

UFMT

Instituto de Física

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

2010

**SIMULAÇÕES DE MONTE CARLO NO MODELO DE ISING
DE SPINS MISTOS
COM INTERAÇÃO ALEATÓRIA DE CAMPO CRISTALINO**

Vinícius de Castro Gorgonho

Orientador:
Prof. Dr. Paulo Henrique Lana Martins

— Dezembro 2010 —

Livros Grátis

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

Milhares de livros grátis para download.

*Comece por fazer o que é necessário,
depois faça o que é possível e em breve
estará fazendo o que é impossível"*
S. Francisco de Assis

*"O futuro pertence àqueles que
acreditam na beleza dos seus
sonhos."*Eleanor Roosevelt

Agradecimentos

- Aos meus pais, irmãos e todos os demais familiares;
- À minha mãe Shirley e meu pai Silvano por me apoiarem nas dificuldades dando amparo psicológico, financeiro e afetivo, além de tudo que uma família pode propiciar para realização deste.
- Ao meu tio Marceliano, sua esposa Ione e sua filha Ingrid por compartilharem momentos especiais, tanto de produção intelectual quanto de lazer.
- Ao meu primo Italo e meus amigos pela companhia nas horas necessárias de entretenimento.
- Aos meus professores, por me ajudarem a conhecer meus limites e principalmente por mostrarem o caminho pelo qual eu pudesse superá-los;
- Aos professores da banca pela participação e por melhorar a qualidade deste trabalho.
- Ao professor Paulo H. L. Martins pela paciência, ensinamentos e parceria. Aos professores Alberto Arruda, Romildo, Jorge (Hulk) e a professora Érica de Mello pelas disciplinas e seminários ministrados durante o curso, além dos outros professores do instituto.
- Aos amigos que iniciaram a jornada juntos e acumularam várias horas de discussões, estudos e conversas fiadas. Um abraço à Ana Paula, Clarice, Edemilson, Fábio, Lucas, Leodécio, Jones, Wesley que a gente possa se encontrar novamente e rir das mesmas piadas.
- Finalmente: gostaria de agradecer a CAPES e a FAPEMAT pelo apoio financeiro e ao CNPq pelos recursos computacionais que possibilitaram a realização deste trabalho.

Resumo

O modelo de Ising é frequentemente estudado por ter solução exata em uma e em duas dimensões, servindo de referência para novos estudos e aplicações em outras áreas da ciência, além da Física. Apesar de ser um modelo simples, é uma importante ferramenta para o estudo de transições de fase, tanto para fluidos quanto para o magnetismo. Para modelos que incluem campos aleatórios, as técnicas analíticas nos levam apenas a soluções aproximadas. Particularmente, as simulações de Monte Carlo constituem uma poderosa ferramenta para o estudo desses problemas, fornecendo resultados bastante confiáveis. Neste trabalho, utilizamos as simulações de Monte Carlo para obter o diagrama de fases do modelo de Ising de spins mistos ($\frac{1}{2}$ e 1) na rede quadrada, com anisotropia de campo cristalino aleatório. Foram calculadas diferentes grandezas como calor específico, susceptibilidade magnética e cumulante de quarta ordem para obtermos a criticalidade do sistema.

Palavras-chave: modelo de Ising, simulações de Monte Carlo, transições de fase, fenômenos críticos.

Áreas do conhecimento: Física Estatística, Física da Matéria Condensada, Simulações Computacionais.

Abstract

The Ising model is often studied since it has exact solutions in one and two dimensions. Thus it serves as reference for further studies and applications in other areas of science, beyond physics. Despite being a simple model, it is an important tool to study phase transitions, both for fluids and for the magnetism. For models that include random fields, analytical techniques lead us only to approximate solutions. In particular, Monte Carlo simulations are a powerful tool to study these problems by providing very reliable results. In this work, we use Monte Carlo simulations to obtain the phase diagram of mixed spin ($\frac{1}{2}$ and 1) Ising model on square lattices, with random crystal field anisotropy. We calculated various quantities like specific heat, magnetic susceptibility and fourth-order cumulant to obtain the criticality of the system.

Keywords: Ising model, Monte Carlo simulations, phase transitions, critical phenomena.

Sumário

1	Introdução	8
1.1	Magnetismo	9
1.1.1	Ferromagnetismo	11
1.1.2	Antiferromagnetismo	12
1.1.3	Ferrimagnetismo	14
1.1.4	Paramagnetismo	14
1.1.5	Diamagnetismo	15
1.2	Transição de Fases e Fenômenos Críticos	15
1.3	Algumas Grandezas Termodinâmicas em Sistemas Magnéticos	17
1.3.1	Magnetização Média	17
1.3.2	Susceptibilidade Magnética	18
1.3.3	Calor Específico	18
1.3.4	Cumulante de Binder	19
1.3.5	Cálculo do Erro	19
1.4	Expoentes Críticos	19
1.5	Universalidade	21
1.6	Efeitos de Tamanho Finito	22
1.6.1	Teoria de Escala de tamanho finito	22

2	Simulações de Monte Carlo	26
2.1	Introdução	26
2.2	Cadeias de Markov	27
2.3	Amostragem por Importância	28
2.4	Algoritmo de Metropolis	29
2.5	Implementação do algoritmo de Metropolis	32
3	Modelo de Ising	34
3.1	Introdução	34
3.2	Modelo de Ising em duas dimensões	36
3.3	Resultados e Discussões	36
3.4	Modelo de Ising de Spins Mistos com Interação Aleatória de Campo Cristalino	41
4		
	Simulações de Monte Carlo no modelo de Ising 2D de Spins Mistos com Anisotropia de Campo Cristalino aleatório	43
4.1	Introdução	43
4.2	Resultados e Discussões	43
4.2.1	Análise das Grandezas Termodinâmicas Para $P=0$	44
4.2.2	Análise das Grandezas Termodinâmicas Para $P=1$	48
4.2.3	Análise das Grandezas Termodinâmicas Para $P=0,90$ e $P=0,96$	58
5	Conclusão	64

Capítulo 1

Introdução

O modelo de Ising [1] é frequentemente estudado por ter solução exata em uma e em duas dimensões, servindo de referência para novos estudos e aplicações em outras áreas da Ciência, além da Física. Apesar de ser um modelo simples, é uma importante ferramenta para o estudo de transições de fase, tanto para fluidos quanto para sistemas magnéticos, entre outros. Os materiais ferromagnéticos são sistemas magnéticos que apresentam uma magnetização espontânea quando a temperatura do material (T) é menor que um determinado valor T_c , denominado temperatura crítica (T_c).

Neste trabalho realizamos simulações de Monte Carlo que permitiram estudar o comportamento termodinâmico de um ferromagneto de Ising com anisotropia de campo cristalino aleatório. Para isso foram utilizadas redes quadradas com interações entre primeiros vizinhos além de variações na intensidade do campo anisotrópico (D) e na probabilidade (p) que governa a ação desse campo. Foram observados os comportamentos da energia média por spin, da magnetização média por spin, da susceptibilidade, do calor específico e do cumulante de 4ª ordem na tentativa de encontrar a T_c desse tipo de material sob essas condições.

O trabalho é apresentado com a seguinte estrutura: no primeiro capítulo é feita uma breve discussão do conteúdo introdutório necessário para compreensão mínima do estudo. No segundo capítulo é apresentado o método de Monte Carlo e no terceiro capítulo é feito um estudo das simulações no mode-

lo de Ising bidimensional. No quarto capítulo apresenta-se o cerne do trabalho, o método aplicado ao modelo de Ising com anisotropia de campo cristalino aleatório e as conclusões e perspectivas são discutidas no quinto capítulo.

1.1 Magnetismo

O magnetismo é um fenômeno muito estudado atualmente pelos cientistas e engenheiros, pelos diversos avanços tecnológicos conseguidos por meio deste fenômeno. As primeiras experiências com a magnetita são atribuídas aos gregos muitos anos antes do início do calendário Cristão. A magnetita é um material encontrado na natureza composto por Fe_3O_4 com a propriedade de atrair pequenos fragmentos de ferro.

Uma das origens da palavra magnetismo é ligada ao nome de uma cidade da região da Turquia que era rica em minério de ferro, a Magnésia. A descoberta da orientação natural dos ímãs é atribuída aos chineses, por volta do ano 2000 a.C. e levou à invenção da bússola. Embora o tempo transcorrido desde o contato do homem com magnetismo, o fenômeno só despertou interesse quando a bússola começou a ser utilizada na Europa.

No final do século XIX, dois cientistas fizeram muitas contribuições e ajudaram a solidificar o estudo do magnetismo. Um deles foi Faraday com a formulação da lei de indução, hábil físico teórico que elaborou a lei sem escrever uma equação. O outro foi James Clarck Maxwell que criou e aperfeiçoou matematicamente um conjunto de leis que deu origem ao eletromagnetismo. Após o estabelecimento da termodinâmica, Pierre Curie iniciou o estudo das propriedades termodinâmicas das substâncias conseguindo categorizá-las em diamagnéticas, paramagnéticas e ferromagnéticas segundo a dependência da susceptibilidade magnética com a temperatura confeccionando a lei de Curie que pôde ser explicada teoricamente por Langevin com modelos clássicos e a estatística de Maxwell-Boltzmann.

O surgimento da Mecânica Quântica, no século XX, possibilitou o entendimento moderno do magnetismo. Entretanto antes de isso acontecer, surgiram as primeiras teorias modernas desse fenômeno, como a de Pierre Weiss em

1907. Weiss tentou explicar o ordenamento magnético espontâneo dos ferromagnetos através da existência de um campo, o que introduziu a ideia de que cada domínio magnético (grupo de dipolos magnéticos) num material está sujeito a um campo proporcional à magnetização total da amostra [2]. Esse campo, denominado molecular ou de Weiss, deve-se às interações de troca entre os momentos magnéticos do material. Outra teoria importante foi a de Van Leeuwen, que defendia que o magnetismo não poderia ser explicado pela física clássica, por se tratar de um fenômeno de origem quântica.

As aplicações tecnológicas e industriais se desenvolveram muito nas últimas décadas e hoje presenciamos fenômenos e aplicações do magnetismo em nosso cotidiano. A maior parte da utilização desses materiais é feita com ferromagnéticos (ou ferrimagnéticos), e pode-se ver nas áreas como eletrônica e telecomunicações, sistemas de geração e distribuição de energia, informática, automação industrial, medicina e engenharia biomédica [3]. No mundo científico, diversos grupos teóricos e experimentais estudam o magnetismo na matéria. A motivação para o grande interesse é a possibilidade de utilização dos estudos tanto na área acadêmica quanto em aplicações práticas [4].

O estudo dos fenômenos magnéticos foi responsável pelo desenvolvimento de diversas tecnologias. Com os avanços na física do estado sólido e na engenharia de dispositivos foi possível evoluir a maioria dos componentes eletrônicos que conhecemos e criar equipamentos cada vez mais sofisticados. Foram as descobertas em física da matéria condensada que possibilitaram o desenvolvimento do transistor, dos circuitos integrados e de inúmeros dispositivos que revolucionaram a eletrônica e os computadores [5]. Os lasers encontraram inúmeras aplicações na indústria e na medicina e propiciaram o advento das comunicações ópticas.

Os novos materiais magnéticos são os responsáveis pela melhoria de dispositivos e de processos de gravação que estão causando enorme impacto e progresso nos meios de comunicação e nos computadores. Entretanto, não foi apenas por causa de sua importância tecnológica que essa nova área se desenvolveu rapidamente. A enorme variedade de fenômenos que os elétrons e os núcleos apresentam coletivamente em sólidos deu origem a descobertas fundamentais excitantes.

Um exemplo concreto do enorme progresso da tecnologia de materiais magnéticos foi a descoberta em 1983, de novos ímãs, chamados de magnetos "duros" ou "permanentes", de neodímio-ferro-boro, cem vezes mais potentes que os ímãs até então usados. Isto levou a novas aplicações tecnológicas que reduziram o peso e o tamanho dos motores e alto-falantes e aumentaram sua eficiência [3]. As propriedades magnéticas da matéria macroscópica estão determinadas quase exclusivamente pelos momentos de dipolo magnético dos elétrons dos átomos que a constituem sendo que os momentos magnéticos nucleares são muito mais fracos que os dos elétrons e podem ser desconsiderados.

Os materiais magnéticos são comumente classificados conforme a resposta que produzem quando são submetidos a campos magnéticos e a essa resposta denominamos susceptibilidade magnética. A seguir apresentam-se os elementos pertencentes a essa categoria mais interessantes para esse trabalho que são o ferromagnetismo, o antiferromagnetismo e o ferrimagnetismo.

1.1.1 Ferromagnetismo

Os materiais magnéticos mais evidentes são os ferromagnéticos, constituídos pelo ferro (Fe), cobalto (Co) e níquel (Ni) [6]. À temperatura ambiente, eles exibem uma imantação natural e por isso são utilizados como ímãs permanentes. Entretanto, se aquecidos, esses materiais perdem a imantação natural a uma determinada temperatura, denominada temperatura crítica (T_c), ou temperatura de Curie, tornando-se paramagnético. Essa alta magnetização nos materiais ferromagnéticos está relacionada ao fato destes possuírem momentos de dipolo magnético intrínsecos altamente interagentes que se alinham paralelamente entre si [7]. A figura 1.1 ilustra o ordenamento de uma rede que representa um ferromagneto uniaxial.

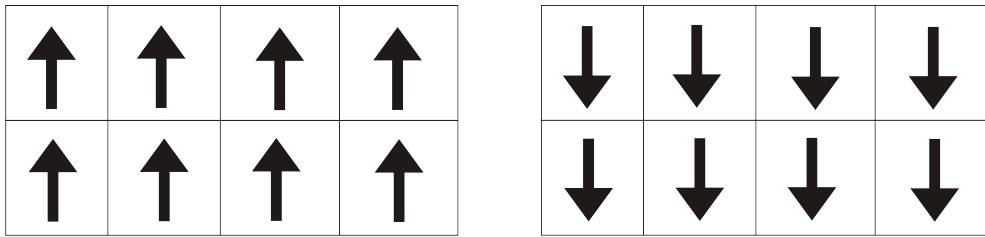


Figura 1.1: Nesta figura, apresentam-se duas ilustrações do alinhamento dos spins dos sítios de um ferromagneto com uma direção preferencial resultando numa magnetização não nula.

Os materiais ferromagnéticos são caracterizados pela ordem magnética espontânea abaixo de uma determinada temperatura crítica e do ordenamento magnético dos dipolos magnéticos de uma amostra sob um campo magnético, na mesma direção e sentido do campo. Esses materiais também possuem dependência linear ($\frac{1}{T}$) da susceptibilidade magnética com a temperatura e quanto maior a temperatura, menor é a resposta do material a um campo magnético. Ao se aplicar um campo magnético nessa amostra, os domínios se orientam no mesmo sentido demonstrando uma magnetização não nula. Mesmo que o campo externo seja desligado, a amostra ainda assim apresentará uma magnetização não nula.

1.1.2 Antiferromagnetismo

No estado antiferromagnético, os spins de sítios vizinhos se alinham antiparalelamente. Assim, podemos dividir a rede em duas sub-redes, cada uma apresentando uma magnetização espontânea numa determinada direção. A figura 1.2 demonstra como os spins dos sítios ficam alinhados nesse fenômeno.

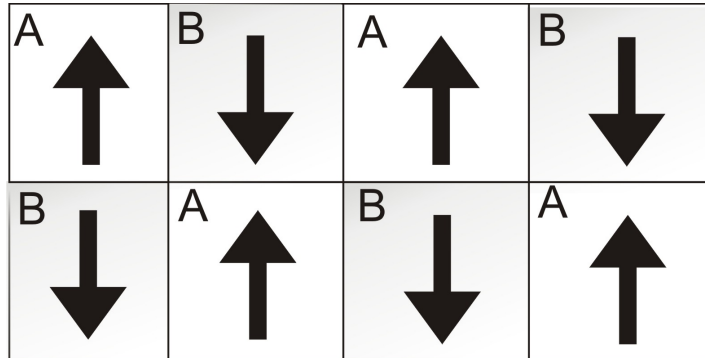


Figura 1.2: Nesta figura, ilustram-se dois arranjos dos spins de um antiferromagneto. O alinhamento antiferromagnético se estende por toda a amostra e a magnetização resultante se anula dada a equivalência entre uma sub-rede e outra.

Esse tipo de fenômeno é caracterizado pela magnetização espontânea que não exibe magnetização total resultante no material, diferenciando-se do ferromagnetismo. Um metal como manganês (Mn) apresenta comportamento antiferromagnético, da mesma forma que alguns óxidos e compostos [8].

A temperatura crítica em que uma amostra antiferromagnética sofre uma transição para o estado paramagnético, denomina-se temperatura de Néel (θ_n). Acima dessa temperatura, os dipolos apontam em direções aleatórias devido à predominância da agitação térmica, produzindo uma magnetização total nula. Abaixo da temperatura de Néel, no estado antiferromagnético, a magnetização total também é nula devido a interação entre os dipolos que provoca um ordenamento magnético tal que a soma das magnetizações espontâneas das sub-redes se anula, definindo o estado antiferromagnético. A susceptibilidade magnética desses materiais é da mesma ordem de grandeza dos materiais paramagnéticos e também diminui como aumento da temperatura (T):

$$\chi_m \simeq \frac{C}{T + \Theta}, \quad (1.1)$$

onde C é a constante de Curie e Θ é uma temperatura não nula. A utilização de compostos antiferromagnéticos está intensificando o entendimento do comportamento desse fenômeno e assim abrindo caminhos para seu uso em tecnologias emergentes, como a computação quântica. A estrutura antiferromagnética mais

simples é aquela constituída por uma rede magnética que se divide em duas sub-redes equivalentes e interpenetrantes [8].

1.1.3 Ferrimagnetismo

O ferrimagnetismo é parecido com o antiferromagnetismo, entretanto a diferença se dá no valor de certo grupo de spins que é menor. Os materiais ferrimagnéticos apresentam magnetização espontânea, porém não são classificados como ferromagnetos. Em altas temperaturas, esses materiais apresentam decaimento na magnetização e tornam-se paramagnéticos. Existem óxidos como NiFe_2O_4 , o CoFe_2O_4 , e o CuFe_2O_4 que exibem magnetização espontânea e são denominados ferritas. Entre outros tem-se as hematitas, a atrolita, o ulvospinélio e a ilmenita. Na figura 1.3 abaixo demonstra-se o comportamento de um ferrimagneto.

