



UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO
INSTITUTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Modelo de Ising de Spins Mistos em uma Rede Triangular com
Anisotropias Aleatórias

Elpidio Sousa Santana

2018
Cuiabá/MT



UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO
INSTITUTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Modelo de Ising de Spins Mistos em uma Rede Triangular com
Anisotropias Aleatórias

Elpidio Sousa Santana

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

Orientador: *Prof. Dr. Maurício Godoy*

Co-orientador: *Prof. Dr. Alberto Sebastião de Arruda*

2018

Cuiabá/MT

Dados Internacionais de Catalogação na Fonte.

S725m Sousa Santana, Elpidio.

Modelo de Ising de Spins Mistos em uma Rede Triangular com Anisotropias Aleatórias / Elpidio Sousa Santana. -- 2018
xii, 61 f. : il. color. ; 30 cm.

Orientador: Maurício Godoy.

Co-orientador: Alberto Sebastião de Arruda.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Mato Grosso, Instituto de Física, Programa de Pós-Graduação em Física, Cuiabá, 2018.

Inclui bibliografia.

1. Ising. 2. Spins mistos. 3. Rede triangular. 4. Simulação Monte Carlo. I. Título.

Ficha catalográfica elaborada automaticamente de acordo com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

Permitida a reprodução parcial ou total, desde que citada a fonte.



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO
PRÓ-REITORIA DE ENSINO DE PÓS-GRADUAÇÃO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
Avenida Fernando Corrêa da Costa, 2367 - Boa Esperança - Cep: 78060900 - CUIABÁ/MT
Tel : (65) 3615-8937 - Email : pgfisica@fisica.ufmt.br

FOLHA DE APROVAÇÃO

TÍTULO : “MODELO DE ISING DE SPINS MISTOS EM UMA REDE TRIANGULAR COM ANISOTROPIAS ALEATÓRIAS”

AUTOR : Mestrando Elpidio Souza de Santana

Dissertação defendida e aprovada em 31/08/2018.

Composição da Banca Examinadora:

Presidente Banca / Orientador Doutor(a) Maurício Godoy
Instituição : UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO

Examinador Interno Doutor(a) Paulo Henrique Lana Martins
Instituição : UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO

Examinador Externo Doutor(a) Octavio Daniel Rodriguez Salmon
Instituição : UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS

Examinador Suplente Doutor(a) Alberto Sebastião de Arruda
Instituição : UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO

CUIABÁ, 31/08/2018.

Agradecimentos

Aos meus familiares.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - CAPES.

Aos professores Milan Žukovič e André Krindges.

Sumário

Lista de Figuras	viii
Resumo	xi
Abstract	xii
Preliminares	1
Objetivo e Motivação	1
Estrutura da Dissertação	1
1 Fundamentação Teórica	3
1.1 Algumas Noções de Mecânica Estatística	3
1.2 Simulação de Monte Carlo	5
1.2.1 Números Pseudo-Aleatórios	7
1.2.2 Estimativas de Erros	8
1.2.3 Algoritmo de Metropolis	8
1.3 Modelo de Ising	10
1.4 Simulação de Monte Carlo do Modelo de Ising	11
2 Modelo de Ising Ferrimagnético com Anisotropias Uniformes	17
2.1 Modelo	17
2.2 Estado Fundamental	18
2.3 Simulações de Monte Carlo	19
2.4 Resultados e Discussões	22
3 Modelo de Ising Ferrimagnético com Anisotropias Aleatórias	30
3.1 O Modelo	30
3.2 Simulações de Monte Carlo	31
3.3 Resultados e Discussões	34

4	Conclusões e Perspectivas de Trabalhos Futuros	43
A	Calculo de Algumas Quantidades	45
A.1	Cálculo do calor específico	45
A.2	Cálculo da suscetibilidade magnética	47
B	Estado Fundamental	48
B.1	Energia Reduzida	48
B.2	Determinação do Estado Ferrimagnético do Tipo 1	49
B.3	Determinação do Estado Ferrimagnético do Tipo 2	49
B.4	Anisotropias Críticas	50
B.5	Magnetização Total no Estado Fundamental	51
C	Magnetizações Alternadas	54
D	Cruzamento das Linhas de Segunda Ordem	57
	Referências Bibliográficas	58

Lista de Figuras

- 1.1 Esquema que representa a relação entre teoria, experimento, simulação e natureza. 6
- 1.2 Fluxograma para o algoritmo do método de Monte Carlo utilizando o algoritmo de Metropolis. 10
- 1.3 Representação esquemática de uma rede unidimensional de spins do modelo proposto por Ising. 10
- 1.4 Representação esquemática da rede quadrada do modelo de Ising. Os elementos com linhas contínuas são pertencentes a rede e os elementos com linhas tracejadas são devido a condição periódica de contorno. 11
- 1.5 Magnetização total m e energia e por sítio em função dos MCs para três tamanhos de rede L , como mostrado na figura. O sistema é simulado para uma temperatura fixa $T = 2,0$ 13
- 1.6 (a) Magnetização m e (b) energia e por sítio em função da temperatura T e para diferentes tamanhos de rede L , como mostrado na figura. 15
- 1.7 Cumulante de Binder de quarta ordem U_L versus temperatura T para diferentes tamanhos de rede L , como mostrado na figura. 16
- 1.8 (a) Calor específico c e (b) susceptibilidade χ em função da temperatura T para diferentes tamanhos de rede L , como mostrado na figura. Em (b) temos uma ampliação para ver a curvas com L menores. 16

- 2.1 Representação esquemática de uma rede triangular mista, composta pelas sub-redes A (σ_A), B (σ_B) e C (σ_C) com spins $1/2$, $1/2$ e 1 , respectivamente. Os círculos tracejados indicam onde há presença da anisotropia D 18
- 2.2 Magnetizações de sub-rede m_A , m_B e m_C em função dos MCs. (a) Para a anisotropia $D = -1,432$ e (b) para a anisotropia $D = -1,55$. As simulações foram realizadas para uma rede de tamanho $L = 48$ e para $T = 0,2$ 20

2.3	Magnetização alternada m_{a1} , m_{a2} e energia e em função dos MCs. Em (a) temos $T = 0,8$ e $D = 2,0$. (b) Para $T = 0,35$ e $D = -3,0$. As simulações foram realizadas para uma rede de tamanho $L = 120$	21
2.4	Magnetização total das sub-redes em função dos MCs. (a) Para $T = 0,8$ e $D = 2,0$. (b) Para $T = 0,35$ e $D = -3,0$. As simulações foram realizadas para uma rede de tamanho $L = 120$	22
2.5	(a) Magnetizações alternadas por spin m_{a1} e m_{a2} e (b) calor específico c em função da temperatura T , e para diferentes valores de D como mostrado na figura. As simulações foram realizadas para uma rede de tamanho $L = 48$.	23
2.6	Magnetização alternada m_{a1} em função da anisotropia D crescente (\blacktriangleright) e decrescente (\blacktriangleleft) para diferentes temperaturas T , como mostrado na figura. As simulações foram realizadas para um tamanho de rede $L = 48$. As curvas se assemelham a curvas de histerese, portanto as setas de dupla ponta indicam a largura do ciclo da histerese. As barras de erros são menores que os símbolos.	24
2.7	Cumulante de Binder de quarta ordem das magnetizações alternadas versus temperatura T . (a) U_{a1} para $D = 0$ e (b) U_{a2} para $D = -2,0$	26
2.8	Diagrama de fases temperatura crítica T_c versus anisotropia D . Na linha cheia temos uma transição de fase de segunda ordem, com o ponto com a menor temperatura sendo o ponto de coexistência de estados (\blacklozenge). Os quadrados (\square) são pontos calculados pelo método do cumulante de Binder. A linha pontilhada é uma transição de fase de primeira ordem que se inicia no ponto de anisotropia crítica D_C (para $T_C = 0$) e vai até o ponto crítico final (\bullet). Os símbolos \triangleright e \triangleleft representam as larguras das curvas de histerese. As simulações foram realizadas para um rede triangular de tamanho linear $L = 48$ e temos três fases P , FR_1 e FR_2 , sendo, paramagnética, ferrimagnética do tipo 1 e do tipo 2, respectivamente.	26
2.9	28
2.10	Cumulante da energia mínimo V_{\min} versus L^{-2} . Em (a) a anisotropia é $D = 0$ e em (b) é $D = -2,0$. A linha cheia corresponde ao valor $V^* = 2/3$ e a linha tracejada ao ajuste linear dos dados.	29
3.1	Termalização para as magnetizações alternadas m_{a1} , m_{a2} e energia e em $T = 0,75$, $p = 0,2$ e $D = 1,0$. Em (a) a distribuição dos spins é de forma aleatória e em (b) a distribuição é de forma “up”. Aqui usamos o tamanho de rede $L = 120$	32
3.2	Termalização para as magnetizações alternadas m_{a1} , m_{a2} e energia e em (a) para $T = 0,35$, $p = 0,4$, $D = -1,0$ e em (b) para $T = 0,6$, $p = 0,8$, $D = -2,0$. Aqui usamos o tamanho de rede $L = 120$	33

3.3	Calor específico c em função da temperatura T em $D = 1,0$ e para vários valores de p , como indicados na figura. Aqui as simulações foram realizadas para uma rede $L = 48$	35
3.4	(a) Temperatura crítica T_c em função anisotropia D . (b) calor específico c em função da temperatura T . Em (b) temos diferentes valores de anisotropia D , como mostrado na figura e para $p = 1,0$	36
3.5	Calor específico c em função da temperatura T . Temos diferentes valores da distribuição p , como mostrado na figura e para uma anisotropia $D = 0$	37
3.6	Magnetização alternada m_{a1} em função da anisotropia D crescente (\blacktriangleright) e decrescente (\blacktriangleleft), para $p = 0,2$ e $L = 66$. Para as temperaturas (a) $T = 0,14$, (b) $T = 0,16$, (c) $T = 0,17$, (d) $T = 0,18$, (e) $T = 0,20$ e (f) $T = 0,25$	38
3.7	Cumulante de Binder de quarta ordem em função da temperatura T . (a) Para a magnetização alternada m_{a1} e $D = 0,0$. (b) Para a magnetização alternada m_{a2} e $D = -2,5$	39
3.8	40
3.9	Diagrama de fases no plano temperatura crítica T_c versus anisotropia D para $p = 0,2$. Na linha cheia temos uma transição de fase de segunda ordem, com o ponto com a menor temperatura é o ponto coexistência de fases (\blacklozenge). Os quadrados (\square) são pontos calculados pelo método do cumulante de Binder. A linha tracejada é uma tentativa de formar um caminho para uma transição de fase de primeira ordem que inicia no ponto de anisotropia crítica D_c vai até o ponto crítico final (\bullet) e os símbolos \triangleright e \triangleleft representam as larguras das curvas de histerese. As simulações foram realizadas para um rede de tamanho linear $L = 60$ e temos três fases P , FR_1 e FR_2 , sendo respectivamente paramagnético, ferrimagnético, do tipo 1 e ferrimagnético do tipo 2.	41
3.10	Diagrama de fases temperatura crítica T_c versus anisotropia D . Nas linhas cheias temos as transições de fase de segunda ordem, com os pontos com menor temperatura sendo o ponto de coexistência de fases (\blacklozenge). As linhas tracejadas são transições de fase de primeira ordem que iniciam no ponto de anisotropia crítica D_c e vão até o ponto crítico final (\bullet). Os símbolos \blacktriangleright e \blacktriangleleft são concernentes as larguras das curvas de histerese para $p = 0,0$ e os símbolos \triangleright e \triangleleft são para $p = 0,2$. As simulações foram realizadas para diferentes tamanhos de rede e temos P, FR_1 e FR_2 , sendo, paramagnético, ferrimagnético do tipo 1 e 2, respectivamente.	42

Resumo

O objetivo deste trabalho é mapear as linhas de transições de fase em um sistema ferrimagnético. Por isso, utilizamos as simulações de Monte Carlo no modelo de Ising de spins mistos em uma rede triangular sob a influência de anisotropias aleatórias. Essa rede é dividida em três sub-redes interpenetrantes, com os spins $\sigma = 1/2$ ocupando as sub-redes A e B , e os spins $S = 1$ formando a sub-rede C . A rede tem interação antiferromagnética ($J < 0$) entre seus spins primeiros vizinhos e temos uma distribuição aleatória da anisotropia D_k^C na sub-rede C . Para determinação das propriedades magnéticas do sistema, calculamos algumas propriedades termodinâmicas tais como: magnetização alternada, magnetização total, susceptibilidade, energia, calor específico, cumulante de Binder, para vários tamanhos de rede L . Construimos o diagrama de fases do modelo no plano temperatura crítica T_c versus anisotropia D , o qual apresenta linhas de transições de fase de primeira e de segunda ordem para diferentes distribuições da anisotropia.

Abstract

The objective of this dissertation is to map the lines of phase transitions in a ferromagnetic system. For this reason, we used the Monte Carlo simulations in the Ising model of mixed spins in a triangular lattice under the influence of random anisotropies. This lattice is divided into three other interpenetrating sublattices, with the $\sigma = 1/2$ spins occupying the sublattices A and B , and the spins $S = 1$ forming the subnet C . The network has ferromagnetic interaction ($J < 0$) between its spins and we have a random distribution of the anisotropy D_k^C in the sublattice C . To determine the magnetic properties of the system, we calculate some thermodynamic properties such as staggered magnetization, susceptibility, energy, specific heat, for various system sizes. We construct the phase diagram of the model in the critical temperature plane T_c versus anisotropy D , which presents lines of first and second order phase transitions for different anisotropy distributions.

