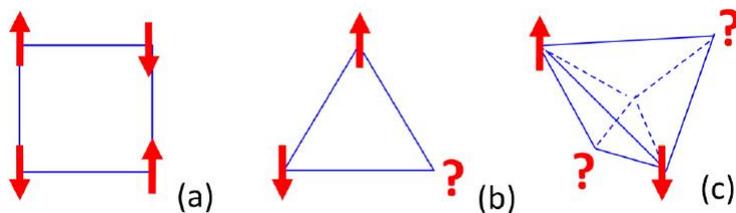


Figura 1.6: Exemplos de redes magnéticas com spins acoplados antiferromagneticamente.[16].

Um spin “flipado”, ou seja invertido, viola a regra do gelo em dois tetraedros, mas isso pode ser visto como a formação de um par de monopólos de sinais opostos nos tetraedros adjacentes e estes monopólos estão deconfinados, eles podem mover-se e separar-se na rede independentemente um do outro. Esta possibilidade de separação das excitações locais dentro de suas partes constituintes, ou seja, a separação de um dipolo em dois monopólos é o que podemos considerar como fracionalização de um sistema em 2 ou 3 dimensões[3, 17]. Isto permite muitos novos aspectos dessas excitações emergentes serem estudadas experimentalmente, como por exemplo: criação de par e interação, movimento individual, correntes de monopólos e fenômenos de correlação e cooperativos.

Um sistema similar ao gelo de spins tridimensional foi construído artificialmente em duas dimensões, utilizando nanopartículas magnéticas alongadas de permalloy. Este material artificial consiste de uma rede quadrada

1. Introdução

bidimensional feita de nano-ilhas magnéticas, com os eixos maiores das ilhas alternando-se em orientação ao longo das duas principais direções da rede[2], conforme Fig.(1.7).

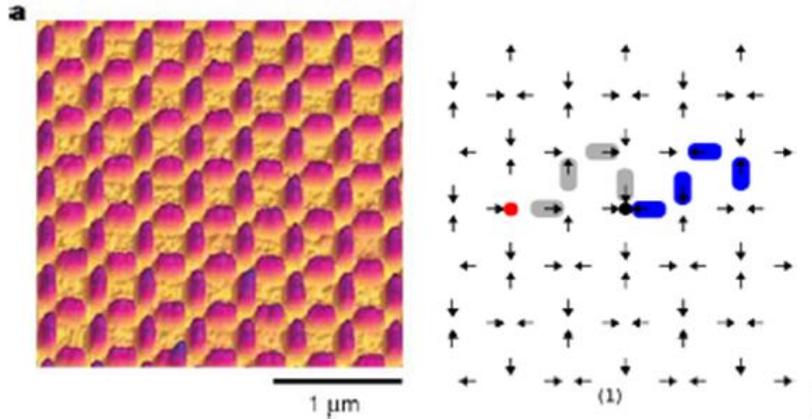


Figura 1.7: Esquerda:Imagem de microscopia de força atômica de um gelo de spin bidimensional artificial, feito de ilhas de permalloy[2]. Direita:Orientação dos momentos magnéticos no gelo de spins bidimensional, com excitações gerando dois monopólos magnéticos[4].

A anisotropia magnetocristalina do permalloy é efetivamente zero, de forma que a anisotropia de forma das ilhas força seu momento magnético a se alinhar na direção do eixo maior, fazendo com que as ilhas sejam efetivamente do tipo Ising ou seja, o spin total em cada ilha aponta em apenas uma direção, com dois sentidos possíveis. A frustração intrínseca da rede é similar àquela do modelo de gelo de spin. Mól e colaboradores[4] chamaram a atenção para o fato de que também em gelos de spin bidimensionais existe a possibilidade da emergência de monopólos magnéticos (Fig.1.7 à direita). A energia do sistema em função da separação espacial dos monopólos é mostrada na figura (1.8), e observa-se um comportamento diferente do encontrado para gelos de spins tridimensionais. Em particular, os monopólos não se encontram livres, tendo sido encontrada dependência com a separação dos monopólos similar à encontrada para quarks na QCD.

Devido à sua periodicidade, a representação do estado fundamental dos gelos de spins bidimensional através de um campo de spins contínuo é

1. Introdução

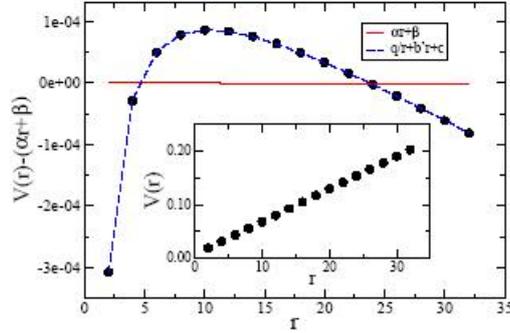


Figura 1.8: Energia em função da separação dos monopólos no gelo de spin bidimensional[4].

de fácil obtenção. É natural nos perguntarmos se é possível a construção de Hamiltonianos contínuos que permitam a obtenção de um estado fundamental com a estrutura de gelos de spins, e qual o comportamento, nessa situação, das excitações responsáveis pelo surgimento de monopólos magnéticos no sistema. Em particular, também, podemos nos perguntar se interações locais são suficientes para gerar uma interação efetiva de longo alcance entre os monopólos magnéticos emergentes.

Neste trabalho, temos como objetivo geral mostrar que um modelo de campos clássicos com interações não locais pode gerar interações efetivas não locais entre excitações no sistema. Além disso, temos como objetivos específicos desenvolver modelos contínuos bidimensionais de spins com interações locais que possuam estado fundamental frustrado com estrutura de gelo de spins, avaliar a construção de excitações a partir deste estado fundamental, estudar o aparecimento de monopólos magnéticos e estudar a energia do sistema em função da separação de pares de monopólos.

Capítulo 2

Gelos de Spin

Frustrações geométricas surgem usualmente em sistemas que possuem momento magnético (spins) residentes sobre sítios de uma rede construída de unidades triangulares ou tetraédrica e que interagem antiferromagneticamente com os vizinhos mais próximos. Embora seja pouco comum, frustrações geométricas podem também surgir em sistemas com forte anisotropia e spins acoplados ferromagneticamente. Isto é o que ocorre em alguns óxidos de pirocloro, materiais onde momentos magnético de terras raras (Ho^{3+} , Dy^{3+}) estão situados em uma rede tetraédrica e são acoplados via interação ferromagnética (dipolar). Este sistema possui um número macroscópico de estados fundamentais degenerados quase clássico e exibe uma alta entropia em baixas temperaturas aproximadamente “semelhantes” a alta entropia da desordem do próton no gelo da água comum. Por esta razão, estes sistemas magnéticos são chamados de gelos de spins. Este capítulo faz uma revisão dos aspectos essenciais da fenomenologia do gelo de spin em óxidos de pirocloro magnético.

2.1 Descoberta do Gelo de Spin

O óxido de pirocloro magnético é dado pela fórmula $A_2B_2O_7$, onde A representa um íon terra rara e B representa um metal. Este óxido forma uma

3. Gelos de Spin

vasta família de materiais que exibem uma gama de fenômenos termodinâmicos e magnéticos interessantes, sendo que muitos desses fenômenos ainda são pouco entendidos [18, 19]. Aqui, ambos os íons trivalente A^{3+} e tetravalente B^{4+} residem sobre duas sub-redes de pirocloro independentes e interpenetrantes. A Fig.2.1 mostra somente umas das duas sub-redes, a sub-rede A . Em $A_2B_2O_7$, podemos também ter as sub-redes A e B ocupadas por um íon magnético, como por exemplo: $Tb_2Ti_2O_7$ [20] e $Y_2Mo_2O_7$ [21] respectivamente. A rede de pirocloro é altamente frustrada quando os íons carregam um spin isotrópico e interage com os vizinhos mais próximos por meio de um acoplamento antiferromagnético, o que já foi discutido por Villain [22] a trinta anos atrás. O óxido de pirocloro pode ser metálico, $Nd_2Mo_2O_7$, o que exibe um interessante Efeito Hall Anômalo [23] ou ele pode ser isolante como é o caso para o $A_2Ti_2O_7$ e $A_2Sn_2O_7$ [18, 19].

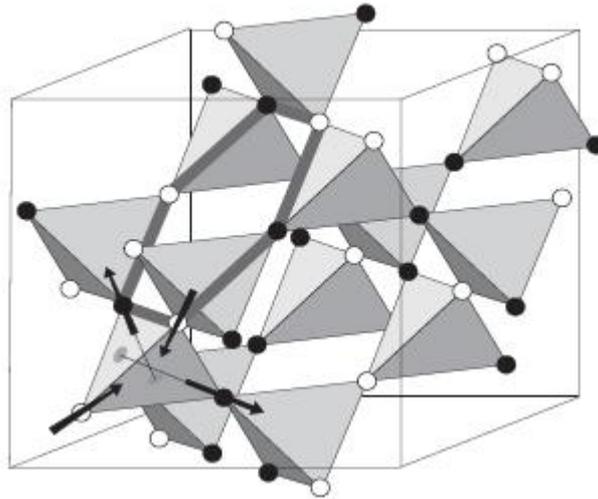


Figura 2.1: Rede Pirocloro tetraédrica, análogo aos materiais de gelos de spin do tipo $Ho_2Ti_2O_7$ e $Dy_2Ti_2O_7$. O momento Ising de terras raras magnéticas ocupam os “cantos” do tetraedro como mostrado na figura. Nos materiais de gelos de spin, a condição de ter dois spins entrando e dois spins saindo resulta do efeito combinado das interações magnéticas e da forte anisotropia Ising. Note que os spins da rede são denotados por bolas brancas e pretas, onde as brancas representam um spin apontando para dentro do tetraedron, enquanto que as pretas representam um spin apontando para fora do tetraedro[24].

3. Gelos de Spin

Na figura 2.1 temos uma rede cúbica de face centrada (FCC) com uma célula base tetraédrica de quatro sítios, esta rede que foi convenientemente descrita é considerada uma rede pirocloro, que possui uma simetria trigonal (portanto rotacional) com relação a qualquer uma das quatro direções da rede cúbica $\langle 111 \rangle$. Devemos notar que enquanto a rede de pirocloro magnética possui uma simetria hexagonal o gelo da água comum à pressão atmosférica, I_h , possui uma estrutura hexagonal. Rigorosamente falando, o problema do pirocloro Ising é equivalente ao gelo cúbico, I_c , e não a fase hexagonal I_h . Entretanto, isso não modifica a analogia à regra do gelo ou a conexão entre a orientação do momento magnético no gelo de spin e a orientação local do próton no gelo da água.

O resultado de um estudo do espalhamento de nêutron de $Ho_2Ti_2O_7$ [25] foi relatado no artigo de 1997 por Harris, Bramwell e colaboradores, e como resultado mais surpreendente da pesquisa foi observado que a temperatura de Curie–Weiss, θ_{CW} , é positiva com $\theta_{CW} \approx +1.9K$, portanto, indicando interações ferromagnéticas. Encontrou-se também que existe uma dependência da intensidade do espalhamento com o campo magnético[26], lembrando o que é observado no vidro de spin[28], embora não exista uma desordem aleatória significativa no $Ho_2Ti_2O_7$.

O desenvolvimento do ordenamento ferromagnético é frustrado pela forte anisotropia Ising local do Ho^{3+} no $Ho_2Ti_2O_7$ [25, 27]. Os Autores de [25, 27] estabeleceram a conexão entre seu modelo e o modelo de Pauling para o problema da desordem do próton no gelo da água considerando um modelo simples de spins Ising acoplados ferromagneticamente $\langle 111 \rangle$ numa rede de pirocloro[29]. Fazendo isso, chegaram ao nome do seu modelo de Modelo de Gelo de Spin.

A característica principal do Gelos de Spins ($Dy_2Ti_2O_7$, $Ho_2Ti_2O_7$) é a presença de momentos magnéticos μ_i (com magnitude de aproximadamente 10 magnetons de Bohr igual a $92.7 \times 10^{-24} J/T$) residindo sobre sítios i de uma rede pirocloro, onde a hamiltoniana que descreve tais sistemas é dada por:

3. Gelos de Spin

$$H = \frac{J}{3} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + D a^3 \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\frac{\hat{e}_i \cdot \hat{e}_j}{|r_{ij}|^3} - \frac{3(\hat{e}_i \cdot r_{ij})(\hat{e}_j \cdot r_{ij})}{|r_{ij}|^5} \right] S_i S_j \quad (2.1)$$

A equação (2.1) pode ser entendida da seguinte forma, o primeiro termo representa o termo Ising enquanto que o segundo representa o termo Dipolar. Podemos também dizer que é convencionalizado que: para $J > 0$ a troca entre os spins mais próximos é ferromagnética e para $J < 0$ a troca entre os spins mais próximos é anti-ferromagnética. Além disso, temos que r_{ij} é a distância entre os spins, $a = 3.54\text{\AA}$ é a distância entre os primeiros vizinhos no pirocloro, $D = \mu_0 \mu^2 / 4\pi a^3$ é a constante de acoplamento da interação dipolar.

Os momentos magnéticos são forçados a apontar ao longo de seus respectivos eixos locais e_i e podem ser modelados como spins Ising $\mu_i = \mu S_i \hat{e}_i$, como podemos ver na Fig.2.2.

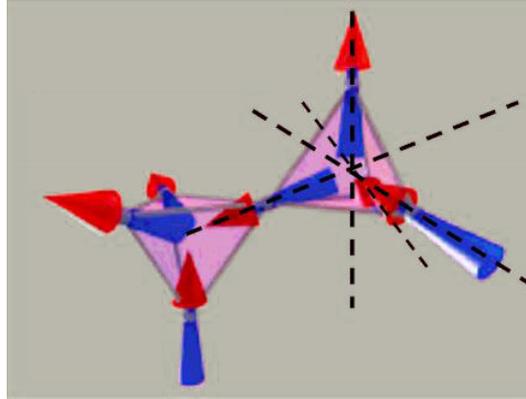


Figura 2.2: Tetraedros com spins em cada vértice[6].

Em cada vértice dos tetraedros que formam a rede de um spin ice (Gelo de Spin), os spins apontam ao longo de eixos locais de uma maneira tipo Ising (+1 ou -1). Obviamente, em um tetraedro, existem 4 spins, um spin em cada vértice. E como já mencionado, esses materiais são denominados spin ices porque eles obedecem à chamada regra do gelo.

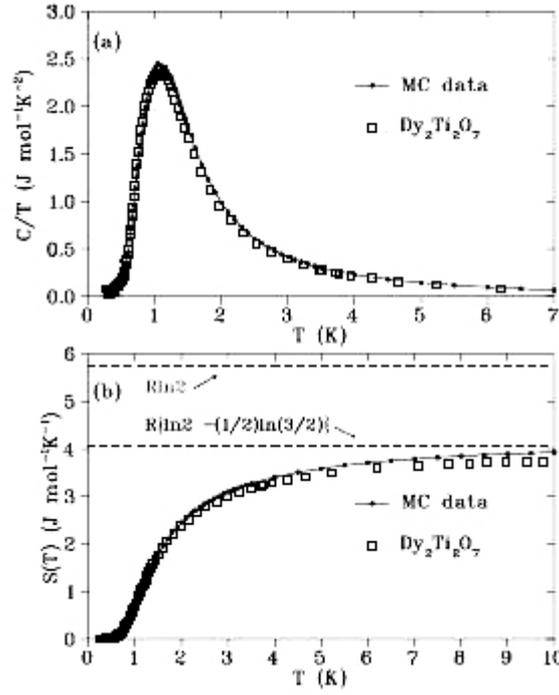
2.2 Entropia residual do $Dy_2Ti_2O_7$ e $Ho_2Ti_2O_7$ 

Figura 2.3: (a) Calor específico e (b) Dados de entropia da Ref.[30] comparados com resultados da simulação de Monte Carlo[33] para o modelo de gelo de spin dipolar, com $J/3 = -1.24K$ e $5D/3 = 2.35K$. Dois regimes podem ser identificados. i) Para T muito maior que a temperatura máxima, $T_{max} \sim 1.24K$, o sistema está no regime paramagnético e está fracamente correlacionado. E tetraedros individuais não obedecem a regra do gelo. ii) Quando T vai pra baixo da temperatura máxima a razão da troca de spin decai exponencialmente[34] e o sistema se “acomoda” num estado que obedece a regra do gelo, com 2 spins entrando e 2 spins saindo sobre cada tetraedro. O regime gelo de spin pode ser descrito como um paramagneto coletivo[22].

Através da medição de calor específico magnético, $C(T)$, do $Dy_2Ti_2O_7$ [30] pôde-se obter a primeira evidência termodinâmica convincente para a existência de um estado de gelo de spin em um sitesma Ising pirocloro. A dependência da temperatura de $C(T)$ pode ser observada na figura 2.3(a). Para determinar a entropia magnética residual de $Dy_2Ti_2O_7$, Ramirez e colaboradores seguiram uma aproximação similar ao que Giauque e colaboradores

3. Gelos de Spin

utilizaram para determinar a entropia do gelo da água[31, 32].

Ramirez *et al.*[30] mediu o calor específico magnético de uma amostra de $Dy_2Ti_2O_7$ entre $T_1 = 300mK$ e $T_2 = 10K$, no regime paramagnético, onde a entropia esperada por mol deve ser $R\ln(2)$ para um sistema de dois estados ($R = N_0k_B$ é a constante molar dos gases e N_0 é o número de Avogadro).

A variação de entropia entre T_1 e T_2 foi encontrada integrando $C(T)/T$ entre essas duas temperaturas:

$$\Delta S_{1,2} = S(T_2) - S(T_1) = \int_{T_1}^{T_2} \frac{C(T)}{T} dT. \quad (2.2)$$

É importante ressaltar que $Ho_2Ti_2O_7$ foi o primeiro material proposto como um sistema spin ice(gelo de spin). No entanto, $Ho_2Ti_2O_7$ é menos conveniente que $Dy_2Ti_2O_7$ para se realizar medidas de calor específico a baixas temperaturas. A origem desta dificuldade decorre da forte interação hiperfina entre os spins eletrônicos e nuclear do Ho^{+3} . Em resumo, o $Ho_2Ti_2O_7$ e $Dy_2Ti_2O_7$ possuem uma entropia residual à baixa temperatura que é compatível com a entropia que é encontrada quando se usa os argumentos de Pauling aplicados no modelo Ising ferromagnético sob a rede pirocloro.

2.3 Simulações de Monte Carlo e origem da regra do gelo

Na simulação de Monte Carlo para $Dy_2Ti_2O_7$ encontra-se que praticamente para todos os efeitos práticos é impossível equilibrar o sistema abaixo de uma temperatura de congelamento, ou seja, $T_f \approx 0.4K$ [34]. Interessantemente, essa temperatura corresponde aproximadamente à temperatura de congelamento encontrado em medidas de susceptibilidade no $Dy_2Ti_2O_7$. No espaço real, uma vez que o sistema é resfriado no regime de gelo torna-se extremamente difícil “flipar” (inverter) os spins, que deve violar a regra do gelo quando a temperatura é muito menor que a barreira de energia dada por $2(J/3 + 5D/3)$. Portanto, enquanto a dinâmica de spins à baixas temperaturas no estado spin ice for extremamente lenta, o sistema ainda não terá

3. Gelos de Spin

atingido a temperatura crítica para a ordem de longo alcance. O estado ou regime spin ice é similar em certos aspectos a fase paramagnética em altas temperaturas, ou sendo mais preciso, um estado paramagnético coletivo, segundo a terminologia de Villain[22]. Isto é, podemos dizer que gelos de spin é um líquido de spins clássico, embora possua dinâmicas de spin bem lenta.