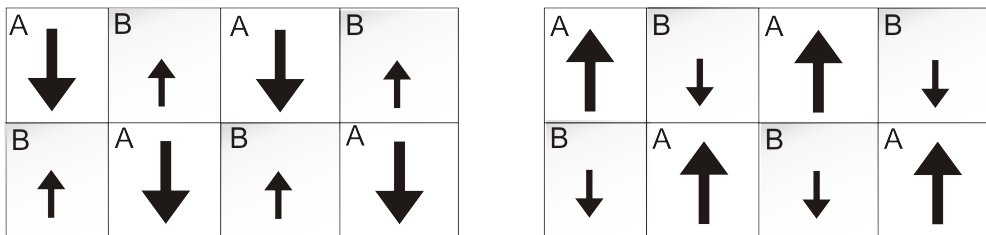


Figura 1.3: Nesta ilustração, tem-se dois arranjos dos spins de um ferrimagneto. Percebe-se a formação de duas sub-redes. Por exemplo, spins inteiros compondo a sub-rede “A” e spins semi-inteiros formando a sub-rede “B”.

1.1.4 Paramagnetismo

Essa forma de magnetismo é caracterizado pela resposta linear a aplicação de um campo magnético, ou seja, quanto maior o campo aplicado maior a magnetização exibida pelo material e na ausência de campo magnético no material a magnetização é nula. O paramagnetismo é um dos diferentes comportamentos magnéticos que são observados na matéria que estão fortemente relacionados com a estatística de Fermi e por outro lado com o princípio de exclusão de Pauli. Os materiais paramagnéticos são caracterizados por uma susceptibilidade magnética

positiva que varia linearmente com o inverso da temperatura. Tal comportamento é descrito pela lei de Curie [8].

$$\chi_m = \frac{C}{T}, \quad (1.2)$$

em que C é uma constante positiva conhecida como constante de Curie. Os paramagnetos são ditos ideais quando apresentam comportamento paramagnético em todas as temperaturas e podem ser comparados do ponto de vista microscópico, a um sistema composto por dipolos magnéticos microscópicos permanentes mas não interagentes. Existem materiais que não são paramagnetos ideais, porém possuem uma fase paramagnética e para temperaturas suficientemente altas, a grandeza χ_m é descrita pela lei de Curie-Weiss.

$$\chi_m = \frac{C}{T \pm \Theta}, \quad (1.3)$$

a constante Θ é positiva para materiais que sofrem transição para um estado ferromagnético e negativa para os que sofrem transição para um estado antiferromagnético. Alguns exemplos de materiais paramagnéticos são: granada, piroxênio, biotita, anfíbólio, pirita, carbonatos, e normalmente, os condutores metálicos.

1.1.5 Diamagnetismo

O diamagnetismo é uma propriedade de todos os materiais, porém só pode ser observado na ausência dos outros comportamentos magnéticos. Os materiais diamagnéticos são caracterizados por um pequeno valor negativo da susceptibilidade e por não possuírem momento de dipolo magnético intrínseco. O diamagnetismo é um fenômeno puramente quântico porque a interação entre o campo magnético externo e o movimento orbital dos elétrons gera elementos que não possuem abordagem na mecânica estatística clássica [9]. Como exemplo, dois materiais diamagnéticos são o quartzo e o sal.

1.2 Transição de Fases e Fenômenos Críticos

As substâncias podem se apresentar em diferentes estados de agre-

gação, classificados conforme as propriedades em determinado estado. Um gás é caracterizado por sua alta compressibilidade e baixa densidade, já um sólido e um líquido são pouco compressíveis e de densidade maior. Uma das diferenças entre o sólido e o líquido é a resistência a deformação [8]. A mudança de uma fase para outra é chamada de transição de fase. Um exemplo de transição de fase bastante conhecido é o da água, que é líquida a temperatura ambiente e pressão atmosférica. Ao ser resfriada abaixo de 273,15K a água se solidifica e se vaporiza quando aquecida acima de 373,15K. Em cada uma dessas temperaturas ocorre uma transição de fase. Para baixas temperaturas a água sofre muitas transições de fase adicionais de uma forma sólida para outra. A distinguibilidade das fases sólidas é designada como Gelo I, Gelo II, Gelo III e etc, diferindo na estrutura cristalina e essencialmente todas as propriedades termodinâmicas [6].

As transições de fase são mudanças nas propriedades de um sistema físico. Paul Ehrenfest (1880-1933) propôs uma classificação das transições de fase onde a ordem da transição seria dada pela ordem da derivada da energia livre, em relação aos parâmetros do sistema, que apresentasse descontinuidade. Atualmente, as transições de fase são classificadas como de primeira ordem ou de segunda ordem. As de primeira ordem são denotadas por mudanças abruptas em algumas grandezas termodinâmicas e por exibirem calor latente, energia gasta para alteração da estrutura do material. Ao contrário das de primeira ordem, as transições de segunda ordem não tem calor latente, são contínuas e mais suaves. As quantidades termodinâmicas possuem comportamento bastante peculiar nas proximidades do ponto crítico. No caso dos sistemas magnéticos, o valor da magnetização se anula para $T > T_c$, dando origem à fase desordenada e para $T < T_c$ caracteriza-se a fase ordenada. Dependendo do sistema físico, o parâmetro de ordem pode ser medido e variado através de métodos experimentais, como ocorre com o magnetômetro de medição oscilante que determina diretamente a magnetização espontânea de um ferromagneto [10].

As teorias clássicas, leia-se antes da renormalização, foram mais analisadas a partir da década de 60, quando se desenvolveram as técnicas necessárias para realizar experiências nas vizinhanças críticas. A susceptibilidade e diversas grandezas termodinâmicas apresentam um comportamento diferenciado na região

crítica, com divergências assintóticas que são caracterizadas por expoentes críticos [9]. Grandezas análogas em outros sistemas podem possuir um mesmo comportamento crítico destacando o caráter universal, identificado pelo mesmo valor dos expoentes. As teorias de campo médio fornecem um conjunto clássico de valores para os expoentes críticos para sistemas diferentes que apontam a existência de classes de universalidade. As grandezas que serão utilizadas, bem como a explicação mais detalhada do que são expoentes críticos e universalidade estão apresentadas nas seções seguintes.

1.3 Algumas Grandezas Termodinâmicas em Sistemas Magnéticos

Nesta seção são apresentadas as formas de cálculo das médias das variáveis termodinâmicas utilizadas no trabalho. Na teoria da mecânica estatística, desenvolvida principalmente por Boltzmann e Gibbs, a partir da função de partição do sistema encontram-se todas as propriedades termodinâmicas [9, 11]. Neste trabalho será utilizado o modelo de Ising, cuja Hamiltoniana na ausência de campo externo é dada por:

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle ij \rangle} -JS_i S_j, \quad (1.4)$$

onde a soma é feita sobre pares de spins primeiros vizinhos. Assim, a função de partição usada segue abaixo:

$$Z = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta\mathcal{H}(\{S_i\})} \quad (1.5)$$

onde a soma é feita sobre todas as configurações. A média canônica de uma grandeza A é obtida por:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{\{S_i\}} A_i e^{-\beta E(\{S_i\})}}{\sum_{\{S_i\}} e^{-\beta E_i}} \quad (1.6)$$

1.3.1 Magnetização Média

A magnetização M de uma determinada configuração é dada simplesmente pela

soma de todos spins da rede.

$$M = \sum_i S_i \quad (1.7)$$

E também pode ser apresentada a magnetização por sítio.

$$m = \frac{1}{N} \sum_i S_i \quad (1.8)$$

Essa quantidade será útil para cálculo das demais grandezas como a susceptibilidade e o cumulante de Binder ou de quarta ordem.

1.3.2 Susceptibilidade Magnética

A susceptibilidade magnética (χ) é a grandeza que caracteriza um material magnético segundo sua resposta a um campo magnético aplicado. A determinação de χ pode ajudar na identificação de transições de fase. A susceptibilidade é dada por:

$$\chi = \frac{J}{k_B T} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2), \quad (1.9)$$

onde k_B é a constante de Boltzmann, J o termo de troca, T a temperatura e M a magnetização.

1.3.3 Calor Específico

O calor específico c é uma grandeza física que indica a variação térmica de um corpo ao receber determinada quantidade de calor. O cálculo do calor específico pode ser feito a partir da derivada da energia do sistema em relação a temperatura a volume constante. Neste trabalho utilizamos:

$$C_v = \frac{J}{k_B T^2} [\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2], \quad (1.10)$$

onde T é a temperatura e E a energia do sistema.

1.3.4 Cumulante de Binder

O cumulante de Binder ou de quarta ordem é uma ferramenta extremamente importante para determinação da temperatura crítica de um sistema magnético. Através da obtenção do cumulante da magnetização como função de T para vários tamanhos de rede, pode-se observar um ponto de intersecção dessas curvas que corresponde a T_c do sistema. O cumulante é calculado da seguinte forma:

$$U_4 = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3\langle M^2 \rangle^2}, \quad (1.11)$$

onde M é a magnetização do sistema.

1.3.5 Cálculo do Erro

As quantidades de interesse encontradas nas simulações podem sofrer flutuações, assim utiliza-se eq.1.12 para calcular os desvios:

$$\sigma = \sqrt{\frac{(\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2)n}{(n-1)}} \quad (1.12)$$

onde A é a grandeza de interesse e n o número de medidas realizadas. Para um número muito grande de amostras se aproxima de 1 e a eq. (1.12) se reduz a:

$$\frac{n}{n-1} \rightarrow 1 \quad (1.13)$$

1.4 Expoentes Críticos

O parâmetro adimensional (t), temperatura reduzida, é definido como a distância entre a temperatura do sistema e a sua temperatura crítica correspondente e sua forma está apresentada abaixo:

$$t \equiv \frac{T - T_c}{T_c} \quad (1.14)$$

Se $t = 0$, o sistema está na temperatura crítica. O comprimento de correlação é uma medida de quão o sistema está correlacionado. No limite termodinâmico, ou

seja, no sistema de tamanho infinito espera-se que o comportamento do comprimento de correlação (ξ) próximo da temperatura de transição varie com:

$$\xi \sim |t|^{-\nu}. \quad (1.15)$$

À quantidade positiva ν dá-se o nome de expoente crítico. Considera-se o valor absoluto t da temperatura reduzida tal que a mesma expressão pode ser considerada para temperaturas inferiores e superiores a T_c . O valor do expoente crítico ν é uma característica do modelo e é independente de variáveis como o valor do acoplamento J . Esta propriedade é conhecida como universalidade. O valor de ν depende da dimensão da rede que se está estudando, modelos de Ising de duas e três dimensões têm valores de ν diferentes. Assim, quando se verifica uma divergência do comprimento de correlação, também se verificam divergências da susceptibilidade magnética e do calor específico em T_c . Os expoentes críticos γ e α associados a cada uma destas grandezas governam estas divergências:

$$\chi \sim |t|^{-\gamma}, \quad (1.16)$$

$$c \sim |t|^{-\alpha} \quad (1.17)$$

Na literatura, podem ser encontrados valores dos expoentes críticos do modelo de Ising para duas e três dimensões [12, 13, 14].

Para a magnetização m , definimos um expoente válido apenas abaixo da temperatura crítica, uma vez que a magnetização é nula para $T \geq T_c$:

$$m \sim |t|^\beta \quad (1.18)$$

Ao relacionar o valor encontrado de T_c nas equações, podem-se determinar os expoentes críticos de cada quantidade correspondente em função da temperatura reduzida. Para o estudo dos fenômenos magnéticos são necessárias simplificações do sistema real. A modelagem do sistema é feita pelas suas características principais. É possível estudar tais fenômenos através de simulações computacionais como foi feito neste trabalho, atualmente favorecidas pela evolução de hardware dos computadores. Por meio das simulações, o pesquisador fica livre para definir os parâmetros que modelam o fenômeno e que muitas vezes não poderiam ser manipulados experimentalmente ou apresentam dificuldade de realização. Nesta dis-

sertação, estudaremos o comportamento das grandezas termodinâmicas do modelo de Ising de spins mistos com anisotropia de campo cristalino aleatório, através das simulações de Monte Carlo.

1.5 Universalidade

Diferentes modelos podem apresentar o mesmo conjunto de expoentes críticos e esse fenômeno é chamado de universalidade. Dizemos que os modelos que possuem os mesmos expoentes críticos estão em uma mesma classe de universalidade.

A teoria da universalidade prevê que os fluidos (líquido-gás) e os imãs (uniaxiais) têm exatamente o mesmo comportamento crítico, assim pertencem à mesma classe de universalidade [15]. Esta previsão foi confirmada através de experimentos e é um dos triunfos da Física Teórica do século XX. A universalidade é também aplicável às transições de fase em fluidos complexos tais como: polímeros e soluções poliméricas, micro-emulsões, cristais líquidos, fluidos em materiais porosos, géis e espumas. São características de todos os sistemas críticos grandes flutuações, susceptibilidade extrema a perturbações externas.

A universalidade do comportamento crítico motivou a busca dos aspectos das interações microscópicas importantes na determinação dos expoentes críticos e das funções de escala. Respostas a estas questões foram dadas por aplicações da teoria do grupo de renormalização [16, 18]. Os resultados destes estudos mostraram que quando a escala muda, as equações que descrevem o sistema mudam de tal forma, que no limite termodinâmico apenas alguns aspectos do sistema são relevantes.

A compreensão dessa universalidade levou a descoberta de mecanismos, geralmente simples, responsáveis pelo comportamento dos sistemas críticos. Ideias como esta guiaram os físicos em problemas de investigação interdisciplinares e puseram em evidência semelhanças entre problemas e disciplinas aparentemente muito diferentes. Hoje, descobertas feitas no contexto dos fenômenos críticos são aplicadas em áreas das ciências naturais, onde os efeitos cooperativos têm um papel decisivo. Por exemplo: a física de polímeros usa ideias e

métodos da teoria de fenômenos críticos, a teoria de percolação (fenômenos críticos geométricos) é aplicada à descrição das transições vítreas e dos géis, e existem analogias surpreendentes entre as transições de fase no equilíbrio e os processos de auto-organização fora do equilíbrio (incluindo sistemas não físicos). O mundo à nossa volta está repleto de fenômenos onde a linguagem das transições de fase termodinâmicas, dinâmicas ou geométricas parece ser a mais adequada.

1.6 Efeitos de Tamanho Finito

1.6.1 Teoria de Escala de tamanho finito

Um dos métodos pelo qual se estuda o comportamento termodinâmico dos sistemas físicos nas proximidades do ponto crítico é chamado de teoria de escala de tamanho finito. Define-se o parâmetro de ordem do sistema de modo que seu valor é nulo para $T > T_c$ e não nulo para $T < T_c$. No ponto crítico, as grandezas termodinâmicas divergem. Estas divergências tomam a forma de leis de potência com expoentes (os expoentes críticos) que dependem apenas de algumas características do sistema. Os comportamentos de escala das funções termodinâmicas perto do ponto crítico já foram verificados experimentalmente.

A hipótese de invariância de escala, que surgiu no contexto dos fenômenos críticos, deu origem a duas categorias de previsões, ambas verificadas experimentalmente para uma grande variedade de sistemas. A primeira categoria é um conjunto de expressões, chamadas relações de escala, que envolvem os expoentes críticos que caracterizam o comportamento singular dos sistemas críticos. A segunda categoria implica um ‘colapso’ ou redução dos resultados experimentais. De fato, verifica-se que perto do ponto crítico, as funções termodinâmicas de (n) variáveis podem ser representadas por funções de $(n-1)$ variáveis devidamente escaladas. Estes princípios da invariância de escala têm sido úteis na interpretação de muitos outros fenômenos, desde a formação de galáxias aos mercados financeiros e à sociologia. Kadanoff [16] conseguiu progressos aplicando a ideia de escala de modo muito habilidoso ao modelo Ising e abriu as portas para a teoria moderna dos fenômenos críticos introduzida por Wilson [17].

No princípio dos anos 70, K. Wilson propôs uma teoria para os fenô-

menos críticos baseada numa alteração essencial de um método largamente utilizado em Física teórica, chamado teoria do grupo de renormalização. A teoria que valeu a Wilson o prêmio nobel da Física em 1982 permitiu a descrição do comportamento dos sistemas perto do ponto crítico, incluindo o cálculo de quantidades essenciais que caracterizam a transição, como os expoentes críticos. Um dos resultados mais importantes desta teoria é a descoberta da existência de classes universais (descritas nas seções anteriores) que não dependem dos detalhes das interações microscópicas, mas apenas da sua simetria. Um dos métodos capazes de determinar os expoentes críticos é o método de escala de tamanho finito de Fisher *et al.*(1971) [18, 19, 20] que possibilita encontrar os valores dos expoentes críticos através da observação de como algumas quantidades variam com o aumento do tamanho linear L da rede na forma de lei de potência. Como exemplo, a magnetização média é dada por:

$$m(T) \sim |t|^\beta \quad (1.19)$$

Onde β é um expoente crítico. Como vimos, relações são válidas para o calor específico:

$$c(T) \sim |t|^{-\alpha} \quad (1.20)$$

e a susceptibilidade magnética:

$$\chi(T) \sim |t|^{-\gamma} \quad (1.21)$$

Outra importante quantidade é o comprimento de correlação. Nas proximidades de uma transição de segunda ordem (em sistemas infinitos) o comprimento de correlação diverge da seguinte forma:

$$\xi(T) \sim |t|^{-\nu} \quad (1.22)$$

Em sistemas finitos, o ξ é limitado pelo tamanho da rede L como é ilustrado na figura 1.4.

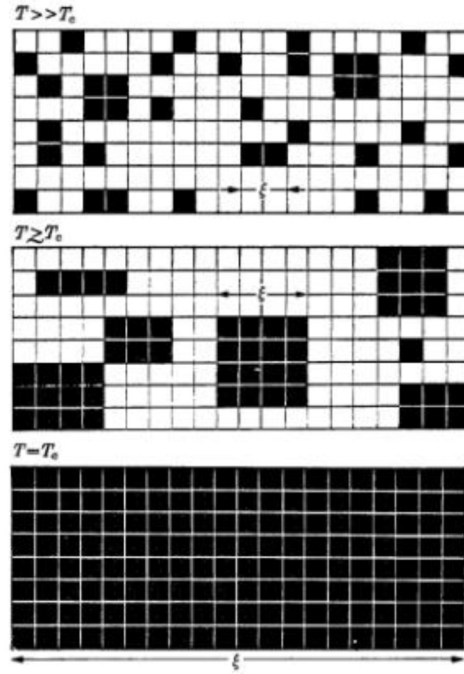


Figura 1.4: Ilustração retirada de [21]. Representa um modelo de gás de rede com temperatura próxima da crítica. Cada célula é preta se está ocupada pelo centro da molécula e branca se está vazia. Analogamente, pode-se representar o modelo de Ising, em que as células pretas correspondem a spin “up” e a branca como “down”. O comprimento de correlação ξ pode ser pensado como o tamanho característico de um bloco de sítios ocupados (ou spin “up”).