Objetivo e Motivação

Os sistemas de spin mistos foram investigados utilizando várias abordagens que incluem um tratamento exato em casos especiais [1, 2], aproximação de campo médio [3, 4], método de Bethe-Peierls [5] e simulação de Monte Carlo (MC) [6, 7, 8, 9]. A maioria dos estudos com os modelos mais simples consiste em duas sub-redes interpenetrantes, uma sub-rede com spin-1/2 e a outra com spin-1. Tal modelo de spin pode ser descrito pela Hamiltoniana

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i S_j - D \sum_j S_j^2, \quad (1)$$

sendo $\sigma_i = \pm 1/2$ e $S_j = \pm 1, 0$ os spins nas diferentes sub-redes, $\langle i, j \rangle$ denota a soma sobre os primeiros vizinhos, $J < 0$ é a constante de interação de troca antiferrimagnética, e D é a anisotropia¹.

Existe uma controvérsia sobre os comportamentos críticos e de compensação mesmo para o caso mais estudado. O modelo em uma rede quadrada com interações entre primeiros vizinhos, foi demonstrado de forma convincente pela simulação de MC [7] que não há pontos tricríticos e nem de compensação², como já foi sugerido por algumas aproximações [10, 11]. A rede quadrada possui número de coordenação 4, enquanto que para uma rede triangular temos o número de coordenação 6, o que torna o sistema mais complexo. E possivelmente a existência de uma temperatura de compensação [12].

Este trabalho visa estudar o diagrama de fases de um sistema de spins mistos 1 e 1/2

¹Anisotropia é uma tendência de direcionamento de uma propriedade física de um material.

²No ponto de compensação a magnetização total é nula, assim a temperatura de compensação pode ser determinada pelo cruzamentos entre as magnetizações das sub-redes.

em uma rede triangular na presença de uma anisotropia aleatória através de simulações de MC. Temos na literatura situação de anisotropia uniforme com a mesma rede tanto ferromagnética [8] quanto ferrimagnética [9] ou aproximações de campo médio como em [13]. O sistema apresenta frustração³ que não é objetivo de estudo deste trabalho.

Estrutura da Dissertação

A dissertação está dividida em 4 capítulos da seguinte forma: Capítulo 1, apresentamos uma introdução a simulação de MC e as técnicas utilizadas neste trabalho. Capítulo 2, é utilizada a técnica de simulação MC para estudar o modelo de spins mistos com spin-1/2 e 1 com anisotropia uniforme em uma rede triangular, comparamos os resultados obtidos com a referência [9]. Capítulo 3, nós também utilizamos as simulações de MC para estudar o modelo de spins mistos com uma anisotropia aleatória em uma rede triangular e apresentamos os resultados obtidos. Capítulo 4, apresentamos as conclusões e perspectivas de trabalhos futuros.

³Frustração magnética é o conflito em minimizar a interação associada a diferentes pares de spin [14].

1.1 Algumas Noções de Mecânica Estatística

Para a compreensão deste trabalho faz-se necessário alguns conceitos de mecânica estatística [15].

Função de Partição

Para obtermos as médias térmicas o primeiro passo é termos a função de partição. A partir dela, obteremos todas as informações que queremos extrair do sistema. A função de partição [16] é dada por,

$$Z(T, N, H) = \sum_{\omega} e^{-\mathcal{H}/k_B T}, \quad (1.1)$$

onde ω refere-se às configurações acessíveis ao sistema, $e^{-\mathcal{H}/k_B T}$ é o peso estatístico de Boltzmann, \mathcal{H} é a Hamiltoniana do sistema, k_B é a constante de Boltzmann, N é o número de partículas, H é o campo externo aplicado e T é a temperatura absoluta. A soma é feita sobre todos os estados do sistema e assim depende do tamanho do sistema e dos graus de liberdade que o sistema possui. A função de partição depende da Hamiltoniana do sistema, ou seja, quanto mais complexa a Hamiltoniana, mais trabalhosa se torna a obtenção das informações do sistema.

Em mecânica estatística de equilíbrio a função de partição auxilia na determinação de um valor médio de uma quantidade A , dado por [16]

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\omega} A(\omega) e^{-\beta E_{\omega}}, \quad (1.2)$$

onde a soma percorre todas as configurações do sistema ω , $A(\omega)$ é o valor da quantidade A na configuração ω , E_ω é energia na configuração ω e β é $(k_B T)^{-1}$.

Energia Livre e Magnetização

Agora que temos a função de partição, podemos determinar as grandezas físicas. Para nosso estudo, vamos considerar a energia livre de Gibbs no limite termodinâmico como o potencial termodinâmico, dada por

$$g(T, H) = \lim_{N \rightarrow \infty} -\frac{1}{N\beta} \ln [Z(T, N, H)]. \quad (1.3)$$

Fazendo derivadas da energia livre de Gibbs Eq. (1.3) temos as quantidades termodinâmicas de interesse.

A magnetização será nossa *equação de estado*. A equação de estado é uma grandeza que descreve o sistema para uma dada configuração. Por exemplo, aqui a parâmetro de ordem é a magnetização, que nos mostrará o comportamento magnético para uma situação de temperatura T .

A partir da energia livre de Gibbs a magnetização [16] é dada por:

$$m(T, H) = - \left(\frac{\partial g}{\partial H} \right)_T. \quad (1.4)$$

Note que a equação acima é derivada de primeira ordem, em função do campo magnético externo H .

Susceptibilidade Magnética e Capacidade Térmica

Com a primeira derivada da energia livre de Gibbs obtivemos a magnetização (Eq. (1.4)), já as segundas derivadas fornecem a capacidade térmica e a susceptibilidade magnética, respectivamente:

$$c(T, H) = -T \left(\frac{\partial^2 g}{\partial T^2} \right)_H \quad (1.5)$$

e

$$\chi(T, H) = - \left(\frac{\partial^2 g}{\partial H^2} \right)_T. \quad (1.6)$$

Fenômenos Críticos

Existem várias ordens de transição de fase, aqui vamos nos ater somente as duas primeiras, segundo a classificação de Paul Ehrenfest [17]. Se as derivadas de primeira ordem, Eq. (1.4), da energia livre são descontínuas temos uma “transição de primeira ordem”. Se a primeira derivada é contínua, mas a segunda derivada, Eqs. (1.5) ou (1.6), é descontínua no ponto crítico temos uma “transição de fase de segunda ordem” [18]. A intensidade da descontinuidade não é importante em termos da classificação da transição de fase.

Portanto, para o caso de uma transição de fase de primeira ordem perceberemos uma descontinuidade nas curvas da magnetização, enquanto que uma transição de segunda ordem teremos uma descontinuidade nas curvas do calor específico e susceptibilidade.

1.2 Simulação de Monte Carlo

Atualmente, para o estudo de diversos sistemas físicos podemos lançar mão dos métodos computacionais. Devido ao grande número de estados possíveis nos sistemas, por exemplo, no modelo de Ising é inviável analisar todos os estados, pois isso acarreta em um grande custo computacional. Com isso utilizamos a simulação de MC que nos auxiliará na obtenção das grandezas termodinâmicas, pois vão utilizar somente as configurações que tiverem importância, ou seja, é feita uma amostragem por importância.

O termo “Método de Monte Carlo” foi usado pela primeira vez na década de 40 por físicos do Laboratório Nacional de Los Alamos, que trabalhavam em um projeto de armas nucleares, o “Manhattan Project” [19], este nome faz referência à cidade de Monte Carlo (Mônaco) que é conhecida por seus jogos que empregam o uso de números aleatórios [20]. Este termo também é utilizado para uma classe de técnicas de simulação que estudam a evolução temporal de um sistema cuja evolução não tem uma maneira predefinida (por exemplo as equações de movimento de Newton, elas descrevem perfeitamente a evolução do movimento de uma partícula). Como não há uma evolução bem definida para o sistema utiliza-se números aleatórios para obtenção dos estados e assim podemos determinar suas grandezas médias.

Basicamente o método de MC consiste em gerar configurações de um sistema, fundamentado sobre uma certa distribuição de probabilidade, e com isso estimar valores

esperados $\langle A \rangle_{MC}$, de uma quantidade A . O cálculo direto das somas na Eq. (1.2) é impraticável para sistemas que não sejam muito pequenos. O número de configurações aumenta exponencialmente com o tamanho L do sistema. Por exemplo, no caso do modelo de Ising 2D com N (sendo $N = L^2$) sítios, que será vista posteriormente (seção 1.4), a soma é sobre 2^N configurações. Agora para o caso deste trabalho, o modelo com $S = (1/2, 1/2, 1)$, a soma é sobre $2^{2M} \cdot 3^M$, onde M é o número de sítios em cada uma das sub-redes $M = N/3 = L^2/3$. Se N for grande o cálculo das médias é uma tarefa impraticável do ponto de vista computacional. Devido a isso surgiram técnicas e métodos computacionais que auxiliam na obtenção dos resultados.

A utilização das simulações torna-se um instrumento importante entre a teoria e o experimento, corroborando resultados experimentais e também ajudando na interpretação de dados experimentais. Podemos entender esta interação entre a simulação, a teoria e o experimento como mostrado no diagrama da Fig. 1.1.

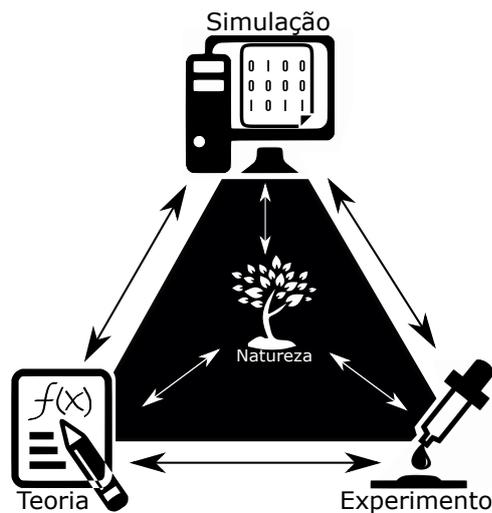


Figura 1.1: Esquema que representa a relação entre teoria, experimento, simulação e natureza.

O cálculo das médias pode ser feito a partir de uma amostragem em um espaço de configurações mais prováveis para o sistema, onde as amostras seguem a distribuição de Boltzmann. O valor médio de uma quantidade A usando este método é dado pelor,

$$\langle A \rangle_{MC} = \frac{1}{M} \sum_{\omega=1}^M A(\omega), \quad (1.7)$$

onde M^1 é a quantidade de estados que a simulação passou, $\langle A \rangle_{MC}$ é a estimativa obtida

¹ M é igual ao número de passos de Monte Carlo depois do sistema estar termalizado.

com o método de MC, baseando na ideia de amostragem por importância.

Um passo de MC (MCs do inglês “Monte Carlo step”) é um processo de visitar N spins na rede. Em cada MCs são atualizadas as quantidades de interesse que para o modelo de Ising, por exemplo, podem ser o momento magnético m e a energia E .

Olhando rapidamente a Eq. (1.4) ela não nos auxilia² muito já que estamos simulando o sistema, então podemos utilizar a média definida, Eq. (1.7), para determinar a energia média,

$$\langle E \rangle = \frac{1}{M} \sum_{\omega=1}^M e_{\omega}, \quad (1.8)$$

e magnetização média,

$$\langle m \rangle = \frac{1}{M} \sum_{\omega=1}^M m_{\omega}. \quad (1.9)$$

onde e_{ω} e m_{ω} são a energia e magnetização do sistema no estado ω .

Como o sistema encontra-se isolado e em equilíbrio a uma temperatura T , o conjunto respeita a distribuição de probabilidade para um microestado ω dada pela distribuição de Boltzmann [16],

$$P(\omega) = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{E(\omega)}{k_B T}\right). \quad (1.10)$$

A equação acima representa a probabilidade de que ocorra a configuração ω para um sistema que está em equilíbrio térmico a uma temperatura T .

1.2.1 Números Pseudo-Aleatórios

Como o método de MC faz utilização de sequências de números aleatórios na resolução de problemas, é necessário tecermos alguns comentários sobre números pseudo-aleatórios.

A arquitetura da computação não é baseada na aleatoriedade mas sim em formas fixas determinísticas, com isso não temos como gerar números verdadeiramente aleatórios, então temos algoritmos geradores de números pseudo-aleatórios [21]. Estes geradores utilizam de algum(ns) método(s) para gerar uma sequência de números que aparentam ser aleatórios. Todavia quando precisamos de uma grande quantidade desses números podemos perceber que eles não são verdadeiramente aleatórios. Por isso, estes algoritmos são chamados de pseudo-aleatórios

²Não estamos interessados em uma solução analítica com relação à função de partição para determinarmos as grandezas de interesse, mas sim através de simulação.

Quanto melhor for a capacidade de um gerador de números pseudo-aleatórios maior será a sequência que ele produz antes que ela se repita, geralmente quanto melhor for este gerador mais tempo computacional é exigido [18], impactando diretamente no tempo das nossas simulações. Nas simulações deste trabalho é utilizado um gerador que seja satisfatório, ou seja, que não demande muito tempo computacional.

1.2.2 Estimativas de Erros

Em uma simulação temos que descartar uma quantidade inicial de passos de MC para conduzir o sistema ao equilíbrio, e a partir desse equilíbrio um novo conjunto tendo mais passos será utilizado para os cálculos das médias. Assim como em um experimento, nas simulações computacionais também surgem erros estatísticos que são inerentes ao método. No processo de MC, as médias são feitas sobre um espaço amostral finito, e além de medirmos o valor esperado também temos que estimar os erros sobre esses valores. Notoriamente há vários erros a que nossas simulações estão submetidas, como os erros sistemáticos, que podem surgir de outros meios que geralmente afetam a simulação, tais como uso de geradores de números aleatórios ruins, erro de programação, etc.

Durante a simulação, a cada MCs temos um tempo computacional t , e em cada tempo computacional uma quantidade $A(t)$ é medida. Para uma simulação, a estimativa de qualquer quantidade média do sistema é dada pela Eq. (1.7). Caso as quantidades médias estimadas $A(t)$ sejam estatisticamente independentes, ou seja não haja relação entre uma quantidade e outra, o processo simples que estima o erro estatístico destas quantidades médias é dado pelo seu desvio padrão,

$$\sigma = \sqrt{\frac{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}{M - 1}} \quad (1.11)$$

Esta expressão somente é válida quando as amostras são estatisticamente independentes. Embora exista ainda uma correlação entre as configurações, supõe-se que o erro possa ainda ser obtido através da expressão acima [22].