Em geral, para explorar a ordenação das propriedades do gelo de spin dipolar à baixas temperaturas, é necessário um algoritmo de Monte Carlo com atualizações não locais que ultrapassa efetivamente a barreira de energia que separa os estados quase degenerados, e que, portanto, permite a simulação explorar o espaço de fase da regra do gelo.

A fenomenologia do gelo de spin é devido as interações dipolar de longo alcance, como pode ser observado no resultado da simulação de Monte Carlo, pois os calculos da teoria de campo médio fornece uma primeira pista sobre o mecanismo que está por trás da formação da regra do gelo. No entanto, nenhum método realmente explica porque o gelo de spin dipolar obedece as regras do gelo. Uma boa aproximação para responder esta questão foi relatada na Ref.[35].

O primeiro fato importante[36] é notar que a regra do gelo “dois spins entrando/dois spins saindo” na rede pirocloro é equivalente a dizer que o fluxo do campo magnético é nulo $\nabla \cdot B = 0$.

$$\sum_{\Delta} \sigma_{\Delta}^{z_1} + \sigma_{\Delta}^{z_2} + \sigma_{\Delta}^{z_3} + \sigma_{\Delta}^{z_4} = 0, \quad (2.3)$$

O segundo fato importante[35] é que se pode construir um modelo de brinquedo tipo gelo de spin cujo os autovetores ϕ_q^{α} podem ser usados para formar um projetor que obedece a regra do gelo no estado fundamental. E além disso, pode-se observar que a interação dipolar entre os momentos magnéticos é real.

2.4 Gelos de Spin tridimensionais

Como já foi mencionado, gelos de spin tridimensionais são caracterizados pela presença de momentos magnéticos localizados nos sítios de uma rede pirocloro (Fig.2.4), na qual ions magnéticos de terras-raras formam uma rede de tetraedros que compartilham seus vértices. Estes momentos estão restritos a apontar ao longo de seus respectivos eixos de Ising locais, e podem ser modelados como spins de Ising, $\vec{\mu} = \mu S_i$, com $S_i = \pm 1$. Sabe-se que as propriedades termodinâmicas dos gelos de spin são bem descritas por um hamiltoniano, equação (2.1), que leve em consideração a interação de troca entre vizinhos mais próximos e as interações dipolares de longo alcance[3],

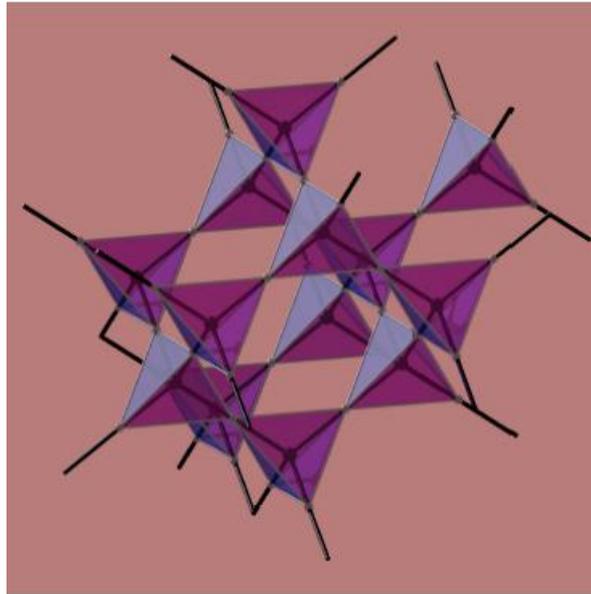


Figura 2.4: Rede tetraédrica de pirocloro e diamante. O momento magnético em gelo de spin reside nos sítios da rede pirocloro tetraédrica[3].

Além disso, gelos de spin também foram identificados como um material magnético não usual quando notou-se que este não se ordena a baixas temperaturas, ainda que suas interações sejam ferromagnéticas. Como exemplos destes materiais foram mencionados os compostos $Dy_2Ti_2O_7$ e $Ho_2Ti_2O_7$. De fato, encontrou-se que os gelos de spin possuem uma entropia residual a baixas temperaturas, que pode ser aproximada pela entropia de Pauling

3. Gelos de Spin

para a água, que mede a degenerescência do estado fundamental gerada pelas chamadas regras de gelo. No contexto de gelos de spin tridimensionais, esta observação implica em um estado macroscópico degenerado obedecendo a “regra de gelo”, em que dois spins apontam para dentro em cada vértice da rede de diamante, enquanto dois apontam para fora. Esta configuração é necessária para que haja a minimização da energia de interação entre spins na rede.

Recentemente, Castelnovo, Moessner e Sondhi [3] mostraram que excitações sobre o estado fundamental destes gelos de spin, ou seja, violações da regra de gelo, se comportam como monopólos magnéticos com propriedades de interação de longa distância. Este fato pode ser observado na Fig.2.5. No topo, à esquerda da figura, estão mostrado dois tetraedros da rede com os momentos magnéticos dos vértices obedecendo a regra de gelo, dois momentos apontando para fora e dois apontando para dentro de cada tetraedro.

Ao inverter o momento de dipolo magnético do vértice comum aos dois tetraedros, a regra de gelo é violada, resultando em um fluxo magnético não nulo para fora do primeiro tetraedro e para dentro do segundo, conforme esboçado no topo à direita da Fig.2.5. Os tetraedros com fluxo magnético positivo ou negativo se comportam como monopólos magnéticos, representados pelas cores azul e vermelha na figura. No painel maior da Fig.2.5, mostram-se dois monopólos magnéticos isolados na rede de diamante do gelo de spin.

Neste trabalho, Castelnovo, Moessner e Sondhi consideraram uma modesta deformação da Hamiltoniana que descreve os materiais spin ices (equação 2.1), trocando a energia de interação dos dipolos magnéticos localizados nos sítios do pirocloro (parte *a* da Fig.2.5) pela energia de interação de “halteres” consistindo de cargas magnéticas iguais e opostas (q_i) em suas extremidades (parte *c* da Fig.2.5). Na Fig.2.6 temos o exemplo da troca realizada.

Dessa forma, a energia de uma configuração de dipolos é computada como a energia de interação entre cargas magnéticas de cada par em um halter, dada pela lei de Coulomb:

3. Gelos de Spin

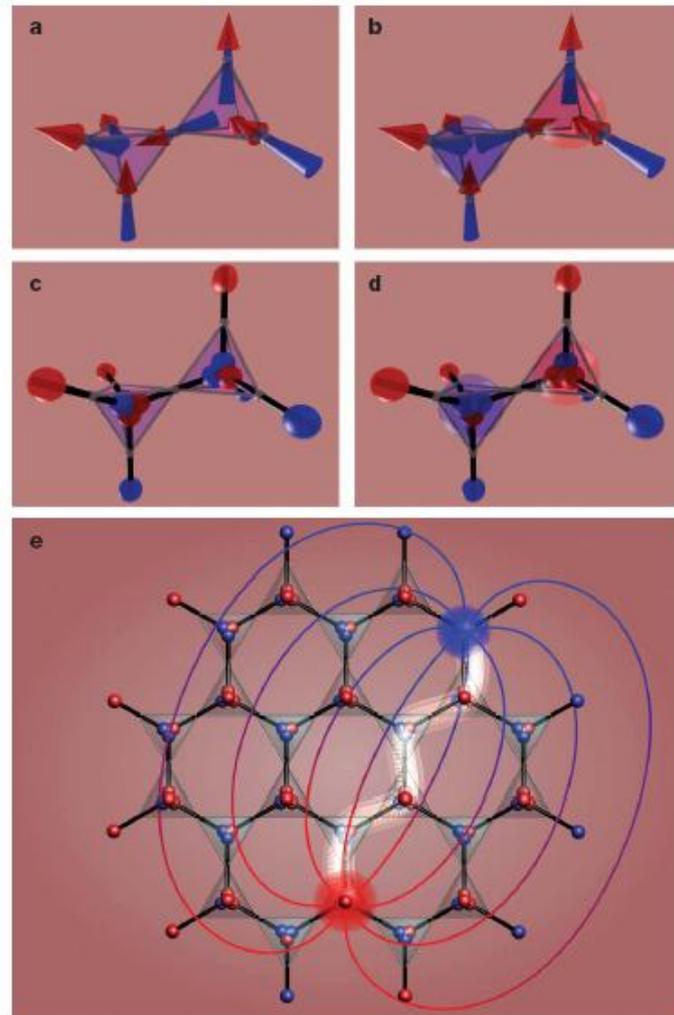


Figura 2.5: Monopólos magnéticos no gelo de spins tridimensional. (a) Dois tetraedros adjacentes respeitando a regra de gelo. (b) Inversão do spin no vértice comum aos dois tetraedros, gerando dois monopólos magnéticos. (c-d) Mesmas situações de a e b, utilizando-se cargas magnéticas. (e) Separação espacial de dois monopólos magnéticos na rede de gelo de spins obtida através da inversão de uma seqüência de spins nos vértices dos tetraedros, gerando uma *string* entre os dois monopólos (linha branca)[3].

3. Gelos de Spin

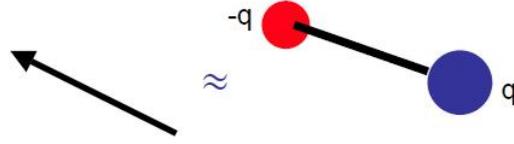


Figura 2.6: Esfera azul: polo norte ou carga positiva do ímã q_i . Esfera Vermelha: polo sul ou carga negativa do ímã $-q_i$. [6]

$$V(r_{ij}) = \begin{cases} \frac{\mu_0 q_i q_j}{4\pi r_{ij}} & \text{se } r_{ij} \neq 0 \\ v_0 q_i q_j & \text{se } r_{ij} = 0, \end{cases} \quad (2.4)$$

onde r_{ij} é a distância entre dois sítios e v_0 é uma energia finita necessária para reproduzir corretamente a interação entre os vizinhos mais próximos.

Dada uma configuração de N dipolos, as correspondentes $2N$ cargas na correspondente configuração de halteres é representada por q_i onde $i = 1, 2, \dots, 2N$. A energia do estado fundamental desse sistema é facilmente obtida. A energia total é minimizada se cada sítio do tetraedro for neutro, i.e., devemos orientar os halteres de maneira que $Q_\alpha = \sum_{i=1\dots 4} q_i = 0$ em cada sítio. Isso é exatamente a regra do gelo comentada anteriormente.

Analisando os estados excitados, eles observaram facilmente que a excitação mais elementar envolve a inversão de um simples dipolo (ou halter), gerando um momento de dipolo líquido local 2μ . Entretanto, a inversão de um halter corresponde a 2 sítios vizinhos com cargas magnéticas opostas $Q_\alpha = \pm 2\mu/a_d$, ou seja, a inversão de um halter ou dipolo leva para a formação de duas cargas magnéticas líquidas de mesma intensidade mas opostas. Veja a Fig.2.7.

Castelново e colaboradores mostraram que a parte de interação dipolar da Hamiltoniana que descreve os spin ices

$$H = Da^3 \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\frac{\hat{e}_i \cdot \hat{e}_j}{|r_{ij}|^3} - \frac{3(\hat{e}_i \cdot r_{ij})(\hat{e}_j \cdot r_{ij})}{|r_{ij}|^5} \right] S_i S_j \quad (2.5)$$

é equivalente a substituir todas as interações entre os dipolos magnéticos do sistema por interações coulombianas entre cargas magnéticas líquidas $Q_\alpha = \pm 2\mu/a_d$. Essa interação é dada por

3. Gelos de Spin

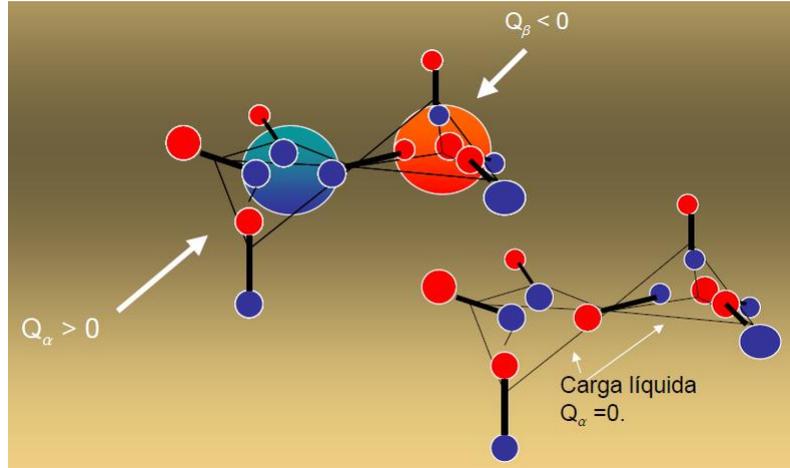


Figura 2.7: Formação de dipolo magnético quando há inversão do haltere, carga líquida diferente de zero. Em baixo temos a representação quando o halter não está invertido, ou seja, carga líquida igual a zero[6].

$$V(r_{\alpha\beta}) = \begin{cases} \frac{\mu_0 Q_\alpha Q_\beta}{4\pi r_{\alpha\beta}} & \text{se } \alpha \neq \beta \\ \frac{1}{2}v_0 Q_\alpha^2 & \text{se } \alpha = \beta, \end{cases} \quad (2.6)$$

A Figura 2.8 mostra exatamente a inversão dos halteres que leva a uma carga líquida diferente de zero e que, portanto, cria o dipolo magnético o qual é nomeado monopólo-antimonopólo. Uma observação a ser ressaltada é que tal par monopólo-antimonopólo em sítios vizinhos pode ser quebrado sem mais violações da neutralidade líquida (regra do gelo), simplesmente por “flipar” uma cadeia de halteres adjacentes. Dessa forma, um par de monopólos separados por uma distancia $r_{\alpha\beta}$ experimenta uma interação coulombiana $-\mu_0 Q_\alpha Q_\beta / 4\pi r_{\alpha\beta}$, mediada por campos magnéticos monopolares.

Além disso, ao analisarem o comportamento da energia em função da separação entre os monopólos na rede, Castelnovo e colaboradores observaram que, em função da separação entre os monopólos, a energia tende a uma constante à medida que a separação entre eles cresce (Fig. 2.9), ou seja, a força entre eles tende a zero, indicando que é possível a obtenção de monopólos magnéticos livres na rede dos gelos de spin tridimensionais. Isto permite concluir que é necessário somente uma quantidade finita de energia para separar as duas cargas até o infinito e, portanto, os monopólos não es-

3. Gelos de Spin

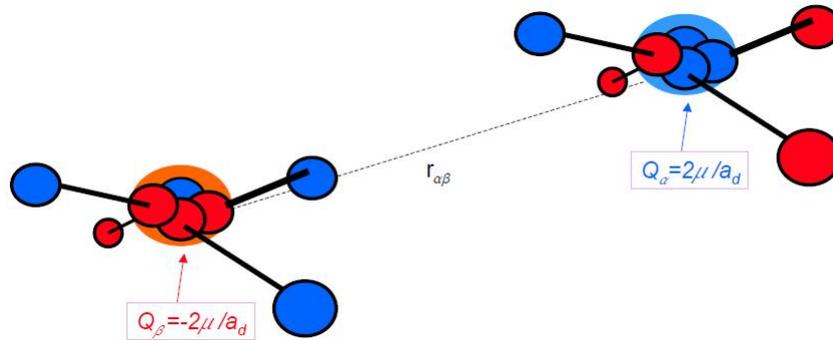


Figura 2.8: Formação de dipolo magnético quando há inversão do haltere, carga líquida diferente de zero. A interação é mediada por uma distância $r_{\alpha\beta}$ [6].

tão confinados. Eles são as verdadeiras excitações elementares do sistema: a excitação dipolar torna-se “frazionalizada”.

Enquanto as strings, ou cordas, da teoria de Dirac são inobserváveis, aqui eles são observáveis, embora sejam sem importância energética: os monopólos são conectados por strings com tensão nula. Não há conflito com a condição de quantização da carga elétrica de Dirac.

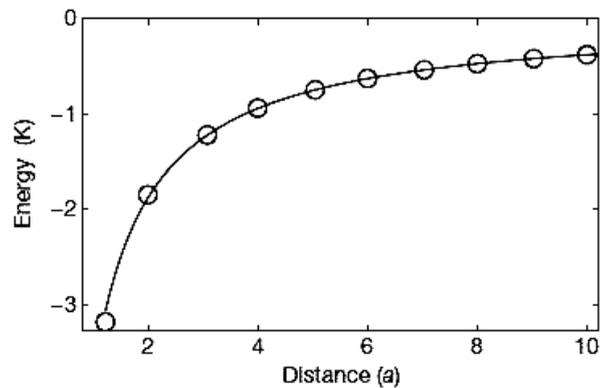


Figura 2.9: Energia do sistema em função da separação entre dois monopólos magnéticos de cargas opostas no gelo de spins. A energia cai com uma potência $1/a$, em analogia ao caso de cargas elétricas[3].

3. Gelos de Spin

Desde a descoberta do comportamento de gelo de spins em materiais como $Dy_2Ti_2O_7$ e $Ho_2Ti_2O_7$, uma série de pesquisas tem sido desenvolvidas explorando o interessante fenômeno termodinâmico e magnético oferecido pelo gelo de spins. Como por exemplo: efeitos de campo magnético, propriedades dinâmicas e função da desordem, modelo gelo de spin dipolar, gelo de spin metálico e gelo de spin artificial.

Capítulo 3

Análogo Unidimensional para Gelos de Spins

Nesta seção apresentamos um análogo unidimensional para gelos de spins que será analisado para facilitar posteriormente o entendimento do caso bidimensional, foco do nosso trabalho. A densidade hamiltoniana para este caso unidimensional pode ser dada por:

$$\mathcal{H} = \lambda_1 \left[\frac{d^2 S}{dx^2} + S \right]^2 + \lambda_2 \left[\left(\frac{dS}{dx} \right)^2 + S^2 - 1 \right]^2 \quad (3.1)$$

onde S representa o campo contínuo de spins e λ_1 e λ_2 são constantes que dão a dimensionalidade correta ao hamiltoniano, e foram escolhidas aqui arbitrariamente iguais a 1. Pode-se observar que o termo proporcional a λ_1 impõe que o estado fundamental seja uma função oscilatória em x , enquanto o segundo termo, não linear, garante que o spin do sistema está, no estado fundamental, limitado ao módulo máximo igual a 1. O hamiltoniano (integrando a equação 3.1) é dado por:

$$H = \int_{-L}^L \left(\left[\frac{d^2 S}{dx^2} + S \right]^2 + \left[\left(\frac{dS}{dx} \right)^2 + S^2 - 1 \right]^2 \right) dx \quad (3.2)$$

4. Análogo Unidimensional para Gelos de Spins

onde os limites de integração $-L$ a L são delimitados de acordo com o tamanho da rede desejada. Com a condição de contorno $S^2(0) = 1$, o hamiltoniano possui mínimo no estado

$$S_0(x) = \cos(x). \quad (3.3)$$

O Hamiltoniano é local e não linear e o estado fundamental pode ser mapeado em um espaço discreto associando os valores de $S(x)$ em $x = n\pi$ à direção do spin nesse ponto, resultando na configuração mostrada na figura 3.1.