Uma transição de fase de segunda ordem é caracterizada pela divergência do comprimento de correlação em T_c . Através das relações de escala de tamanho finito é possível relacionar os resultados do comportamento de uma rede finita com uma rede de tamanho infinito. Como as simulações lidam com sistemas finitos, o comprimento de correlação ξ é limitado pelo tamanho L do sistema. Para um determinado L , associamos uma temperatura pseudocrítica [22], na qual ξ é da ordem de L :

$$\xi(T_c^L) \sim L \quad (1.23)$$

Comparando a equação anterior com a eq. (1.15), vê-se que quando $L \rightarrow \infty$ a temperatura pseudocrítica da rede finita obedece a leis de escala

$$T_c^L = T_c + aL^{-\frac{1}{\nu}} \quad (1.24)$$

Assim, sabendo-se o valor do expoente ν , pode-se determinar a temperatura crítica T_c do sistema infinito através de um gráfico de T_c^L como função de $L^{-\frac{1}{\nu}}$. A intersecção desse gráfico com o eixo das temperaturas fornece T_c . Como na maioria das vezes, ν não é conhecido, necessita-se de um modo de avaliá-lo. Conforme foi dito, um sistema finito é limitado pelo tamanho L do sistema. Assim, o comprimento de correlação é dado por:

$$\xi(T) \sim L \sim |T_c - T|^{-\nu} \implies |T_c - T| \sim L^{-\frac{1}{\nu}} \quad (1.25)$$

Se, $T \simeq T_c$, obtém-se:

$$m(T) \sim (T_c - T)^\beta \rightarrow L^{-\frac{\beta}{\nu}} \quad (1.26)$$

$$c(T) \sim |T_c - T|^{-\alpha} \rightarrow L^{\frac{\alpha}{\nu}} \quad (1.27)$$

$$\chi(T) \sim |T_c - T|^{-\gamma} \rightarrow L^{\frac{\gamma}{\nu}} \quad (1.28)$$

Como exemplo, vamos analisar o expoente γ da susceptibilidade. Eliminando $|t|$, i.e $|T - T_c|$, das equações (1.16 e 1.22) deve-se chegar a:

$$\chi \sim \xi^{\frac{\gamma}{\nu}} \quad (1.29)$$

Analogamente:

$$c \sim \xi^{\frac{\alpha}{\nu}} \quad (1.30)$$

$$m \sim \xi^{-\frac{\beta}{\nu}} \quad (1.31)$$

Essas grandezas termodinâmicas podem ser determinadas por meio das simulações. A partir do comportamento dessas quantidades em escala logarítmica como funções de L , podem-se encontrar os expoentes críticos.

Neste capítulo foi apresentado um breve embasamento teórico para compreender os fenômenos magnéticos, as grandezas termodinâmicas envolvidas nos sistemas magnéticos e os elementos capazes de analisar o comportamento dessas propriedades. No capítulo seguinte será exposto o método de Monte Carlo utilizado nas simulações computacionais.

Capítulo 2

Simulações de Monte Carlo

2.1 Introdução

As primeiras simulações de Monte Carlo [23] tiveram início no final da 2ª Guerra Mundial por von Neumann, Ulam e Metropolis que designaram o método simbolizando a união entre a arte e o jogo. Devido a sua beleza e precisão, ele ganhou rapidamente espaço na mecânica estatística simulando ensembles estatísticos e calculando propriedades termodinâmicas. Assim, trata-se de uma técnica muito importante para Ciência em geral pela sua flexibilidade e diversidade de utilização.

A dificuldade do uso de Monte Carlo nos problemas físicos não está principalmente focada na modelagem e sim no arcabouço teórico necessário para sua compreensão. Por trás dessa brilhante ferramenta temos a teoria dos processos estocásticos, em particular, os processos ou cadeias de Markov e ainda os diferentes algoritmos que podem ser utilizados. Em [10], pode-se ter alguns exemplos de aplicações do método de Monte Carlo, além da Física, como em árvores genealógicas, na determinação de raízes de equações e integrais numéricas, ou mesmo para prever ou entender fenômenos sociológicos, no mercado financeiro e no auxílio em projetos de dispositivos de imagem médicas para a tomografia.

2.2 Cadeias de Markov

Por trás do método de Monte Carlo existem conceitos muito importantes que devem ser estudados. Entre eles temos os processos estocásticos, particularmente, os processos markovianos. Um processo estocástico é um processo que evolui no tempo dependendo de certa probabilidade. Ele é caracterizado por um conjunto de variáveis aleatórias ($X(t)$), cujo valores variam com o tempo que pode ser considerado contínuo ou discreto.

Neste trabalho utilizaremos apenas os processos estocásticos chamados de processos markovianos, que ocorrem se a probabilidade de o sistema estar em determinado estado no instante t depende apenas da probabilidade no instante imediatamente anterior. Ou seja, o estado futuro deve depender apenas do estado presente e somente informações do estado imediatamente anterior são necessárias para um estado evoluir, descartando a memória de outros estados passados.

O conceito de cadeia de Markov é tão importante para simulações de Monte Carlo que deve-se apresentar uma breve discussão de suas ideias básicas [10]. As cadeias de Markov fornecem o critério necessário para garantir que um dado algoritmo possa convergir para o estado de equilíbrio [10]. Uma cadeia de Markov é um processo markoviano com um conjunto de estados discretos em tempos discretos. A probabilidade de transição entre estados determina o comportamento da cadeia de Markov. Então, define-se um processo estocástico em tempos discretos chamados de (t_1, t_2, t_3, \dots) para um sistema finito na forma de possíveis estados (x_1, x_2, x_3, \dots) e denotamos por x_t o estado do sistema no tempo t . Assim, tem-se a probabilidade condicional do estado (x_n) evoluir para (x_{n+1}) dada por:

$$P(x(t_{n+1}) = x_{n+1} | x(t_n) = x_n) \quad (2.1)$$

Essa probabilidade condicional é chamada de probabilidade de transição e representa a probabilidade do estado $x(t_{n+1})$ ser x_{n+1} no instante t_{n+1} dado que o estado $x(t_n)$ é x_n no instante de tempo t_n . Essa sequência correspondente de estados X_t é chamada de cadeia de Markov e a probabilidade condicional acima pode ser interpretada como uma probabilidade de transição para mover-se do estado i

para o estado j .

$$W_{ij} = W(x_i \rightarrow x_j) = P(x_{t_n} = x_j | x_{t_{n-1}} = x_i) \quad (2.2)$$

Existe a necessidade de que a eq. anterior obedeça:

$$W_{ij} \geq 0 \text{ e } \sum_j W_{ij} = 1 \quad (2.3)$$

Esses dois aspectos são usualmente impostos para probabilidades de transição, a positividade e normalidade. Se o estado j nunca ocorrer $W_{ij} = 0$ para qualquer i e se certamente ocorrer $W_{ij} = 1$.

2.3 Amostragem por Importância

Na simulação do modelo de Ising será utilizado um algoritmo que permite fazer uma amostragem não-homogênea do espaço de configurações da rede de spins. O algoritmo seleciona as regiões do espaço das configurações de onde vêm as contribuições mais importantes para efeito do cálculo do valor médio das grandezas que pretendemos determinar. Um desses algoritmos é o de Metropolis e será descrito na seção seguinte. Neste método, constrói-se uma cadeia de Markov em que cada configuração x_j é obtida da configuração anterior x_i a partir de uma função de transição (W_{ij}) adequada. A evolução temporal deste processo estocástico é descrito pela seguinte equação:

$$\frac{dP_i(t)}{dt} = - \sum_j [P_i(t)W_{(ij)} - P_j(t)W_{(ji)}] \quad (2.4)$$

Onde P_i é a probabilidade do sistema estar no estado i no tempo t e W_{ij} é a taxa de transição de $i \rightarrow j$. A eq. (2.4) é chamada de equação mestra e os termos da somatória podem ser interpretados como a descrição do balanço de ganha e perda de processos. A condição suficiente para que a distribuição de probabilidade seja a de equilíbrio é:

$$\frac{dP_{eq}(t)}{dt} = 0, \quad (2.5)$$

Essa condição garante que os termos da somatória se cancelem exatamente e nos leve a concluir que:

$$\sum_j P_i(t)W_{ij} - P_j(t)W_{ji} = 0 \quad (2.6)$$

O caso em que:

$$P_i(t)W_{ij} = P_j(t)W_{ji} \quad (2.7)$$

é conhecida como balanço detalhado. Para qualquer j deve-se escolher uma probabilidade de transição que satisfaça essa condição de equilíbrio, qualquer taxa de transição que satisfaça o balanço detalhado é aceitável.

2.4 Algoritmo de Metropolis

Em 1953, Nicolas Metropolis e colaboradores [24] introduziram um algoritmo capaz de gerar um conjunto de configurações, independente do estado inicial dessas configurações, através do processo de Markov e conduzir à função de distribuição ao equilíbrio. A seleção das probabilidades deve ser feita satisfazendo a condição de ergodicidade, o princípio de que cada estado seja acessível a partir de qualquer outro em um número finito de passos. Uma escolha possível que caracteriza o algoritmo de Metropolis é utilizar a eq.(2.8). Nesse caso, a razão entre as probabilidades de transição para um movimento ($i \rightarrow j$) e para o movimento inverso ($j \rightarrow i$) deve depender apenas da diferença de energia entre os estados inicial e final:

$$\frac{P_j}{P_i} = \frac{W_{ij}}{W_{ji}} = e\left(-\frac{\Delta E}{k_B T}\right), \text{ onde } \Delta E = E_j - E_i, \quad (2.8)$$

Esta equação não especifica unicamente a probabilidade de transição. A probabilidade de um enésimo estado ocorrendo em um sistema clássico é dado por:

$$P_n(t) = \frac{1}{Z} e\left(-\frac{E(x_n)}{k_B T}\right) \quad (2.9)$$

onde Z é a função de partição. Essa probabilidade, em geral, não é conhecida exatamente por causa do denominador. No entanto, pode-se evitar essa dificuldade gerando uma cadeia de Markov de estados, ou seja, a geração de cada novo

estado diretamente do estado anterior [10]. A probabilidade de transição dada por Metropolis é:

$$W_{ij} = \min \left[1, e^{\left(-\frac{\Delta E}{k_B T}\right)} \right] \quad (2.10)$$

Em outras palavras:

$$\begin{cases} W_{ij} = e^{\left(-\frac{\Delta E}{k_B T}\right)} & \text{se } \Delta E > 0 \\ W = 1 & \text{se } \Delta E \leq 0 \end{cases} \quad (2.11)$$

Deve-se refletir o significado desta probabilidade de transição no contexto do modelo de Ising, mesmo sem introduzi-lo, para torná-la mais compreensível. Após a apresentação do modelo e aplicação do método de Monte Carlo esse passo se tornará natural. Dada uma configuração inicial de spins, uma nova configuração de spins é gerada a partir da anterior por meio da tentativa de flip (ou inversão) de spin. Para esse modelo, os spins podem assumir +1 (Up) ou -1 (Down), logo as tentativas serão $(\sigma_i \rightarrow -\sigma_i)$. Assim, monta-se uma receita, ou melhor, um algoritmo com as tarefas para avaliar se o estado atual sofrerá transição ou não para um estado diferente.

Uma implementação do algoritmo de Metropolis é descrita a seguir:

1. Seleciona-se um spin no estado inicial σ_i .
2. Gera-se uma nova configuração σ_j .
3. Calcula-se ΔE , a diferença entre energia da configuração gerada e da configuração inicial.
4. Se $\Delta E < 0$, aceita-se a nova configuração σ_j e retorna-se ao passo dois.
5. Se $\Delta E > 0$, calcula-se a probabilidade $e^{[-\beta\Delta E]}$.
6. Gera-se um numero aleatório entre 0 e 1.
7. Se o número gerado for menor ou igual à $e^{[-\beta\Delta E]}$, aceita-se a configuração σ_j e repete-se o passo 2 .
8. Armazenam-se as grandezas de interesse para cálculo das médias.

Nos itens 1 e 2 são definidos os estados atuais e futuros, respectivamente, para o cálculo da diferença de energia entre eles no item 3. Os itens 4 e 5 são decisões tomadas através da pergunta sobre a variação de energia. Caso essa seja menor que zero, o estado futuro é aceito e inicia-se novamente o procedimento. Sendo a energia maior que zero deve-se calcular a probabilidade Boltzmann. No passo 6 é importante notar que o número aleatório gerado deve ser escolhido de forma uniforme no intervalo (0,1). Porém, os computadores possuem dificuldades em produzir números aleatórios independentes. Por isso, eles são chamados de números pseudoaleatórios. Em [25], pode-se encontrar muitas discussões sobre geração de números aleatórios para método de Monte Carlo. Note que no item 7, se uma tentativa de transição para um estado futuro é rejeitada, o antigo estado é contado novamente para a média.

O término do item 8 do algoritmo caracteriza a conclusão de um passo de Monte Carlo que pode ser tomado como uma unidade de “tempo” computacional da simulação. Ao final da repetição desses passos para todos os sítios da rede, calculam-se as propriedades do sistema, tomando-se o valor médio. A forma de se descrever esse tempo computacional é (MCS / N) , onde MCS é o número total de passos de Monte Carlo e N o número total de sítios da rede. Então, um passo de Monte Carlo por sítio corresponde à tentativa de inversão de N spins (ou inversão de todos spins da rede). As sucessivas configurações são obtidas das imediatamente anteriores tornando-as fortemente correlacionadas, consequentemente não se deve calcular médias no fim de cada passo 7, mas apenas depois de intervalos de “tempo” muito maiores. Para assegurar que os valores que entram para o cálculo das médias provêm de configurações estatisticamente independentes é aconselhável implementar o passo 8 apenas ao fim de pelo menos um passo de Monte Carlo por sítio. É necessário também repetir um número suficientemente grande de vezes os passos 1-7 até que a memória dessa configuração inicial se perca e se atinja a distribuição de equilíbrio à temperatura escolhida. Para esse efeito é necessário um tempo de relaxação desprezando as primeiras configurações [26]. Naturalmente, a precisão dos resultados depende de alguns fatores incluindo variações do tamanho da rede e condições de contorno. Um fluxograma do algoritmo de Metropolis é apresentado na figura 2.1 a seguir.

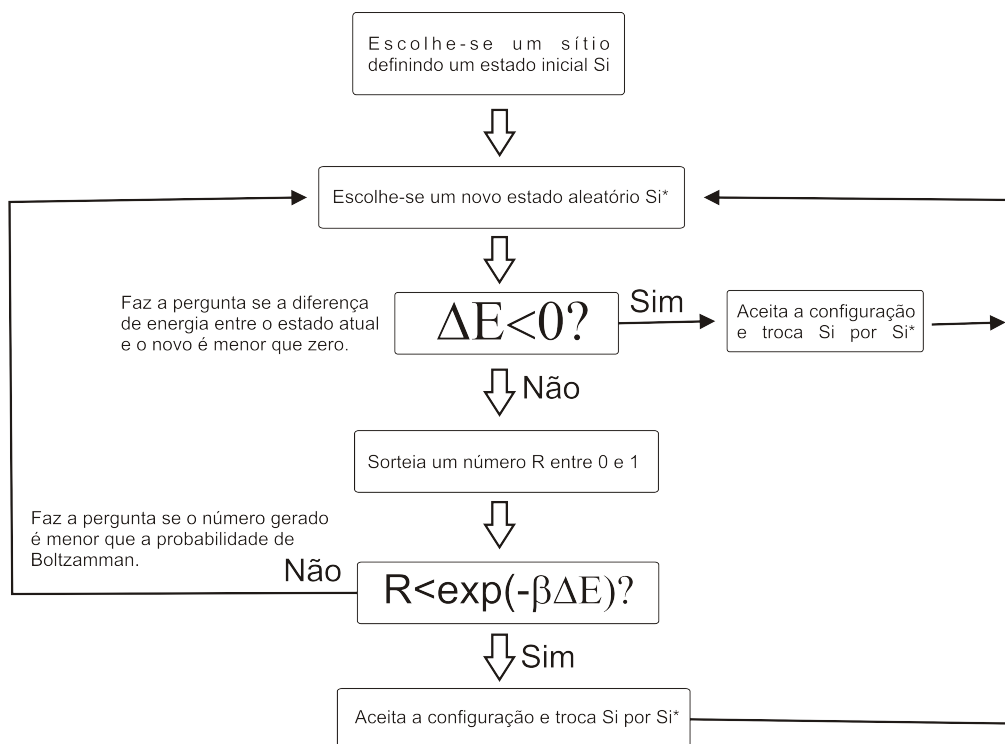


Figura 2.1: Fluxograma do algoritmo de Metropolis

2.5 Implementação do algoritmo de Metropolis

Nessa seção é apresentado um exemplo de implementação do algoritmo de Metro-polis para o modelo de Ising em uma rede quadrada. Neste trabalho foi utilizado o algoritmo 2.1 para realizar as simulações do capítulo 3.

E nesta seção foi apresentado o algoritmo de Metropolis com um arcabouço teórico resumido para fundamentar a sua utilização. Os elementos que compõem o algoritmo se encaixam e se tornam mais simples de serem compreendidos e identificados quando incorporados ao método de Monte Carlo. No capítulo 3 será discutido o modelo de Ising com foco principalmente em duas dimensões para a realização das primeiras simulações a fim de se testar a precisão e compreensão da ferramenta em questão.