1.2.3 Algoritmo de Metropolis

O algoritmo de Metropolis [23], também conhecido por Algoritmo de Metropolis-Hastings, devido a Nicholas Metropolis te-lo desenvolvido em 1953 e mais tarde por W. K.

Hastings ter generalizado sua aplicação [24]. Possivelmente seja o algoritmo mais utilizado em simulações de MC para problemas de ciências em geral e principalmente na física.

A função deste algoritmo é determinar valores esperados de grandezas termodinâmicas de um sistema, através de algumas médias sobre determinadas amostras sem assim percorrer todas as possibilidades que o sistema admite, para tal ele obtém amostras que seguem a distribuição de Boltzmann. A probabilidade de transição de estado proposta por Metropolis pode ser dada por:

$$P = \begin{cases} 1, & \text{se : } \Delta E \leq 0, \\ \exp(-\beta\Delta E), & \text{se : } \Delta E > 0. \end{cases} \quad (1.12)$$

onde $\beta = \frac{1}{k_B T}$ e ΔE é a diferença de energia entre os dois estados.

Os principais passos do algoritmo de Metropolis podem ser descritos da seguinte maneira [25, 18]:

1. Iniciamos com uma configuração que foi gerada de forma aleatória ω_i .
2. Geramos uma nova configuração do sistema ω_f , através da mudança do estado de um spin.
3. Calculamos a variação de energia entre o estado inicial e o novo estado $\Delta E = E_f - E_i$.
4. Se $\Delta E \leq 0$ o novo estado é aceito, pois a energia é reduzida. Caso contrário, um número aleatório x no intervalo $0 \leq x < 1$ é gerado e o novo estado somente será aceito se $x < \exp(-\beta\Delta E)$.
5. Os passos de 1 a 4 são repetidos até o algoritmo percorrer toda a rede, e o sistema então se encontra em uma configuração de equilíbrio.

Pode se ter uma ideia melhor da estruturado algoritmo, olhando sua evolução na Fig. 1.2.

A estrutura apresentada na Fig. 1.2 é utilizada neste trabalho para obtenção das propriedades termodinâmicas significativas que serão descritas posteriormente.

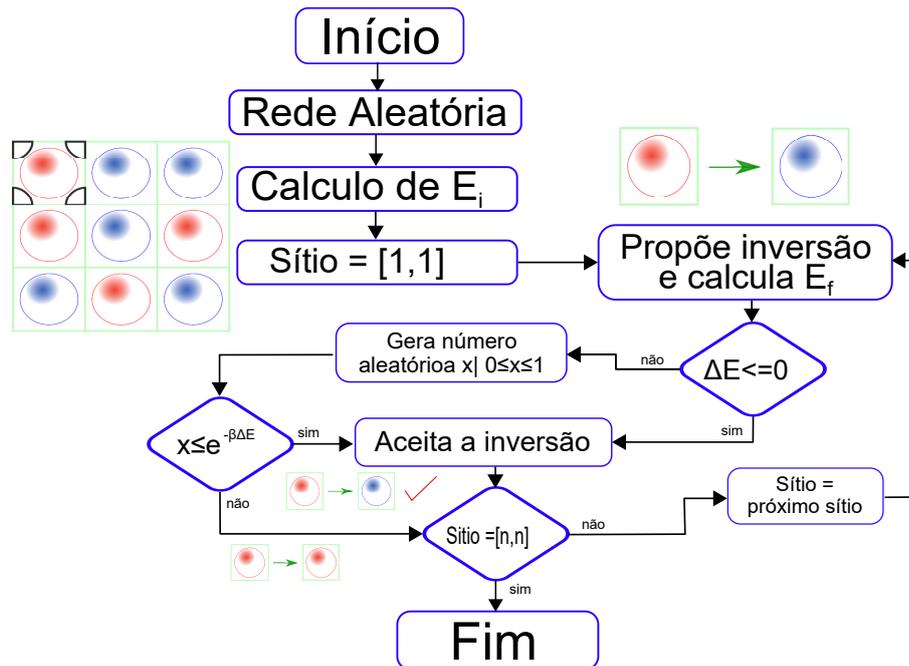


Figura 1.2: Fluxograma para o método de Monte Carlo utilizando o algoritmo de Metropolis.

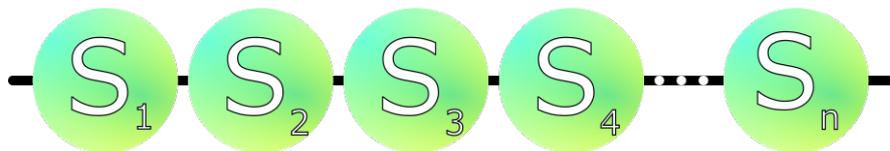


Figura 1.3: Representação esquemática de uma rede unidimensional de spins do modelo proposto por Ising.

1.3 Modelo de Ising

O modelo de Ising foi proposto por Wilhelm Lenz, em 1920 ao seu estudante de doutorado Ernst Ising. O objetivo deste modelo era estudar transição de fase para uma temperatura diferente de zero e Ising resolveu exatamente em 1925 para o caso unidimensional [26]. Ele chegou a conclusão que o modelo não exibia transição de fase em temperaturas finitas.

O modelo proposto por Ising consiste em uma rede unidimensional (um fio) de spins podendo ter o valor $+1$, “para cima” ou -1 , “para baixo”, veja Fig. 1.3.

A rede de tamanho finito torna o estudo mais complexo pois devemos também nos importar com os efeitos da borda. Para não termos este problema utilizamos a “condição periódica de contorno”. Com esta condição “ligamos” o último elemento ao primeiro, no caso unidimensional. Para o caso bidimensional ligamos o último elemento de cada coluna

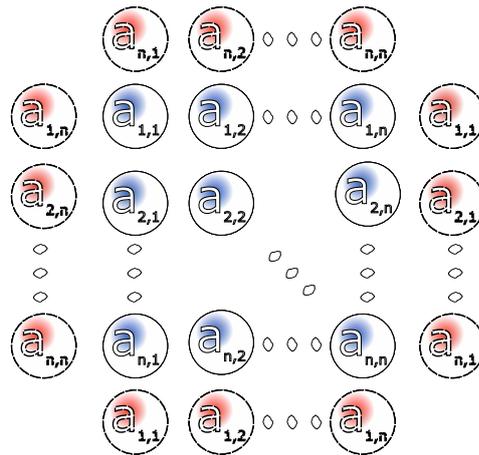


Figura 1.4: Representação esquemática da rede quadrada do modelo de Ising. Os elementos com linhas contínuas são pertencentes a rede e os elementos com linhas tracejadas são devido a condição periódica de contorno.

ao primeiro elemento e o último elemento de cada linha ao primeiro, gerando assim uma rede “infinita” [18], veja na Fig. 1.4.

Também podemos expressar a condição periódica de contorno de forma matemática por

$$\begin{cases} a_{n+1,j} = a_{1,j} \\ a_{i,n+1} = a_{i,1}, \end{cases} \quad (1.13)$$

sendo $a_{i,j}$ um sítio da rede na posição (i, j) em uma rede tendo dimensão n por n .

Retomando o modelo proposto por Ising, temos uma energia de interação entre os dois spins primeiros vizinhos que é $-J$ quando os spins se encontram paralelos ($\uparrow\uparrow; \downarrow\downarrow$), e $+J$ para o caso dos spins estarem antiparalelos ($\uparrow\downarrow; \downarrow\uparrow$). A Hamiltoniana que descreve este modelo sem a presença de um campo magnético externo é:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad (1.14)$$

onde $\sigma_{i(j)} = \pm 1$ representa os spins “para cima” ou “para baixo”, e J é a energia de interação entre os spins primeiros vizinhos.

1.4 Simulação de Monte Carlo do Modelo de Ising

Para exemplificar melhor a aplicação das simulações de MC, vamos introduzir rapidamente os procedimentos para a simulação no modelo de Ising.

Vamos simular o modelo de Ising utilizando uma rede quadrada com diferentes tamanhos $L = 8, 16, 32, 64$ e 128 . Essas redes foram constituídas de sítios, cada um é ocupado por uma partícula de spin $1/2$ com o estados “para cima” com valor $+1$, ou “para baixo” com valor -1 . Utilizamos condições de contorno periódicas. O estado inicial de cada spin da rede foi gerado aleatoriamente e foram feitas atualizações através do algoritmo de Metropolis. Geralmente descartamos $2,5 \times 10^4$ MCs, para atingir a termalização, para qualquer tamanho de rede.

A unidade de tempo MC equivale a uma realização de L^2 sorteios na rede onde todos os spins têm a mesma probabilidade de serem sorteados e, em cada sorteio, tentamos mudar o estado do spin.

Podemos ver na Fig. 1.5 o tempo (em MCs) que cada tamanho de rede demora para alcançar o equilíbrio térmico. A figura também mostra a magnetização total por sítio m em função do tempo (MCs). No início da simulações tem-se uma flutuação nos valores da magnetização até que em um determinado valor de MCs, o sistema oscila em torno de um valor médio, ou seja, o sistema atingiu o equilíbrio termodinâmico. Note que quanto maior for o tamanho do sistema menor é a variação em torno do ponto médio. Somente após atingir o equilíbrio termodinâmico que podemos estimar as médias das quantidades termodinâmicas de interesse (magnetização m , susceptibilidade χ , calor específico c , etc).

Neste trabalho sempre utilizamos as constantes k_B e $|J|$ sendo iguais a 1, e a temperatura está em unidades de $k_B/|J|$, a anisotropia D esta em unidades de $1/|J|$.

Foram calculados a magnetização por sítio m ,

$$m = \frac{\langle M \rangle}{L^2} = \frac{1}{L^2} \left\langle \left| \sum_i^{L^2} \sigma_i \right| \right\rangle, \quad (1.15)$$

a energia por sítio e ,

$$e = \frac{\langle e \rangle}{L^2} = \frac{1}{L^2} \left\langle \sum_i^{L^2} \varepsilon_i \right\rangle, \quad (1.16)$$

onde ε_i é a energia no sítio i , o calor específico c (mais detalhes no apêndice A),

$$c = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B T^2 L^2}, \quad (1.17)$$

susceptibilidade magnética,

$$\chi = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{k_B T^2 L^2} \quad (1.18)$$

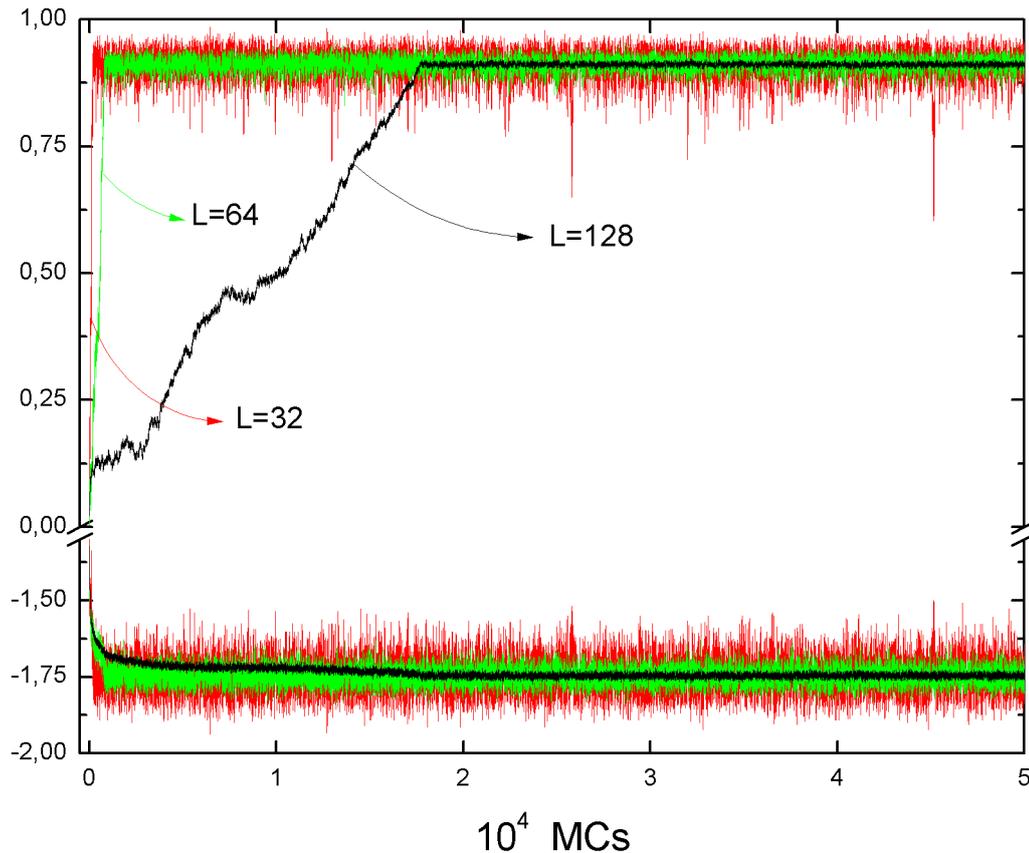


Figura 1.5: Magnetização total m e energia e por sítio em função dos MCs para três tamanhos de rede L , como mostrado na figura. O sistema é simulado para uma temperatura fixa $T = 2,0$.

e o cumulante de Binder de quarta ordem U_L [27] (ou quarto momento da magnetização),

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2}. \quad (1.19)$$

o cruzamento entre as curvas do cumulante de Binder para diferentes tamanhos de rede nos dá a temperatura crítica para uma transição de segunda ordem.

Na Fig. 1.6(a) pode-se notar o comportamento da magnetização m em função da temperatura T para vários tamanhos de rede L . Podemos observar que as magnetizações tendem a zero quando a temperatura cresce, o que indica uma transição de fase.

Na Fig. 1.6(b) temos o comportamento energia e em função da temperatura T para vários tamanhos da rede L . Tanto a curva da magnetização, quanto a da energia não apresentam uma descontinuidade explícita, isso indica que pode haver uma transição de fase de segunda ordem.