Figura 3.1: Estado fundamental desordenado (considerando interação ferromagnética) de uma rede de spins unidimensional.

O estado fundamental não corresponde a um “gelo de spins” unidimensional, pois o fluxo em cada vértice $[x = (n + 1/2)\pi]$ é diferente de zero, ao contrário dos gelos de spin. Entretanto, a similaridade com estes sistemas está no fato de que o estado fundamental é desordenado.

Se colocarmos excitações no sistema, temos:

$$S(x) = \cos(x) + \zeta_1 + \zeta_2 + \zeta_3 + \zeta_4 + \dots + \zeta_n, \quad (3.4)$$

onde a primeira excitação é representada por ζ_1 até a excitação desejada ζ_n . Além disso, a exemplo dos gelos de spins, construímos as excitações no sistema invertendo o spin em um dado sítio. Para isso, foram utilizadas excitações do tipo

$$\zeta(x, x_p) = e^{-\gamma(x-x_p)^2} f(x - x_p), \quad (3.5)$$

onde $x_p = p\pi$ localiza a excitação no sítio $p = 1, 2, 3 \dots n$. A função que apresentou melhor ajuste (menor energia) foi

$$\zeta(x, x_p) = (-1)^p e^{-\gamma(x-x_p)^2} [a(x - x_p)^8 - b], \quad (3.6)$$

4. Análogo Unidimensional para Gelos de Spins

onde $\gamma = 0.3283676784$, $a = 0.0002229873870$ e $b = 2$, ajustados pelo Método do Gradiente que se encontra explicado no Apêndice A. Fisicamente podemos dizer que γ representa a largura da excitação, a é um parâmetro que multiplicado a gaussiana dar um melhor ajuste da gaussiana com a função que terá o spin invertido, ou seja, o parâmetro a ajuda a delimitar a região correta onde o spin será invertido, e b é o termo que faz a inversão do spin. Também verificou-se o valor do expoente $2n$ de $(x - x_p)^{2n}$, e constatou-se que a menor energia é obtida para $2n = 8$.

Outras funções, como por exemplo

$$\zeta(x, x_p) = -2\cos(x)e^{-\gamma(x-x_p)^2}, \quad (3.7)$$

também foram testadas, apresentando, porém, energia sempre maior que a obtida com a excitação acima. A Fig.3.2 mostra a introdução de 1 excitação no sistema localizada em $x_p = 2\pi$.

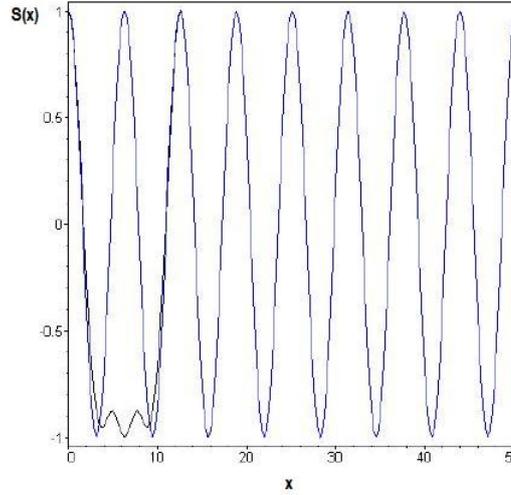


Figura 3.2: Estado fundamental (em azul) e estado com 1 excitação introduzida em $x_p = 2\pi$.

A introdução da excitação cria duas “quase-partículas” no sistema, localizadas próximas uma da outra, como pode ser verificado através da densidade de energia do sistema, mostrada na Fig.3.3.

As quasi-partículas podem ser separadas pela introdução de novas

4. Análogo Unidimensional para Gelos de Spins

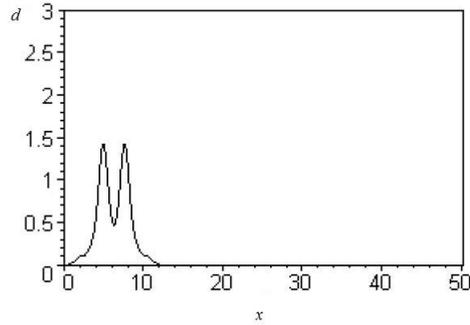


Figura 3.3: Densidade de energia com 1 excitação introduzida em $x_p = 2\pi$.

excitações vizinhas, ou, equivalentemente, invertendo uma sequência de spins vizinhos. Por exemplo, a introdução de 4 excitações localizadas em $x = 2\pi, 3\pi, 4\pi$ e 5π produzem o estado no sistema reproduzido na Fig.3.4, assim como a densidade de energia reproduzida na mesma figura. Da mesma forma, para excitações introduzidas de $x = 2\pi$ até $x = 13\pi$, o estado e a densidade de energia são mostrados na Fig.3.5.

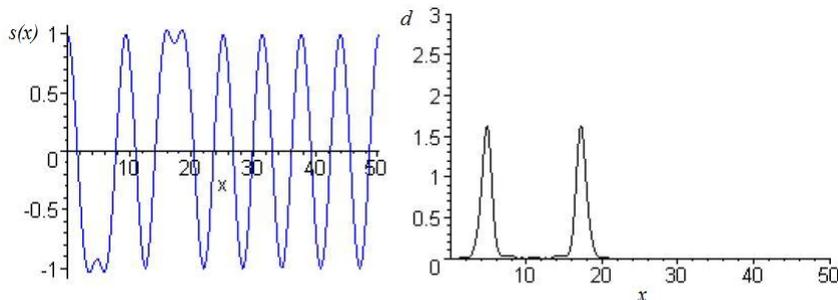


Figura 3.4: Estado do sistema e densidade de energia para sequência de 4 excitações vizinhas introduzidas no sistema.

A energia do sistema em função da separação das quasi-partículas pode ser calculada a partir da Eq.(3.2). Na tabela 3.1 mostramos todas energias calculadas com o respectivo valor da separação das quasi-partículas.

O resultado está apresentado na Fig.3.6. Os pontos correspondem aos valores calculados, enquanto a linha contínua corresponde ao ajuste por mínimos quadrados. O melhor ajuste foi obtido para uma equação que combina um potencial do tipo Van der Waals com um potencial tipo corda:

4. Análogo Unidimensional para Gelos de Spins

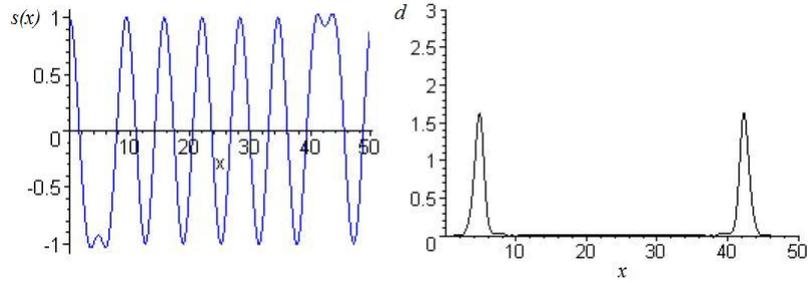


Figura 3.5: Estado do sistema e densidade de energia para sequência de 12 excitações vizinhas introduzidas no sistema.

Tabela 3.1: Energia do sistema em função da separação das quasi-partículas.

Excitação	Energia	Distância
1	5,392590567	3,141592654
2	5,524604549	6,283185308
3	5,511908219	9,424777962
4	5,530168397	12,56637062
5	5,548724492	15,70796327
6	5,566985693	18,84955592
7	5,585180042	21,99114858
8	5,603374391	25,13274123
9	5,621568740	28,27433389
10	5,639763089	31,41592654
11	5,657957438	34,55751919
12	5,676151787	37,69911185

$$H = \frac{a}{x^6} + \frac{b}{x^{12}} + c + dx, \quad (3.8)$$

com $a = 1993, 2$, $b = -0.199 \times 10^7$, $c = 5.48$ e $d = 0, 0586$.

A linha pontilhada (figura 3.6) corresponde ao ajuste por mínimos quadrados para uma energia dada por,

$$H = \frac{a}{x} + b + cx, \quad (3.9)$$

com $a = -0, 382$, $b = 5, 515$ e $c = 0, 00430$. Esse segundo ajuste não repro-

4. Análogo Unidimensional para Gelos de Spins

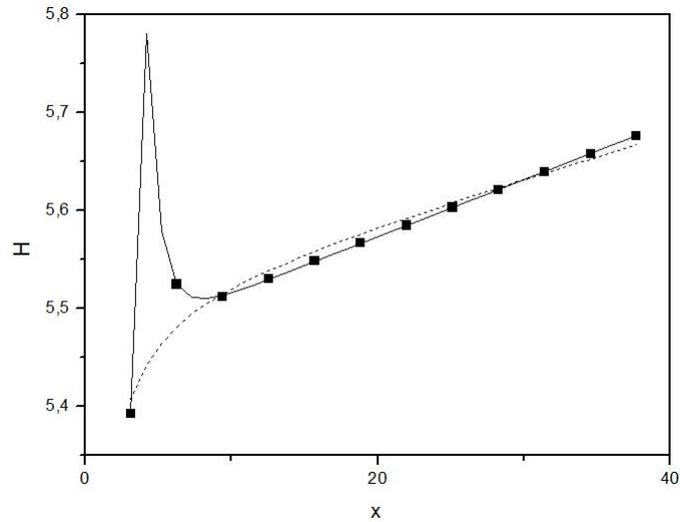


Figura 3.6: Energia do sistema em função da separação das quasi-partículas. Os pontos correspondem aos valores calculados, a linha pontilhada corresponde ao ajuste por mínimos quadrados e a linha contínua corresponde ao ajuste de uma equação que combina um potencial tipo Van der Waals com um potencial tipo corda.

duz a ligeira redução na energia obtida com a introdução de uma terceira excitação no sistema, o que pode ser observado através do primeiro ajuste, embora esse apresente um pico artificialmente alto. Pode-se observar, em ambos os casos, que o aumento da corda leva a elevação da energia do sistema de forma aproximadamente linear com a separação entre as quasi-partículas. Apesar do estado fundamental não corresponder a um “gelo de spins” unidimensional, já que o fluxo em cada vértice é diferente de zero, esse modelo unidimensional apresenta alguns pontos em comum com os gelos de spins tridimensionais apresentado em [3]: notamos que o estado fundamental é desordenado; observamos também a presença de quasi-partículas e o distanciamento destas a medida que vamos introduzindo as excitações.

Capítulo 4

Gelos de Spins Bidimensionais

Nesta seção apresentamos um modelo contínuo para gelos de spins bidimensionais. Revisamos brevemente um modelo discreto apresentado em [4], mostrando alguns de seus resultados. No modelo contínuo, trabalho realizado como objetivo dessa dissertação, apresentamos nossos resultados e discussões e comparamos tais resultados com o modelo discreto.

4.1 Modelo Discreto para Gelos de Spins Bidimensionais

Em um trabalho recente, Mól e colaboradores[4] estudaram excitações magnéticas (monopólos magnéticos) de uma rede bidimensional de gelos de spins recentemente produzida de uma forma artificial [2] em uma rede geometricamente frustada, e examinou como esses monopólos interagem em um sistema de 2 dimensões.

Assim como no sistema tridimensional de gelos de spin, para minimizar a energia de interação spin-spin de uma rede bidimensional construiu-se uma rede que obedece a regra do gelo, ou seja, dois spins entrando e dois spins saindo. Este material artificial consiste de ilhas de permaloy alongadas, com o eixo maior alternando em orientação ao longo das duas direções prin-

5. Gelos de Spins Bidimensionais

cipais (x, y) do arranjo mostrado na figura 4.1. A dimensão das ilhas são suficientemente pequenas, de maneira que os spins atômicos são alinhados ferromagneticamente em um domínio simples, apontando ao longo da maior dimensão da ilha.

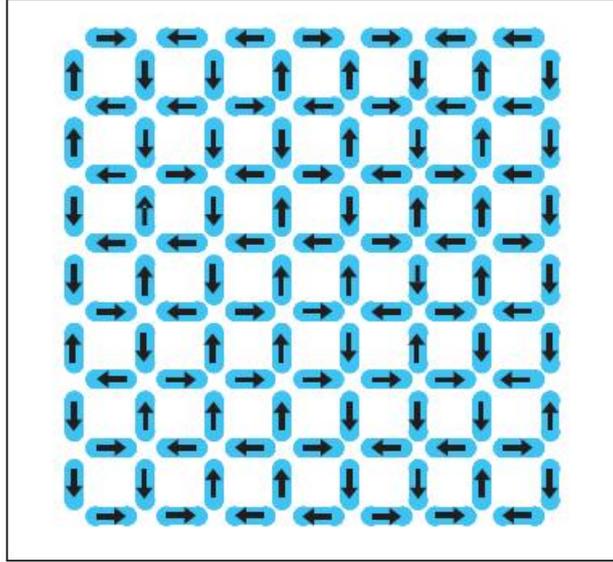


Figura 4.1: Ilustração da frustração sobre uma rede bidimensional. Cada ilha na rede é um único domínio ferromagnético com o momento apontando ao longo do maior eixo[2].

A rede considerada por Mól e colaboradores possui um arranjo parecido ao que é mencionado na referência [2]. Neste caso, foi notado que a interação entre as nanoilhas é de longo alcance e é essencialmente dipolar. Desta forma, as ilhas foram substituídas por dipolos puntiformes e usados 2 tipos de condições de contorno: periódica e aberta. Ambas levaram a resultados similares.

Para estudar esse sistema bidimensional partiu-se de um hamiltoniano que descreve as interações dipolares entre ilhas magnéticas:

$$H_{SI} = Da^3 \sum_{i \neq j} \left[\frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{r_{ij}^3} - \frac{3(\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right]. \quad (4.1)$$

onde $D = \mu_0 \mu^2 / 4\pi a^3$ é a constante de acoplamento da interação dipolar, a é

5. Gelos de Spins Bidimensionais

a distância entre sítios e \vec{S}_i representa os momentos dipolares (ligações entre os vértices horizontais e verticais).

Iniciando com o estado fundamental, foram obtidos alguns estados excitados com a inversão dos spins na rede. Ao inverter um spin é observado que próximo a esse determinado ponto da rede passa a existir 3 spins entrando e 1 saindo (carga negativa), e 3 spins saindo e 1 entrando (carga positiva). Essas cargas magnéticas podem ser separadas espacialmente, obedecendo a regra do gelo, a medida que outras excitações são acrescentadas. No entanto, eles notaram que apesar da separação existe uma corda que liga tais “monopólos” e esta corda possui tensão diferente de zero. A corda surge por questões topológicas da rede, já que há uma mudança na configuração dos spins entre as cargas.

Os cálculos indicaram que o custo da energia total de um par monopólo-antimonopólo separados por uma certa distância r é a soma do termo usual coulombiano, q/r , mais o termo linear br . Isto pode ser observado na figura 4.2, onde tem-se a energia do sistema em função da separação espacial dos monopólos. Nota-se um comportamento diferente do encontrado para gelos de spins tridimensionais. Em particular, os monopólos não se encontram livres, tendo sido encontrada dependência com a separação dos monopólos.

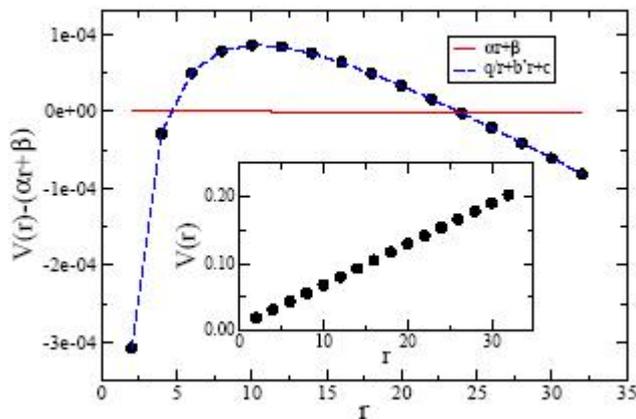


Figura 4.2: Energia em função da separação dos monopólos no gelo de spin bidimensional[4], onde α e β são os termos encontrados do ajuste linear.

5. Gelos de Spins Bidimensionais

As cordas que ligam o par monopólo-antimonopólo podem desaparecer? Este é um questionamento que Mól e colaboradores fizeram e, por isso, argumentaram que o número de configurações por valor de energia $E(r)$ aumenta com r , ou seja, a entropia $S(r)$ aumenta proporcionalmente com uma potência de r ($S \propto r^n$), assim como o valor da energia $E(r)$ também aumenta com r . Portanto, pôde-se concluir que a energia livre, dada por $F = E(r) - TS(r)$, muda de sinal em uma temperatura T_c , ou seja, aumentando a temperatura no sistema para um certo valor de r , com $E(r)$ e $S(r)$ fixo, a energia livre (F) tende a ficar negativa. Considerando que $F < 0$ implica em $b < 0$ [37], com o aumento da temperatura a tensão (b) da corda vai diminuindo, relaxando, até finalmente se anular em T_c , o que permitiria dizer que os monopólos estariam livres.

4.2 Modelo Contínuo para Gelos de Spins Bidimensionais

O estado fundamental do gelo de spins bidimensional em uma rede regular de espaçamento a pode ser obtido a partir da discretização do seguinte campo contínuo de spins:

$$\vec{S}_0(\vec{r}) = -\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\cos\left(\frac{\pi y}{a}\right)\vec{i} + \sin\left(\frac{\pi y}{a}\right)\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)\vec{j}. \quad (4.2)$$

O traçado do campo representado na Eq.(4.2) resulta no diagrama mostrado na Fig.4.3, para uma rede de espaçamento $a = \pi$. Verifica-se que o estado fundamental é desordenado e que o campo satisfaz a regra de gelo, tendo, em cada vértice, dois spins apontando para dentro e dois spins apontando para fora. Portanto, podemos dizer que esta rede, composta por diversas ilhas, é equivalente ao gelo de spin bidimensional descrito nas referências [2, 4].

Quando analisamos a figura 4.4 podemos notar que a configuração escolhida para construir as ilhas da figura 4.3 não ocorre por acaso. Observamos na figura 4.4 que existem 16 possibilidades para a configuração de 4

5. Gelos de Spins Bidimensionais

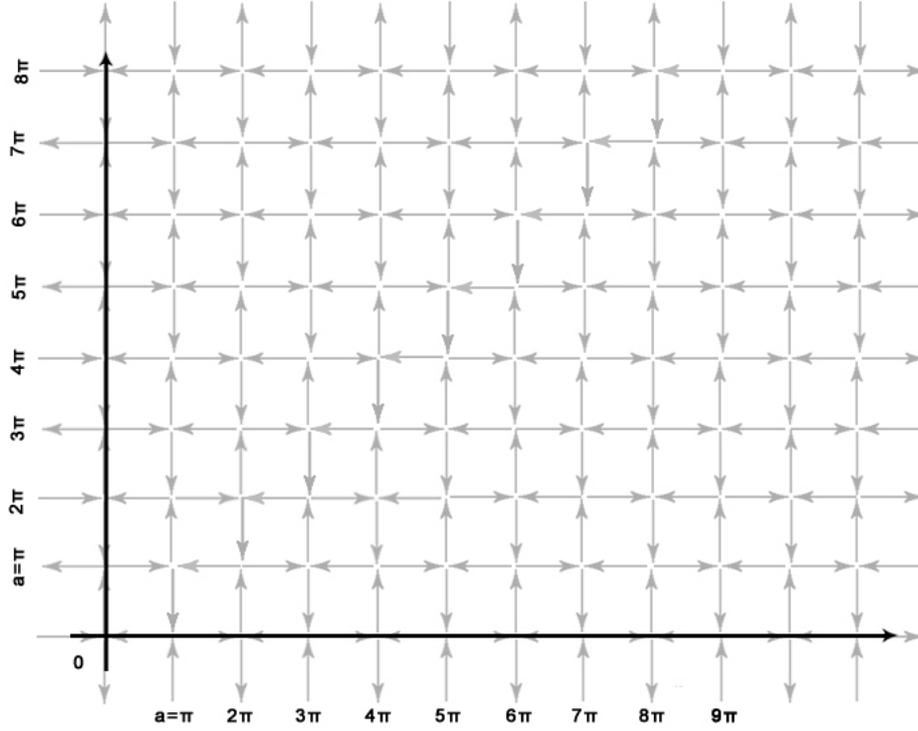


Figura 4.3: Diagrama do campo de spins da Eq.(4.2). A regra de gelo para gelos de spins bidimensionais está satisfeita em cada vértice e em cada célula.

momentos magnéticos, sendo que o tipo III e o tipo IV não obedecem a regra do gelo. No modelo discreto da referência [4], nas configurações do tipo I e do tipo II, que obedecem a regra do gelo, o primeiro tem a configuração de menor energia já que não possui um “spin resultante” como é notado na configuração do tipo II.