Algorithm 2.1 Exemplo de algoritmo de Monte Carlo para o modelo de Ising na rede quadrada.

```
for (imcs=0; imcs<relax; ++imcs){
//Alguns passos iniciais são desprezados, relax representa o tempo de relaxação
//Laços para formar uma rede quadrada
for (i = 0; i < L; ++i){ for (j = 0; j < L; ++j){
// Aqui, calcula-se a interação com os spins dos sítios primeiros vizinhos
soma = S[i][j]*( S[up[i]][j] + S[dw[i]][j] + S[lf[j]] + S[rt[j]] );
//Assim, calcula-se a variação de energia entre as configurações
deltaE = 2*soma;
//E a variação da magnetização
deltaM = -2*S[i][j];
// Algoritmo de Metropolis verifica se a nova configuração será aceita
// Se a variação da energia for menor que zero, aceita-se a nova configuração
if (deltaE < 0){ S[i][j] = -S[i][j]};
//Se for maior
else{
// Gera-se um número aleatório
numeroSorteado = geradorNumeroAleatorio();
// Calcula-se a probabilidade de Boltzmann
prob = exp( (-1.0*deltaE)/(k*T) );
// E faz a verificação se o número gerado é menor que a probabilidade calculada
// Se for menor, aceita-se a configuração
if (numeroSorteado<prob){ S[i][j] = -S[i][j]};
// Se o número sorteado for maior que a probabilidade
else{ // Não é aceita a configuração futura e prevalece a configuração atual
// o que leva a uma variação igual a zero
deltaE=0; deltaM=0;}}
// Armazenam-se as grandezas magnetização e energia
mag = mag + deltaM;
energia = energia + deltaE;}}
for (imcs=0; imcs<MCS; ++imcs){ (...) }
// Armazenamento das grandezas para efetuar as médias }
// fim dos passos de Mc ←-
// Cálculo das Médias
```

Capítulo 3

Modelo de Ising

3.1 Introdução

O modelo proposto em 1920, por Wilhelm Lenz ao seu aluno de doutorado Ernest Ising objetivava estudar o ferromagnetismo de momentos localizados. O modelo conhecido como de Ising [1] foi idealizado por ele como uma rede linear de momentos magnéticos, mais especificamente, o sistema considerado é um conjunto de momentos magnéticos (spins) fixos nos N sítios de uma rede. Cada spin S_i interage apenas com seus primeiros vizinhos S_{i+1} e S_{i-1} na forma $-J S_i(S_{i+1}+S_{i-1})$, onde J é interação de troca, como se pode ver na figura abaixo:

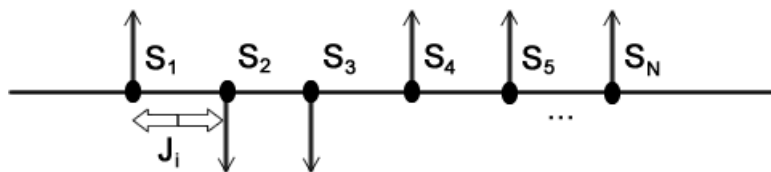


Figura 3.1: Representação de uma rede linear com N sítios de spin S_i e a energia de interação J_i podendo ter várias magnitudes.

Para $J > 0$ tem-se um ferromagneto, em que o alinhamento paralelo dos momentos é favorecido e a desordem é imposta pela temperatura. E para $J < 0$ temos o antiferromagnetismo. Dessa competição entre o alinhamento dos spins

e a desordem imposta pela temperatura, esperava-se a exibição de uma temperatura crítica e ordenamento de toda cadeia. Sabe-se hoje que em uma dimensão a cadeia de spins é instável em qualquer temperatura não nula, ordenando-se apenas em $T = 0$. O resultado obtido por Ising estava correto, porém o levou a concluir que seu modelo, por não apresentar transição de fase em uma dimensão, também não apresentaria para dimensões superiores. Além de ferromagnetismo, o modelo de Ising também pode descrever outros sistemas físicos, como o gás de rede e ligas binárias.

Em 1952, Yang e Lee [27] descreveram um modelo em que M átomos ocupam aleatoriamente os $N > M$ sítios de uma rede e deram o nome de gás de rede. A cada par de sítios vizinhos ocupados dá-se uma energia $E = E_0$; caso contrário tem-se $E = 0$. A interação tem a mesma forma que a de Ising, mas S_i pode ter os valores 0 (ausência de átomo) ou 1 (presença de átomo). Uma liga binária consiste em dois tipos de átomos ocupando aleatoriamente os sítios de uma rede. Dependendo se os vizinhos são do mesmo tipo de átomo ou não, atribui-se energia diferente ao par. Neste caso, $S_i = 1$ representa um tipo de átomo enquanto $S_i = -1$ representa o outro tipo [29].

A estrutura geométrica da rede no modelo de Ising pode ser linear, quadrada, cúbica, triangular entre outras. Associada a cada sítio da rede está um spin S_i que pode assumir dois estados possíveis: $S_i = +1$ (spin *up*) e $S_i = -1$ (spin *down*). A energia de uma determinada configuração de spins é dada pelo Hamiltoniana:

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

Onde $\langle ij \rangle$ indica que a soma é feita sobre todos os pares de spins primeiros vizinhos, H é um campo magnético externo e J é a constante de acoplamento que pode ser ferromagnética ($J > 0$), ou antiferromagnética ($J < 0$), comumente conhecida como energia de troca. É importante ressaltar que no modelo de Ising, os S_i não tem relação de comutação com momento angular como dito em [29]. Na próxima seção será apresentado o modelo de Ising em duas dimensões e os resultados obtidos.

3.2 Modelo de Ising em duas dimensões

O primeiro a demonstrar que o modelo de Ising em duas ou mais dimensões apresentava transição de fase a uma temperatura não nula foi Peierls em 1936 [30]. Mais tarde em 1944, Onsager [31] expressou soluções exatas para função de partição, energia média, magnetização média e calor específico a campo externo nulo. O modelo em uma rede quadrada é exemplificado na figura abaixo:

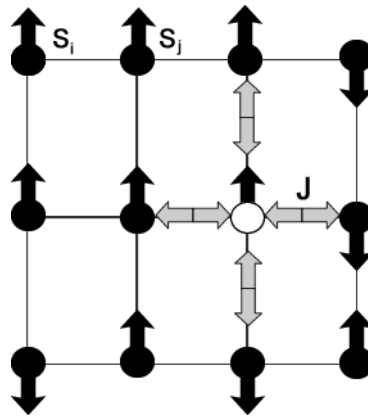


Figura 3.2: Representação de uma rede quadrada de sítios S_{ij} com interação J entre eles. Pode-se ver na figura o spin interagindo com quatro spins vizinhos.

A campo nulo este modelo apresenta uma transição de 2ª ordem à temperatura crítica (exata) $k_B T_c / J \approx 2,269185$ conforme obtido por Onsager[31]. A solução obtida pode ser encontrada na literatura [9, 31, 32].

3.3 Resultados e Discussões

São apresentados abaixo os gráficos das quantidades termodinâmicas encontradas por meio das simulações. O código implementado na linguagem C para simulações de Monte Carlo no modelo de Ising de duas dimensões encontra-se no apêndice A.

Nas simulações foram calculadas grandezas termodinâmicas na ausência de campo magnético e obtidas médias com uso de 130.000 passos de Monte

Carlo descartando os primeiros 30.000 passos para considerar o tempo de relaxação. Na figura 3.3 tem-se o gráfico da energia pela temperatura:

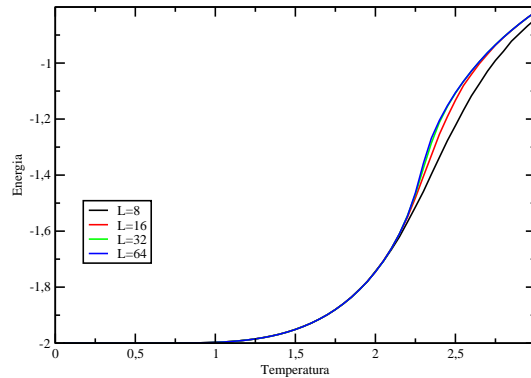


Figura 3.3: A energia pela temperatura. Pode-se perceber que, com a diminuição de T, a energia do sistema desce rapidamente, próximo de uma temperatura crítica.

Na figura 3.3, obtêm-se uma temperatura crítica entre $k_B T/J = 2,2$ e $k_B T/J = 2,5$. Resultados mais precisos são alcançados através do aumento do tamanho de rede juntamente com o número de passos de Monte Carlo. O próximo gráfico mostra a magnetização média pela temperatura partindo de um sistema que está ordenado com temperaturas inferiores a $k_B T/J = 2,0$ para um sistema com configuração desordenada, sem magnetização. O aumento da temperatura implica numa transição de fase de um sistema magnetizado para um desmagnetizado considerando que o sistema estava em baixa temperatura. Essa transição é chamada de ferromagnética \rightarrow paramagnética.

O fenômeno da magnetização que ocorre em um ferromagneto a temperaturas menores que a temperatura crítica é chamado de magnetização espontânea. A avaliação da magnetização média nos permite descrever em que temperatura o sistema deixa de ser ordenado e passa a ser desordenado com magnetização resultante igual a zero. Na figura 3.4, tem-se um gráfico da magnetização em função da temperatura.

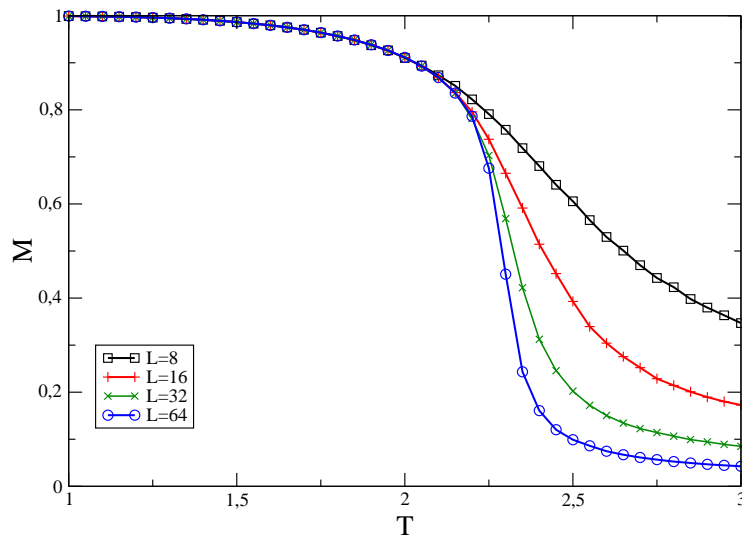


Figura 3.4: Magnetização média pela temperatura para vários tamanhos de rede. Percebe-se que para valores maiores de L , aproxima-se da temperatura crítica encontrada analiticamente.

No gráfico 3.4, verifica-se que a temperatura crítica está entre $k_B T/J = 2,3$ e $k_B T/J = 2,5$. Na figura 3.5, tem-se o calor específico pela temperatura, que possui uma divergência nas proximidades da temperatura crítica.

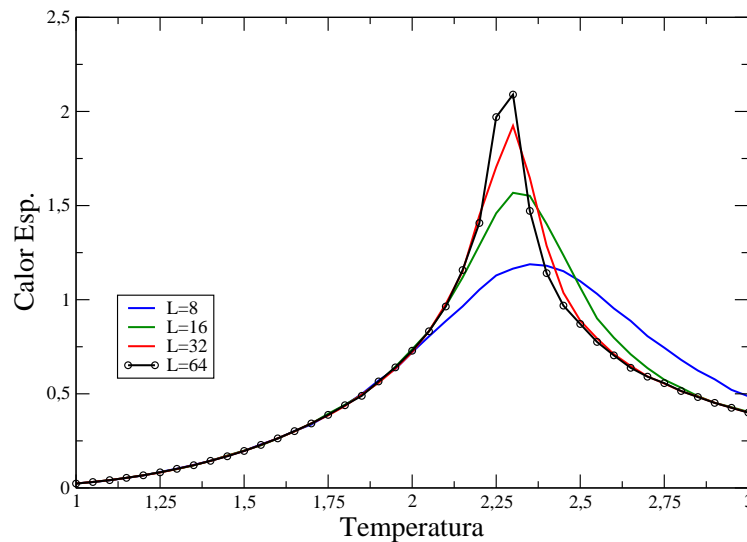


Figura 3.5: Gráfico do calor específico versus temperatura. O pico apresentado entre $k_B T/J = 2,2$ e $k_B T/J = 2,4$ é devido à aproximação da região crítica.

O gráfico do calor específico apresenta um pico na temperatura crítica, o que corresponde a transição de fase. Na figura 3.6, exibe-se a susceptibilidade magnética pela temperatura. Também pode-se verificar uma divergência por volta da temperatura crítica, como esperado.

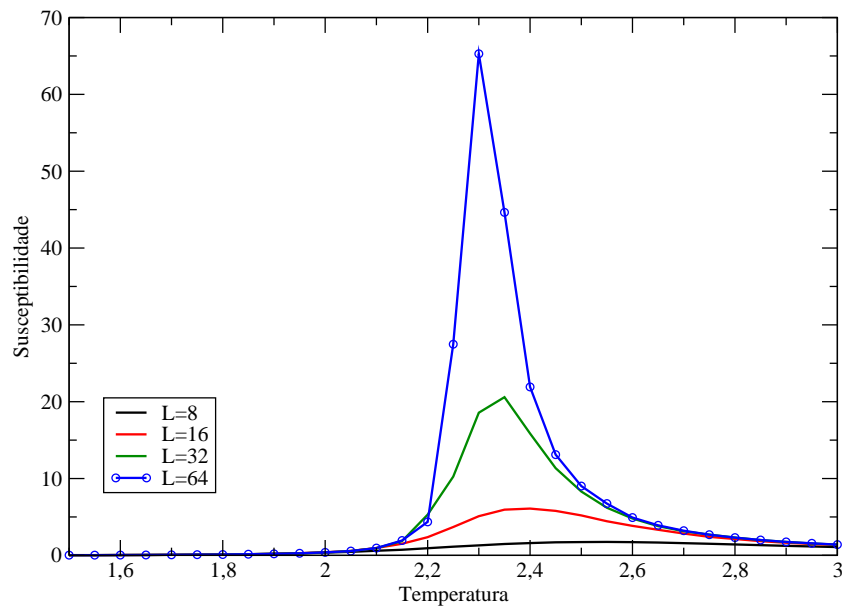


Figura 3.6: O gráfico apresenta a susceptibilidade magnética pela temperatura. O pico exibido neste gráfico ressalta a temperatura crítica.

Através do cumulante de 4ª ordem da magnetização, também pode-se verificar a temperatura crítica como demonstrado na figura 3.7.

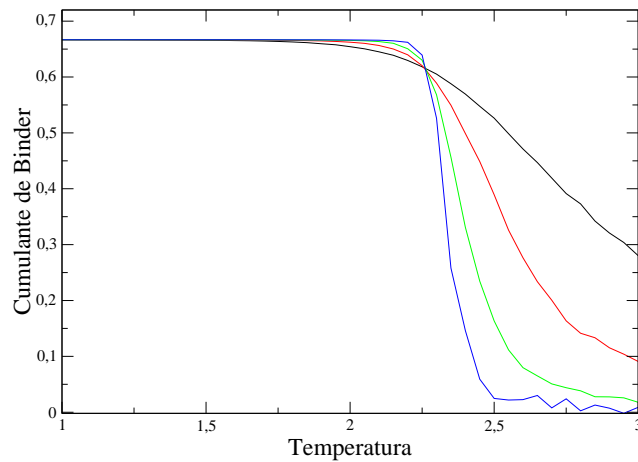


Figura 3.7: Cumulante de Binder vs temperatura

O cumulante de Binder é uma ferramenta muito importante para descrição de uma transição de fase. Ao verificar nesse gráfico o ponto de cruzamento das curvas para os vários valores de L , encontra-se a temperatura crítica[10].

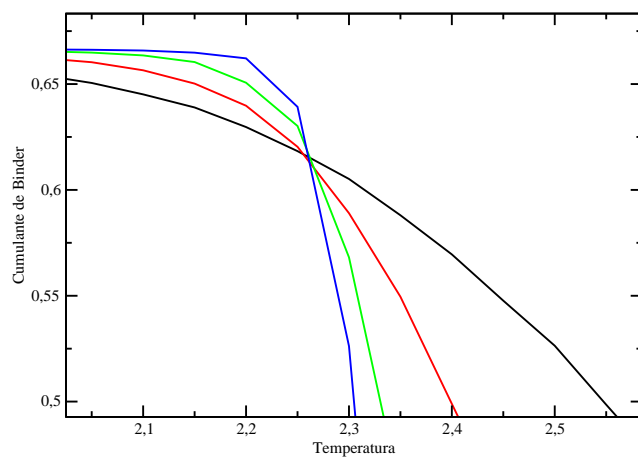


Figura 3.8: Neste gráfico, pode-se verificar mais detalhadamente o cruzamento das curvas do cumulante de Binder.

Nesse gráfico a temperatura está por entre $k_B T/J = 2,25$ e $k_B T/J = 2,30$, bem próxima da temperatura encontrada por Onsager. Na seção seguinte serão apresentadas algumas discussões sobre o modelo de Ising de spins mistos.

3.4 Modelo de Ising de Spins Mistos com Interação Aleatória de Campo Cristalino

O estudo extensivo das propriedades magnéticas de sistemas de spins mistos é devido a sua capacidade de descrever os materiais ferrimagnéticos, os quais têm grande potencial para as aplicações tecnológicas [34]. Experimentalmente, importantes avanços foram alcançados na síntese de ferrimagnetos em duas e três dimensões, tais como os organometálicos ferrimagnéticos em duas dimensões, redes bidimensionais construídas de misturas de metais [35] e outros [36, 37]. As propriedades magnéticas desses sistemas têm sido fortemente estudadas por técnicas analíticas e numéricas. Um fenômeno interessante que pode ocorrer em sistemas ferrimagnéticos é a existência de uma temperatura de compensação T_{CMP} abaixo da temperatura crítica [38]. Na temperatura de compensação, o sistema apresenta magnetização total nula, embora esteja em uma fase ordenada. A existência desta T_{CMP} é devida, sob certas condições, às magnetizações de subrede que se compensam, ou se anulam, e assim a magnetização resultante desaparece a esta temperatura. Esta propriedade é muito útil na gravação termomagnética.

Nesse trabalho utilizaremos spins mistos com valores semi-inteiros ($\pm\frac{1}{2}$) formando uma sub-rede “A” e inteiros (± 1 e 0) compondo uma sub-rede “B”. Na figura a seguir ilustra-se esse arranjo.

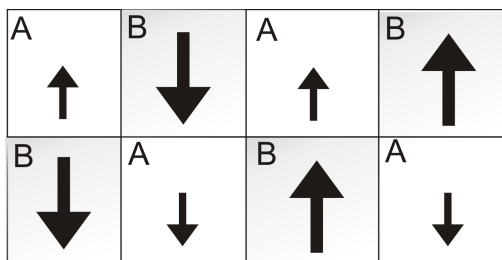


Figura 3.9: Nesta figura, apresentam-se as sub-redes. Na sub-rede “A”, os spins podem possuir valores ($\pm\frac{1}{2}$) e na sub-rede “B” valores (± 1 e 0).