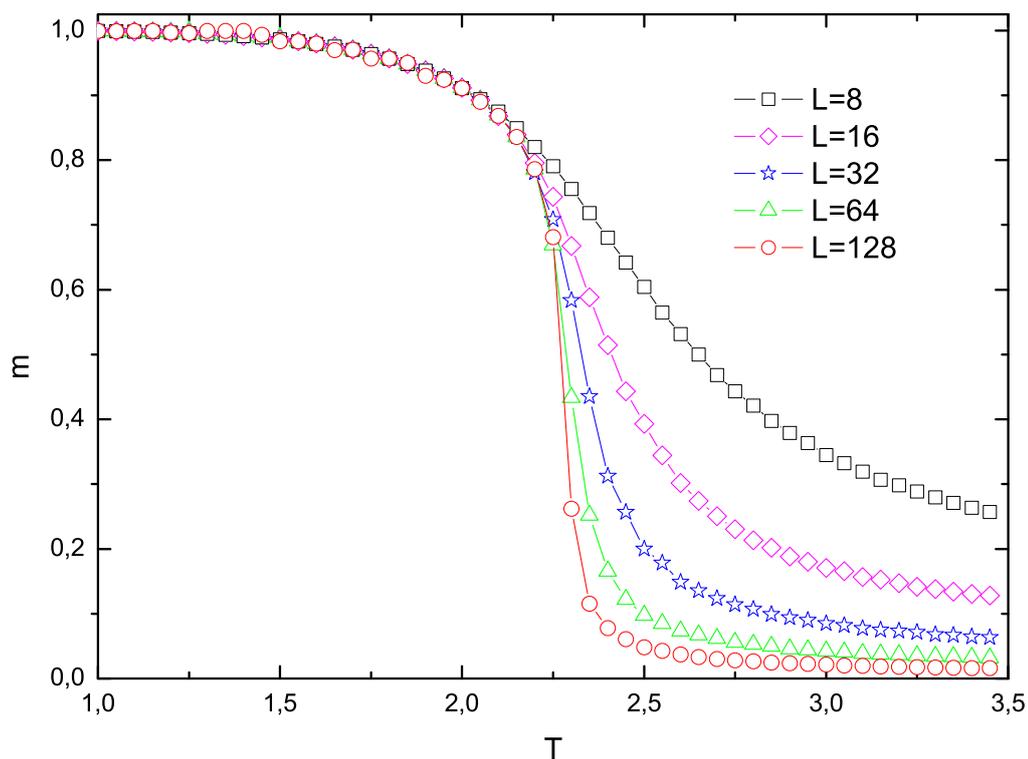
Obtemos também curvas do cumulante de Binder de quarta ordem U_L para vários

tamanhos de rede, que se cruzem em um único ponto, que é o ponto crítico, cujo valor estimado é $T_c = 2,266 \pm 0,014^3$ (veja detalhe da Fig. 1.7). O valor exato da literatura é $T_c = \frac{2}{\ln(1+\sqrt{2})} \approx 2,269$ [18].

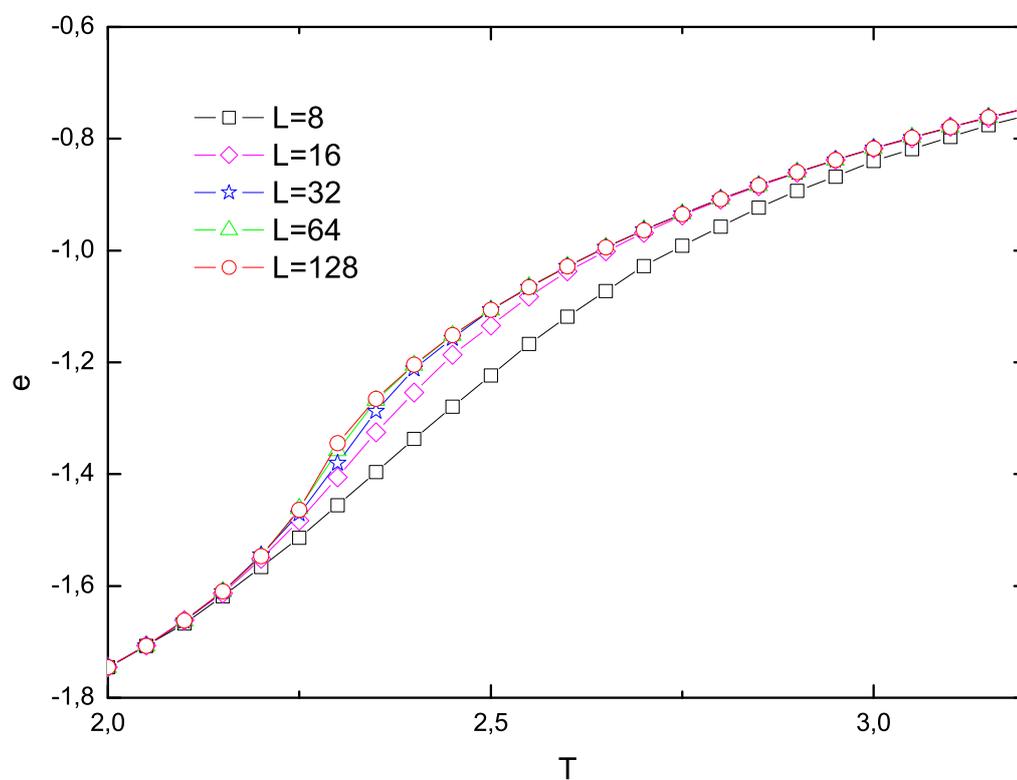
Na Fig. 1.8(b) podemos observar o comportamento do calor específico c e susceptibilidade χ , que apresentam um pico na temperatura crítica. Note que quanto maior for o tamanho da rede L mais o pico se aproxima da temperatura crítica. O aumento do número de MCs pouco altera a distribuição das curvas [22], porem quanto maior o número de MCs melhor será a precisão do resultado.

A temperatura crítica pode ser ainda estimada através dos picos da susceptibilidade χ ou/e do calor específico c , conforme mostrado na Fig. 1.8(b). Pode-se ver que quanto maior for o tamanho da rede mais preciso fica o ponto de máximo, todavia quanto maior a rede mais tempo é exigido na simulação (devido a termalização, veja Fig. 1.5), por este motivo é que não utilizamos sistemas com redes muito grandes. Porem uma rede pequena tem imprecisão quanto a determinação o ponto critico. Posteriormente será visto que a maioria das simulações será sobre uma rede de tamanho $L = 48$ no capítulo 2 e $L = 60$ no capítulo 3.

³O erro foi determinado com o menor e maior ponto onde estimamos ser a temperatura crítica.



(a)



(b)

Figura 1.6: (a) Magnetização m e (b) energia e por sítio em função da temperatura T e para diferentes tamanhos de rede L , como mostrado na figura.

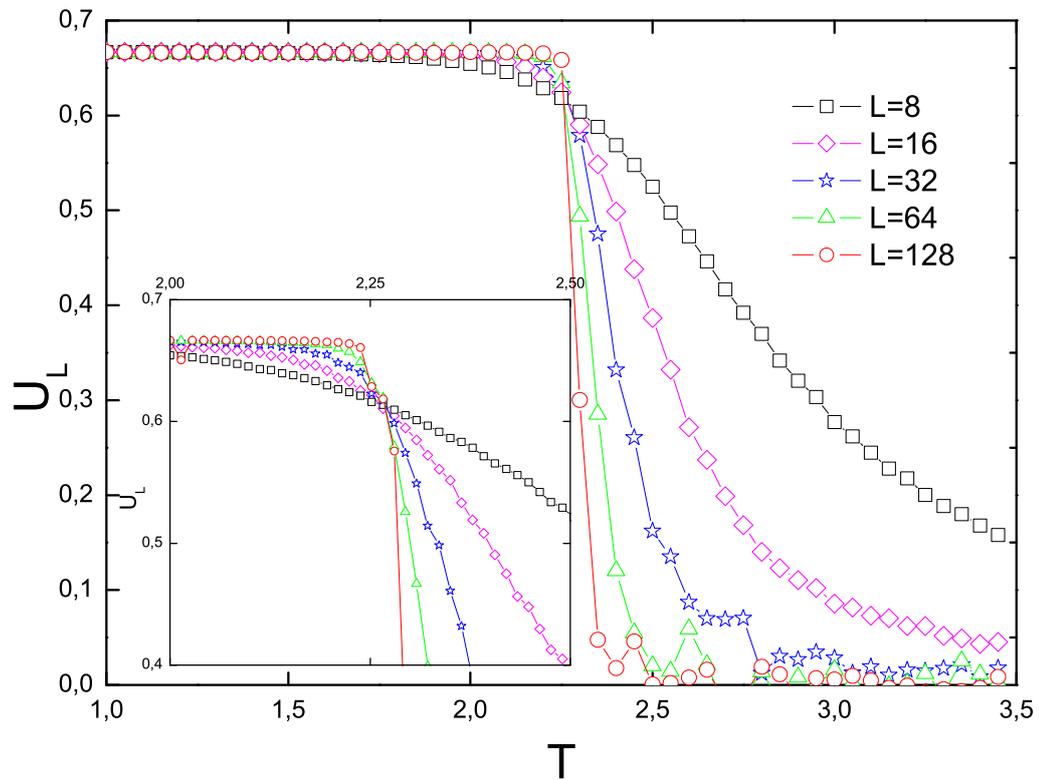


Figura 1.7: Cumulante de Binder de quarta ordem U_L versus temperatura T para diferentes tamanhos de rede L , como mostrado na figura.

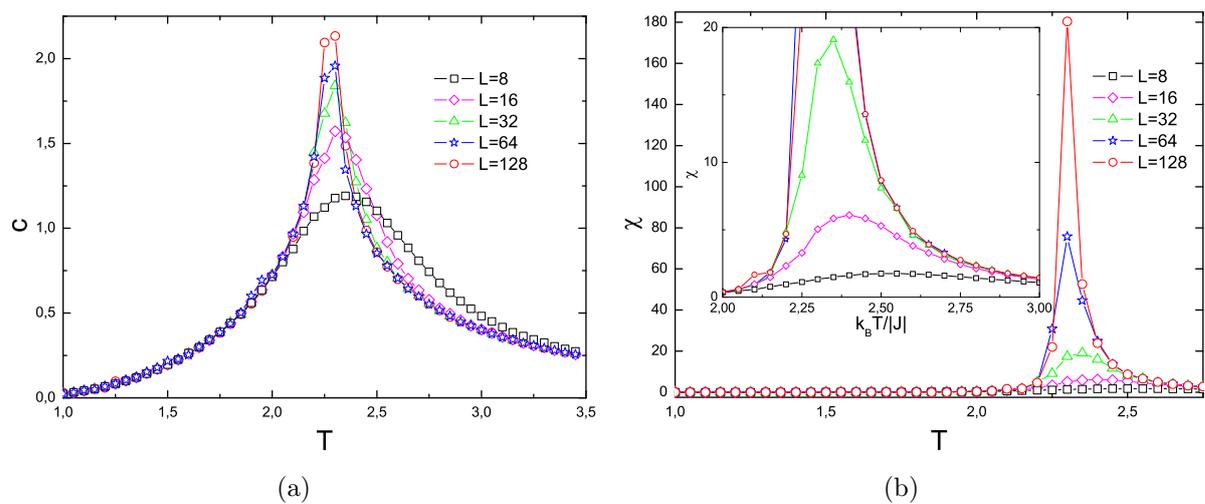


Figura 1.8: (a) Calor específico c e (b) susceptibilidade χ em função da temperatura T para diferentes tamanhos de rede L , como mostrado na figura. Em (b) temos uma ampliação para ver as curvas com L menores.

Modelo de Ising Ferrimagnético com Anisotropias Uniformes

Neste capítulo vamos utilizar simulações de MC, para estudar o modelo de Ising ferrimagnético de spin misto com spin-1/2 e spin-1. Aqui temos uma rede triangular e uma anisotropia uniforme atuando na sub-rede C .

A anisotropia que atua em cada spin da sub-rede C é responsável por aumentar ou diminuir os efeitos da magnetização dos spins em cada sítio.

Como neste trabalho as simulações exigem grande esforço computacional, foi utilizado o Laboratório de Matemática Aplicada do Departamento de Matemática (LAMAP - UFMT) cujo laboratório está sob coordenação do prof. Dr. André Krindges, para poder realizar as simulações.

2.1 Modelo

O modelo estudado aqui nesta dissertação consiste em uma rede composta por três sub-redes interpenetrantes A , B e C . Cada sítio das sub-redes é ocupado por átomos magnéticos com spins $\sigma_{A(B)} = 1/2$ (estados $\mp 1/2$) nas sub-redes A e B . Já na sub-rede C os spins são $S_C = 1$ (estados $\pm 1; 0$), como esquematizado na Fig. 2.1. Como o sistema é ferrimagnético a interação de troca é negativa $J < 0$. Na sub-rede C existe uma anisotropia uniforme D . A Hamiltoniana que descreve o sistema é:

$$\mathcal{H} = -J \left(\sum_{i \in A, j \in B} \sigma_i \sigma_j + \sum_{i \in A, k \in C} \sigma_i S_k + \sum_{j \in B, k \in C} \sigma_j S_k \right) - D \sum_{k \in C} S_k^2, \quad (2.1)$$

onde os termos que multiplicam J , representam a interação entre os pares dos primeiros vizinhos, como mostrado na Fig. 2.1. Podemos notar que cada spin tem 6 primeiros vizinhos. O termo com D na Eq. (2.1) representa a anisotropia uniforme aplicada em todas os spins da sub-rede C .