Pode-se verificar, em cada vértice do diagrama, que o campo possui divergente nulo, o que também pode ser verificado formalmente tomando-se o divergente da Eq.(4.2),

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{S}_0 = \frac{\partial S_{0x}}{\partial x} + \frac{\partial S_{0y}}{\partial y} = 0. \quad (4.3)$$

Já o rotacional do campo se alterna na rede entre valores positivos e negativos, formando uma figura de tabuleiro de xadrez, como mostrado na

5. Gelos de Spins Bidimensionais

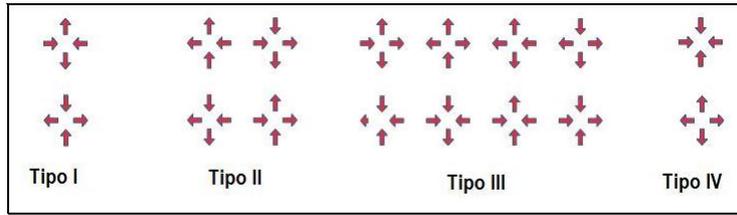


Figura 4.4: Topologias diferentes para a configuração de 4 momentos magnéticos. O tipo I e II obedecem a regra do gelo, enquanto o tipo III e IV não obedecem a regra do gelo[2].

figura 4.5,

$$\nabla \times \vec{S}_0 = \frac{\partial S_{0y}}{\partial x} - \frac{\partial S_{0x}}{\partial y}. \quad (4.4)$$

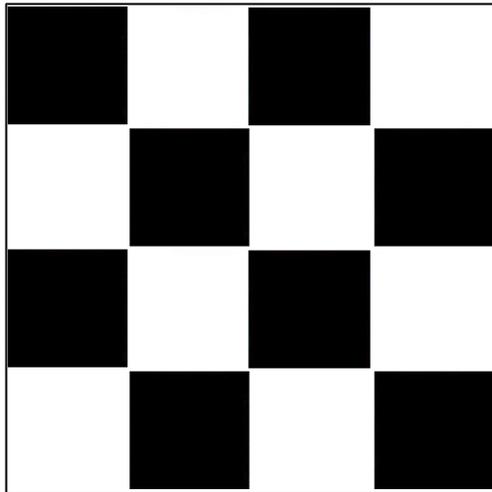


Figura 4.5: Representação do rotacional do campo analisado.

O objetivo desse trabalho é estudar um hamiltoniano contínuo que apresente como estado fundamental o estado representado pela Eq.(4.2). Pode-se verificar que um dos possíveis hamiltonianos que apresenta esta característica é dado por

5. Gelos de Spins Bidimensionais

$$\begin{aligned}
H = & \left(\frac{\partial S_x}{\partial x} + \frac{\partial S_y}{\partial y} \right)^2 + \lambda_1 \left[A - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial S_y}{\partial x} - \frac{\partial S_x}{\partial y} \right) \right]^2 \\
& + \lambda \left[\left(S_x - \frac{\partial A}{\partial y} \right)^2 + \left(S_y + \frac{\partial A}{\partial x} \right)^2 \right] \\
& + \lambda_2 \left[\vec{S}^2 + A^2 - \frac{\partial S_x}{\partial x} \frac{\partial S_y}{\partial y} - 1 \right]^2, \tag{4.5}
\end{aligned}$$

onde $\vec{S}(x, y) = S_x(x, y)\vec{i} + S_y(x, y)\vec{j}$ é o campo de spins, A é um campo auxiliar, introduzido de forma a fazer a parte cinemática quadrática nos campos, sendo $A = (1/2)(\vec{\nabla} \times \vec{S}) \cdot \vec{k}$, λ_1 é um multiplicador de lagrange utilizado para fixar a condição anterior e λ é usado para garantir que, no mínimo, $\nabla^2 \vec{S} = -2\vec{S}$. O termo proporcional a λ_2 é introduzido para fixar a condição entre colchetes, que delimita as soluções àquelas que representam um campo de spins oscilatório de módulo máximo igual à 1. São os únicos termos não quadráticos nos campos apresentados na Hamiltoniana. Neste trabalho, as constantes de interação λ_1 e λ_2 apresentadas em (4.5) foram consideradas como arbitrariamente pequenas, não gerando efeitos para o cálculo da energia do sistema. No entanto, sua presença é importante na definição do estado fundamental de H .

O hamiltoniano 4.5 foi construído para reproduzir a partir do estado fundamental (equação 4.2) as condições dada pelas equações 4.3 e 4.4. Portanto, analisando cada termo do hamiltoniano (4.5) temos que o primeiro termo garante:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{S}_0 = 0. \tag{4.6}$$

O segundo termo define:

$$A\vec{k} = \frac{1}{2} (\vec{\nabla} \times \vec{S}_0). \tag{4.7}$$

E no terceiro termo tem-se:

5. Gelos de Spins Bidimensionais

$$\vec{S} = \vec{\nabla} \times A\vec{k} = \left(\frac{\partial}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial z} \vec{k} \right) \times A\vec{k} = \frac{\partial A}{\partial x} \vec{j} + \frac{\partial A}{\partial y} \vec{i}. \quad (4.8)$$

Analisando a seguinte igualdade,

$$\vec{S} = S_x \vec{i} + S_y \vec{j} = \frac{\partial A}{\partial x} \vec{j} + \frac{\partial A}{\partial y} \vec{i}, \quad (4.9)$$

isso implica em dizer que:

$$\left(S_x - \frac{\partial A}{\partial y} \right) \vec{i} + \left(S_y - \frac{\partial A}{\partial x} \right) \vec{j} = 0. \quad (4.10)$$

conforme garantido pelo terceiro termo do hamiltoniano (4.5). Substituindo (4.7) em (4.8):

$$\vec{S} = \vec{\nabla} \times \frac{1}{2} (\vec{\nabla} \times \vec{S}) \quad (4.11)$$

$$2\vec{S} = \vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{S} = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{S}) - \nabla^2 \vec{S}.$$

Sabendo que o termo $\vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{S})$ é nulo,

$$\nabla^2 \vec{S} = -2\vec{S}. \quad (4.12)$$

O hamiltoniano (4.5) apresenta invariância rotacional e translacional, e outro multiplicador de lagrange pode ser introduzido para fixar a origem e orientação do sistema, quebrando as invariâncias acima citadas, da forma $H_3 = \lambda_3 (\vec{S}(\vec{r}_0) - \hat{e}_0)^2$, fixando a orientação do campo de spins na direção do unitário \hat{e}_0 na posição \vec{r}_0 . Outros termos podem ser adicionados ao Hamiltoniano dado pela Eq.(4.5) sem alterar o estado fundamental, mas poderão, eventualmente, gerar diferentes energias para os estados excitados.

A implementação de excitações no sistema foi feita construindo-se estados a partir do estado fundamental (4.2) que representem inversão na direção dos spins nas linhas que ligam os vértices da rede. Quando isso é feito, alteramos a configuração das ilhas e, conseqüentemente, alteramos também

5. Gelos de Spins Bidimensionais

a energia do sistema. Dizemos que não estamos mais em um estado fundamental e sim em um estado excitado. Em analogia ao caso unidimensional estudado no capítulo 4, propõe-se, para uma excitação localizada na posição \vec{r}_e , a seguinte forma funcional

$$\vec{\xi}_{\vec{r}_e}(x, y) = e^{-\gamma(\vec{r}-\vec{r}_e)^2} [a((\vec{r}-\vec{r}_e)^2)^4 - b]. \quad (4.13)$$

Sabendo que,

$$(\vec{r}-\vec{r}_e)^2 = (x-x_e)^2 + (y-y_e)^2, \quad (4.14)$$

a equação (4.13) pode ser expressa da seguinte forma

$$\vec{\xi}_{\vec{r}_e}(x, y) = e^{-\gamma[(x-x_e)^2 - (y-y_e)^2]} [a((x-x_e)^2 - (y-y_e)^2)^4 - b], \quad (4.15)$$

com $\gamma = 0.3283676784$ representando a largura da excitação, no qual o valor utilizado é o que foi calculado para o caso unidimensional. Em princípio, não há garantias de que os mesmos parâmetros que minimizam a energia do sistema no caso unidimensional sejam os parâmetros ótimos para o caso bidimensional, uma vez que os hamiltonianos não são os mesmos. Assim, as excitações introduzidas com parâmetros iguais aos do caso unidimensional devem ser entendidas como uma primeira aproximação para o resultado exato.

Outras classes de hamiltonianos também foram estudados até chegarmos no hamiltoniano (4.5) que representa o sistema desejado. Os valores de γ , a e b observados na equação (4.15) foram ajustado de modo a minimizar a energia do sistema no caso unidimensional. Tais valores foram calculados através do método do gradiente (Apêndice A) e representam num primeiro momento uma boa aproximação para os valores de γ , a e b para o modelo bidimensional.

É importante frisar que x_e e y_e representam o local da excitação e estes atuam em um eixo preferencial, por exemplo, para $x_e = \pi/2$ e $y_e = 0$ temos uma inversão no sentido da componente x do spin, no entanto, para $x_e = \pi$ e $y_e = \pi/2$ a inversão ocorre no sentido da componente y do spin.

5. Gelos de Spins Bidimensionais

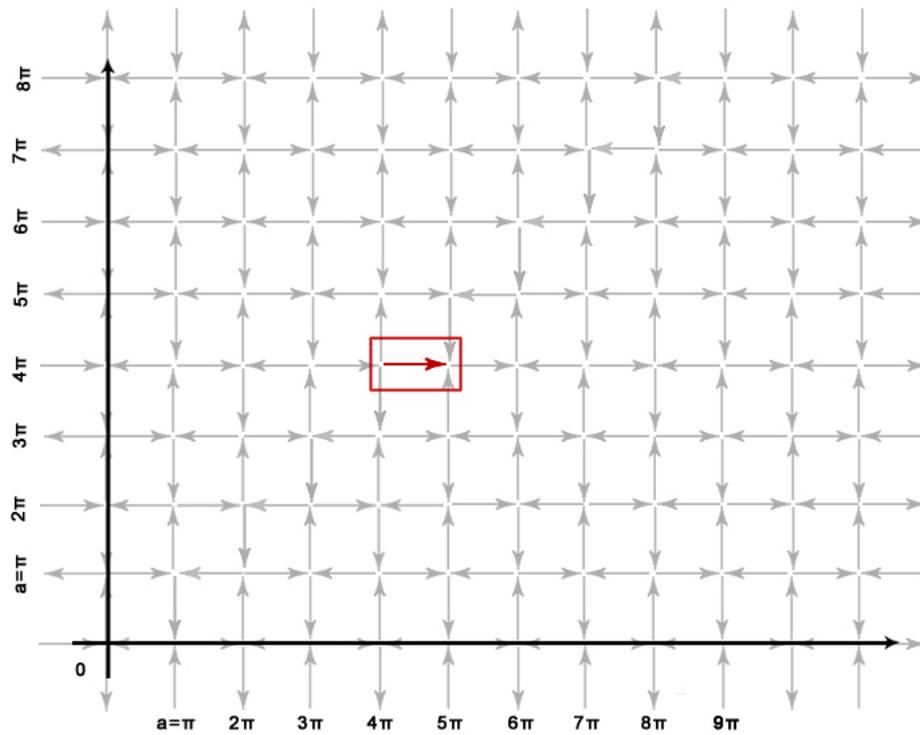


Figura 4.6: Diagrama do campo de spins de $\vec{S} = \vec{S}_0 + \vec{\xi}_{re}$. A excitação introduzida viola a regra de gelo para os vértices adjacentes ao spin destacado na figura.

5. Gelos de Spins Bidimensionais

O mapeamento do estado resultante da adição de uma excitação ao estado fundamental é mostrado na Fig.4.6 (utilizando $a = \pi$), onde está destacado o domínio que viola a regra do gelo.

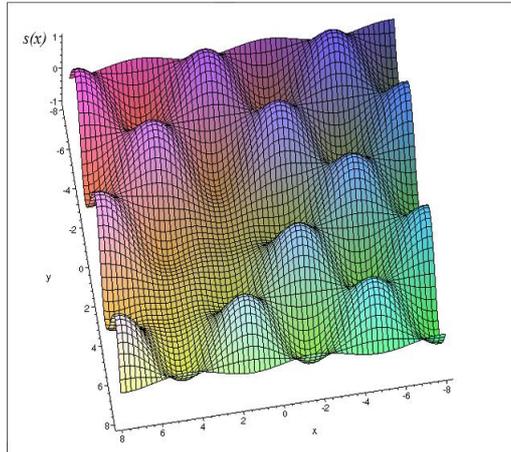


Figura 4.7: Diagrama do campo de spins no eixo x com 3 excitações introduzidas, onde duas componentes x dos spins são invertidas.

Quando introduzimos excitações no sistema o campo de spins sofre alterações. Esse campo de spins, por ser um vetor bidimensional, possui, portanto, uma componente x representada por S_x e uma componente y representada por S_y . Nas figuras 4.7 e 4.8 mostramos o campo de spins quando há três excitações. Neste caso de três excitações no campo temos que duas das excitações estão localizadas no sentido da componente x , ou seja, em S_x (Fig.4.7), enquanto que uma das excitações está localizada no sentido da componente y , ou seja, em S_y (Fig.4.8). É importante dizer que nesse caso o caminho escolhido foi um caminho diagonal, onde as três primeiras excitações estão apresentadas na Fig.4.9.

Deve-se salientar que γ representa a largura da excitação e por tal motivo encontrar o seu valor adequado é de extrema relevância. Podemos entender essa importância ao analisar o seguinte exemplo: uma dada função $f(x)$, que tem um multiplicador γ , é esboçada na Fig.4.10. Para invertermos o caminho da função, traçado pontilhado da Fig.4.11, devemos inverter o spin da rede. Esta inversão está diretamente relacionada ao valor do γ , pois,

5. Gelos de Spins Bidimensionais

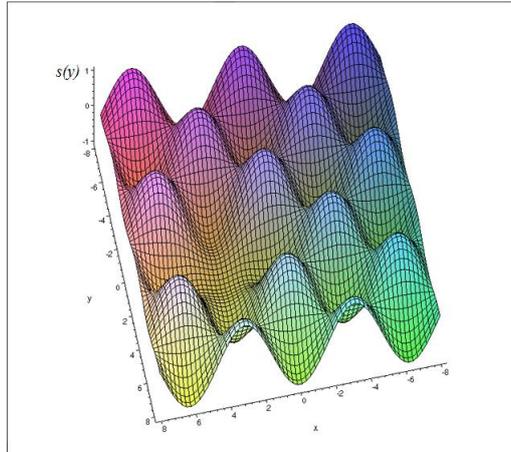


Figura 4.8: Diagrama do campo de spins no eixo y com 3 excitações introduzidas, onde uma componente y do spin é invertida.

quando γ é pequeno a gaussiana é larga, logo, vários spins podem ser invertidos de uma única vez, como pode ser visto na Fig.4.11 que tem dois spins invertidos, gerando um valor de energia mais alto para o sistema, conforme a equação (4.5). No entanto, se γ é grande a largura da gaussiana será pequena, logo, poucos spins serão invertidos. Entretanto, o hamiltoniano (4.5) depende da derivada do campo de spins \vec{S} , ou seja, dependerá de derivadas da excitação $\vec{\xi}_{re}$. Essas derivadas possuem termos diretamente proporcionais a γ , e por isso, altos valores de γ geram também valores altos para a energia do sistema. O desejado é encontrar um valor de γ que possa inverter somente um único spin de cada vez, como é mostrado na Fig.4.12, e que gere o menor valor de energia para o estado excitado.

5. Gelos de Spins Bidimensionais

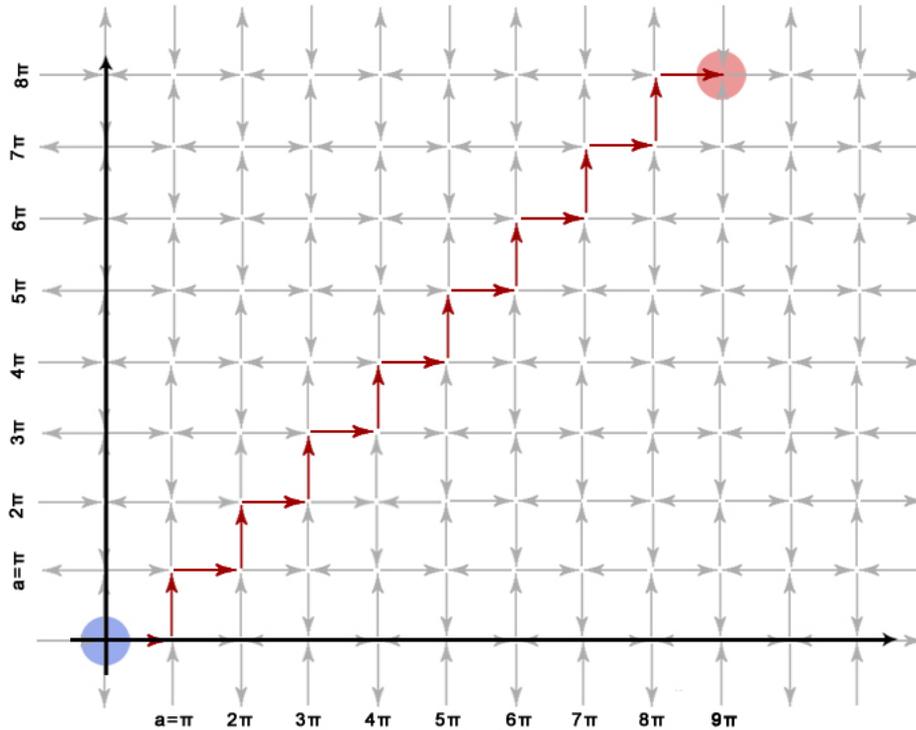


Figura 4.9: Rede bidimensional: um caminho diagonal é escolhido para inverter os spins e assim criar a excitação no sistema. Com o fluxo magnético diferente de zero é criado o dipolo magnético. O dipolo magnético é separado espacialmente de acordo com o número de excitações implementadas no sistema.