A Hamiltoniana que descreve esse modelo de Ising é:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i S_j + \sum_{j \in B} D_j S_j^2 \quad (3.2)$$

com acoplamento J entre os spins $\sigma = \pm 1$ da sub-rede “A” e os spins vizinhos $S_i = 1, 0, -1$ da sub-rede “B”. O 2 termo corresponde à anisotropia de campo cristalino e a soma é feita sobre os spins inteiros da sub-rede B. Anisotropia é a característica de um material que possui propriedades físicas diferentes para variação de direções [33]. Então, nessa rede a intensidade do campo cristalino pode afetar suas propriedades. Consideramos aleatória a interação do campo caracterizada pela seguinte distribuição de probabilidade:

$$P(D_j) = p\delta(D_j - D) + (1 - p)\delta(D_j) \quad (3.3)$$

O primeiro termo $p\delta(D_j - D)$ indica a probabilidade dos spins na sub-rede B estarem sob ação da anisotropia cristalina de íon único. Da mesma forma, o segundo termo $(1 - p)\delta(D_j)$ indica uma parte $(1 - p)$ de spins que não estará sob a ação da anisotropia de intensidade D .

No caso $p = 0$, o campo cristalino não atuará em nenhum sítio da sub-rede B. E quando $p = 1$ todos os sítios dessa rede são influenciados pelo campo cristalino. Em ambas situações, sendo $D = 0$, os resultados não devem apresentar alterações. Entretanto, com o aumento de D , a temperatura crítica decresce rapidamente como veremos no próximo capítulo.

Capítulo 4

Simulações de Monte Carlo no modelo de Ising 2D de Spins Mistos com Anisotropia de Campo Cristalino aleatório

4.1 Introdução

Os resultados obtidos concordam com recentes publicações e são apresentados no decorrer desta seção. Nas simulações foram calculadas grandezas termodinâmicas com variação da probabilidade que governa a atuação do campo cristalino e de sua intensidade, assim obtivemos médias a partir de 10 amostras executando 130.000 passos de Monte Carlo descartando os primeiros 30.000 passos para considerar o tempo de relaxação. É interessante esclarecer dois conceitos que também foram verificados com os resultados obtidos e serão citados no decorrer do texto. O primeiro é o ponto tricrítico que consiste no ponto de união de uma linha de primeira ordem e uma de segunda ordem e vice-versa. E o segundo conceito trata-se do ponto de compensação que ocorre quando as magnetizações de sub-redes possuem o mesmo módulo, porém com sentidos opostos.

4.2 Resultados e Discussões

O intuito de se calcular diversas grandezas termodinâmicas é esclarecer o comportamento de uma amostra com a variação, de algum outro parâmetro termodinâmico, a fim de encontrar a transição de fases. Os resultados foram obtidos para dois casos limites: o primeiro para a probabilidade $p = 0$ que significa ausência do campo cristalino na sub-rede B e o outro $p = 1$ determinando a presença do campo em todos sítios da sub-rede B. A partir daí, deve-se verificar o

comportamento das grandezas em relação à temperatura, à probabilidade, juntamente com a variação do valor de D para se determinar a ocorrência ou não de transições de fase, bem como da existência de uma temperatura crítica.

4.2.1 Análise das Grandezas Termodinâmicas Para $P=0$

Nesta seção são apresentados os gráficos da energia, magnetização, susceptibilidade, calor específico e cumulante de Binder. Nas simulações, todas as grandezas variam com a temperatura e foram utilizados vários valores do campo D mantendo a probabilidade $p = 0$. É importante notar que para $p = 0$, não há ação do campo cristalino D . Então, as diversas grandezas não são alteradas mesmo ao modificarmos os valores de D . Apresenta-se na figura 4.1 o gráfico da energia.

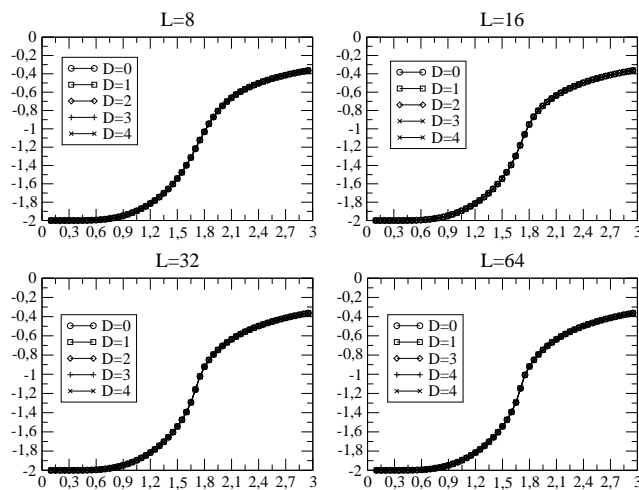


Figura 4.1: Energia em função da temperatura com $p=0$ para vários valores de D .

Os gráficos da energia mostram essas curvas negritas por serem os mesmos pontos independentemente do D escolhido. Os próximos gráficos da magnetização demonstram um aprimoramento na determinação de uma temperatura crítica em relação ao aumento do tamanho de L .

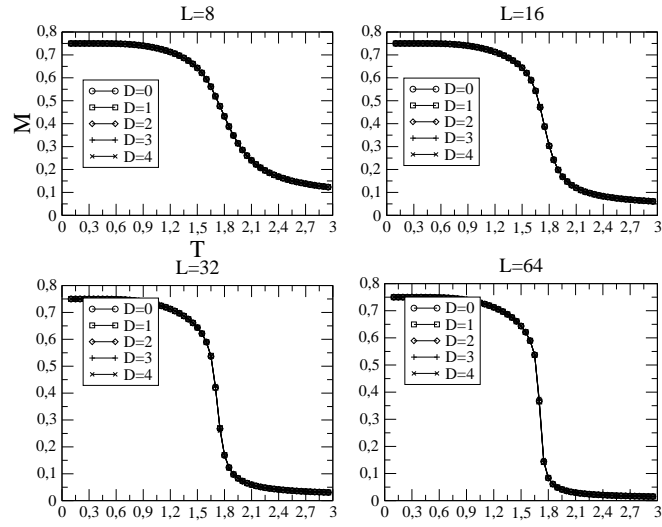


Figura 4.2: Magnetização em função da temperatura com $p=0$ para vários valores de D .

Nos gráficos da magnetização vemos a existência de uma fase paramagnética acima de $k_B T_c / J = 1,8$. No próximo gráfico, pode-se perceber que existe um estreitamento da curva dos valores da susceptibilidade explicitando o pico. A temperatura em que isso ocorre fornece uma estimativa de T_c .

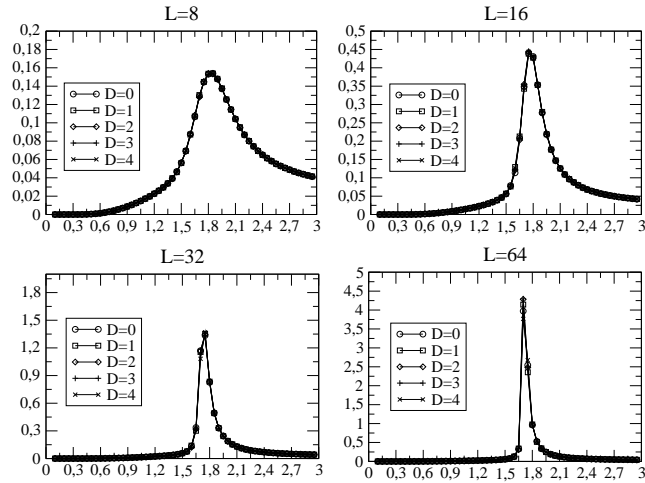


Figura 4.3: Susceptibilidade em dependência da temperatura com $p=0$ para vários valores de D .

A temperatura crítica encontrada a partir da susceptibilidade foi $k_B T_c / J \approx 1,70 \pm 0,04$ para redes de $L = 32$ e $L = 64$. A curva do calor específico exibe um

afinamento, o que também denota a temperatura crítica do sistema. Na figura 4.4, a variação de D não modifica o comportamento da grandeza.

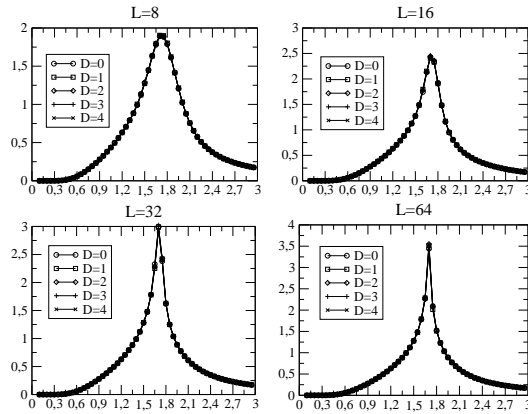


Figura 4.4: Gráfico do calor específico em relação a temperatura com $p=0$ para vários valores de D .

Através do gráfico do calor específico encontrou-se $k_B T_c / J \approx 1,70 \pm 0,04$. Na figura 4.5, o campo cristalino não altera os valores do cumulante e os gráficos para mesmo tamanho de rede ficam idênticos.

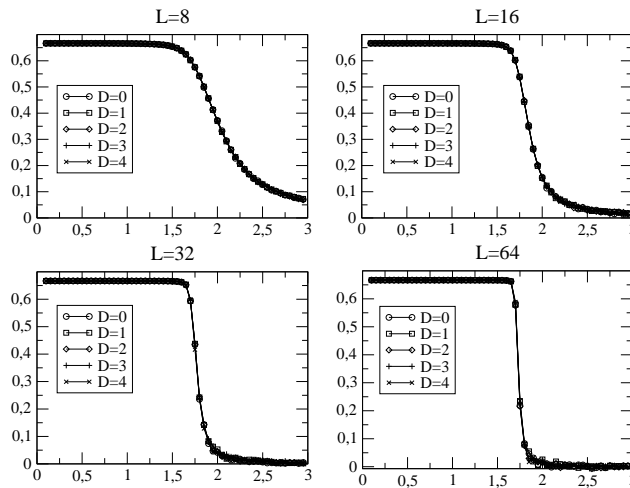


Figura 4.5: Cumulante de Binder em função da temperatura com $p=0$ para valores de $D=0,1,2,3$ e 4.

A intersecção das curvas do cumulante de Binder para diferentes tamanhos de rede confirma a existência de uma temperatura crítica. Na figura 4.6, amplia-se o cruzamento das curvas facilitando a identificação do valor da temperatura crítica. A simulação foi feita com a variação da temperatura de 0,05 justificando a distância entre os pontos e assim conseguiu-se determinar T_c .

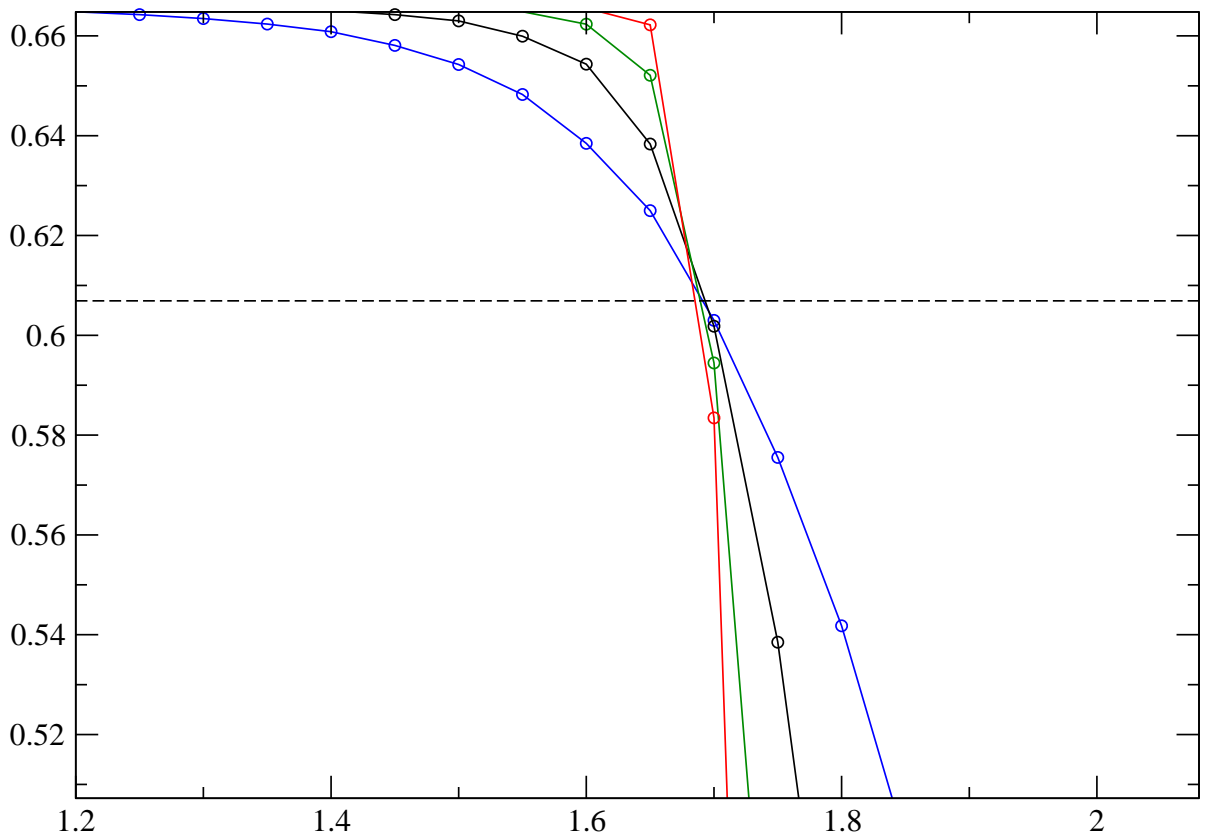


Figura 4.6: Cumulante de Binder em função da temperatura com o valor do campo cristalino $D = 0$. A temperatura crítica do cruzamento das curvas foi $T_c \approx 1,70 \pm 0,04$.

O gráfico da figura 4.6 possui uma linha tracejada que corresponde ao ponto de intersecção do cumulante bastante preciso para sistemas de tamanho pequeno, é importante notar que onde ocorre o cruzamento das curvas está bem próximo desse valor. Esse valor é conhecido como cumulante de Binder crítico sendo $U^* = 0.6069\dots$ e através dele chega-se a temperatura crítica $T_c \approx 1,70 \pm 0,04$. Na próxima figura, tem-se o gráfico da magnetização variando com a temperatura.

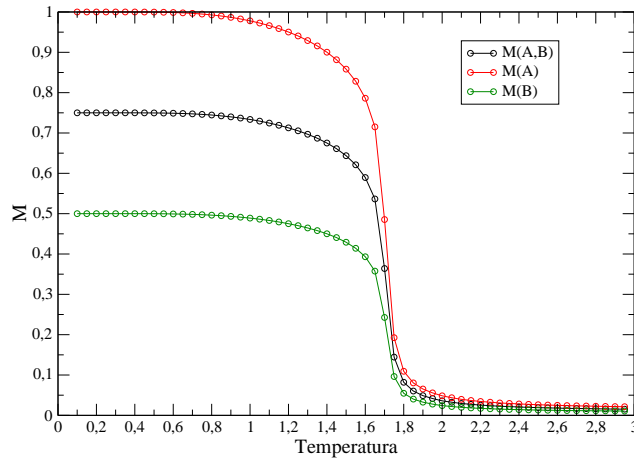


Figura 4.7: A magnetização versus a temperatura com $D = 0$ em uma rede de $L = 64$.

Na figura 4.7, observa-se que as magnetizações de sub-rede ficam separadas pela magnetização total não havendo nenhum ponto em que a magnetização da sub-rede B fosse o mesmo da sub-rede A. Logo, pode-se afirmar que tanto para $p = 0$ quanto $p = 1$ com $D = 0$ o modelo em questão não exibe nenhum ponto de compensação.

4.2.2 Análise das Grandezas Termodinâmicas Para $P=1$

As simulações foram realizadas com tamanhos de rede L entre 8 e 64 e a temperatura variou com intervalos de 0,05. Deve-se ressaltar que a probabilidade $p = 1$ altera o comportamento das grandezas termodinâmicas, como será visto nos próximos gráficos. Nessa seção, o campo cristalino D está presente em todos os sítios da sub-rede B e o aumento da intensidade desse campo leva a uma diminuição de T_c . Isso é devido a ação do campo na sub-rede B que favorece o estado $S = 0$ e diminui a magnetização mais rapidamente (se compararmos com o caso $p = 0$). Porém, pode-se perceber na figura 4.7 que $p = 1$ e o campo $D = 0$, o sistema se comporta da mesma forma do caso anterior porque permanece sem ação do campo.

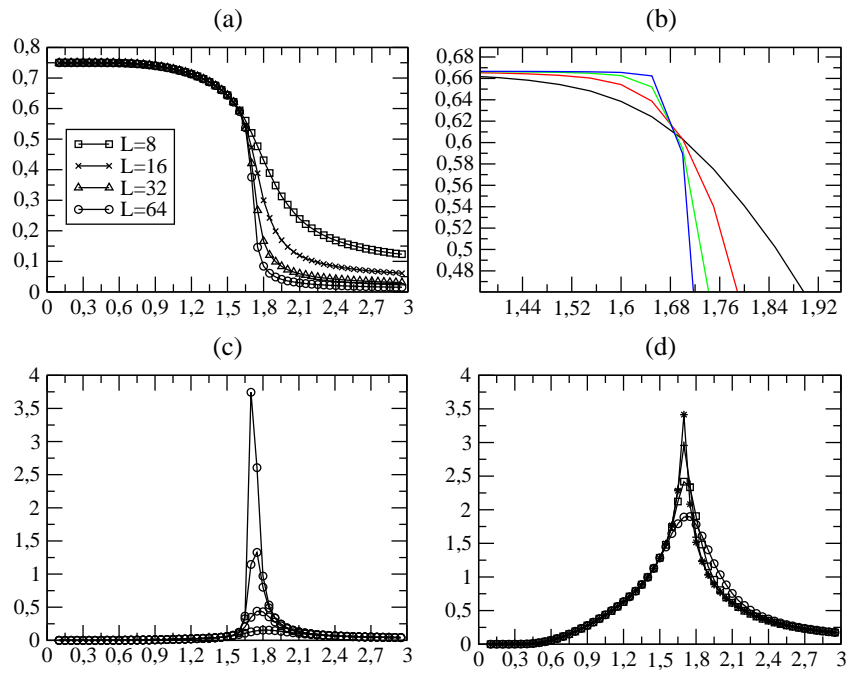


Figura 4.8: (a) Magnetização (b) Cumulante de Binder (c) Susceptibilidade (d) Calor Específico todos variando com a temperatura e sempre com $D = 0$.