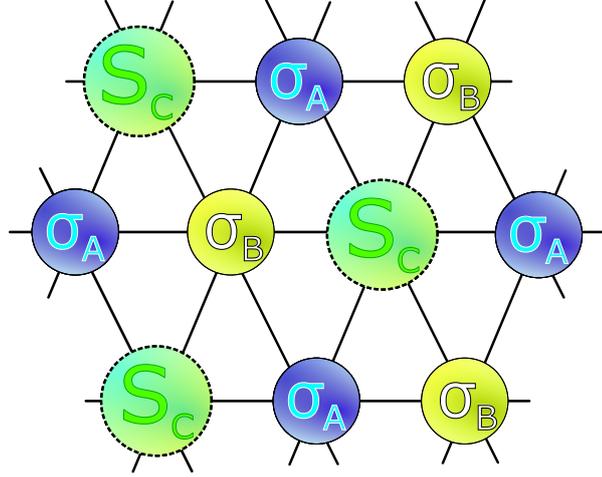


Figura 2.1: Representação esquemática de uma rede triangular mista, composta pelas sub-redes A (σ_A), B (σ_B) e C (S_C) com spins $1/2$, $1/2$ e 1 , respectivamente. Os círculos tracejados indicam onde há presença da anisotropia D .

2.2 Estado Fundamental

Agora vamos estudar o estado fundamental do sistema (para $T = 0$). Para isso, vamos analisar uma célula unitária triangular constituída por σ_A , σ_B , S_C , e considerar todos os estados possíveis das variáveis. Podemos obter as fases e expressões para as energias reduzidas por sítio $e/|J|$ [8].

Como $S = (\sigma_A, \sigma_B, S_C) = (1/2, 1/2, 1)$ temos duas¹ situações possíveis para a sub-rede C , $S_C = 0$ ou $S_C = \pm 1$. Para o caso $S_C = 0$, como S_C não contribui para energia (Eq. (B.2)), então podemos ter os spins “para cima” na sub-rede A ($\sigma_A = +1/2$) enquanto que na sub-rede B estará “para baixo” ($\sigma_B = -1/2$), que tem a mesma energia que oposto ($\sigma_A = -1/2$ e $\sigma_B = +1/2$). Isso pode ser visto no apêndice B.2. Vamos definir esse estado como sendo o estado ordenado ferrimagnético² do tipo 1, $FR_1 : (\pm 1/2, \mp 1/2, 0)$.

¹Temos duas situações pois, os termos da sub-rede C estão elevado ao quadrado na Eq.(2.1), não 3 como se poderia pensar devido a sub-rede C possuir 3 estados.

²A escolha deste nome se deve ao fato que os spins das sub-redes possuem módulos diferentes ($|S_C| \neq |\sigma_{A(B)}|$) e são antiparalelos ($\downarrow\uparrow$).

Para o caso em que $S_C = \pm 1$, temos que os spins da sub-rede C tem grande contribuição na energia, então os spins das sub-redes A e B tendem a se opor ao sentido dos spins da sub-rede C , para minimizar a energia, as sub-redes A e B são sofrem a influência da anisotropia D . Portanto um outro estado ordenado aparece e vamos denominar como sendo o estado ordenado ferrimagnético do tipo 2, $FR_2 : (\pm 1/2, \pm 1/2, \mp 1)$ (veja apêndice B.3).

Energias associadas aos estados:

- Fase 1 - $FR_1 : (\pm 1/2, \mp 1/2, 0)$ - estado ferrimagnético com $S_C = 0$, $\sigma_A = \sigma_B = \pm 1/2$ e a energia $-\frac{1}{4}$.
- Fase 2 - $FR_2 : (\pm 1/2, \pm 1/2, \mp 1)$ - estado ferrimagnético com $S_C = \mp 1$, $\sigma_A = \sigma_B = \pm 1/2$ e a energia $-\frac{3}{4} - \frac{D}{3|J|}$.

As energias reduzidas são obtidas da Eq. (2.1) e estão mostradas na tabela 2.1. Para mais detalhes veja apêndice B.

Tabela 2.1: Configurações para o estado fundamental do sistema, com suas respectivas energias reduzidas para diferentes intervalos da anisotropia [9].

Estado	$e/ J $	$D/ J $
$FR_1 : (\pm 1/2, \mp 1/2, 0)$	$-1/4$	$(-\infty, -3/2)$
$FR_2 : (\pm 1/2, \pm 1/2, \mp 1)$	$-3/4 - D/3 J $	$(-3/2, +\infty)$

Para se ter uma idéia melhor destes dois estados podemos observar na Fig. 2.2 o comportamento das magnetizações das sub-redes A , B e C (dadas pelas Eq. (2.2)). Note que elas apresentam as magnetizações esperadas segundo a análise do estado fundamental, todavia, a figura é para uma temperatura $T = 0, 2$. Note também que na Fig. 2.9(a) depois de termalizar temos uma tendência para ir ao estado FR_1 ³ enquanto que na Fig. 2.9(b) temos o estado FR_2 ⁴.

2.3 Simulações de Monte Carlo

Para estudarmos as propriedades termodinâmicas deste modelo empregamos simulações de MC. Utilizamos redes de tamanho linear L , com os valores de $L = 24$ até $L = 120$. Como a rede é formada por triângulos o valor de L deve sempre ser múltiplo de 3. Quanto

³O estado FR_1 na Fig. 2.9(a) é $(+1/2, -1/2, 0)$.

⁴O estado FR_2 na Fig. 2.9(b) é $(+1/2, +1/2, -1)$.

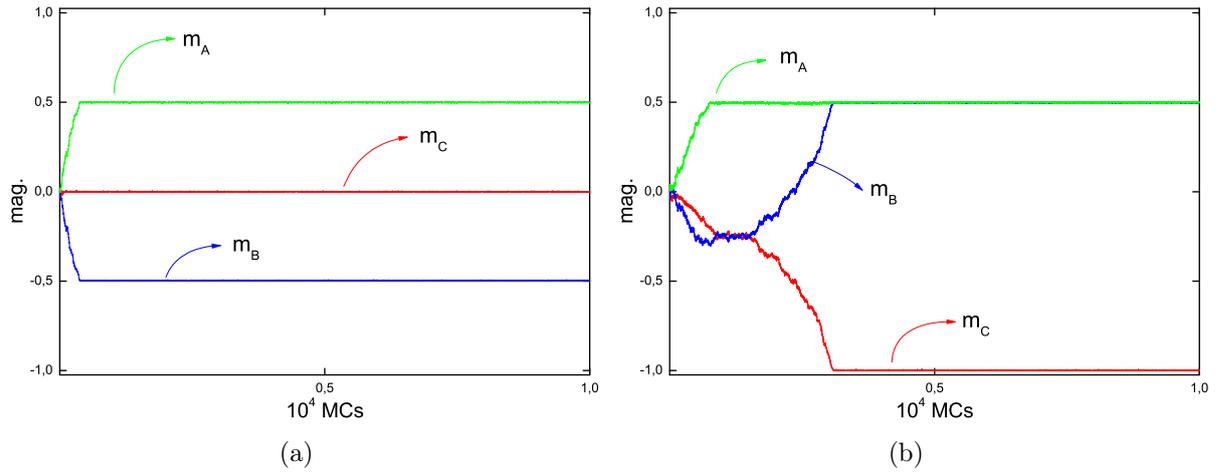


Figura 2.2: Magnetizações de sub-rede m_A , m_B e m_C em função dos MCs. (a) Para a anisotropia $D = -1,432$ e (b) para a anisotropia $D = -1,55$. As simulações foram realizadas para uma rede de tamanho $L = 48$ e para $T = 0, 2$.

à anisotropia D foram tomados valores de $D = -3,0$ até $D = 2,0$. Para determinar os valores da temperatura crítica utilizamos os picos do calor específico, na maioria das vezes as simulações ocorreram em uma rede com tamanho $L = 48$. Nosso sistema é composto de três sub-redes interpenetrantes, cada uma contendo $L^2/3$ sítios, com condições de contorno periódicas como já apresentado na seção 1.3.

Para começar a simulação, a rede é gerada distribuindo-se os estados dos spins aleatoriamente. Geralmente descartamos $3,0 \times 10^4$ MCs para o sistema termalizar e utilizamos $3,0 \times 10^5$ MCs para calcularmos as médias termodinâmicas. Estes valores são obtidos com base na análise dos gráficos da termalização para diferentes valores de temperatura T e anisotropias D . Calculamos as magnetizações das sub-redes A , B e C , por sítio,

$$m_{A(B)} = 3[\langle |M_{A(B)}| \rangle] / L^2 = 3 \left[\left\langle \left| \sum_{i \in A(B)} \sigma_i \right| \right\rangle \right] / L^2, \quad (2.2a)$$

$$m_C = 3[\langle |M_C| \rangle] / L^2 = 3 \left[\left\langle \left| \sum_{k \in C} S_k \right| \right\rangle \right] / L^2, \quad (2.2b)$$

onde $\langle \dots \rangle$ denota a média térmica e $[\dots]$ denota a média sobre as amostras do sistema. A Fig. 2.3 apresenta a evolução da magnetização alternada (Eqs. (2.3a) e (2.3b)) e da energia (Eq. (1.16)) em função do tempo (MCs).

O sistema apresenta uma magnetização total⁵ nula para temperatura zero, veja Fig.

⁵A magnetização total é Eq. B.8, devido a natureza dos estados ordenados FR_1 e FR_2 ela tende a ser nula.

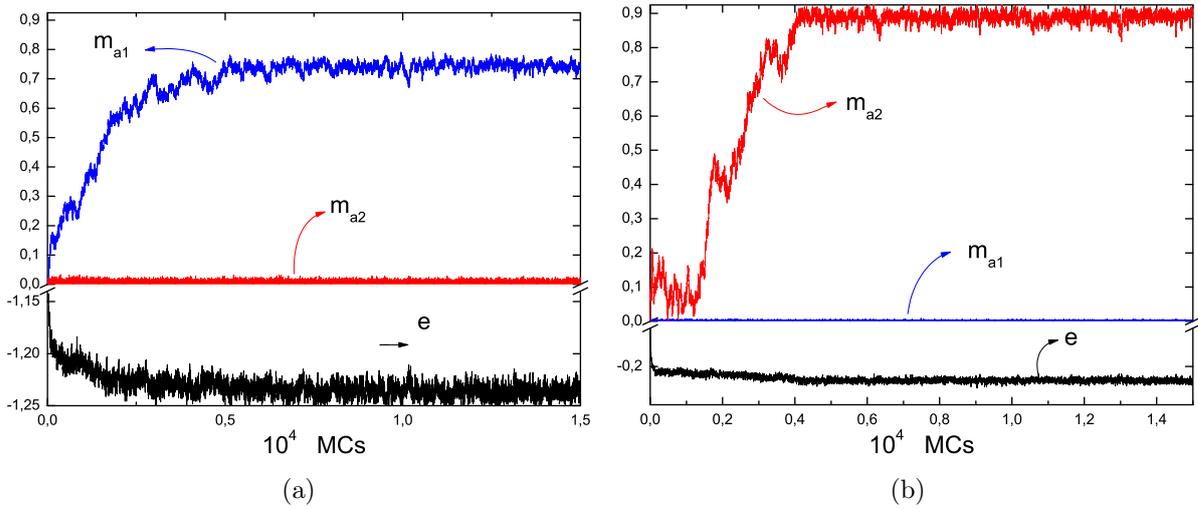


Figura 2.3: Magnetização alternada m_{a1} , m_{a2} e energia e em função dos MCs. Em (a) temos $T = 0,8$ e $D = 2,0$. (b) Para $T = 0,35$ e $D = -3,0$. As simulações foram realizadas para uma rede de tamanho $L = 120$.

2.4 e apêndice B.5, portanto é conveniente utilizarmos como parâmetro de ordem as magnetizações alternadas que podem ser escritas como,

$$m_{a1} = [\langle |M_{a1}| \rangle] / L^2 = \left[\left\langle \left| \sum_{k \in C} S_k - 2 \sum_{i \in A} \sigma_i - 2 \sum_{j \in B} \sigma_j \right| \right\rangle \right] / L^2, \quad (2.3a)$$

$$m_{a2} = 3[M_{a2}] / L^2 = 3 \left[\left\langle \left| \sum_{i \in A} \sigma_i - \sum_{j \in B} \sigma_j \right| \right\rangle \right] / L^2, \quad (2.3b)$$

note que temos duas magnetizações alternadas. Isto se deve ao fato que temos duas fases ferrimagnéticas FR_1 e FR_2 , a magnetização m_{a2} tende a ser nula até que em uma certa “região”⁶ a magnetização m_{a1} torne se nula, como pode ser visto na Fig. 2.5(b).

Quanto à energia total do sistema E , calor específico por sítio,

$$c = \frac{[\langle E^2 \rangle] - [\langle E \rangle]^2}{k_B T^2 L^2}, \quad (2.4)$$

onde k_B é a constante de Boltzmann.

O cumulante de Binder de quarta ordem⁷ [27],

$$U_{a1} = 1 - \frac{[\langle m_{a1}^4 \rangle]}{3[\langle m_{a1}^2 \rangle]^2}, \quad (2.5a)$$

⁶Esta região esta em função da magnetização, por volta de $D = -1.48$.

⁷Um cumulante de Binder para cada uma das magnetizações, U_{a1} para a magnetização alternada m_{a1} e U_{a2} para a magnetização alternada m_{a2} .