Na Fig.4.9 temos um exemplo da rede bidimensional onde alguns spins foram “flipados”, ou seja invertidos, o que representa a excitação na rede. O número de spins “flipados” significa o número de excitações que foram implementadas no sistema dado pela Eq.(4.5). Quando invertemos o spin criamos um fluxo magnético não nulo como pode ser observado na figura 4.9, criamos um ponto da rede com fluxo positivo (disco azul) e um ponto da rede com fluxo negativo (disco vermelho). Esse dipolo que é criado no sistema pode ser separado espacialmente introduzindo mais excitações na rede. No caso da Fig.4.9, escolhemos um caminho diagonal para introduzir as excitações desejadas.

5. Gelos de Spins Bidimensionais

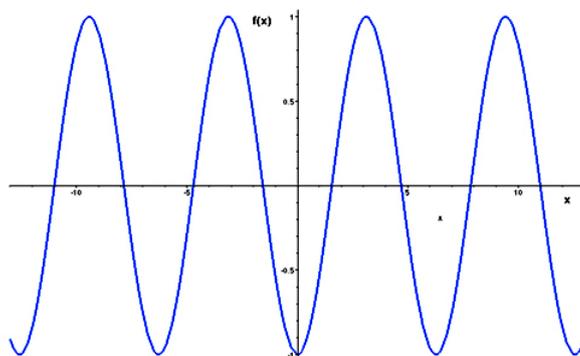


Figura 4.10: Representação da função no seu estado fundamental

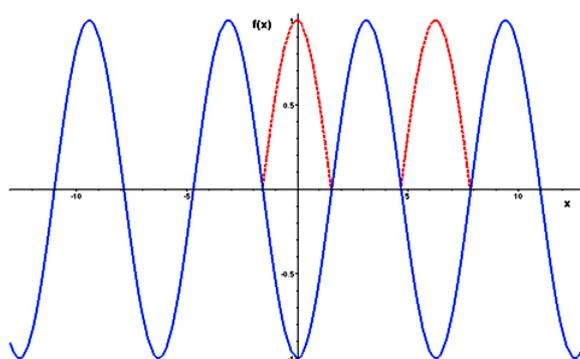


Figura 4.11: Representação da função com alguns spins invertidos devido ao valor pequeno de γ , que fornece uma gaussiana grande.

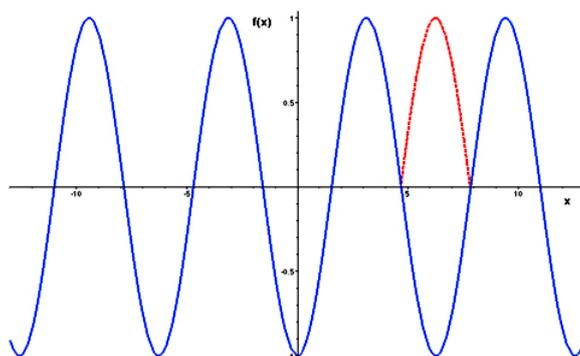


Figura 4.12: Representação da função com um spin invertido devido ao valor ideal de γ , que fornece uma gaussiana adequada para a inversão de um único spin.

5. Gelos de Spins Bidimensionais

Na tabela 4.1 encontram-se os dados dos cálculos realizados para a obtenção da energia do sistema nos seus devidos níveis e a dependência dessa energia com a separação dos monopólos magnéticos, para valores diferentes da interação λ .

As figuras 4.13, 4.14 e 4.15 representam a densidade de energia com a introdução de 1, 2 e 10 excitações respectivamente, assim como as figuras 4.16, 4.17 e 4.18 também representam o fluxo magnético para 1, 2 e 10 excitações respectivamente. Neste caso, os cálculos foram executados com o valor de $\lambda = 0.1$ e seguindo um caminho diagonal.

De acordo com a figura 4.13 podemos notar que a implementação de uma excitação faz surgir o dipolo magnético, isto também é perceptível quando observamos a figura 4.16 que mostra presença de um fluxo magnético calculado por $\vec{\nabla} \cdot \vec{S}$, e representado pelo pico no eixo positivo de z (pólo norte) e pelo pico no eixo negativo de z (pólo sul). Com o aumento de excitações implementadas no problema é observado, como esperado, que o dipolo vá se separando espacialmente mas, ainda permanecem ligados por uma “string”. Este fato pode ser analisado nas figuras 4.13, 4.14 e 4.15 que representam a densidade de energia com diferentes excitações.

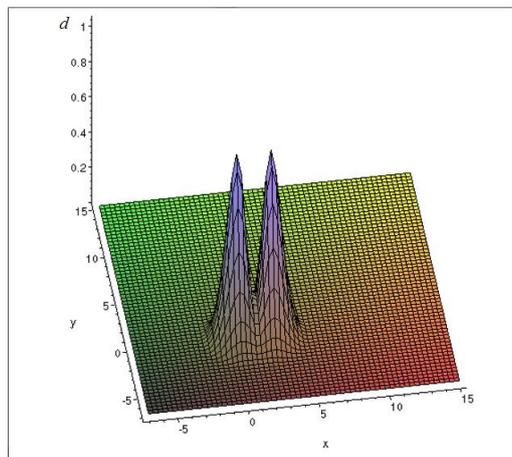


Figura 4.13: Densidade de energia com 1 excitação. Valor de $\lambda = 0.1$ e caminho percorrido diagonal.

Obviamente, o fluxo magnético (figuras 4.16, 4.17 e 4.18) não nulo, que

5. Gelos de Spins Bidimensionais

Tabela 4.1: Energia das “strings” de acordo com a distância de separação das quasi-partículas.

Excitações	Distância	Hamiltoniano					
		$\lambda = 0.01$	$\lambda = 0.1$	$\lambda = 0.3$	$\lambda = 0.5$	$\lambda = 0.7$	$\lambda = 0.9$
1	3,1416	7,0576	8,3279	11,1508	13,9736	16,7965	19,6193
2	4,4429	8,9222	11,1564	16,1212	21,0860	26,0508	31,0156
3	7,0248	9,2018	12,3975	19,4989	26,6003	33,7017	40,8032
4	8,8858	9,7821	13,9578	23,2373	32,5167	41,7961	51,0755
5	11,3272	10,3659	15,5221	26,9803	38,4384	49,8966	61,3548
6	13,3286	10,9482	17,0846	30,7211	44,3575	57,9940	71,6304
7	15,7080	11,5305	18,6471	34,4619	50,2766	66,0914	81,9061
8	17,7715	12,1128	20,2097	38,2027	56,1957	74,1887	92,1818
9	20,1160	12,6951	21,7722	41,9435	62,1148	82,2861	102,4575
10	22,2144	13,2774	23,3347	45,6843	68,0339	90,3835	112,7331
11	24,5366	13,8597	24,8972	49,4251	73,9530	98,4809	123,0088
12	26,6573	14,4419	26,4597	53,1659	79,8721	106,5783	133,2845
13	28,9641	15,0242	28,0222	56,9067	85,7912	114,6757	143,5602
14	31,1002	15,6065	29,5848	60,6475	91,7103	122,7731	153,8358
15	33,3956	16,1888	31,1473	64,3883	97,6294	130,8704	164,1115
16	35,5431	16,7709	32,7093	68,1279	103,5466	138,9652	174,3838
17	37,8298	17,3534	34,2723	71,8699	109,4676	147,0652	184,6628
18	39,9860	17,9357	35,8348	75,6108	115,3867	155,1626	194,9385
19	42,2658	18,5180	37,3973	79,3516	121,3058	163,2599	205,2142
20	44,4288	19,1002	38,9599	83,0924	127,2249	171,3574	215,4899
21	46,7031	19,6825	40,5224	86,8332	133,1440	179,4548	225,7655
22	48,8717	20,2648	42,0849	90,5740	139,0631	187,5521	236,0412

5. Gelos de Spins Bidimensionais

Excitações	Distância	Hamiltoniano				
		$\lambda = 1.1$	$\lambda = 1.3$	$\lambda = 1.5$	$\lambda = 1.7$	$\lambda = 1.9$
1	3,1416	22,4422	25,2651	28,0879	30,9108	33,7336
2	4,4429	35,9804	40,9452	45,9100	50,8748	55,8396
3	7,0248	47,9046	55,0060	62,1074	69,2089	76,3103
4	8,8858	60,3550	69,6344	78,1380	88,1932	97,4726
5	11,3272	72,8129	84,2711	95,7293	107,1874	118,6456
6	13,3286	85,2669	98,9033	112,5399	126,1762	139,8127
7	15,7080	97,7208	113,5356	129,3503	145,1651	160,9798
8	17,7715	110,1748	128,1678	146,1609	164,1539	182,1469
9	20,1160	122,6288	142,8001	162,9714	183,1427	203,3140
10	22,2144	135,0827	157,4323	179,7820	202,1316	224,4812
11	24,5366	147,5367	172,0646	196,5925	221,1204	245,6483
12	26,6573	159,9907	186,6969	213,4030	240,1092	266,8154
13	28,9641	172,4446	201,3291	230,2136	259,0981	287,9825
14	31,1002	184,8986	215,9614	247,0241	278,0869	309,1497
15	33,3956	197,3526	230,5936	263,8347	297,0757	330,3168
16	35,5431	209,8024	245,2211	280,6397	316,0583	351,4770
17	37,8298	222,2605	259,8581	297,4557	335,0534	372,6510
18	39,9860	234,7144	274,4904	314,2663	354,0422	393,8181
19	42,2658	247,1684	289,1226	331,0768	373,0310	414,9853
20	44,4288	259,6224	303,7549	347,8874	392,0199	436,1524
21	46,7031	272,0763	318,3871	364,6979	411,0087	457,3195
22	48,8717	284,5303	333,0194	381,5085	429,9975	478,4866

5. Gelos de Spins Bidimensionais

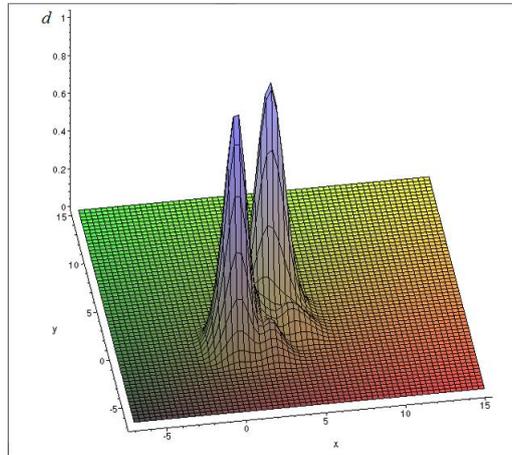


Figura 4.14: Densidade de energia com 2 excitações. Valor de $\lambda = 0.1$ e caminho percorrido diagonal.

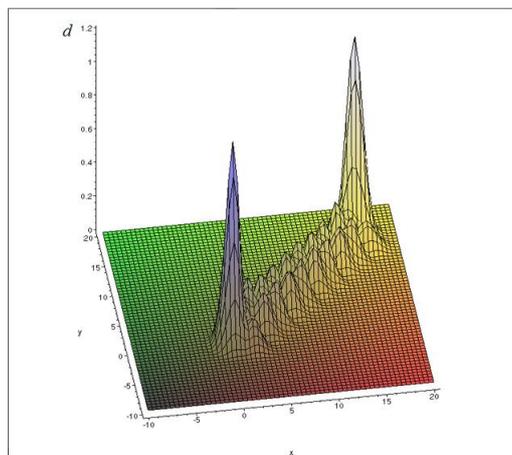


Figura 4.15: Densidade de energia com 10 excitações. Valor de $\lambda = 0.1$ e caminho percorrido diagonal.

5. Gelos de Spins Bidimensionais

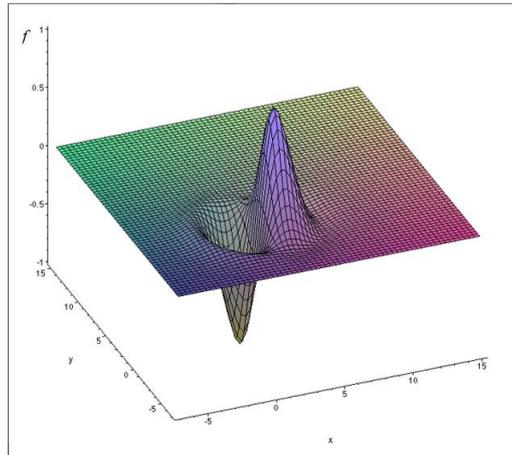


Figura 4.16: Fluxo magnético com 1 excitação. Valor de $\lambda = 0.1$ e caminho percorrido diagonal.

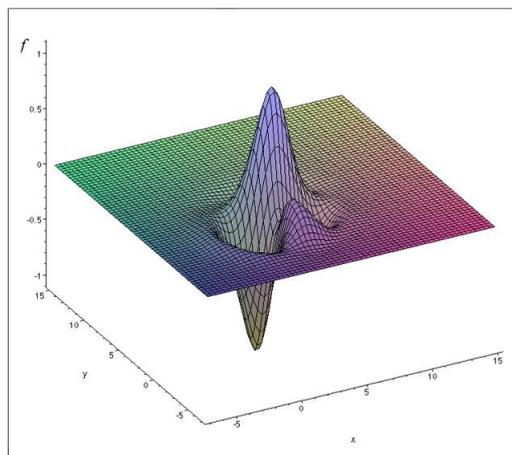


Figura 4.17: Fluxo magnético com 2 excitações. Valor de $\lambda = 0.1$ e caminho percorrido diagonal.

5. Gelos de Spins Bidimensionais

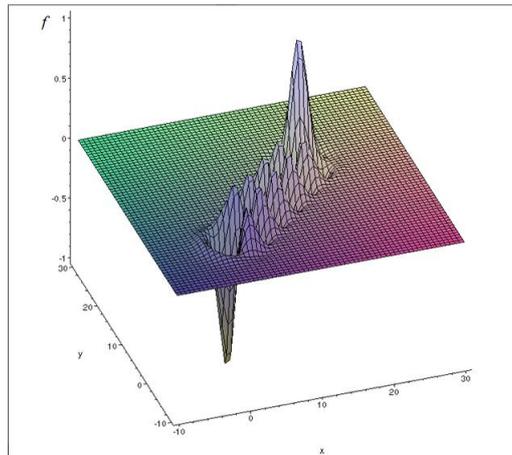


Figura 4.18: Fluxo magnético com 10 excitações. Valor de $\lambda = 0.1$ e caminho percorrido diagonal.

surge quando introduzimos a excitação no problema, também é observado ser separado espacialmente de acordo com o número de excitações que é implementado na rede. Além disso, podemos notar que entre os picos do fluxo magnético existe uma certa flutuação na rede, isto representa a corda que está ligando as quasi-partículas, ou seja, os pólos norte e sul magnético. Isto nos permite afirmar que os “monopólos” não estão livres.

5. Gelos de Spins Bidimensionais

Apresentamos também nas figuras 4.19 e 4.20 o comportamento da energia em função da separação dos monopólos (r). Na figura 4.20 temos uma análise da energia com o melhor ajuste da sua equação. Tais figuras foram construídas para um caminho diagonal e com o valor de $\lambda = 0.1$. Analisando a figura 4.19 nota-se que a energia varia linearmente com r , o que corresponde a uma interação tipo “string” e assinala o confinamento dos monopólos, semelhante a um sistema de dois quarks (mésons)[38]. Um ajuste linear (linha preta) foi realizado como mostra a figura 4.19 e apresentou a seguinte equação de mínimos quadrados

$$y = 7,82601 + 0,7001r. \quad (4.16)$$

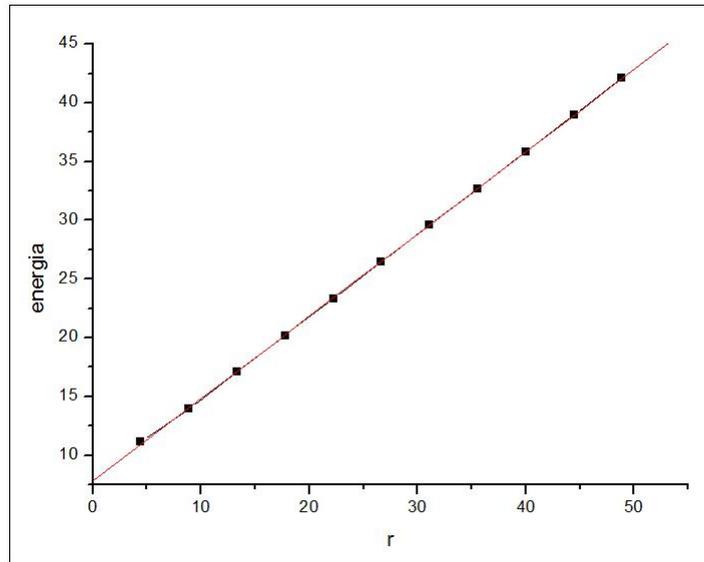


Figura 4.19: Energia em função da separação dos monopólos. Valor de $\lambda = 0.1$ e caminho percorrido diagonal

Além disso, um outro ajuste (linha vermelha da figura 4.19) foi feito introduzindo o termo $1/r$ como mostra a equação (4.17). Subtraindo a energia do sistema do ajuste linear dado por (4.16), (figura 4.20), observamos que há um resíduo que depende ainda de potências negativas de r (ex: $1/r$), o que pode ser confirmado quando subtraímos o ajuste feito para $1/r$ do ajuste linear. Isto indica a presença de uma interação do tipo coulombiana entre os

5. Gelos de Spins Bidimensionais

monopólos.

$$y = 7,50622 + 0,70713r + \frac{2,14343}{r} \quad (4.17)$$

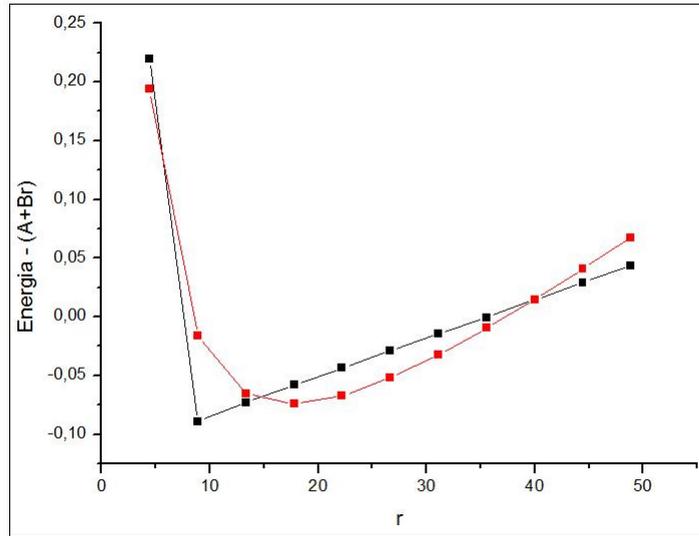


Figura 4.20: Energia em função da separação dos monopólos considerando o melhor ajuste. A linha preta representa a subtração da energia do sistema pelo ajuste linear, o que mostra que há um resíduo que se torna maior para valores menores de r . A linha vermelha representa a subtração do ajuste $1/r$ pelo ajuste linear, o que confirma a presença de um resíduo. Valor de $\lambda = 0.1$ e caminho percorrido diagonal

Um outro fato importante que foi estudado, é que a implementação da excitação na rede pode ir por um caminho que não seja o diagonal, como mostrado na Fig.4.21. Sendo assim, excitações no caminho horizontal foram realizadas invertendo os spins até a distância desejada de separação dos dipólos.