Através dos gráficos do cumulante, da susceptibilidade e do calor específico da figura 4.7 pode-se encontrar uma temperatura crítica $k_B T_c / J \approx 1,70 \pm 0,04$. Essa temperatura concorda com o esperado, tendo em vista que ambos os casos $p = 1$ e $p = 0$ não estão sob ação do campo. Assim, confirma-se que a temperatura crítica $\approx 1,70 \pm 0,04$ é a mesma para os dois casos. Nos próximos gráficos, o valor de D é incrementado para análise dos resultados desse efeito.

Na figura 4.8, apresenta-se a magnetização para vários valores de D .

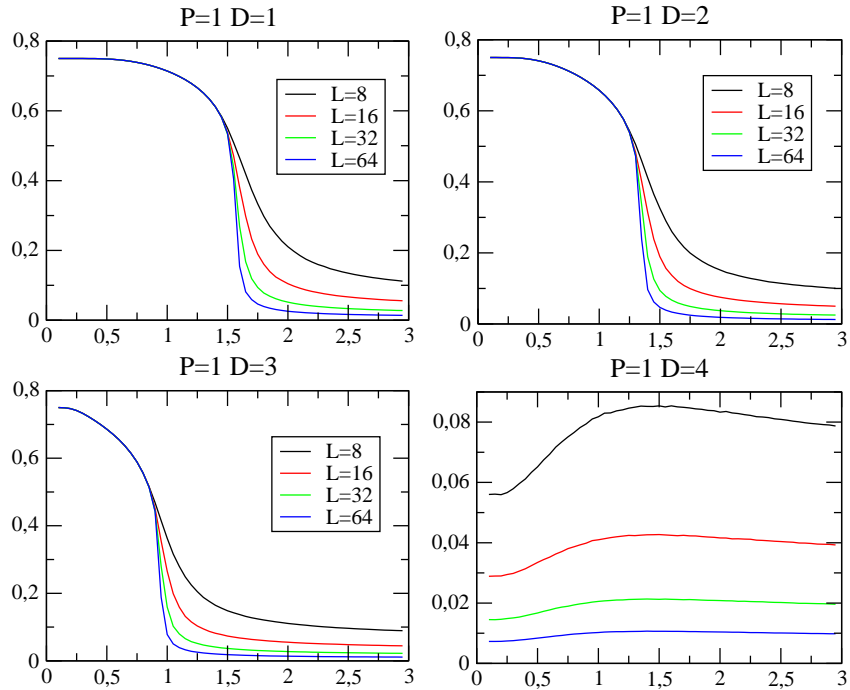


Figura 4.9: Magnetização versus a temperatura para $D/J = 1, 2, 3, 4$.

O gráfico da magnetização confirma o valor crítico para $D/J = 4$, como esperado e previsto em [40]. Com esse valor para o campo cristalino, a magnetização varia muito pouco com a temperatura não apresentando mais transição de fase de segunda ordem que exibia para $D < 4$.

Na figura 4.10, pode-se perceber que com $D/J = 4$ e a temperatura próxima de zero, não aparecem mais picos e a susceptibilidade diverge para $+\infty$, além de que a temperatura crítica encontrada a partir dos picos da susceptibilidade magnética diminui com o aumento do campo. Já na figura 4.11, tem-se o gráfico do calor específico e na figura 4.12 o cumulante de 4ª ordem.

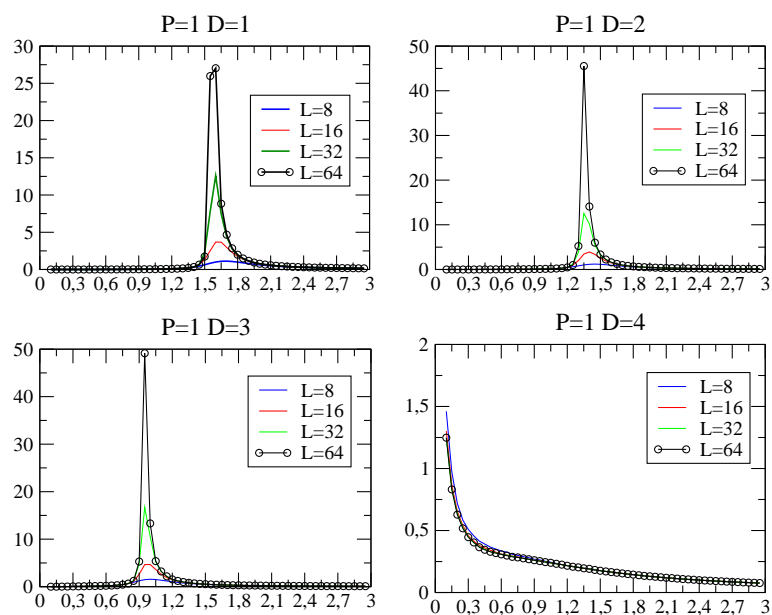


Figura 4.10: Susceptibilidade magnética versus a temperatura para $D/J=1,2,3,4$.

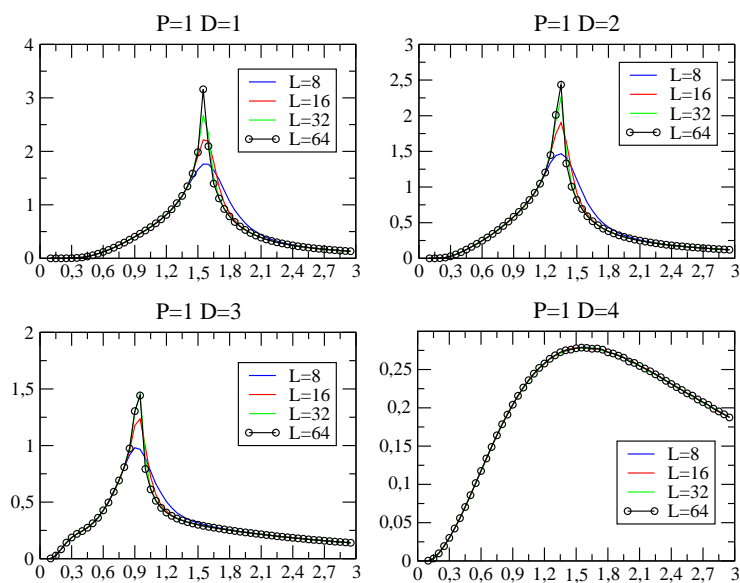


Figura 4.11: Gráficos do calor específico variando com a temperatura com $D/J=1,2,3,4$.

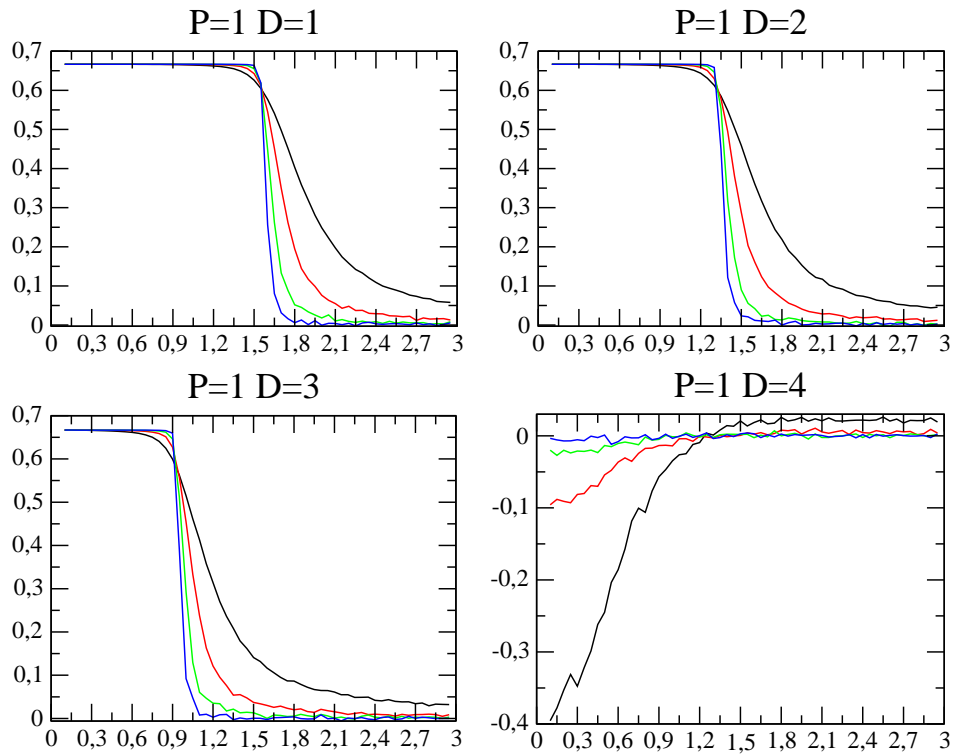


Figura 4.12: Gráfico do cumulante de Binder versus a temperatura para $D/J = 1, 2, 3, 4$.

Como pode-se ver anteriormente todos os gráficos apontaram para um D/J crítico em $D/J = 4$. No gráfico, o cumulante flutua próximo de zero e assume alguns valores negativos. Foram encontradas nesse gráfico as temperaturas críticas para redes de $L = 8, 16, 32, 64$ para $D = 1, 2, 3$ conforme a tabela a seguir.

	D=1	D=2	D=3
L	T_c	T_c	T_c
8	$1,60 \pm 0,23$	$1,37 \pm 0,19$	$0,93 \pm 0,14$
16	$1,58 \pm 0,19$	$1,35 \pm 0,15$	$0,95 \pm 0,12$
32	$1,56 \pm 0,13$	$1,33 \pm 0,08$	$0,93 \pm 0,06$
64	$1,56 \pm 0,13$	$1,33 \pm 0,08$	$0,93 \pm 0,06$

Tabela 4.1: Temperaturas críticas para cada rede com variação do campo cristalino.

A partir das temperaturas críticas obtidas pelo cumulante elaborou-se o diagrama de fases a seguir.

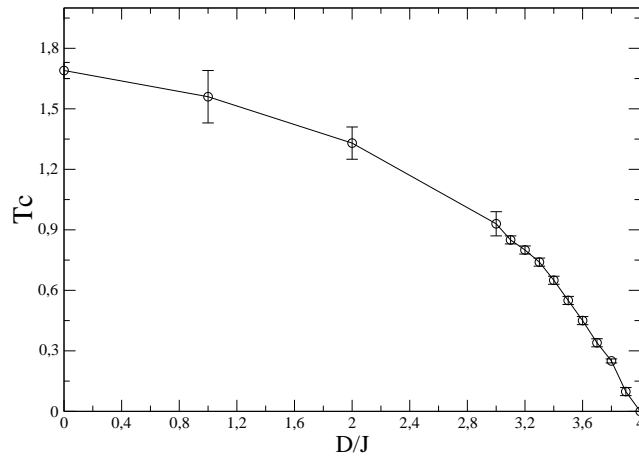


Figura 4.13: Diagrama de fase de $k_B T_c / J$ por D/J .

Por esse diagrama de fase, pode-se determinar o efeito do campo crista-lino no modelo de Ising de spins mistos para $D/J = 4$ não há o ordenamento magnético. Os spins da sub-rede B ficam no estado 0, enquanto os da sub-rede A ficam aleatórios. A figura 4.15 mostra a magnetização como função de T para vários valores do campo D, entre 3,0 e 4,0.

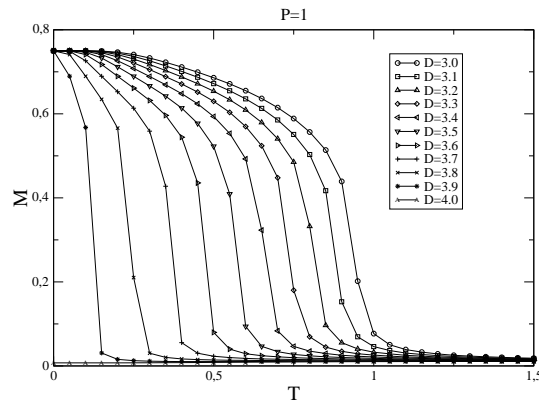


Figura 4.14: Gráfico da magnetização pela temperatura pra valores D entre 3 e 4.

Na figura 4.15, tem-se o gráfico do cumulante de Binder para vários valores de D e nas figuras 4.16 e 4.17, apresenta-se os gráficos da susceptibilidade magnética e do calor específico.

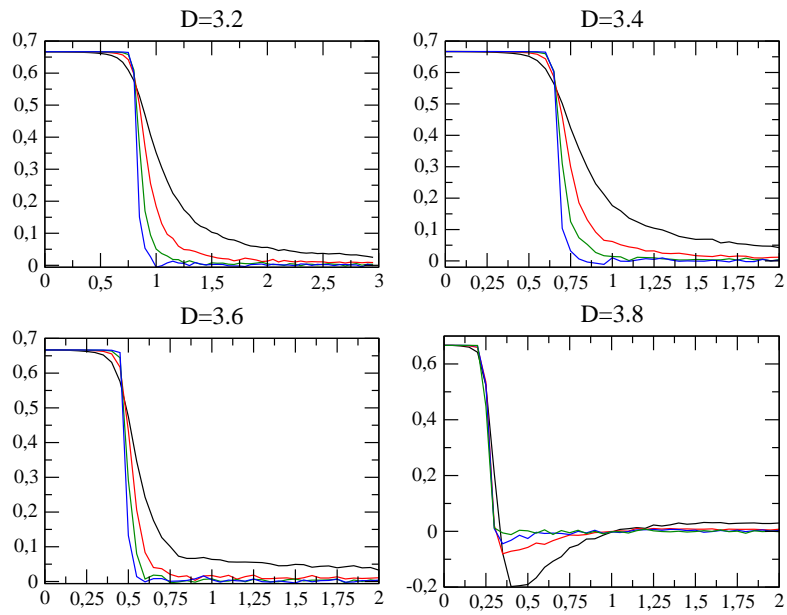


Figura 4.15: Gráfico do cumulante de Binder para $D=3,2, 3,4, 3,6$ e $3,8$ em relação a temperatura.

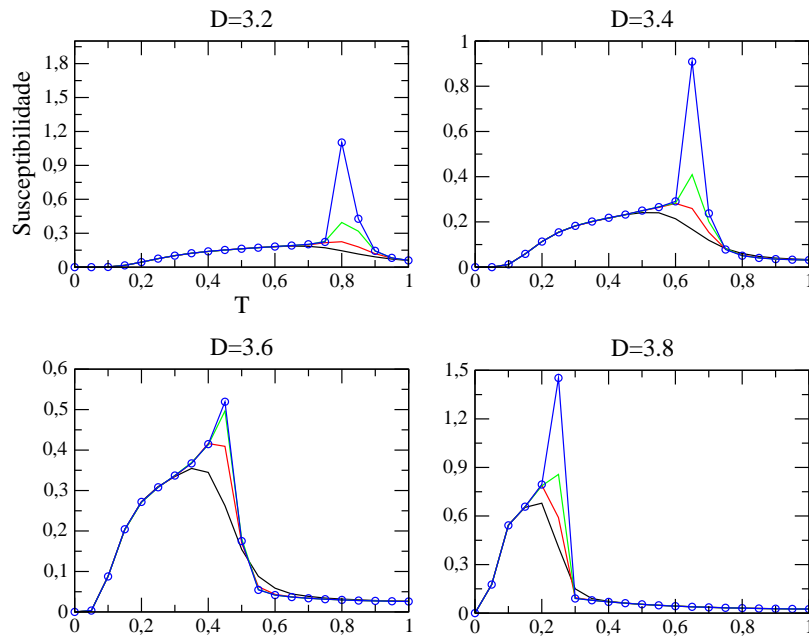


Figura 4.16: Gráfico da susceptibilidade magnética versus a temperatura para $D=3,2, 3,4, 3,6$ e $3,8$.

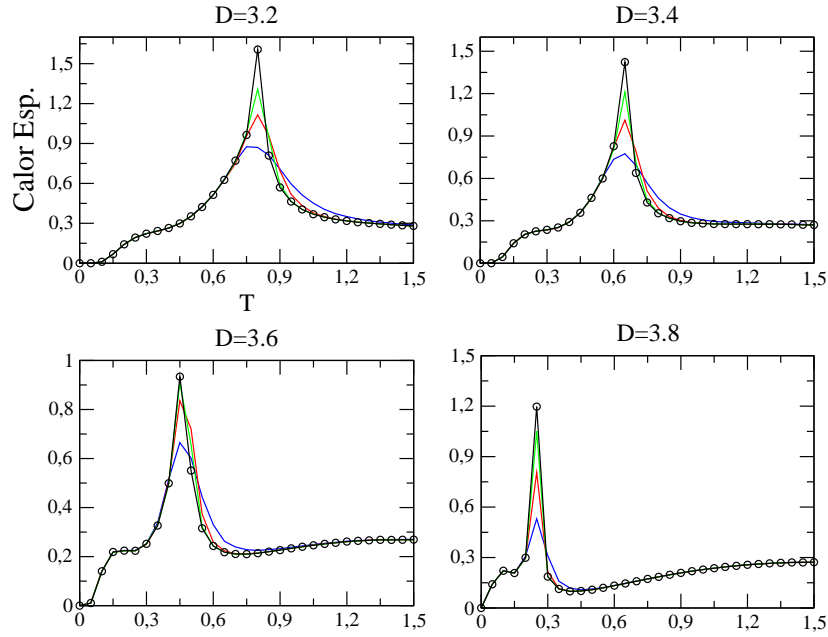


Figura 4.17: Gráfico do calor específico para $D=3,2, 3,4, 3,6$ e $3,8$ em relação a temperatura.

Os resultados para T_c obtidos a partir dos gráficos anteriores são resumidos na tabela 4.2.

D/J	3,2	3,4	3,6	3,8
L	T_c	T_c	T_c	T_c
8	$0,75 \pm 0,13$	$0,65 \pm 0,1$	$0,45 \pm 0,07$	$0,25 \pm 0,04$
16	$0,80 \pm 0,02$	$0,65 \pm 0,06$	$0,45 \pm 0,05$	$0,25 \pm 0,04$
32	$0,80 \pm 0,02$	$0,65 \pm 0,02$	$0,45 \pm 0,02$	$0,25 \pm 0,01$
64	$0,80 \pm 0,02$	$0,65 \pm 0,02$	$0,45 \pm 0,02$	$0,25 \pm 0,01$

Tabela 4.2: Tabela com as temperaturas críticas encontradas em relação ao campo cristalino.