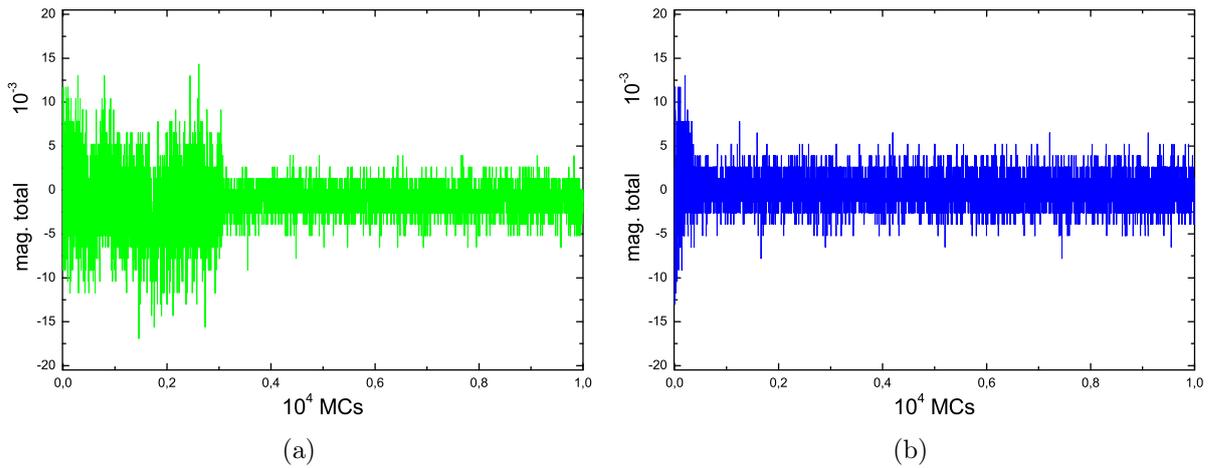


Figura 2.4: Magnetização total das sub-redes em função dos MCs. (a) Para $T = 0,8$ e $D = 2,0$. (b) Para $T = 0,35$ e $D = -3,0$. As simulações foram realizadas para uma rede de tamanho $L = 120$.

$$U_{a2} = 1 - \frac{[\langle M_{a2}^4 \rangle]}{3[\langle M_{a2}^2 \rangle]^2}. \quad (2.5b)$$

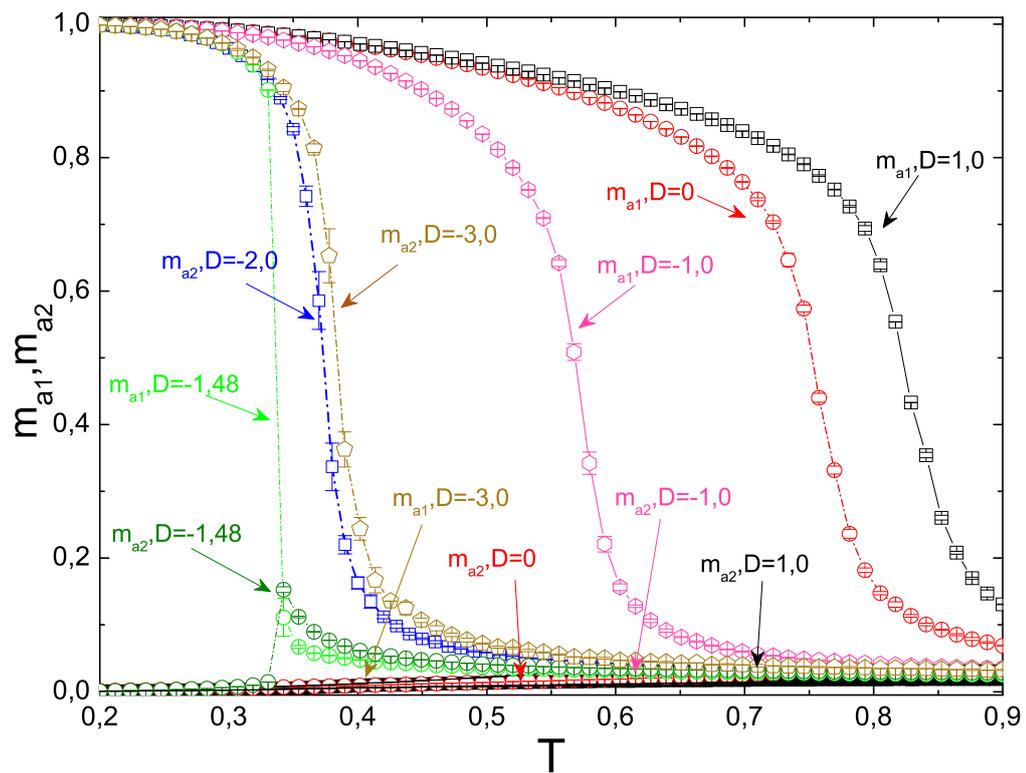
O cumulante de quarta ordem da energia,

$$V = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle}{3\langle E^2 \rangle^2}. \quad (2.6)$$

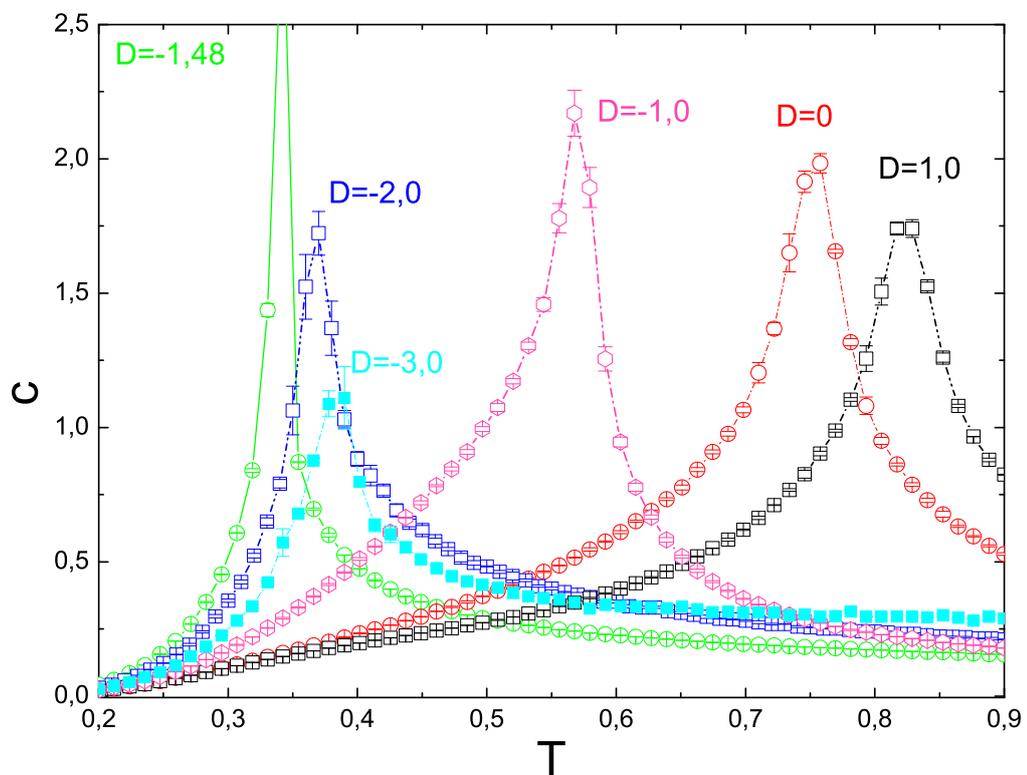
Utilizamos as quantidades acima para a determinação da transição de fase, bem como para a determinação de sua natureza. Por exemplo as temperaturas críticas podem ser obtidas pela localização dos picos das curvas do calor específico. Também é possível a obtenção do ponto crítico com maior precisão, utilizando a intersecção das curvas do cumulante de Binder de quarta ordem para diferentes tamanhos da rede L , como mostrado nas Figs. 2.7(a) e 2.7(b). Neste trabalho utilizamos os picos do calor específico, todavia, para algumas anisotropias utilizamos o cumulante de Binder tendo como função verificar se os resultados do calor específico estão próximos aos do cumulantes. Com isso poderemos ver o comportamento de transição de fase para diferentes valores da anisotropia uniforme.

2.4 Resultados e Discussões

Na Fig. 2.5(a) as magnetizações alternadas m_{a1} e m_{a2} (Eq. (2.3)) são apresentadas e obtidas a partir de nossas simulações. Com isso podemos verificar que as magnetizações



(a)



(b)

Figura 2.5: (a) Magnetizações alternadas por spin m_{a1} e m_{a2} e (b) calor específico c em função da temperatura T , e para diferentes valores de D como mostrado na figura. As simulações foram realizadas para uma rede de tamanho $L = 48$.

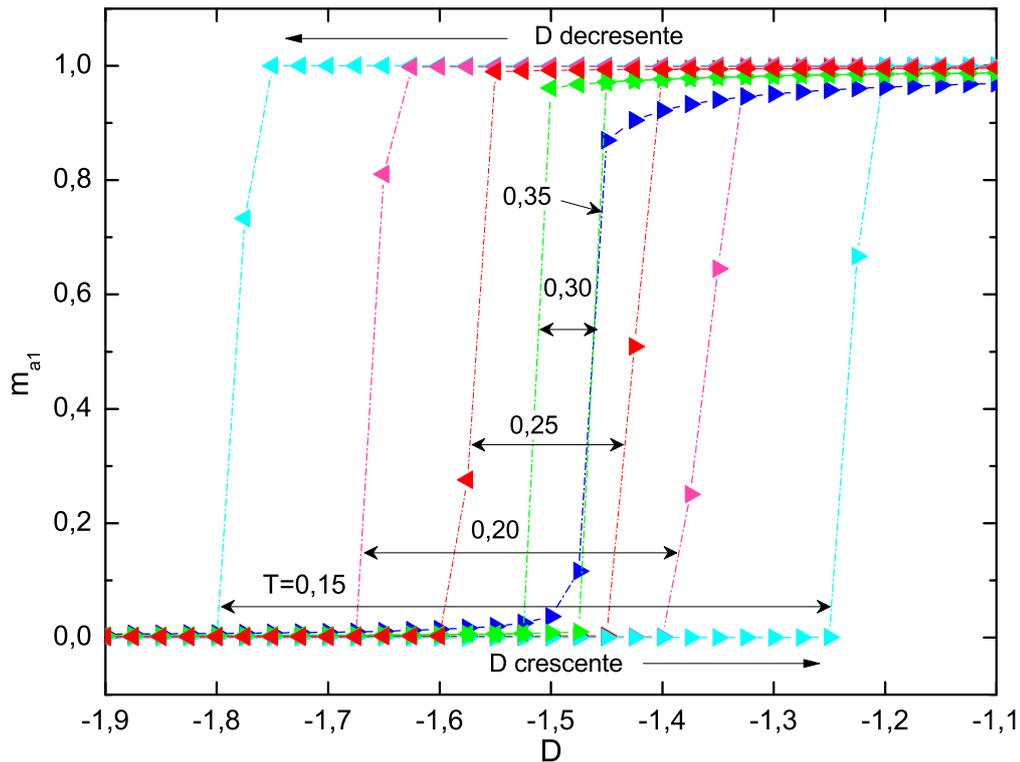


Figura 2.6: Magnetização alternada m_{a1} em função da anisotropia D crescente (\blacktriangleright) e decrescente (\blacktriangleleft) para diferentes temperaturas T , como mostrado na figura. As simulações foram realizadas para um tamanho de rede $L = 48$. As curvas se assemelham a curvas de histerese, portanto as setas de dupla ponta indicam a largura do ciclo da histerese. As barras de erros são menores que os símbolos.

variam continuamente com a temperatura indicando⁸ uma transição de fase de segunda ordem. Podemos observar que as duas magnetizações apresentam um comportamento interessante, pois para os casos em que a anisotropia é $D = 1,0, 0, -1,0, -1,48$ a magnetização alterna da m_{a1} , é contínua (tem aparência similar ao da Fig. 1.6(a)) enquanto que a magnetização alternada m_{a2} , é nula, exceto para o caso de $D = -1,48$, neste caso há um pequeno pico. Já para o $D = -2,0; -3,0$ temos que agora m_{a1} é nula enquanto m_{a2} é contínua. Na Fig. 2.5(b) temos os pontos do calor específico c (Eq. (2.4)) utilizados para determinação das temperaturas críticas. Nesta figura temos uma descontinuidade no calor específico (segunda derivada), para os diferentes valores da anisotropia D . Quanto mais próximo de $D = -1,47$ mais alto o pico do calor específico e para valores menores o pico vai diminuindo, como em $D = -2,0$ e $D = -3,0$. Nestas simulações adotamos um tamanho de rede $L = 48$.

Podemos observar na Fig. 2.8 que temos um mínimo da linha cheia, então investigamos

⁸Assim como o modelo de Ising analisado na seção 1.4, em que as curvas da magnetização (Fig. 1.6(a)) também são contínuas e são de segunda ordem.

a existência de uma transição de fase próxima à $T_c \simeq 0.35$. A linha esperada para a transição é vertical em relação a abscissa (eixo D), é conveniente fixar a temperatura e plotar o parâmetro de ordem magnetização alternada $1 m_{a1}$ como função crescente e decrescendo da anisotropia D . Apresentamos na Fig. 2.6 a magnetização, ela tem um caráter descontínuo e apresenta curvas similares á “ciclos de histerese”, caracterizando uma transição de fase de primeira ordem⁹.

Na Fig. 2.8 apresentamos o digrama de fases temperatura crítica T_c versus anisotropia D . A linha contínua representa as transições de fase de segunda ordem e foi determinada a partir dos picos do calor específico c (como por exemplo da Fig. 2.5(a)). Para verificar os nossos resultados do calor específico, alguns pontos (quadrado - \square) foram também calculados com o método do cumulante de Binder de quarta ordem, eles podem ser vistos na Fig. 2.7, onde comparamos os métodos do cumulante de Binder de quarta ordem com os valores obtidos pelo calor específico c , tabela 2.2.

Tabela 2.2: Comparação entre os métodos para determinação da temperatura crítica, entre o cumulante de Binder de quarta ordem e o calor específico.

		Temperatura		Erro	
		Calor específico	Binder	Calor específico	Binder
Aniso-	0	0,7576	0,7487	$\pm 0,004$	$\pm 0,001$
tropia	-2,0	0,3661	0,3663	$\pm 0,004$	$\pm 0,001$

Temos uma transição de fase de primeira ordem no diagrama de fases Fig. 2.8, entre os estados ferrimagnético tipo 1 $FR_1 : \pm 1/2, \pm 1/2, 0$ e tipo 2 $FR_2 : \pm 1/2, \pm 1/2, \pm 1$, que começa no ponto da anisotropia crítica D_C (com $T = 0$) e que segue em torno da linha pontilhada, obtida a partir das curvas de histerese presentes na Fig. 2.6, esta linha continua até o ponto crítico final (\bullet) da linha de primeira ordem.