Na tabela 4.2 apresentamos todos os resultados calculados para o caminho horizontal e com $\lambda = 0.1$, realizados para a obtenção da dependência da energia do sistema com a separação dos monopólos magnéticos.

Inicialmente podemos perceber no caminho horizontal que para separar os “monopólos” a uma distância aproximadamente semelhante do caminho diagonal é necessário um número maior de excitações. No entanto, isso não

5. Gelos de Spins Bidimensionais

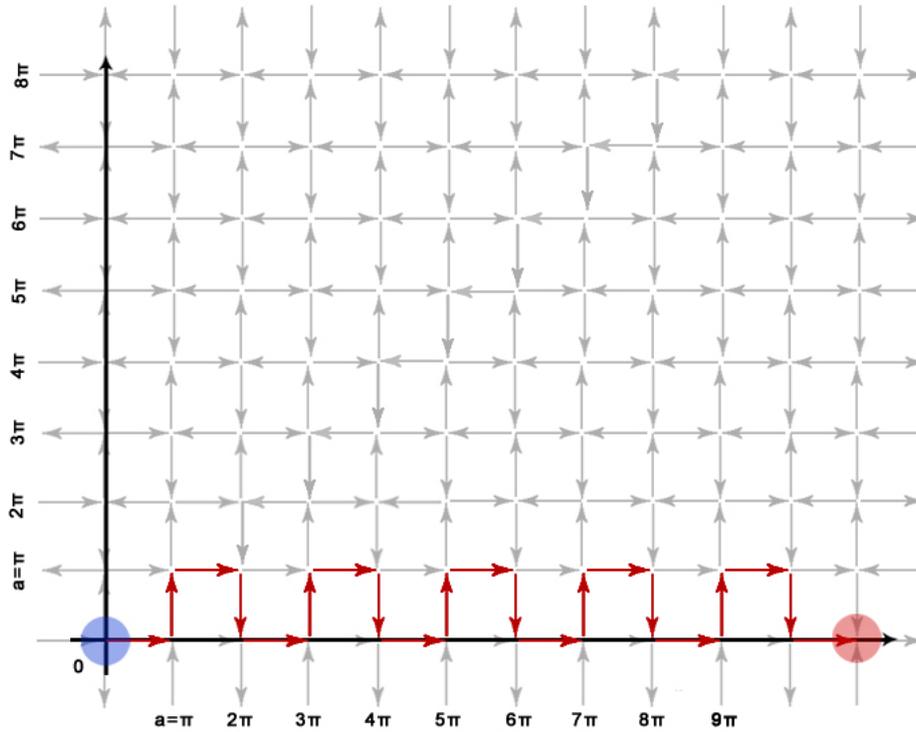


Figura 4.21: Rede bidimensional: um caminho horizontal é escolhido para inverter os spins. Com o fluxo magnético diferente de zero é criado o dipolo magnético. O dipolo magnético é separado espacialmente de acordo com o número de excitações implementadas no sistema.

implica em um valor maior de energia para o caminho horizontal. Como pode ser observado nas tabelas 4.1 e 4.2 para uma separação espacial das quasi-partículas de aproximadamente $15a$ a energia para o caminho horizontal será menor que a energia do caminho diagonal. Podemos também notar que quanto maior é a separação espacial dos “monopólos” maior se torna a diferença de energia entre os dois caminhos (horizontal e diagonal), ou seja, fica mais evidente que a energia no caminho horizontal tende a ser menor que a do caminho diagonal. Este fato pode ser explicado pelo sentido do spin invertido, ou seja, no caminho diagonal podemos observar que os spins invertidos do eixo x e do eixo y assumiram o sentido positivo. No caso do caminho horizontal, podemos notar que no eixo y os spins invertidos assumi-

5. Gelos de Spins Bidimensionais

ram alternadamente os sentidos positivo e negativo na rede. Este fato pode ter levado a um menor gasto de energia para separar os “monopólos”.

Para um caminho horizontal também apresentamos a densidade de energia e o fluxo magnético. Os cálculos foram realizados com $\lambda = 0.1$. As figuras 4.22, 4.23 e 4.24 mostram o comportamento da densidade de energia de acordo com o número de excitações que é introduzido na rede. Da mesma forma que no caminho diagonal, no caminho horizontal pode-se observar a separação dos monopólos a medida que é acrescentada a excitação. Apesar da energia de separação das quasi-partículas tender a ser menor, no caminho horizontal, ainda existe uma energia relacionada à “string” que liga os “monopólos”, ou seja, os pólos não estão livres e ainda permanecem ligados por uma corda.

As figuras 4.25, 4.26 e 4.27 representam o fluxo magnético para 1, 4 e 12 excitações respectivamente. Da mesma forma que o caso do caminho diagonal, também é observado que os fluxos magnético opostos são separado espacialmente de acordo com o número de excitações que é implementado na rede. Também notou-se que entre os picos do fluxo magnético existe uma certa flutuação na rede, isto representa a corda que está ligando as quasi-partículas, e nos permite afirmar que os “monopólos” não estão livres.

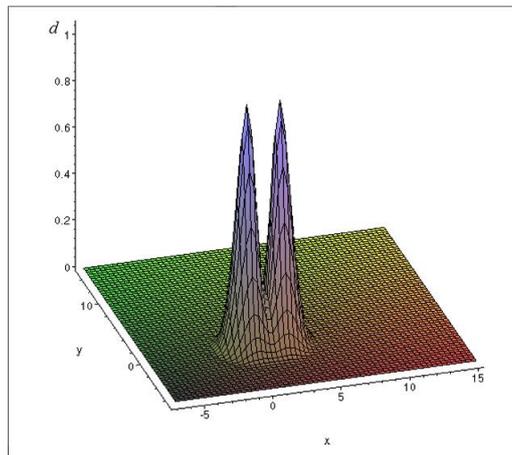


Figura 4.22: Densidade de energia com 1 excitação. Valor de $\lambda = 0.1$ e caminho percorrido horizontal.

5. Gelos de Spins Bidimensionais

Tabela 4.2: Energia das “strings” em função da distância de separação das quasi-partículas.

Excitações	Distância	Hamiltoniano ($\lambda = 0.1$)
1	3,1416	8,3279
2	4,4429	11,1564
3	7,0248	12,3975
4	6,2832	12,2333
5	9,4248	14,4235
6	9,9346	14,1143
7	12,9531	16,3237
8	12,5664	16,0121
9	15,7080	18,2219
10	16,0190	17,9103
11	19,1096	20,1201
12	18,8496	19,8085
13	21,9911	22,0183
14	22,2144	21,7067
15	25,3283	23,9165
16	25,1327	23,6050
17	28,2743	25,8142
18	28,4483	25,5032
19	31,5726	27,7130
20	31,4159	28,0158
21	34,5575	29,8802
22	34,7000	29,9302
23	37,8298	32,2444
24	37,6991	31,9214
25	40,8407	34,1679
26	40,9614	33,7862
27	44,0944	36,0578
28	43,9823	35,7467
29	47,1239	37,9452

5. Gelos de Spins Bidimensionais

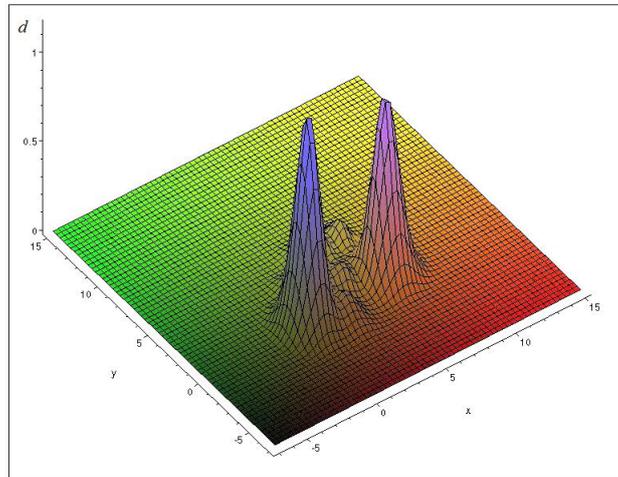


Figura 4.23: Densidade de energia com 4 excitações. Valor de $\lambda = 0.1$ e caminho percorrido horizontal.

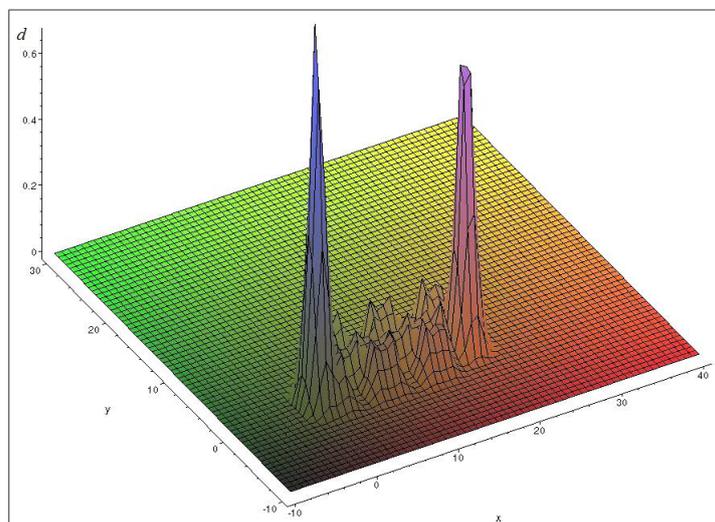


Figura 4.24: Densidade de energia com 12 excitações. Valor de $\lambda = 0.1$ e caminho percorrido horizontal.

5. Gelos de Spins Bidimensionais

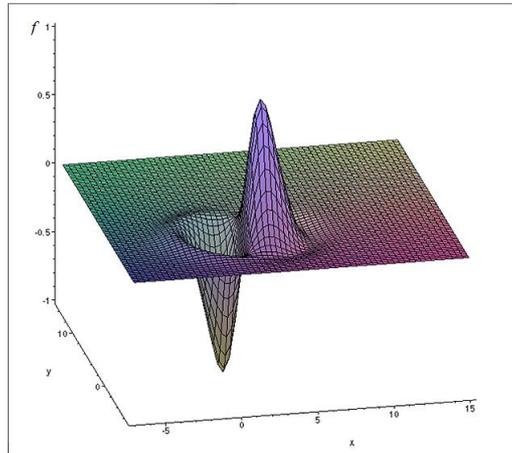


Figura 4.25: Fluxo magnético com 1 excitação. Valor de $\lambda = 0.1$ e caminho percorrido horizontal.

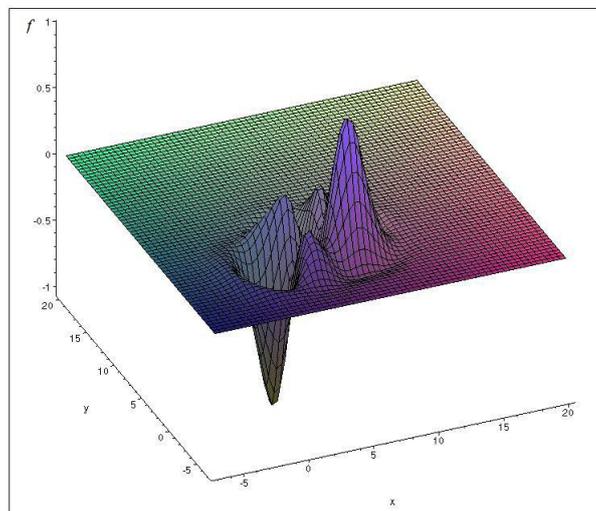


Figura 4.26: Fluxo magnético com 4 excitações. Valor de $\lambda = 0.1$ e caminho percorrido horizontal.

5. Gelos de Spins Bidimensionais

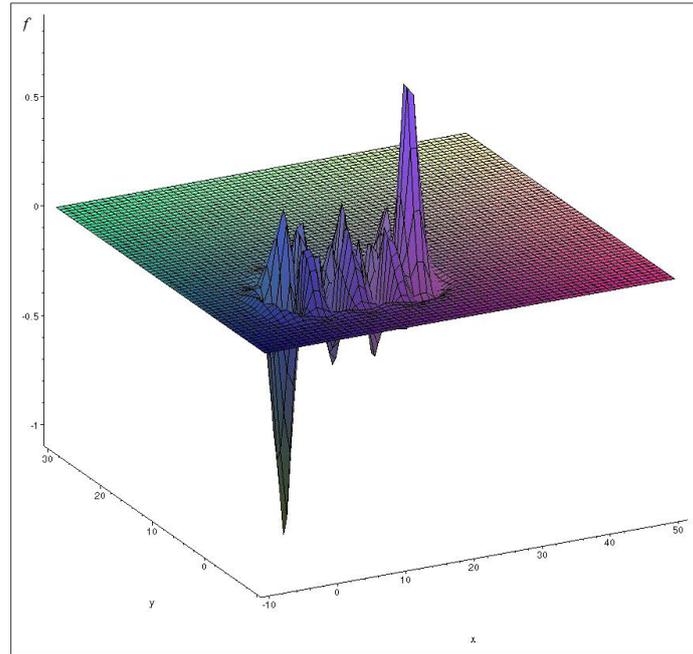


Figura 4.27: Fluxo magnético com 12 excitações. Valor de $\lambda = 0.1$ e caminho percorrido horizontal.

Semelhantemente ao caminho diagonal, apresentamos as figuras 4.28 e 4.29 que mostram o comportamento da energia em função da separação dos “monopólos” e a análise do melhor ajuste da sua equação. Na figura 4.28 notamos que a energia também varia linearmente com r , o que corresponde a uma interação tipo “string” e evidencia o confinamento dos monopólos, semelhante ao que encontramos em um sistema de dois quarks (mésons). O ajuste mostrado de vermelho na figura 4.28 é representado pela equação de mínimos quadrados

$$y = 7,70061 + 0,64336r. \quad (4.18)$$

Em seguida, um novo ajuste foi realizado introduzindo um termo em $1/r$, fornecendo

$$y = 8,93154 + 0,61404r - \frac{7,0145}{r}. \quad (4.19)$$

A figura 4.29, mostra a diferença entre a energia do sistema e o ajuste

5. Gelos de Spins Bidimensionais

linear, e também observamos que existe um resíduo que depende ainda de potências negativas de r , por exemplo: $1/r$. Isso indica presença de uma interação tipo coulombiana entre os monopólos.

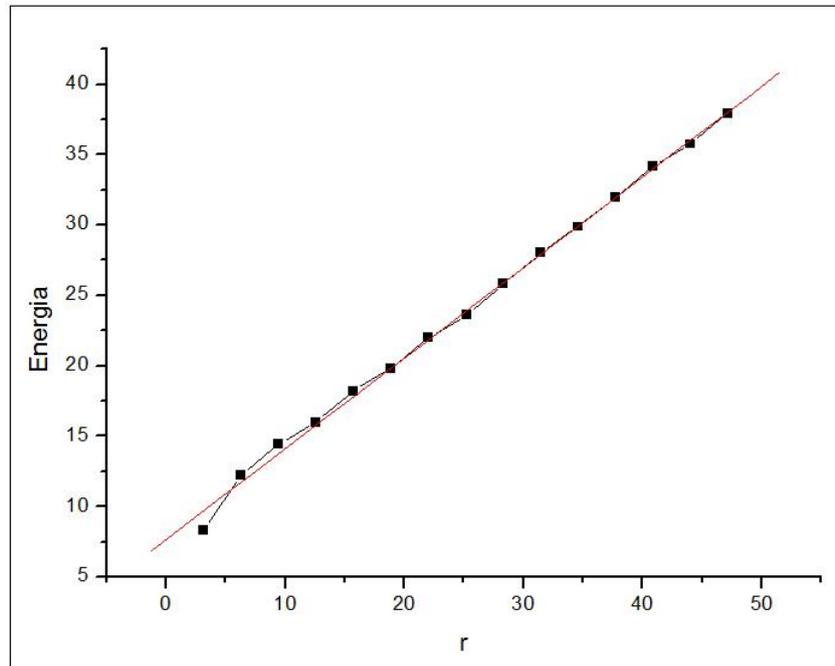


Figura 4.28: Energia em função da separação dos monopólos. Valor de $\lambda = 0.1$ e caminho percorrido horizontal

5. Gelos de Spins Bidimensionais

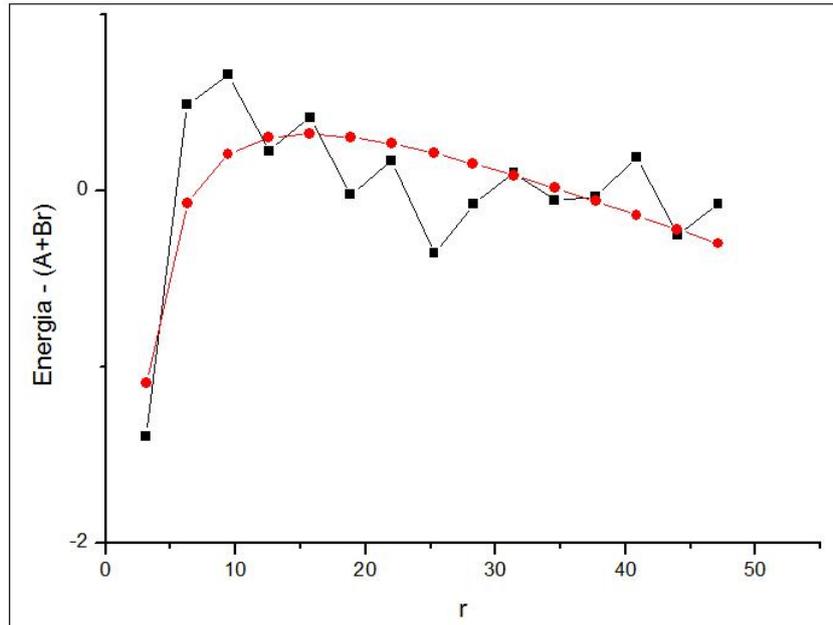


Figura 4.29: Energia em função da separação dos monopólos considerando o melhor ajuste. A linha preta representa a subtração da energia do sistema pelo ajuste linear, o que mostra que há um resíduo que se torna maior para valores menores de r . A linha vermelha representa a subtração do ajuste $1/r$ pelo ajuste linear, o que confirma a presença de um resíduo. Valor de $\lambda = 0.1$ e caminho percorrido horizontal

Nas Figuras 4.30 e 4.31 apresentamos a densidade de energia e nas figuras 4.32 e 4.33 o fluxo magnético, para o caminho diagonal utilizando $\lambda = 1.0$. Podemos notar que as quasi-partículas também são espacialmente separadas a medida que introduzimos um número maior de excitações, no entanto, para um valor maior de λ , maior será a energia da corda que liga os monopólos, ou analisando pelo lado contrário, quanto menor o valor de λ menor será a energia da corda que liga os “monopólos”. Tais afirmações podem ser observadas na tabela 4.1.

As figuras 4.30 e 4.31 que representam a densidade de energia possuem justamente uma flutuação entre os “monopólos” maior que o caso para λ menor que 1.0 porque a energia que liga os polos é maior quanto maior o valor de λ , como pode ser observado na figura 4.34. A energia do sistema cresce com o valor de λ , o que é esperado com vistas no hamiltoniano (4.5).