Nos gráficos anteriores do calor específico, com $D = 3,2$ percebe-se o aparecimento de um ombro adicional para uma temperatura $T < T_c$ que fica mais evidente no gráfico de $D = 3,8$ quando torna-se uma máxima local, porém não crítico. Esse comportamento se revela com aumento de D na faixa $3,2 \leq D < 4$ e pode ser reflexo da tentativa do ordenamento dos spins ± 1 da sub-rede B pela baixa temperatura. Entretanto o campo cristalino favorece o estado $S = 0$ conduzindo esses spins para o estado zero, como já dito anteriormente.

A figura 4.18 possui gráficos de m , u^4 , χ , c em relação a temperatura que podem ser vistos a seguir.

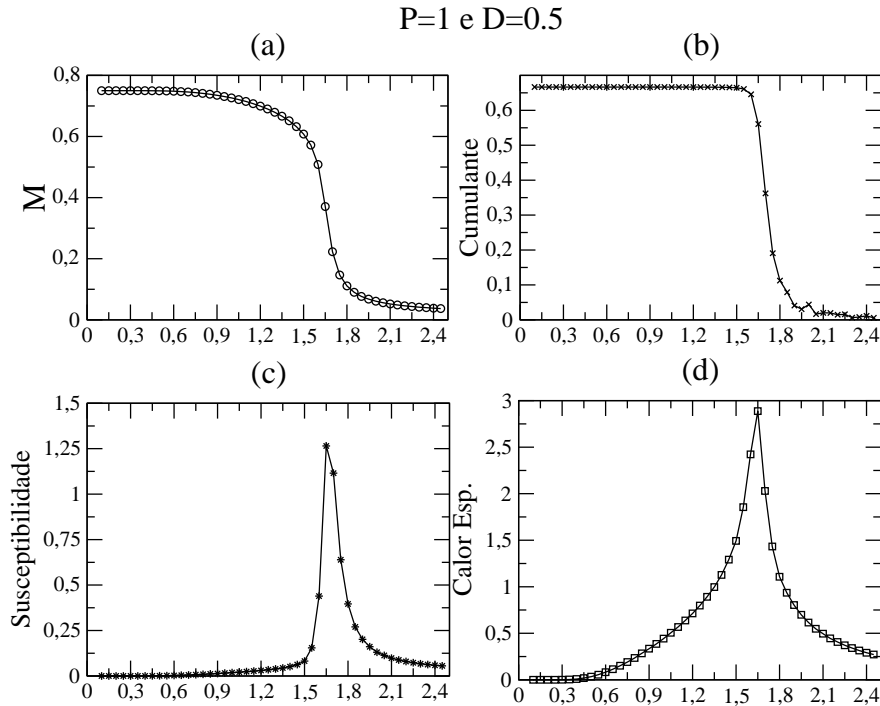


Figura 4.18: Gráficos da magnetização, cumulante de quarta ordem, susceptibilidade magnética e calor específico variando com a temperatura para rede de $L = 32$.

Os gráficos anteriores apontaram para uma $T_c \approx 1,65 \pm 0,05$, ligeiramente difere da ref. [32] que encontrou 1,5299.

Utilizando-se a teoria de escala de tamanho finito, plotou-se um gráfico que está a seguir para $D = 2$ de $\ln(\chi_{max})$ versus $\ln(L)$ para verificar o comportamento dessas grandezas. Esse gráfico confirma como previsto exatamente para a classe de universalidade do modelo de Ising em duas dimensões a $\chi \sim L^{\frac{7}{4}}$. O valor encontrado para esse expoente crítico foi $\frac{\gamma}{\nu} \approx 1,75 \pm 0,002$ que é satisfatório, pois está de acordo com a solução exata. Assim, pode-se afirmar que esse modelo de spins mistos não apresenta uma transição de primeira ordem em $D = 1,9$ como dito em [32].

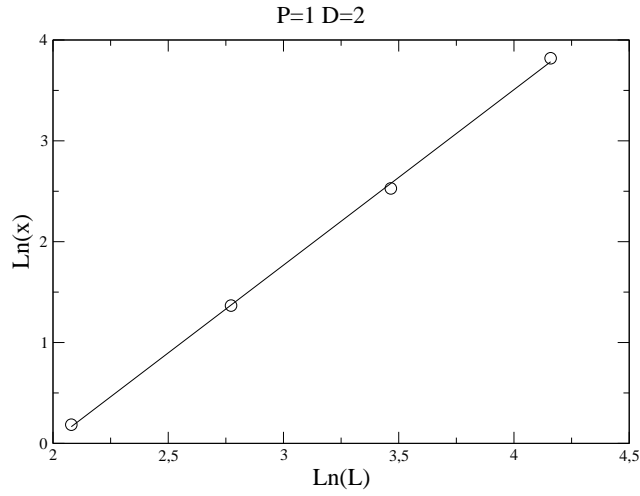


Figura 4.19: Gráfico do $\text{Ln}(\chi_{max})$ por $\text{Ln}(L)$ sendo χ_{max} , a susceptibilidade máxima num determinado T_c . A linha representa o crescimento linear de χ conforme o esperado.

A figura 4.20 mostra a magnetização em função da temperatura com campo $D/J = 3,6$ para vários tamanhos de rede. Observa-se que nesses gráficos não aparece nenhum ponto de compensação, uma vez que as magnetizações de sub-rede não apresentam o mesmo módulo e sentidos opostos. Assim, nosso trabalho concorda com [40] e contraria [41] que anteriormente afirmara que a magnetização total nesse ponto deveria se anular ou em nosso caso possuir o mesmo valor.

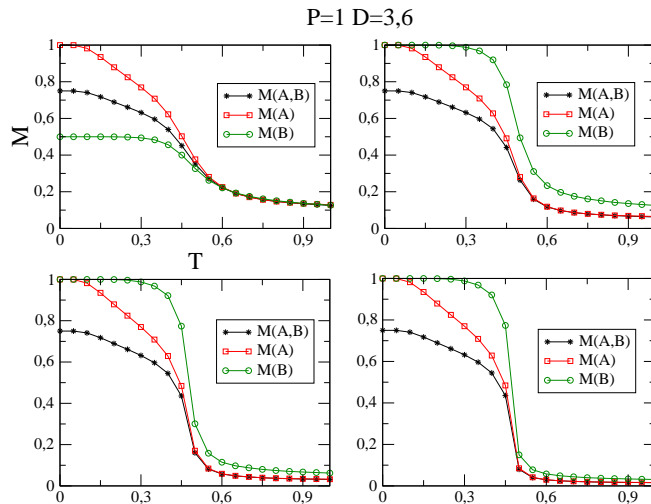


Figura 4.20: Magnetização Total e das sub-rede A e B para redes de $L=8,16,32,64$.

4.2.3 Análise das Grandezas Termodinâmicas Para $P=0,90$ e $P=0,96$

As simulações para essas probabilidades foram realizadas com os mesmos tamanhos de rede e intervalos de pontos de temperatura das anteriores. Deve-se ressaltar que as probabilidades $p = 0,96$ e $p = 0,90$ demonstraram comportamento semelhante ao da probabilidade $p = 1$, ou seja, transições de fases de 2º ordem e um campo cristalino crítico $D = 4$. Neste ponto, deixam de ocorrer transições de fases como será visto nos próximos gráficos. Nessa seção, a presença do campo cristalino D nos sítios da sub-rede B depende da probabilidade, porém para os valores de probabilidade estudados foram obtidos resultados que concordam com o caso anterior e refutam afirmações feitas em [32]. Abaixo, inicia-se a apresentação dos gráficos das grandezas para $p = 0,96$ e $D = 2$.

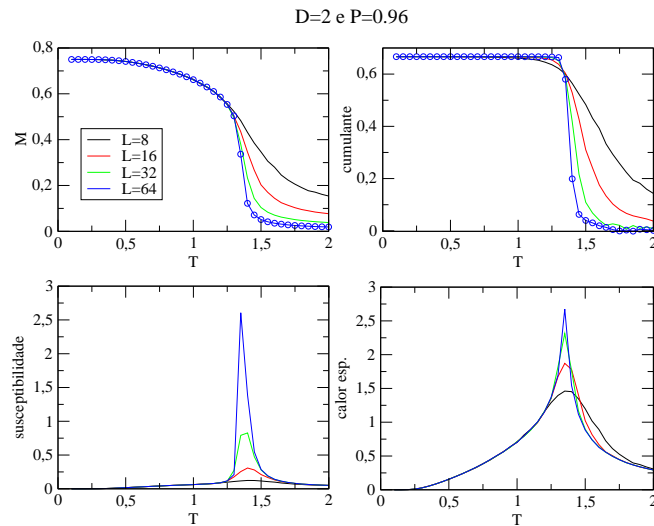


Figura 4.21: A magnetização, o cumulante de 4ª ordem, a susceptibilidade magnética e o calor específico levaram a encontrar uma temperatura crítica $T_c \simeq 1,37 \pm 0,03$.

Os dois próximos gráficos apresentam as quantidades termodinâmicas M , u^4 , χ e c . Respectivamente para $D = 3$ e $D = 4$. Lembrando que para $D = 4$, tem-se um D crítico, valor onde deixa de ocorrer transição de fases.

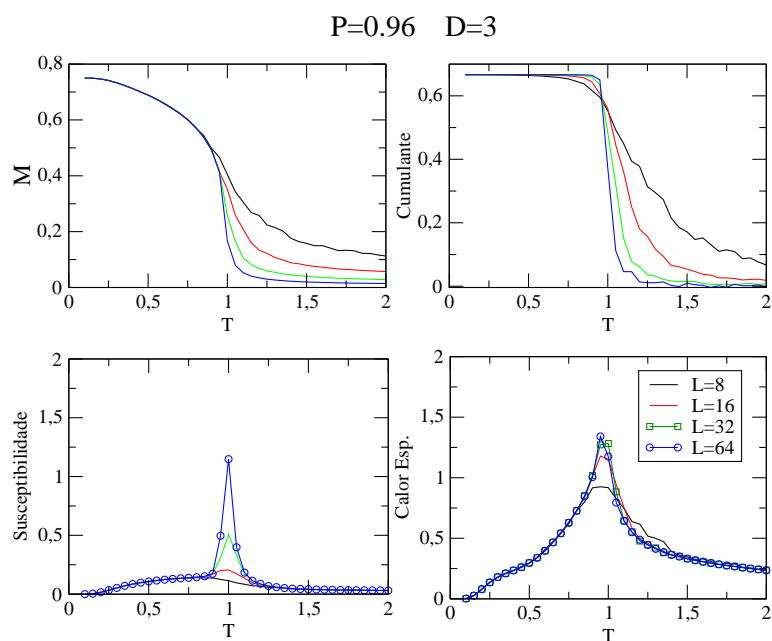


Figura 4.22: As grandezas termodinâmicas apontaram para uma temperatura crítica $T_c \simeq 0,956 \pm 0,05$

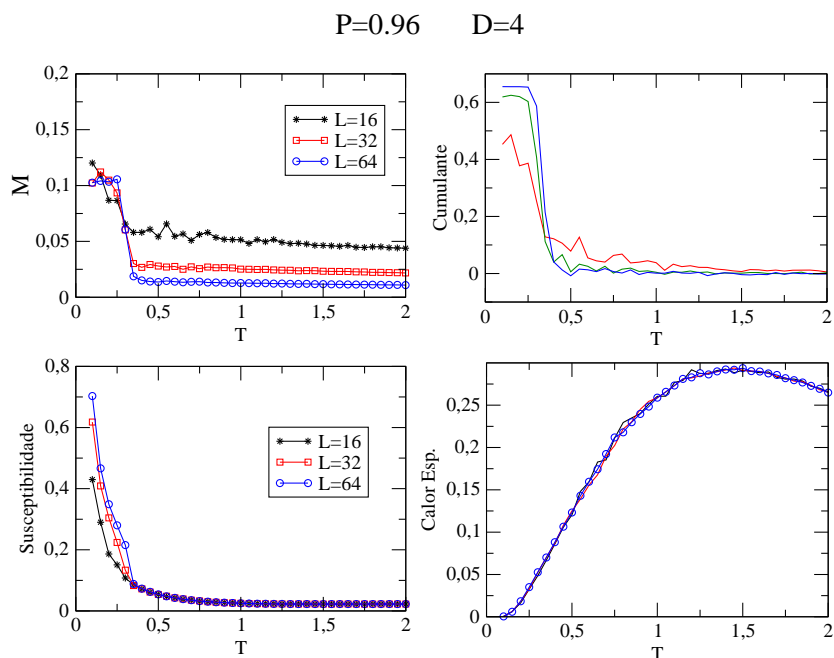


Figura 4.23: A pequena variação da magnetização, a ausência dos picos da susceptibilidade magnética e do calor específico demonstraram a ausência de uma temperatura crítica para $D = 4$.

Após a análise dos resultados, sustenta-se que não ocorreu em nenhum momento uma transição de fase de primeira ordem como afirmou-se em [32] com essa probabilidade. Para $p = 0,90$ com $D=1, 2, 3$ e 4 as quantidades são apresentadas a seguir.

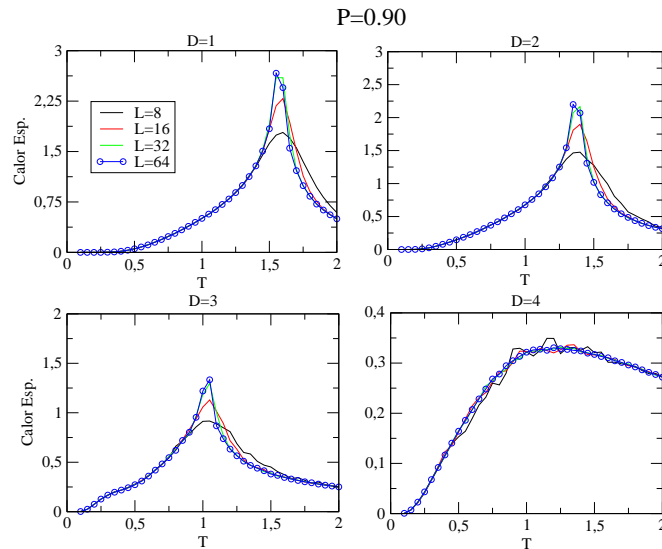


Figura 4.24: O calor específico variando com a temperatura para $D = 1, 2, 3, 4$. Nota-se o arredondamento da curva no gráfico de $D = 4$, mas o que não caracterizou mudança na transição de fase e sim a ausência de uma.

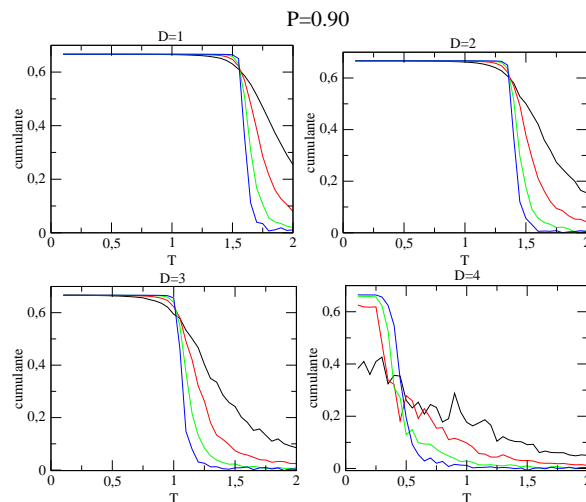


Figura 4.25: O cumulante de 4ª ordem para $D = 1, 2, 3$ e 4 . Para $D = 4$, essa quantidade deixa de apresentar a intersecção das curvas, característica utilizada pra encontrar temperaturas críticas.

A susceptibilidade magnética para $D = 1, 2, 3$ e 4 com $p = 0, 90$.

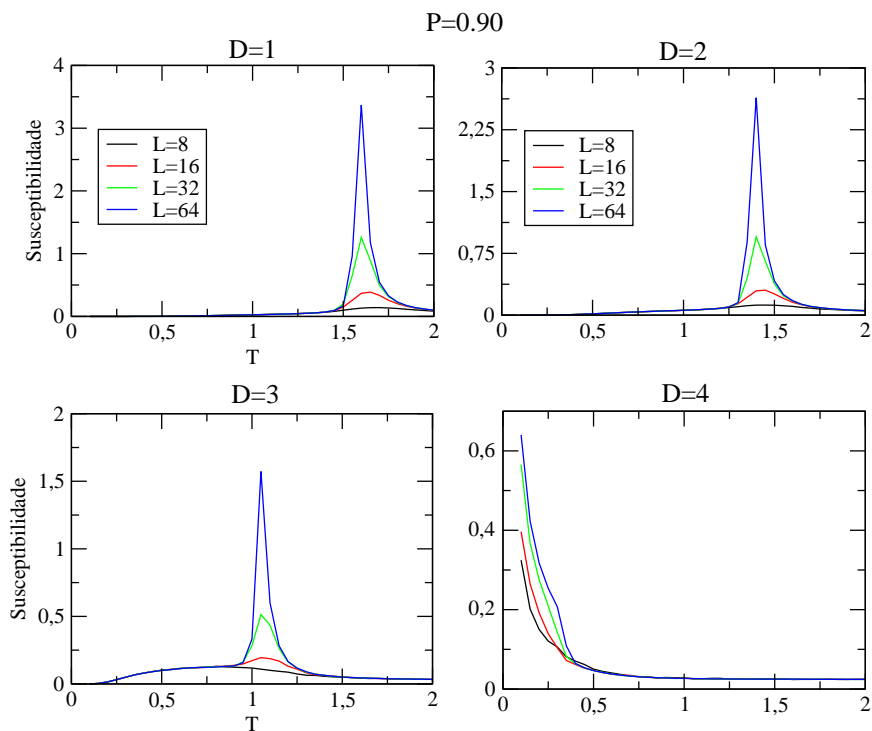


Figura 4.26: A χ não possui pico em $D = 4$, o que também confirma a ausência de transição de fases para esse valor do campo cristalino.

Por fim, foram feitas análises utilizando finite-size scaling (FSS) para ambos os casos. A fim de se obter a comprovação final da existência ou não de um transição de fases de primeira ordem. A seguir é exibido para $p = 0, 96$.