É importante notar que não conseguimos mapear a linha de primeira ordem o suficiente para afirmar que ela se encontra com a linha de segunda ordem, então definimos o ponto crítico final (\bullet) como sendo o ponto final da linha de primeira ordem até onde conseguimos mapear. As coordenadas do ponto crítico final são dadas por ($D = -1,487, T = 0,33$) apresentadas na Fig. 2.9(a), onde podemos ver que com a evolução do tempo (em MCs) temos uma mudança do estado ferrimagnético tipo 1 (nas regiões 1 e 2) para tipo 2 (na

⁹Descontinuidade da primeira derivada da energia livre (magnetização - Eq.(1.4)), segundo a classificação de Paul Ehrenfest [17] é uma transição de fase de primeira ordem.

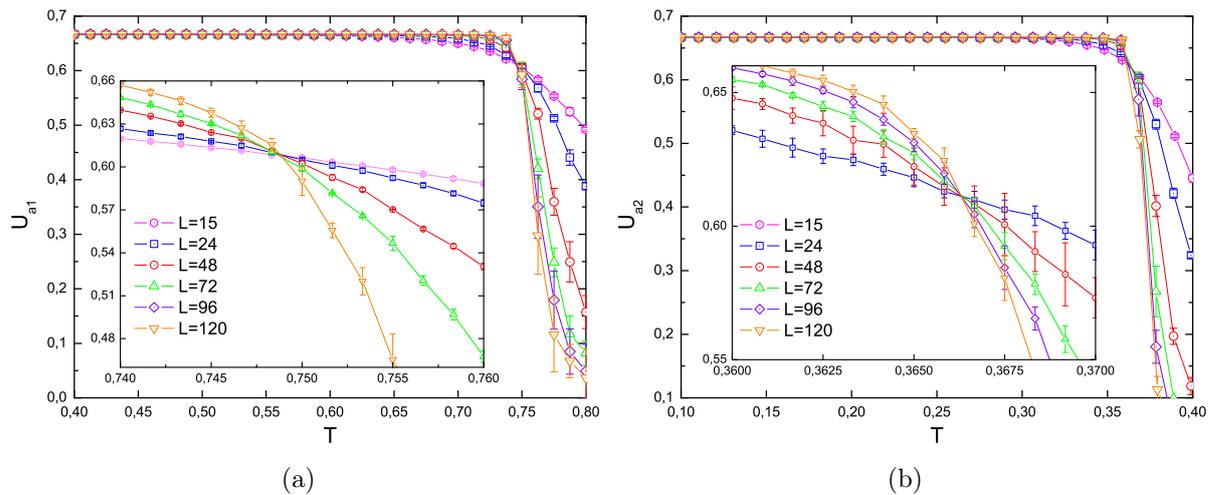


Figura 2.7: Cumulante de Binder de quarta ordem das magnetizações alternadas versus temperatura T . (a) U_{a1} para $D = 0$ e (b) U_{a2} para $D = -2, 0$.

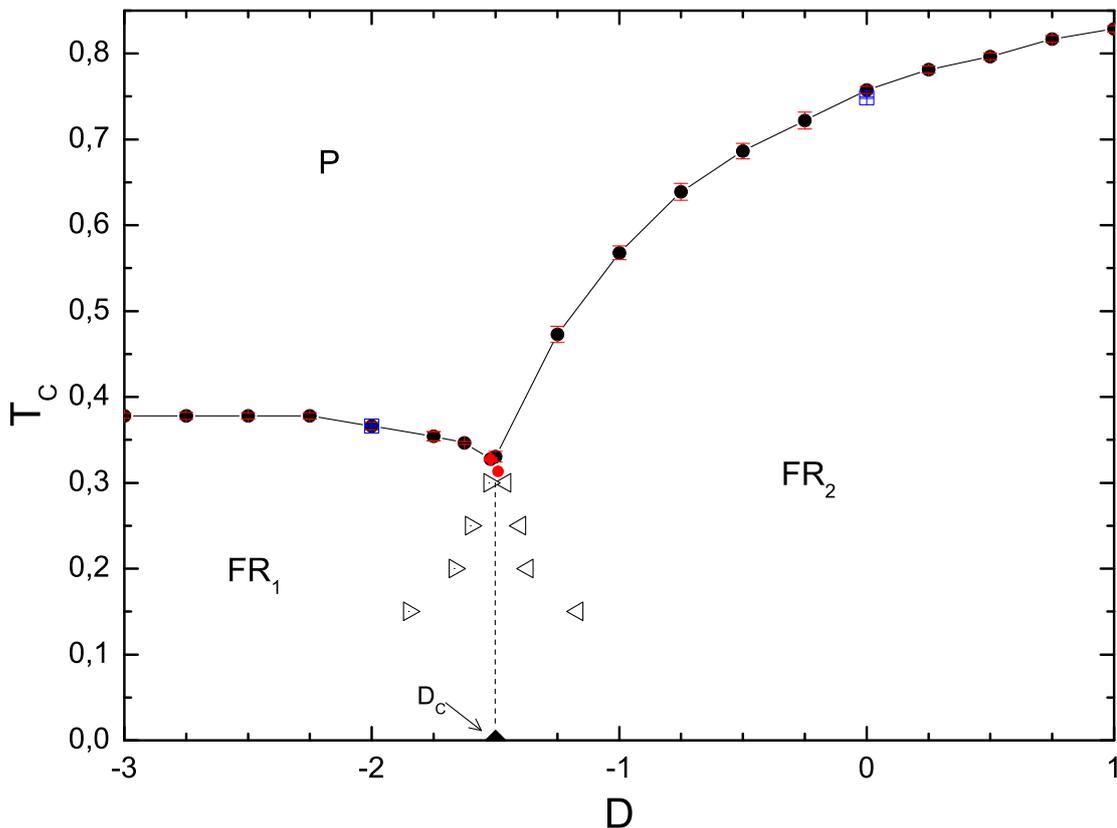


Figura 2.8: Diagrama de fases temperatura crítica T_c versus anisotropia D . Na linha cheia temos uma transição de fase de segunda ordem, com o ponto com a menor temperatura sendo o ponto de coexistência de estados (◆). Os quadrados (□) são pontos calculados pelo método do cumulante de Binder. A linha pontilhada é uma transição de fase de primeira ordem que se inicia no ponto de anisotropia crítica D_c (para $T_c = 0$) e vai até o ponto crítico final (●). Os símbolos \triangleright e \triangleleft representam as larguras das curvas de histerese. As simulações foram realizadas para um rede triangular de tamanho linear $L = 48$ e temos três fases P , FR_1 e FR_2 , sendo, paramagnética, ferrimagnética do tipo 1 e do tipo 2, respectivamente.

região 3), indicando assim que há uma coexistência das fases ordenadas FR_1 e FR_2 no ponto crítico final.

No ponto de coexistência de fases¹⁰, aqui representado pelo símbolo \diamond no diagrama de fases, podemos notar uma coexistência entre as fases FR_1 , FR_2 e P . Nós determinamos as coordenadas do ponto de coexistência como sendo $(D_t = -1,74, T_t = 0,35)$. Na Fig. 2.9(b) isso é nítido pois temos inicialmente o estado FR_2 (região 1) depois o sistema passa por regimes de P (região 2) e tenta ir para o estado FR_1 (região 3).

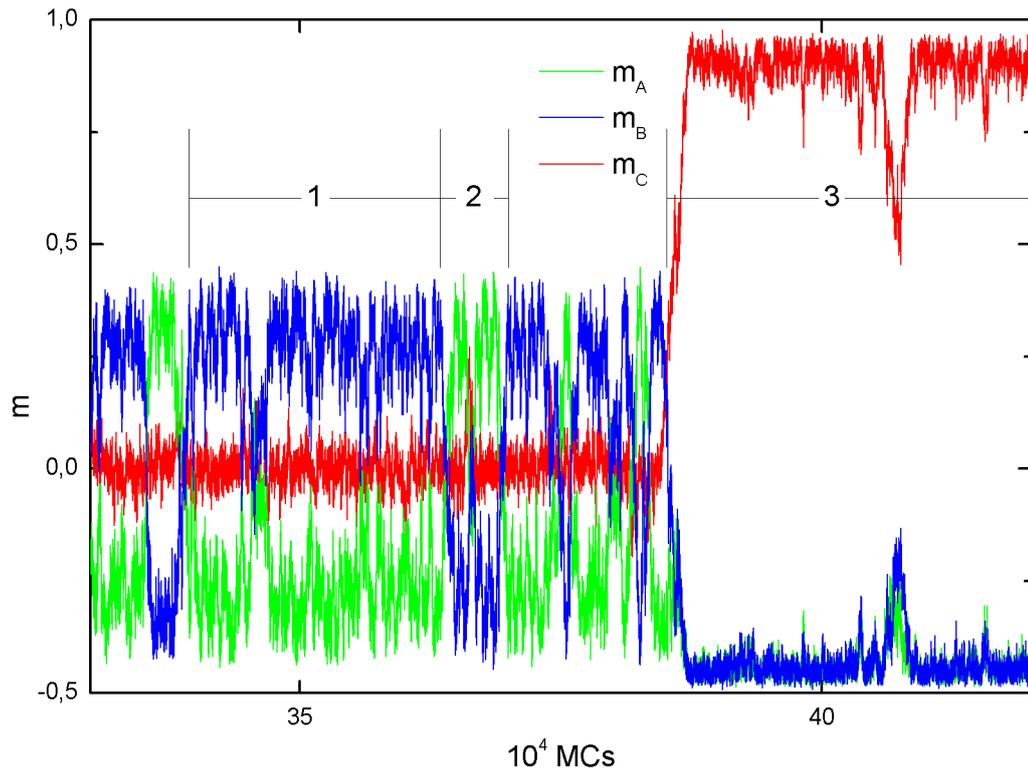
Vemos na Fig. 2.8 uma predominância da fase FR_2 na região ordenada, e que quando a temperatura aumenta o sistema converge para um estado paramagnético independente da anisotropia.

Os resultados das nossas simulações são similares aos da referência [9]. A temperatura crítica encontrada foi $T_c = 0,7488(1)$ para $D = 0$ enquanto que na referência foi $T_c = 0,7485(1)$. Outra temperatura obtida foi $T_c = 0,3663(1)$ para $D = -2$, a mesma da referência. Ambas as temperaturas são para uma rede de tamanho $L = 48$.

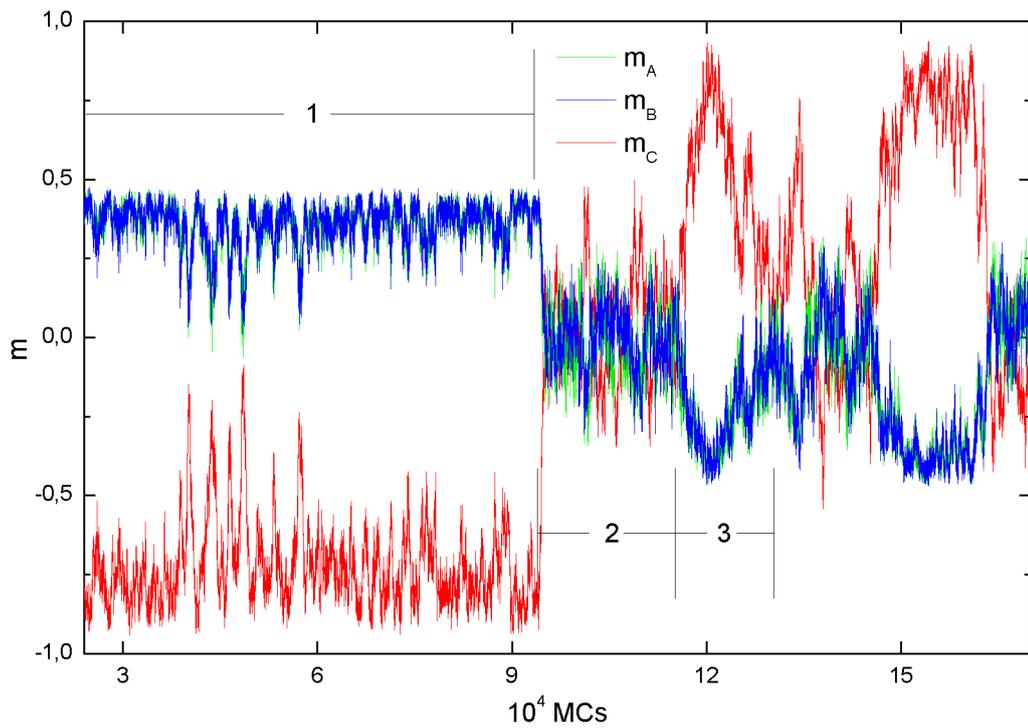
Calculamos também o mínimo do cumulante da energia V_{\min} (Eq. (2.6)) para ficar mais claro se a transição é de segunda ordem ou de primeira ordem (ver Fig. 2.10). A ordem da transição de fase pode ser estabelecida por uma análise de escala de tamanho finito (*finite-size scaling analysis*). Por exemplo, em nossas simulações nós encontramos a interceptação¹¹ da reta com o eixo vertical $V_{\min} = 0,6664(1)$, para $D = 0$ e $V_{\min} = 0,6664(6)$, para $D = -2,0$ sendo estes valores inferiores a $V^* = 2/3$ para $L \rightarrow \infty$, como esperado para transições de fase de segunda ordem.

¹⁰O ponto de coexistência de fases é o ponto de mínimo da curva de segunda ordem, pois abaixo deste ponto tem-se uma linha de coexistência de fases entre as fases ordenadas FR_1 e FR_2 .

¹¹A interceptação foi conseguida utilizando o ajuste linear.