5. Gelos de Spins Bidimensionais

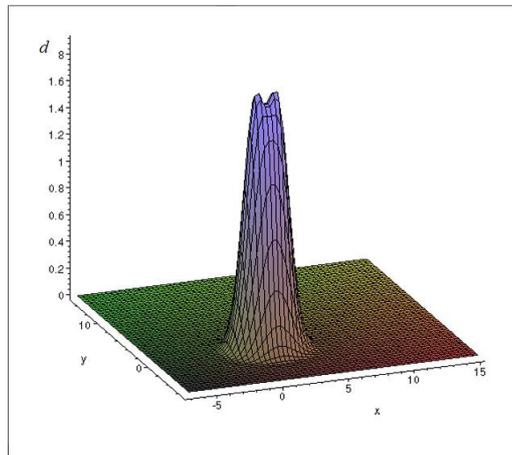


Figura 4.30: Densidade de energia com 1 excitação. Valor de $\lambda = 1.0$ e caminho percorrido diagonal.

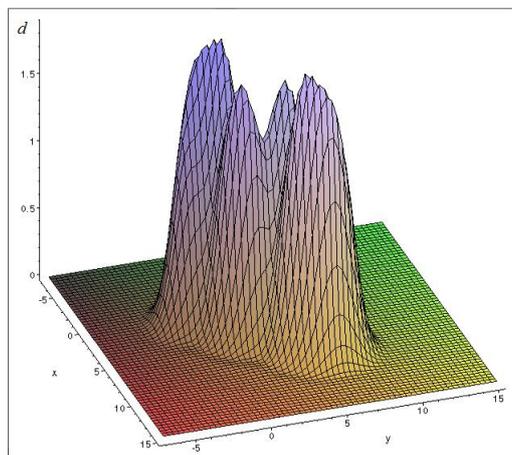


Figura 4.31: Densidade de energia com 5 excitações. Valor de $\lambda = 1.0$ e caminho percorrido diagonal.

5. Gelos de Spins Bidimensionais

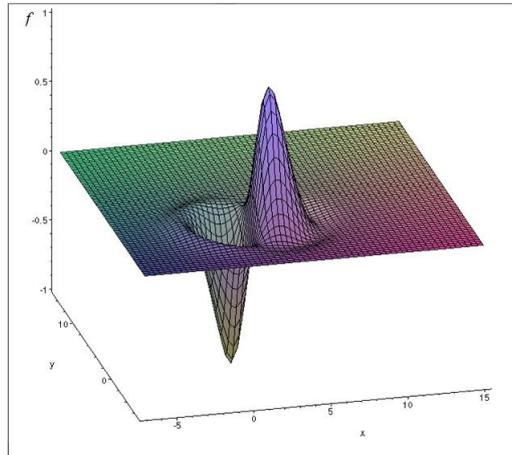


Figura 4.32: Fluxo magnético com 1 excitação. Valor de $\lambda = 1.0$ e caminho percorrido diagonal.

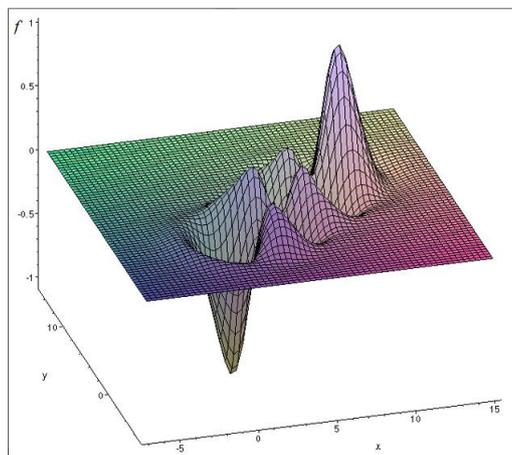


Figura 4.33: Fluxo magnético com 5 excitações. Valor de $\lambda = 1.0$ e caminho percorrido diagonal.

5. Gelos de Spins Bidimensionais

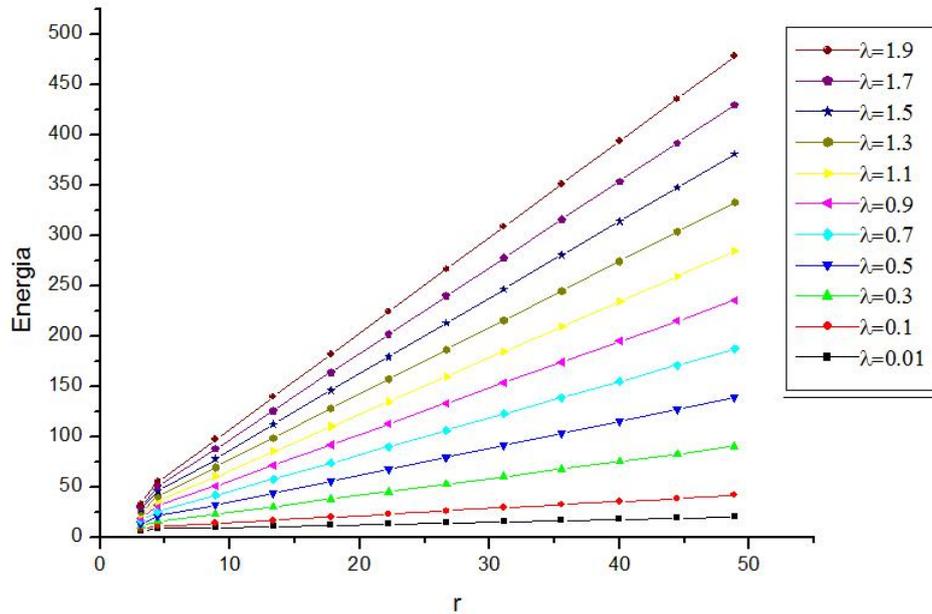


Figura 4.34: Energia em função da separação dos monopólos para diversos valores de λ . Caminho percorrido diagonal.

Por fim, analisamos o sistema sujeito ao vínculo da existência de um pólo norte na posição $(0,0)$ e um pólo sul na posição $(3\pi, 3\pi)$ para o caminho diagonal e $\lambda = 0.1$. Observamos que este estado, a temperatura zero, é metaestável (figura 4.35), ou seja, a energia desse estado é um mínimo local mas não é um mínimo global. Quando observamos a introdução de 6 excitações no sistema temos que a energia obtida é igual a 17,0846. No entanto, poderia ser mais favorável energeticamente a corda se romper e assim obtermos 2 dipolos na mesma rede, como pode ser observado na figura 4.36, em que está representado o rompimento da corda formando dois dipolos de energia $E_1 = 8,3279$. Logo, a energia total do sistema é 16,6558, que é menor que a energia do sistema sem o rompimento da corda, ou seja, esta configuração é energeticamente mais favorável. Porém, para atingirmos este estado de menor energia, é necessário passar por estados intermediários de maior energia como o representado na figura 4.37 em que a energia total do sistema (22,2857) ainda permanece maior que a energia do sistema sem o rompimento da corda. Portanto, é necessário uma dada perturbação para

5. Gelos de Spins Bidimensionais

levar o sistema do estado M (metaestável) ao estado E (estável).

À temperatura zero, o sistema permaneceria indefinidamente no estado metaestável, e poderíamos, eventualmente, obter “monopólos” ligados por cordas de tamanhos arbitrariamente grandes. Efeitos térmicos, entretanto, poderiam levar ao rompimento da string com a criação de dois pares de monopólos confinados, como mostrado na figura 4.36.

Concluimos portanto que, embora o mecanismo descrito em [4], com a redução da energia livre através do aumento da temperatura do sistema, possa levar ao surgimento de monopólos livres, haverá uma competição entre esse efeito e o rompimento descrito acima, que sinaliza que pares de monopólos confinados (dipólos) podem surgir como estados de menor energia, e, portanto, termodinamicamente mais prováveis.

Entretanto, é possível a observação de monopólos magnéticos livres, a exemplo do que ocorre na transição da matéria de quarks para o plasma de quarks e gluóns.

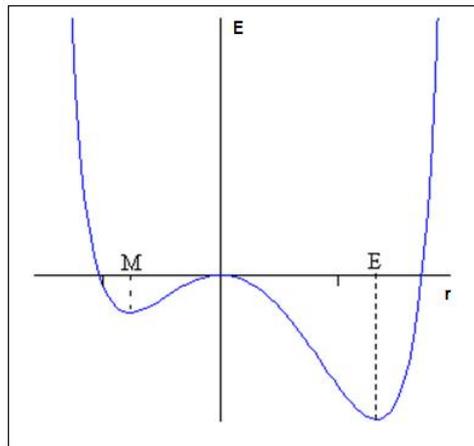


Figura 4.35: Energia metaestável (M). Uma dada perturbação pode levar a um estado estável (E)[39].

5. Gelos de Spins Bidimensionais

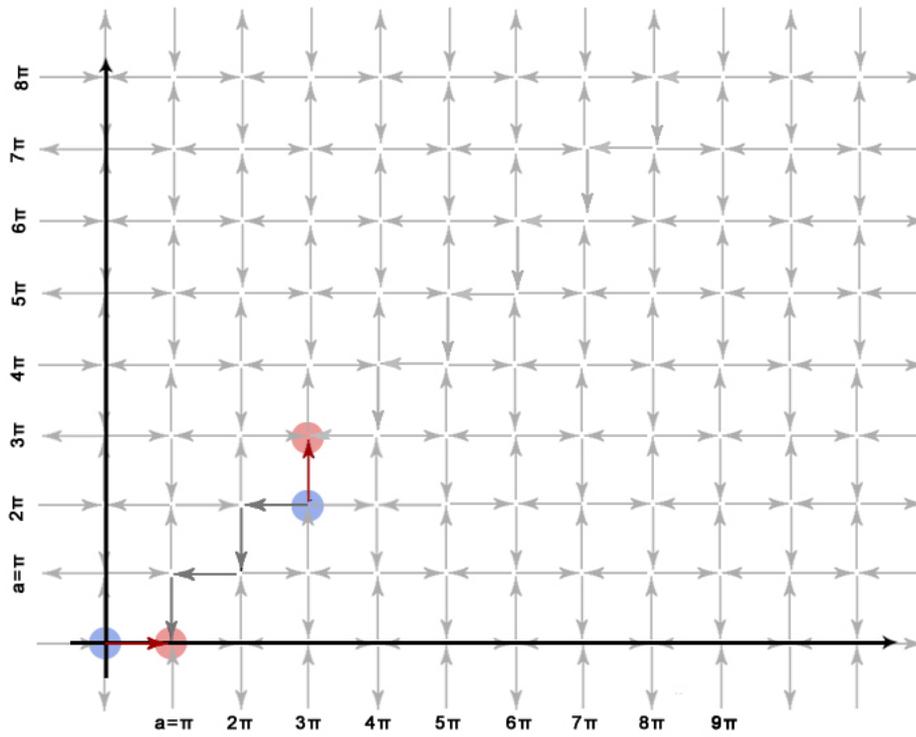


Figura 4.36: Rompimento da corda formando dois novos dipolos de valores de energia diferentes. $E_1 + E_1 = 16,6558$.

5. Gelos de Spins Bidimensionais

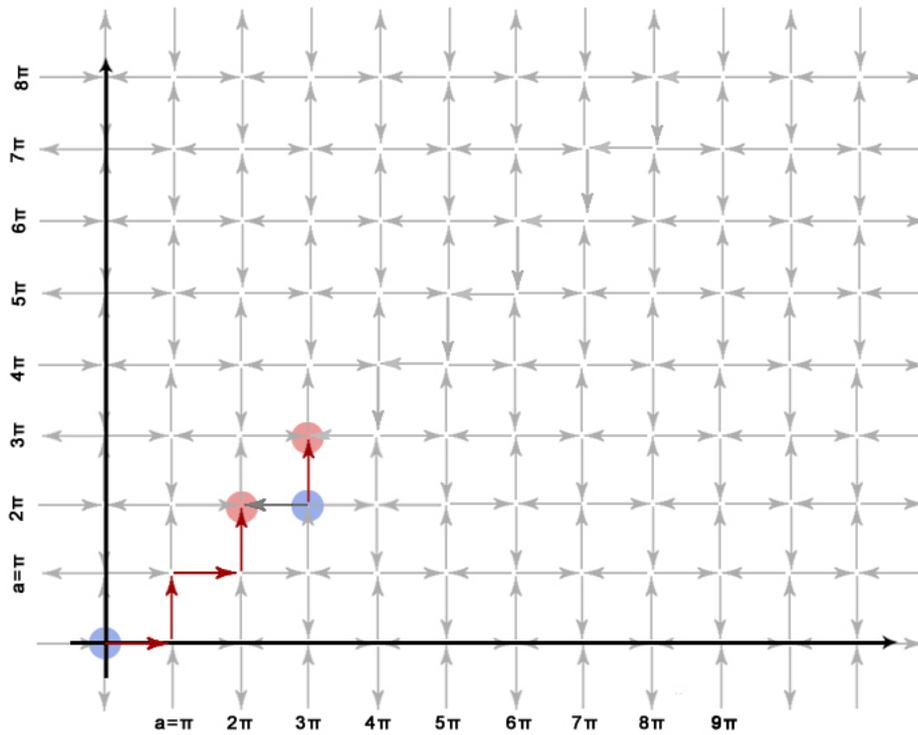


Figura 4.37: Rompimento da corda formando dois novos dipolos de valores de energia diferentes. $E_4 + E_1 = 22,2857$.

Capítulo 5

Conclusões

Neste trabalho, apresentamos um modelo contínuo para gelos de spins bidimensionais que consiste de uma rede quadrada feita de nano-ilhas magnéticas, com os eixos maiores das ilhas alternando-se em orientação ao longo das duas principais direções da rede. A frustração intrínseca da rede é similar àquela do modelo de gelo de spin. O estado fundamental do gelo de spin bidimensional em uma rede regular de espaçamento a representado pela equação (4.2) resulta no diagrama mostrado na figura 4.3. O estado fundamental é desordenado e o campo satisfaz a regra do gelo, tendo, em cada vértice, dois spins apontando para dentro e dois spins apontando para fora. Portanto, podemos dizer que esta rede, composta por diversas ilhas, é equivalente ao gelo de spin bidimensional descrito nas referências [2, 4].

O modelo contínuo para gelos de spins bidimensionais apresentou alguns comportamentos semelhantes ao modelo discreto estudado por Mól e colaboradores. Como pode ser notado, a introdução da excitação no sistema contínuo leva a criação de duas cargas opostas, já que possuem fluxo magnético opostos, o qual chamamos de quasi-partículas. Esses pólos também foram separados espacialmente e observou-se que existe uma corda que liga esses dois “monopólos” que apresenta uma energia diferente de zero. Logo, podemos concluir que os pólos não estão livres, ou seja, eles estão confinados e presos por uma corda.

Podemos também concluir que o caminho escolhido para introduzir as

6. Conclusões

excitações interfere no valor da energia do sistema. Neste trabalho percorremos dois caminhos (horizontal e diagonal) e podemos notar que o caminho horizontal apresenta uma configuração de menor energia, mesmo com a introdução de um número maior de excitações. Mas, ainda assim, os “monopólos” permanecem ligados por uma corda. A diferença de energia entre os dois caminhos percorridos não é tão grande, entretanto, esperava-se que a energia no caminho horizontal fosse maior devido ao número maior de excitações introduzidas na rede. Uma possível explicação para este fato, como já foi mencionado, pode está relacionada com o sentido do spin invertido, ou seja, no caminho diagonal podemos observar que os spins invertidos do eixo x e do eixo y assumiram somente o sentido positivo da rede. No caso do caminho horizontal, podemos notar que no eixo y os spins invertidos assumiram alternadamente os sentidos positivo e negativo na rede. Este fato pode ter levado a um menor gasto de energia para separar os “monopólos”.

Além disso, temos que as variações dos acoplamentos λ também fornecem várias configurações de energia de acordo com seu λ específico. Quanto maior o valor de λ , maior é a energia do sistema. Portanto, os monopólos se encontram mais intensamente ligados, dizendo de outra forma, maior é a tensão da corda entre essas quasi-partículas.

Os cálculos indicaram que o custo da energia total de um par monopólo-antimonopólo separados por uma certa distância r é a soma do termo usual coulombiano, q/r , mais o termo linear br . Isto pode ser observado nas figuras 4.20 e 4.29. Nota-se também um comportamento diferente do encontrado para gelos de spins tridimensionais. Em particular, os monopólos não se encontram livres, tendo sido encontrado dependência linear com a separação dos monopólos.

Também foi observado que para uma determinada quantidade de excitações torna-se mais favorável energeticamente a corda se romper e assim obtermos 2 dipolos na mesma rede, como pode ser observado na figura 4.36. No entanto, isso não ocorre quando estamos trabalhando em um sistema sem temperatura. A introdução da temperatura no sistema pode, de fato, levar ao relaxamento da corda que une os monopólos chegando a uma temperatura crítica em que os monopólos se encontrarão livres. Mas, uma competição

6. Conclusões

entre o efeito termodinâmico e rompimento da corda, formando dois novos dipolos, pode ocorrer para gerar novos efeitos que interfiram na transição de fase do sistema.

A temperatura pode ser um fator importante para obter-se monopólos livres em duas dimensões. Muito recentemente, Ladak e colaboradores[41] observaram monopólos magnéticos em uma nanoestrutura artificial tipo gelos de spin. Eles fizeram com que magnetos de dimensões sub-microscópicas se comportassem como monopólos magnéticos ao longo de uma estrutura em formato de colmeia. Will Branford e Sam Ladak, que coordenaram o experimento, afirmam que seu estudo os deixa a um passo de isolar o monopólo magnético. Mas eles já foram capazes de comprovar sua existência e o fluxo destes no material.

A possibilidade de isolamento do monopólo magnético abre grandes perspectivas de aplicações tecnológicas. A expectativa é ainda maior com o advento da magnetricidade[42], um fenômeno pelo qual uma carga magnética pode se comportar e interagir exatamente como uma carga elétrica. A magnetricidade é o equivalente magnético da eletricidade.

Um outro fato importante a ser mencionado é que apesar de usarmos os valores de γ , b e a do caso unidimensional (já que a primeiro momento esta é a tentativa natural), estes podem não ser os valores exatos para o caso bidimensional. Entretanto, espera-se que isto não altere qualitativamente os resultados do presente trabalho, ainda que alterações quantitativas sejam esperadas.

Ressalta-se também o fato de que, no modelo estudado nessa dissertação, interações efetivas não locais entre as quasi-partículas (ação à distância entre os monopólos magnéticos) são obtidas a partir de um hamiltoniano contendo apenas termos locais (Eq.(4.5)).

Por fim, vale a pena mencionar que o estudo da termodinâmica do hamiltoniano (4.5) e o desenvolvimento de modelo contínuo para o sistema apresentado em [41] e para o gelo de spin tridimensional são as extensões naturais para o presente trabalho.

Apêndice A

Método do Gradiente

Em um problema de otimização, o objetivo é otimizar (maximizar ou minimizar) algumas funções f , que são conhecidas como “função objetivo”. Por exemplo, uma função objetivo f a ser maximizada pode ser a “receita” na produção de aparelhos de TV, o rendimento por minuto em um processo químico, a quilometragem por litro de um certo tipo de carro, o número de clientes atendidos por hora no banco, a dureza do aço, ou uma resistência à tração da corda.

Similarmente podemos querer minimizar f se, f é por exemplo: o custo por minuto da produção de certas câmeras, o custo de operação de algumas usinas, a perda diária de calor em um sistema de aquecimento, ou o tempo necessário para produzir um pára-lama.