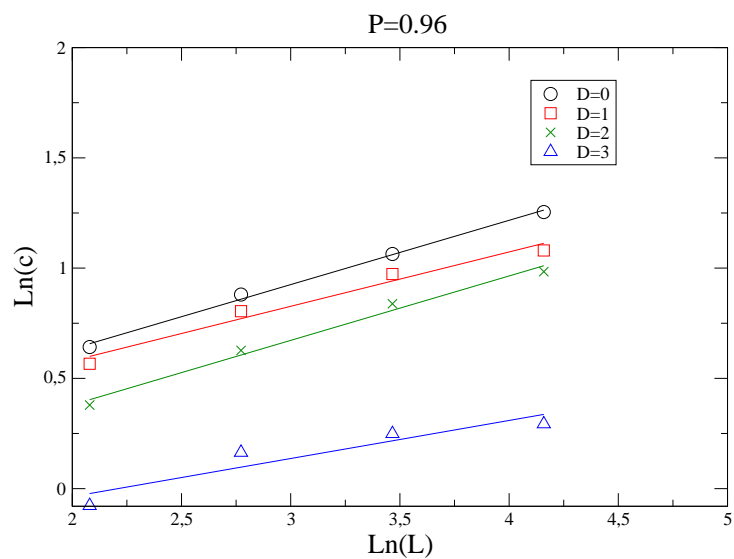


Figura 4.27: Através do método FSS, encontrou-se o expoente crítico do calor específico. De modo que $c L^{\frac{\alpha}{\gamma}}$ sendo $\frac{\alpha}{\gamma} \simeq 0,17 \pm 0,02$ muito próximo do expoente exato encontrado para o modelo de Ising de duas dimensões.

Também foi realizada análise pelo método de finite-size scaling para $p = 0,90$ com diversos valores de D para o calor específico.

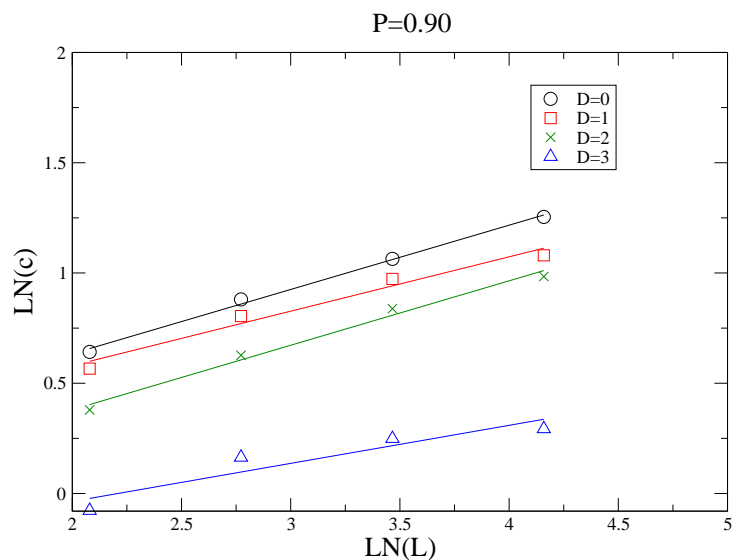


Figura 4.28: Gráfico do método de FSS para o calor específico com $p = 0,90$.

Os gráficos anteriores comprovaram através da *scaling* do calor específico que não ocorrem transições de fases de primeira ordem com esses valores de probabilidade, $p = 0,96$ e $p = 0,90$ respectivamente. Então, esse trabalho estende a afirmativa de [40] para um intervalo do campo cristalino $4 \leq D \leq 0$ para o caso $p = 1$ e também na região de probabilidades $1 \leq p \leq 0,90$ com o mesmo intervalo de campo.

Capítulo 5

Conclusão

Neste trabalho realizaram-se simulações de Monte Carlo no modelo de Ising em duas dimensões com spins $\pm\frac{1}{2}$ e encontrados resultados de acordo com a literatura. Também foram feitas simulações para o caso de spins mistos com interação de campo cristalino aleatório. Foram calculadas médias da energia, magnetização, susceptibilidade magnética, calor específico e cumulante de 4º ordem. A partir dos resultados das simulações, diversos gráficos das variáveis de interesse foram elaborados. Com isso, obtivemos um diagrama de fase com uma linha de temperaturas críticas em relação a variação do campo cristalino.

Vimos que o valor do campo $D/J = 4$ suprime o ordenamento magnético imposto pelas baixas temperaturas levando a magnetização do sistema a zero como o esperado. Esse fato acontece porque o campo $D > 0$ favorece o estado $S = 0$ da sub-rede B que contribui para redução rápida da magnetização dessa sub-rede. A magnetização de toda rede é influenciada porque os spins da sub-rede A interagem com os spins $S = 0$ da sub-rede B o que reduz a energia de interação entre os spins de sub-redes diferentes e a magnetização total do sistema. A susceptibilidade magnética também demonstrou claramente que o aumento na magnitude da anisotropia de campo cristalino diminui a temperatura crítica. Outro comportamento peculiar foi o arredondamento da curva do calor específico para $D/J = 4$, porém isso não implicou na existência de uma transição de primeira ordem porque com esse valor para o campo a magnetização e as outras grandezas variam muito pouco com a temperatura deixando de ocorrer qualquer transição. E

outros pontos importantes foram:

- Para baixas temperaturas e campo cristalino muito grande o sistema não apresentará nenhuma fase ordenada, ferri- ou ferromagnética.
- Como dito anteriormente, em [32] foram encontradas para os campos $D = 0$ e $D = 0,5$ as temperaturas $1,6322$ e $1,5299$. Em nosso trabalho encontramos $1,70 \pm 0,04$ e $1,65 \pm 0,05$.
- Também não foi identificado nenhuma linha de pontos de compensação, para $p = 1$ antes encontrado por tratamento de campo médio na região de $4 < D/J \leq 3,58$ [41].
- E fica refutada a existência de transições de primeira ordem e ponto tricrítico para a região de probabilidades $1 \leq p \leq 0,90$ como afirmado em [32].
- Portanto, este trabalho concorda com [40] e estende o estudo sobre o modelo de spins mistos afirmando que em todos os casos estudados não foram encontradas transições de fases de primeira ordem.

Perspectivas

Para os futuros trabalhos propõem-se a utilização do mesmo modelo agora sob ação de um campo externo aleatório, a fim de se verificar a existência de transições de fase de primeira ordem, pontos de compensação e pontos tricríticos. Também no modelo de spins mistos pode-se usar um termo de troca J específico para sítios de sub-redes iguais ou diferentes e analisar a influência nas variáveis de interesse. Outra prosposta seria encontrar resultados experimentais que correspondam ao modelo estudado e compará-los com os obtidos através das simulações. E por fim, há possibilidade de se introduzir mais um tipo de spin semi-inteiro, por exemplo, $S = \pm \frac{3}{2}; \pm \frac{1}{2}$.

Apêndice A

```
// Programa do Modelo de Ising 2D com campo externo nulo
// Declaração das Bibliotecas
#include <stdio.h>
#include <time.h>
#include <stdlib.h>
#include <math.h>
#include "MersenneTwister.h" // Biblioteca para geração de números aleatórios
//Definido Constantes
#define k 1.0
#define L 8
#define MCS 130000 // Número de Passos de Monte Carlo
#define relax 30000
MTRand mtrand1;
float geradorNumeroAleatorio(void);

int main (){
// Declaração dos vetores primeiros vizinhos
int S[L][L], dw[L], up[L], lf[L], rt[L];
// Declaração das variáveis
int energia, mag, soma, deltaE, deltaM; int i, j, imcs;
double x, prob, mediaen, mediaen2, mediam, mediam2, mediam4, cesp, chi, u4;
double T, en, en2, m, m2, m4, invL2, invMCS, numeroSorteado;

FILE *arq; // Ponteiro para gravação do arquivo com os resultados
invL2 = 1.0/(L*L);
invMCS = 1.0/MCS;
```

```

// Monta a primeira configuracao
for (i = 0; i < L; i++) {
for (j=0; j < L; j++) {
numeroSorteado = geradorNumeroAleatorio();
if(numeroSorteado >= 0.5){
S[i][j]=1; }
else{ S[i][j]=1; }
printf("%d ",S[i][j]); }
printf("\n"); }
//definindo os primeiros vizinhos
for (i = 0; i < L; ++i) {
if (i==0) up[i] = L-1;
else up[i] = i-1;
if (i==L-1) dw[i] = 0;
else dw[i] = i+1; }
for (j=0; j < L; ++j) {
if (j==0) lf[j] = L-1;
else lf[j] = j-1;
if (j==L-1) rt[j] = 0;
else rt[j] = j+1; }

// Calcula-se a magnetização e a energia da configuração inicial
mag = 0; energia = 0;
for (i = 0; i < L; i++)
for (j = 0; j < L; j++) {
energia = energia - S[i][j]*( S[up[i]][j] + S[i][lf[j]] );
mag = mag + S[i][j]; }
// Começa a variação da temperatura
for (T=0.05; T<=3.0; T = T + 0.05) {
mediaen=0.0;
mediaen2=0.0;
mediam=0.0;
mediam2=0.0;
mediam4=0.0;
// Alguns passos de Monte Carlo são despresados para efeito de termalização

```

```

for (imcs=0; imcs<relax; ++imcs){
for (i = 0; i < L; ++i) {
for (j = 0; j < L; ++j) {
soma = S[i][j]*( S[up[i]][j] + S[dw[i]][j] + S[i][lf[j]] + S[i][rt[j]] );
deltaE = 2*soma; deltaM = -2*S[i][j];

//Anteriormente, define-se imcs como número de passos de Monte Carlo
for (imcs=0; imcs<relax; ++imcs){
//Alguns passos iniciais são desprezados, relax representa o tempo de relaxação
//Laços para formar uma rede quadrada
for (i = 0; i < L; ++i){ for (j = 0; j < L; ++j){
// Aqui, calcula-se a interação com os spins dos sítios primeiros vizinhos
soma = S[i][j]*( S[up[i]][j] + S[dw[i]][j] + S[i][lf[j]] + S[i][rt[j]] );
//Assim, calcula-se a variação de energia entre as configurações
deltaE = 2*soma;
//E a variação da magnetização
deltaM = -2*S[i][j];
// Algoritmo de Metropolis verifica se a nova configuração será aceita
// Se a variação da energia for menor que zero, aceita-se a nova configuração
if (deltaE < 0){
S[i][j] = -S[i][j]};
//Se for maior else{
// Gera-se um número aleatório
numeroSorteado = geradorNumeroAleatorio();
// Calcula-se a probabilidade de Boltzmann
prob = exp( (-1.0*deltaE)/(k*T) );
// E verifica-se o número gerado é menor que a probabilidade calculada
// Se for menor aceita, aceita a configuração
if (numeroSorteado<prob){
S[i][j] = -S[i][j]};
// Se o número sorteado for maior que a probabilidade
else{
// Não é aceita a configuração futura e prevalece a configuração atual
// o que leva a uma variação igual a zero
deltaE=0;

```

```

deltaM=0; } }
// Armazena-se as grandezas magnetização e energia
mag = mag + deltaM;
energia = energia + deltaE; } } }
// Inicia-se os passos que serão calculadas as médias
for (imcs=0; imcs<MCS; ++imcs){
for (i = 0; i < L; ++i) {
for (j = 0; j < L; ++j) {
soma = S[i][j]*( S[up[i]][j] + S[dw[i]][j] + S[i][lf[j]] + S[i][rt[j]] );
deltaE = 2*soma;
deltaM = -2*S[i][j];
if (deltaE < 0) S[i][j] = -S[i][j];
else { numeroSorteado = geradorNumeroAleatorio();
prob = exp( (-1.0*deltaE)/(k*T) );
if (numeroSorteado<prob){ S[i][j] = -S[i][j];}
else { deltaE=0; deltaM=0;
} }
} }
// Armazenamento das grandezas para efetuar as médias
mag = mag + deltaM;
energia = energia + deltaE;
}
} // fim dos passos de Mc <-
// Cálculo das Médias
mediaen=mediaen*invMCS;// Média da Energia
mediaen2=mediaen2*invMCS;// Média da Energia Quadrada
mediam=mediam*invMCS;// Média Magnetização
mediam2=mediam2*invMCS; // Média da Magnetização ao quadrado
mediam4=mediam4*invMCS;// Média da Magnetização a quarta
cesp=( mediaen2-(mediaen*mediaen) )*( (L*L)/(T*T) );// Calor Específico
chi=( mediam2-(mediam*mediam) )*( (L*L)/T ); // Susceptibilidade
u4=1.0 - mediam4/(3.0*mediam2*mediam2); //Cumulante de Binder
// Salvando os resultados nos arquivos
arq = fopen("mediam.txt", "a");
fprintf(arq,"%f %f \n", T , mediam);

```

```

fclose(arq);

arq = fopen("mediaen.txt", "a");
fprintf(arq, "%f %f \n", T, mediaen);
fclose(arq);

arq = fopen("cesp.txt", "a");
fprintf(arq, "%f %f \n", T, cesp);
fclose(arq);

arq = fopen("susc.txt", "a");
fprintf(arq, "%f %f \n", T, chi);
fclose(arq);

arq = fopen("cumu.txt", "a");
fprintf(arq, "%f %f \n", T, u4);
fclose(arq);
} // Fim Temperatura
return 0; // Fim Programa}
// Função Geradora de números aleatórios
float geradorNumeroAleatorio(void){
float numeroGerado = (float) mtrand1();
return numeroGerado; }

```

Referências Bibliográficas

- [1] E. Ising, Z. Phys. 31, 253 (1925).
- [2] Weiss, P. , J. Phys. 6, 667 (1907).
- [3] Chaves, Alaor e Shellard, Ronald C., SBF, Física Para o Brasil - Pensando o Futuro, 2005.
- [4] Oliveira, Ivan S., Introdução a Física do Estado Sólido, 1ª Edição. São Paulo, Editora Livraria da Física, 2005.
- [5] Rezende, Sergio M., Materiais e Dispositivos Eletrônicos, Editora: Livraria da Física, 2ª Edição Editora Livraria da Física, Ano 2004.
- [6] Callen, H., Thermodynamics and an Introduction to thermostattics, 2ª edição, Ano 1985.
- [7] Ribeiro, P. A. Giuliano. Revista Brasileira de Ensino de Física, vol. 22, no. 3, Setembro, 2000.
- [8] Oliveira, Mário José, Termodinâmica, Editora Livraria da Física, 2005.
- [9] Salinas, Silvio R., Introdução à Física Estatística, Editora Edusp, 1997.
- [10] Landau D.P. and Binder K., A Guide To Monte Carlo Simulations in Statistical Physics (2ed, 2005) Cambridge Univesity Press.
- [11] Ishihara, A., Statistical Physics, State University of New York, Buffalo - US. Ed. Academic Press, 1971.
- [12] Ferrenberg, A. M., Landau, D. P., Phys. Rev. B 44, 5081 (1991).

- [13] Barber, M. N., Pearson, R. B., Toussaint, D., Phys. Rev. B 32, 1720 (1985).
- [14] Bhanot, G., Duke, D., Salvador, R., Phys. Rev. B 33, 7841 (1986).
- [15] Cannas, Sérgio A., Introdução a la Teoría de los Fenómenos Críticos, Nota de clase, 2004.
- [16] Kadanoff, L. P., Scaling Laws for Ising Models Near Critical Points, Proc. 1966 Midwest Conf. on Theor. Phys., (Bloomington, Ind.).
- [17] Reichl, L. E. , A Modern Course in Statistical Physics, 2nd Edition. 1998.
- [18] Fisher, M.E., in Critical Phenomena, edited by M.S. Green (Academic, New York, 1971).
- [19] Barber, M.N. in Phase Transitions and Critical Phenomena, edited by C. Domb and J.K. Lebowitz (Academic, London, 1983), Vol. 8.
- [20] Privman, V. (Ed.), Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems (World Scientific, Singapore, 1990).
- [21] Stanley, H. E., Introduction to phase transitions and critical phenomena, 1971.
- [22] Martins, P. H. L., Simulações de Monte Carlo em problemas de Física Estatística. Tese de Doutorado, 2004.
- [23] Metropolis, N. and Ulam, S., Journal of American Statistical Association 44 (1949) 335-41.
- [24] N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller e E. Teller, J. Chem. Phys. 21, 1097 (1953).
- [25] Gentle, J. E., Random number generation and Monte Carlo methods. 2nd. edition, 2005.
- [26] Binder. K., Heermann. D. W., Monte Carlo Simulation in Statistical Physics An Introduction, 4th Ed., Springer 2002.
- [27] C. N. Yang e T. D. Lee, Phys. Ver. 87, 404, 410 (1959).

- [28] Attwood, Brian Christopher. Monte Carlo Simulations of Solid-Fluid Phase Equilibria in Binary and Ternary Mixtures, A dissertation submitted to the Graduate Faculty of North Carolina State University, 2003.
- [29] Líbero, Valter L., De Ising a Metropolis, Revista Brasileira de Ensino de Física, vol.22, no.3, Setembro,2000.
- [30] R. E. Peierls, Proc. Camb. Phil. Soc. 32. 471 (1936);
- [31] Onsager, L. Phys. Rev. 65, 117 (1944).
- [32] Coelho, João M., Modelo de Ising de Spins Mistos com Interação Aleatória de Campo Cristalino, Dissertação de Mestrado, 2007.
- [33] Roditi, Itzhak. Dicionário Houaiss de Física, Instituto Antonio Houaiss, 2005.
- [34] A. Benyoussef, A. el Kenz and M. el Yadari, Mean Field Study of Decorated Ferrimagnetic Ising Model, M. J. Condensed Matter , volume 8, number 1, 2007.
- [35] S.Decurtins, H. W. Schmalke, H. R. Oswald, A. Linden, J.Ensling, P.Gutlich and A.Hauser, Inorganica Chimica acta 65 (1994) 216.
- [36] M. Sugimoto, N. Hiratsuka, Jpn. J. Appl. Phys. 21 (1982) 197.
- [37] Gatteschi, O. Kahn, J. S. Miller and F. Palacio, Magnetic Molecular Materials (NATO ASI Series, Kluwer Academic, Dordrecht, 1991).
- [38] L.Néel, Ann.de phys.3 (1948) 137.
- [39] Oitmaa J and Enting I G 2006, J. Phys.: Condens. Matter 18 10931.
- [40] W Selke and J Oitmaa, Monte Carlo Study of mixed-spin $S=(1/2, 1)$ Ising ferrimagnets, J. Phys.: Condens. Matter 2010.
- [41] Kaneyoshi T and Chen J C 1991 J. Magn Magn. Mater. 98 201.

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](#)