Na maioria dos problemas de otimização a função f depende de inúmeras variáveis

$$x_1, \dots, x_n. \tag{A.1}$$

Estas são as chamadas variáveis de controle, porque podemos “controlá-las”, ou seja, escolher os seus valores. Por exemplo, o rendimento de um processo químico pode depender da pressão x_1 e da temperatura x_2 . A eficiência de um determinado sistema de ar condicionado pode depender da temperatura x_1 , pressão do ar x_2 , umidade x_3 , a área transversal da tomada x_4 , e

7. Apêndice A

assim por diante.

A teoria de otimização desenvolve métodos para realizar a melhor escolha destas variáveis x_1, \dots, x_n , que maximiza ou minimiza a função objetivo f , ou seja, é um método para escolher o melhor valor de x_1, \dots, x_n .

Em muitos problemas a escolha dos valores de x_1, \dots, x_n não é inteiramente livre mas, está sujeita a alguns vínculos, isto é, vínculos adicionais que são decorrentes da natureza do problema e das variáveis. Por exemplo, se x_1 é o custo de produção, então $x_1 \geq 0$ e existem muitas outras variáveis (tempo, peso, distancia percorrida pelo vendedor, etc.) que podem assumir somente valores positivos. Vínculos podem ter também a forma de equações.

Temos uma função real $f(x_1, \dots, x_n)$, vamos considerar primeiramente a otimização sem vínculos. Também escrevemos $x = (x_1, \dots, x_n)$ e $f(x)$ por conveniência. Por definição, f tem um mínimo no ponto $x = X_0$ em uma região R (onde f é definida) se $f(x) \geq f(X_0)$ para todo x em R . Similarmente, f tem um máximo no ponto X_0 se $f(x) \leq f(X_0)$ para todo x em R . Valores máximos e mínimos juntos são chamados extremos.

Além disso, f é dito ter um mínimo local para X_0 se $f(x) \geq f(X_0)$ para todo x em uma vizinhança de X_0 , por exemplo,

$$|x - X_0| = [(x_1 - X_1)^2 + \dots + (x_n - X_n)^2]^{1/2} < r, \quad (\text{A.2})$$

onde $X_0 = (X_1, \dots, X_n)$ e $r > 0$ é suficientemente pequeno. Um máximo local é definido similarmente.

Se f é diferenciável e tem um extremo em um ponto X_0 no interior de R , então as derivadas parciais $\partial f / \partial x_1, \dots, \partial f / \partial x_n$ deve ser zero para X_0 . Estas são as componentes de um vetor que é chamado o *gradiente* de f e denotado por $\text{grad } f$ ou ∇f . Então,

$$\nabla f(X_0) = 0. \quad (\text{A.3})$$

Um ponto X_0 para o qual a equação (A.3) é válida, chamamos de *ponto estacionario* de f .

A condição (A.3) é necessária para um extremo de f para X_0 no interior de R , mas não é suficiente. De fato, se $n = 1$, então para $y = f(x)$,

7. Apêndice A

a condição (A.3) é $y' = f'(x) = 0$; por exemplo, $y = x^3$ satisfaz $y' = 3x^2 = 0$ para $x = X_0 = 0$, onde f não tem um extremo, mas um ponto de inflexão. Similarmente, para $f(x) = x_1x_2$ temos $\nabla f(0) = 0$, e f não tem um extremo mas tem um ponto de sela para 0. Consequentemente, depois de resolver (A.3) devemos ainda descobrir se foi obtido um extremo. No caso $n = 1$ as condições $y'(X_0) = 0$, $y''(X_0) > 0$ garantem um mínimo local para X_0 e as condições $y'(X_0) = 0$, $y''(X_0) < 0$ um máximo local, como é conhecido dos cálculos. Para $n > 1$ existem critérios semelhantes. Entretanto, Na prática resolver a equação (A.3) geralmente é muito difícil. Por esta razão, é preferível uma solução por interação, isto é, por um processo que se inicia de algum ponto e move passo a passo para um ponto na qual f é o menor (se um mínimo de f é desejado) ou é o maior (no caso de um máximo).

Um exemplo desse tipo é o *metodo do gradiete*, que foi introduzido em 1847 e ganhou populariedade. A idéia é encontrar um mínimo de $f(x)$ por um processo repetido de computação do mínimo de uma função $g(t)$ de uma variável t . Suponha que f tem um mínimo em X_0 e iniciamos de um ponto x . Então, procuramos por um mínimo de f o mais próximo de x ao longo de uma reta na direção de

$$-\nabla f(x), \tag{A.4}$$

a direção do gradiente de f para x (direção de redução máxima), isto é, determinamos o valor de t e o ponto correspondente

$$z(t) = x - t \nabla f(x), \tag{A.5}$$

na qual a função

$$g(t) = f(z(t)) \tag{A.6}$$

tem um mínimo. Tomamos este $z(t)$ como nossa próxima aproximação para X_0 .

Apêndice B

Regra de Simpson

Se uma função $f(x)$ é contínua em um intervalo $[a, b]$ e sua primitiva $F(x)$ é conhecida, então a integral definida desta função neste intervalo é dada por:

$$\int_a^b f(x) dx = F(b) - F(a), \quad (\text{B.1})$$

onde $F'(x) = f(x)$.

Entretanto, em alguns casos, o valor desta primitiva $F(x)$ não é conhecido ou de fácil obtenção, o que dificulta ou mesmo impossibilita o cálculo desta integral. Logo, buscamos calcular o valor da integral definida por meio de métodos numéricos. Métodos numéricos são adequados para situações onde $F(x)$ não pode ser obtida analiticamente ou quando o cômputo da solução analítica é complexo.

A solução numérica de uma integral simples é comumente chamada de quadratura. Os métodos mais utilizados podem ser classificados em dois grupos:

1) As fórmulas de Newton-Côtes que empregam valores de $f(x)$, onde os valores de x são igualmente espaçados.

2) A fórmula de quadratura gaussiana que utiliza pontos diferentemente espaçados, onde este espaçamento é determinado por certas propriedades de polinômios ortogonais.

Dentre as fórmulas de Newton-Côtes, será apresentado aqui a 1º re-

8.Apêndice B

gra de simpson. A idéia básica desses métodos de integração numérica é a substituição da função $f(x)$ por um polinômio que a aproxime razoavelmente no intervalo $[a, b]$. Assim o problema fica resolvido pela integração de polinômios, o que é trivial de se fazer. Com esse raciocínio podemos deduzir fórmulas para aproximar a Eq.(B.1).

B.1 Fórmula Simples

Consideremos agora que se queira aproximar $f(x)$ por um polinômio interpolador de 2º grau (parábola), $p_2(x)$, que é dado pela formula de Lagrange:

$$p_2(x) = L_0(x)f(x_0) + L_1(x)f(x_1) + L_2(x)f(x_2), \quad (\text{B.2})$$

tal que,

$$L_i(x) = \prod_{\substack{\alpha=0, \alpha \neq i}}^2 \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)}, \quad (\text{B.3})$$

com $i = 0, 1, 2$.

De acordo com a figura abaixo podemos analisar a interpretação geométrica do problema:

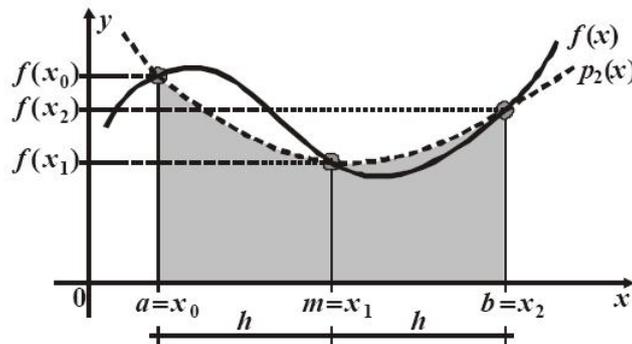


Figura B.1: Primeira regra de Simpson[43].

Temos os seguintes dados: $x_0 = a$, $x_1 = m = (a + b)/2$, $x_2 = b$, $h = (b - a)/2$, $x_0 - x_1 = -h$, $x_1 - x_0 = h$, $x_0 - x_2 = -2h$, $x_2 - x_0 = 2h$,

8.Apêndice B

$x_1 - X_2 = -h$ e $x_2 - x_1 = h$. Logo, o polinômio será dado por:

$$\begin{aligned} p_2(x) &= f(x_0) \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(-h)(-2h)} + f(x_1) \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(-h)(-h)} \\ &\quad + f(x_2) \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(2h)(h)}. \end{aligned} \tag{B.4}$$

O que permite escrever a seguinte igualdade,

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= \int_{x_0}^{x_2} f(x) dx \approx \int_{x_0}^{x_2} p_2(x) dx \\ &= \frac{f(x_0)}{2h^2} \int_{x_0}^{x_2} (x-x_1)(x-x_2) dx - \frac{f(x_1)}{h^2} \int_{x_0}^{x_2} (x-x_0)(x-x_2) dx \\ &\quad + \frac{f(x_2)}{2h^2} \int_{x_0}^{x_2} (x-x_0)(x-x_1) dx \\ &= \frac{h}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)]. \end{aligned} \tag{B.5}$$

Logo, o valor da integral calculada segundo a regra de Simpson será:

$$\int_a^b f(x) dx = \int_{x_0}^{x_2} f(x) dx = \frac{h}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)]. \tag{B.6}$$

B.2 Fórmula Composta

Quando subdividimos o intervalo de integração $[a, b]$ em n subintervalos iguais de amplitude h e a cada par de subintervalos aplicarmos a primeira regra de simpson (simples), teremos então, a regra de simpson composta. Isto pode ser visto na Figura B.2.

A cada par de subintervalos temos 3 pontos para ajustar uma parábola ($P_2(x)$). Uma observação importante é que, como a regra de Simpson é aplicada em pares de subintervalos, o número n de subintervalos deverá ser sempre par. Assim, a equação da fórmula composta de simpson será:

8.Apêndice B

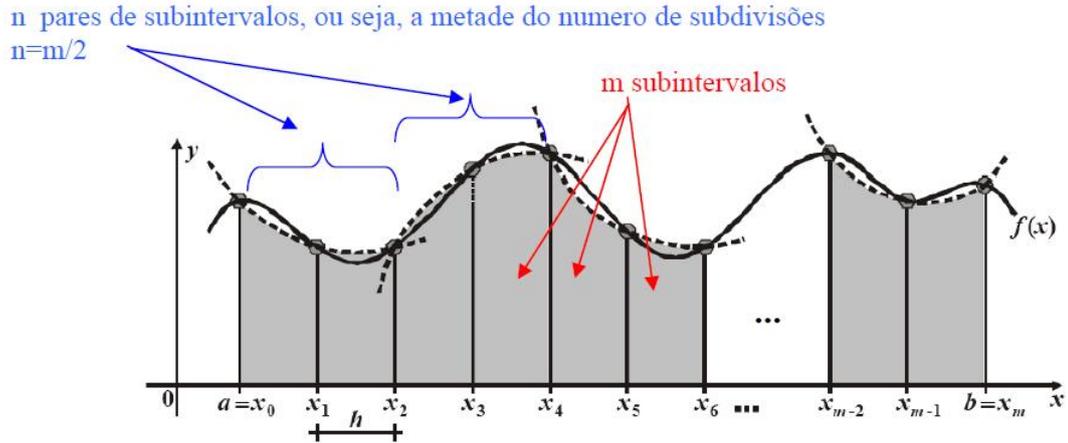


Figura B.2: Regra de simpson composta[43].

$$\begin{aligned}
 \int_a^b f(x)dx &= \int_{x_0}^{x_m} f(x)dx \\
 &\approx \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] + \frac{h}{3}[f(x_2) + 4f(x_3) + f(x_4)] \\
 &\quad + \frac{h}{3}[f(x_{m-2}) + 4f(x_{m-1}) + f(x_m)] \quad (\text{B.7})
 \end{aligned}$$

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3}[f(x_0) + f(x_m) + 2 \sum_{i=1}^{m/2-1} f(x_{2i}) + 4 \sum_{i=1}^{m/2} f(x_{2i-1})] \quad (\text{B.8})$$

onde $f(x_0)$ e $f(x_m)$ é o valor da função nas extremidades inicial e final do intervalo, ou seja, nos pontos a e b . Já o terceiro termo da Eq.(B.8) é o valor da função nos subintervalos de índices pares dentro do intervalo $[a, b]$, excluindo as extremidades. E no quarto termo da Eq.(B.8) temos o valor da função nos subintervalos de índices ímpares dentro do intervalo $[a, b]$, excluindo as extremidades.

Bibliografia

- [1] Steven T. Bramwell, Michel J. P. Gingras., Spin Ice State in Frustrated Magnetic Pyrochlore Materials, *Science* 294, 1495(2001).
- [2] R. F. Wang, C. Nisoli, R. S. Freitas, J. Li, W. McConville, B. J. Cooley, M. S. Lund, N. Samarth, C. Leighton, V. H. Crespi, P. Schiffer, Artificial spin ice in a geometrically frustrated lattice of nanoscale ferromagnetic islands, *Nature* 439, 303 (2006).
- [3] C. Castelnovo, R. Moessner, S. L. Sondhi., Magnetic monopoles in spin ice, *Nature* 451(7174), 42-5(2008).
- [4] Mol, L. A. S. ; Silva, R. L. ; Silva R.C. ; Pereira, A. R. ; Moura-Melo, W. A. ; Costa, B. V. . Magnetic monopole and string excitations in two-dimensional spin ice. *Journal of Applied Physics* 106, 063913(2009).
- [5] Fundamental Particles and interactions. Acedido em 10 de maio de 2010, em: http://www.cpepweb.org/cpep_sm_large.html.
- [6] Afranio R. Pereira, Ricardo L. Silva, Rodrigo C. Silva e, Winder A. Moura-Melo (2008). Monopólos Magnéticos?. Acedido em 20 de abril de 2010, em: <http://www.ufv.br/dpf/divulga.htm>.
- [7] P. A. M. Dirac, *Proc. R. Soc. London Ser. A* 133, 60(1931).
- [8] J. Preskill, *Annu. Rev. Nucl.* 34, 461(1984).
- [9] M. Cozzi, *Phys. Atom. Nucl.* 70, 118(2007).
- [10] K. A. Milton, *Rep. Prog. Phys.* 69, 1637(2006).

9. Bibliografia

- [11] Laughlin R. B., Nobel Lecture: Fractional, Rev. Mod. Phys. 71, 863-874(1999).
- [12] D.J.P. Morris, D.A. Tennant, S.A. Grigera, B. Klemke, C. Castelnovo, R. Moessner, C. Czternasty, M. Meissner, K. C. Rule, J.U. Hoffman, K. Kiefer, S. Gerischer, D. Slobinsky, R.S. Perry; Dirac Strings and Magnetic Monopoles in the Spin Ice $Dy_2Ti_2O_7$; Science 326, 411(2009).
- [13] A. P. Ramirez, Annu. Rev. Mater. Sci. 24, 453 (1994).
- [14] R. Moessner, Can. J. Phys. 79, 1283 (2001).
- [15] R. Moessner and A. P. Ramirez Physics Today 59, 24 (2006).
- [16] [http: R. S. Freitas, Materiais Magnéticos Geometricamente Frustrados, Acedido em 20 de abril de 2010, em:http://www.sbf1.sbfisica.org.br/eventos/ebm/vii/T_completo/EBM09-Freitas.ppt](http://www.sbf1.sbfisica.org.br/eventos/ebm/vii/T_completo/EBM09-Freitas.ppt)
- [17] P. Fulde, K. Penc, and N. Shannon: Ann. Phys. 11 (2002) 892.
- [18] J. E. Greedan, J. of Materials Chemistry 11, 37 (2001)
- [19] J. S. Gardner, M. J. P. Gingras and J. E. Greedan, Rev. Mod.Phys. 82, 53107(2010).
- [20] J. S. Gardner, S. R. Dunsiger, B. D.Gaulin, M. J. P. Gingras, J. E. Greedan, R. F. Kiefl, M. D. Lumsden, W. A. MacFarlane, N. P. Raju, J. E. Sonier, I. Swainson, Z. Tun, Phys. Rev. Lett. 82, 1012 (1999).
- [21] J. E. Greedan, M. Sato, Y. Xu, F. S. Razavi, Solid State Commun. 59, 895 (1986).
- [22] J. Villain, Z. Phys. B 33, 31 (1979).
- [23] Y. Taguchi, Y. Oohara, H. Yoshizawa, N. Nagaosa, Y. Tokura, Science 291, 2573 (2001).
- [24] Michel J.P. Gingras, Spin Ice, cond-mat.stat-mech (2009).

9. Bibliografia

- [25] M. J. Harris, S. T. Bramwell, D. F. McMorrow, T. Zeiske, K.W. Godfrey, Phys. Rev. Lett. 79, 2554 (1997)
- [26] T. Fennell, O. A. Petrenko, B. Fak, J. S. Gardner, S. T. Bramwell, B. Ouladdiaf, Phys. Rev. B 72, 224411 (2005).
- [27] M. J. Harris, S. T. Bramwell, T. Zeiske, D. F. McMorrow, P. J. C. King, J. Magn. Magn. Mater. 177, 757 (1998).
- [28] K. Binder, A. P. Young, Rev. Mod. Phys. 58, 801 (1986).
- [29] S. T. Bramwell and M. J. Harris, J. Phys.: Condens. Matter 10, L215 ((1998).
- [30] A. P. Ramirez, A. Hayashi, R. J. Cava, R. Siddharthan, Nature 399, 333 (1999).
- [31] W. F. Giaque, M. F. Ashley, Phys. Rev. 43, 81 (1933).
- [32] W. F. Giaque, J. W. Stout, J. Am. Chem. Soc. 58, 1144 (1936).
- [33] B. C. den Hertog, M. J. P. Gingras, Phys. Rev. Lett. 84, 3430 (2000).
- [34] R. G. Melko, M. J. P. Gingras, J. Phys.: Condensed Matter 16, R1277 (2004).
- [35] S. V. Isakov, R. Moessner, S. L. Sondhi, Phys. Rev. Lett. 95, 217201 (2005).
- [36] S. V. Isakov, K. Gregor, R. Moessner, S. L. Sondhi Phys. Rev. Lett. 93, 167204 (2004).
- [37] D.H. Lee e G. Grinstein; Strings in two-dimensional classical XY models.; Phys. Rev. Lett., 55 (1985).
- [38] J. F. Gunion and L. F. Lee, Relativistic treatment of the quark-confinement potential. Phys. Rev. D 12, 3583 (1975).

9. Bibliografia

- [39] Everton G. de Santana, Equilíbrio e estabilidade de um sistema mecânico. Acedido em 09 de junho de 2010, em: <http://www.fisica.ufs.br/CorpoDocente/egsantana/>.
- [40] Leônidas C. B., Magali M. A. B., Frederico F. C. F., Márcio L. B. C. e Miriam L. M.; Cálculo Numérico-com aplicações, Ed. Harbra, segunda edição (1087).
- [41] S. Ladak, D.E. Read, G.K. Perkins, L.F. Cohen e W.R. Branford; Direct observation of magnetic monopole defects in an artificial spin-ice system; Nature Physics. 6, (2010).
- [42] S.T. Bramwell, S.R. Giblin, S. Calder, R. Aldus, D. Prabhakaran e T. Fennell; Measurement of the charge and current of magnetic monopoles in spin ice; Nature; 461, (2009).
- [43] Sergio Pilling, Integração Numérica. Acedido em 01 de maio de 2010, em: www1.univap.br/~spilling/CN/CN_aula11e12.pdf.

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](#)