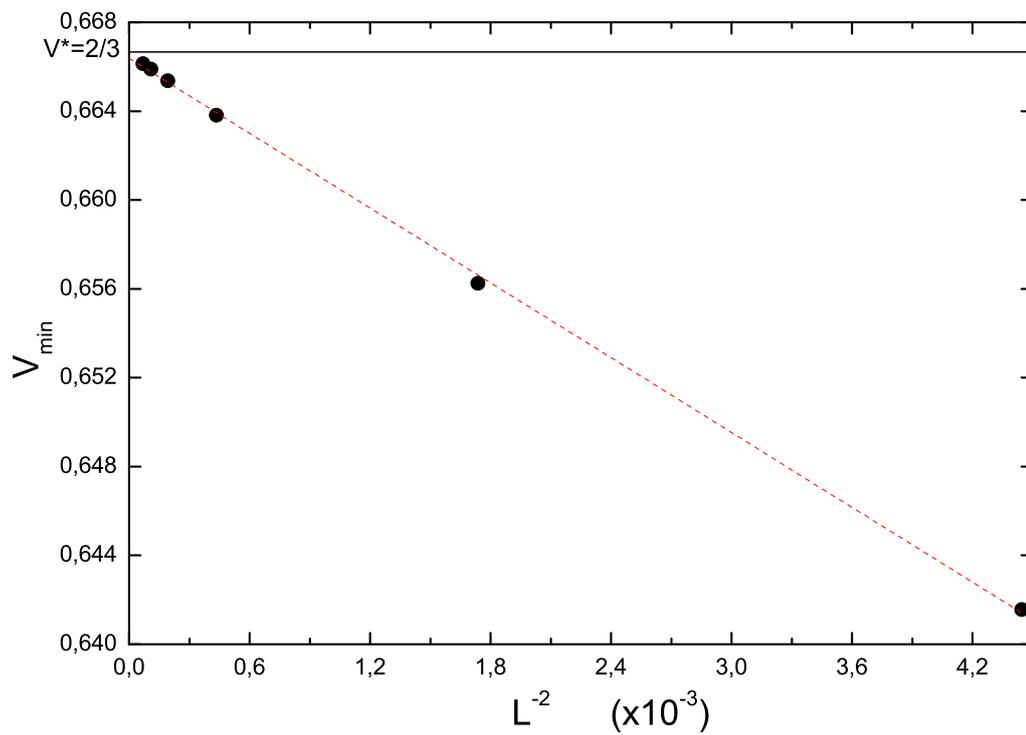


(a)

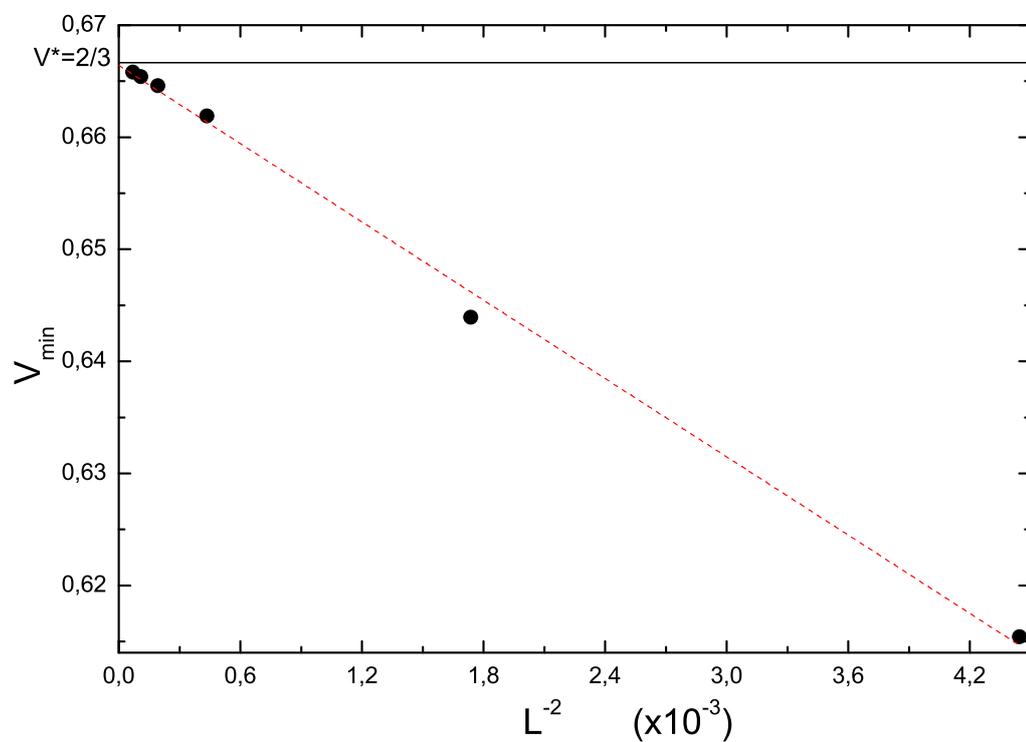


(b)

Figura 2.9: Magnetização das sub-redes A , B e C em função dos MCs. As simulações foram realizadas para uma rede com tamanho linear $L = 48$. Em (a) $T = 0,33$, $D = -1,487$, e as regiões 1, 2 e 3 são os estados $FR_1(-1/2, +1/2, 0)$, $FR_1(+1/2, -1/2, 0)$ e $FR_2(-1/2, -1/2, +1)$, respectivamente. Em (b) $T = 0,35$, $D = -1,47$, e as regiões 1, 2 e 3 são os estados $FR_2(+1/2, +1/2, -1)$, P e $FR_2(-1/2, -1/2, +1)$, respectivamente.



(a)



(b)

Figura 2.10: Cumulante da energia mínimo V_{\min} versus L^{-2} . Em (a) a anisotropia é $D = 0$ e em (b) é $D = -2, 0$. A linha cheia corresponde ao valor $V^* = 2/3$ e a linha tracejada ao ajuste linear dos dados.

Modelo de Ising Ferrimagnético com Anisotropias Aleatórias

Neste capítulo estudamos o modelo de Ising ferrimagnético de spins mistos com spin-1 e spin-1/2 na presença de anisotropias aleatórias em uma rede triangular.

Em nosso modelo, além dos efeitos da intensidade da anisotropia temos uma diluição dessa anisotropia na sub-rede C , ou seja, apenas alguns spins desta sub-rede sofrem a influência da anisotropia, enquanto que uma percentagem restante é livre da ação da anisotropia. Em outras palavras, na sub-rede C existem valores de anisotropia $D = 0$ ou $D = D_0$ distribuídos aleatoriamente. Esta aleatoriedade pode ser usada para modelar situações em que um material apresenta impurezas em sua constituição, imperfeições estruturais, etc.

Assim como no capítulo anterior as simulações também foram realizadas no LAMAP.

3.1 O Modelo

O modelo de Ising ferrimagnético de spins mistos com spin-1 e spin-1/2, na presença de anisotropias aleatórias, em uma rede triangular é descrito pela seguinte Hamiltoniana:

$$\mathcal{H} = -J \left(\sum_{i \in A, j \in B} \sigma_i \sigma_j + \sum_{i \in A, k \in C} \sigma_i S_k + \sum_{j \in B, k \in C} \sigma_j S_k \right) - \sum_{k \in C} D_k S_k^2, \quad (3.1)$$

onde J é a magnitude da interação entre os spins primeiros vizinhos, as três parcelas que multiplicam J são somas sobre os primeiros vizinhos de um sítio qualquer que interage com as outras sub-redes, $\sigma_{(i)j}$ são sítios com spin-1/2 das sub-redes A e B , enquanto S_k são spins nos sítios da sub-rede C e que possuem spin-1. D_k^C é a anisotropia aleatória que

satisfaz a seguinte distribuição de probabilidade:

$$P(D_k^C) = p\delta(D_k) + (1 - p)\delta(D_k - D_k^C), \quad (3.2)$$

onde o termo $p\delta(D_k)$ da equação acima indica que uma porcentagem p de spins na sub-rede C está livre da ação da anisotropia aleatória, enquanto que o termo $(1 - p)\delta(D_k - D_k^C)$ indica uma porcentagem $1 - p$ de spins na sub-rede C sobre a influência da anisotropia aleatória.

No capítulo 2 tratamos o problema com anisotropia constante em toda a sub-rede C , isso equivale ao caso de $p = 0$. Pois temos que $1 - p = 1$, ou seja todos os spins da sub-rede C estão sobre a influência da anisotropia com módulo D .

3.2 Simulações de Monte Carlo

Para as nossas simulações utilizamos redes triangulares de tamanho $L = 24$ até $L = 120$, todavia na maioria das vezes foi utilizado $L = 60$. Esta rede é constituída de três sub-redes interpenetrantes, com cada uma dessas sub-redes com $L^2/3$ sítios, e aplicamos condições de contorno periódicas.

Os estados iniciais de cada uma das configurações foram preparados a partir da distribuição dos estados dos spins de forma “up”, em que todos estão em $(+1/2, +1/2, +1)$. A partir desta configuração, a qual será o ponto inicial da simulação, as atualizações foram realizadas pelo algoritmo de Metropolis. Isso foi utilizado para reduzir o tempo de termalização. Como pode ser visto na Fig. 3.1, a magnetização vai mais rapidamente para a termalização (Fig. 3.2(a)) do que se usássemos uma distribuição aleatória (Fig. 3.2(b)).

Para cada amostra do sistema, as anisotropias foram distribuídas aleatoriamente respeitando a distribuição de probabilidade dada pela Eq. (3.2). Para $p = 0$ temos o caso visto no capítulo anterior. Por exemplo, para uma amostra com $p = 0,2$ temos que em média, 20% dos spins da sub-rede C estão sob a influência da anisotropia D , ou seja, 80% dos spins estão livres da anisotropia, o mesmo vale pra $p = 0,4$ e assim por diante. A distribuição é aplicada aos sítios da sub-rede C com um valor de anisotropia D . Normalmente, foram utilizados 4 amostras com $0,9 \times 10^6$ MCs para os cálculos das médias termodinâmicas e $1,1 \times 10^5$ MCs foram descartados pois o sistema não tinha atingido a termalização. Para se ter uma ideia da influencia da distribuição na termalização veja as

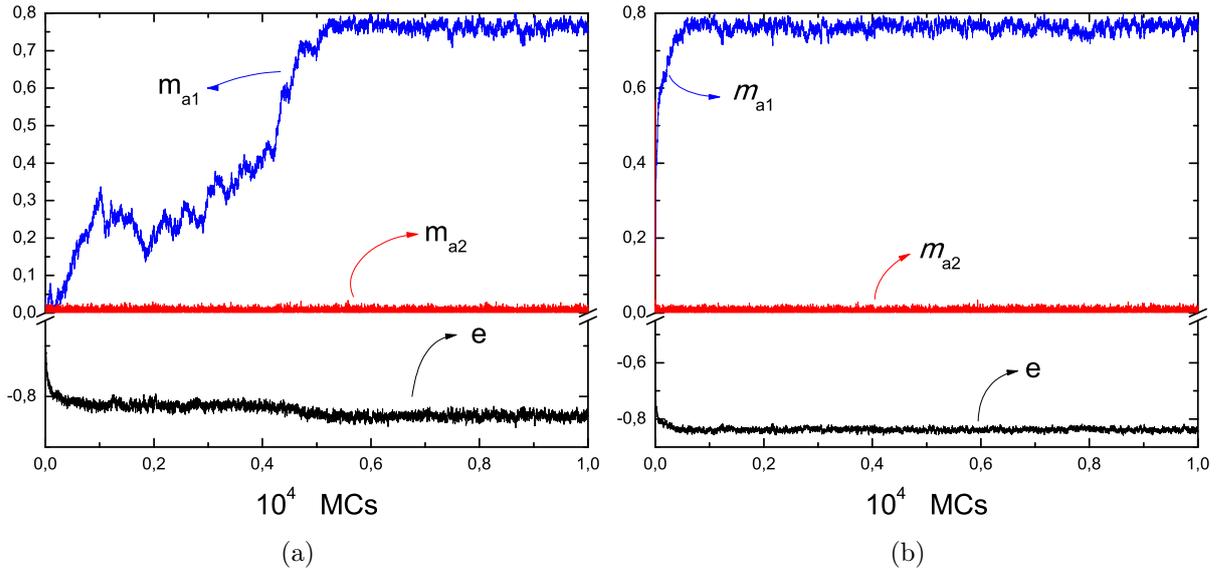


Figura 3.1: Termalização para as magnetizações alternadas m_{a1} , m_{a2} e energia e em $T = 0,75$, $p = 0,2$ e $D = 1,0$. Em (a) a distribuição dos spins é de forma aleatória e em (b) a distribuição é de forma “up”. Aqui usamos o tamanho de rede $L = 120$.

Figs. 3.1 e 3.2.

Foram calculadas as magnetizações das sub-redes A , B e C por sítio,

$$m_{A(B)} = 3[\langle |M_{A(B)}| \rangle] / L^2 = 3 \left[\left\langle \left| \sum_{i \in A(B)} \sigma_i \right| \right\rangle \right] / L^2, \quad (3.3a)$$

$$m_C = 3[\langle |M_C| \rangle] / L^2 = 3 \left[\left\langle \left| \sum_{k \in C} S_k \right| \right\rangle \right] / L^2, \quad (3.3b)$$

onde $\langle \dots \rangle$ indica a média térmica e $[\dots]$ denota a média sobre as amostras do sistema.

O parâmetro de ordem apropriado são as magnetizações alternadas, pois nosso sistema apresenta uma magnetização total nula em $T = 0$. A magnetização alternada é estimada como:

$$m_{a1} = [\langle |M_{a1}| \rangle] / L^2 = \left[\left\langle \left| \sum_{k \in C} S_k - 2 \sum_{i \in A} \sigma_i - 2 \sum_{j \in B} \sigma_j \right| \right\rangle \right] / L^2, \quad (3.4a)$$

$$m_{a2} = 3[M_{a2}] / L^2 = 3 \left[\left\langle \left| \sum_{i \in A} \sigma_i - \sum_{j \in B} \sigma_j \right| \right\rangle \right] / L^2, \quad (3.4b)$$

sendo m_{a1} e m_{a2} as magnetizações alternadas 1 e 2, respetivamente.

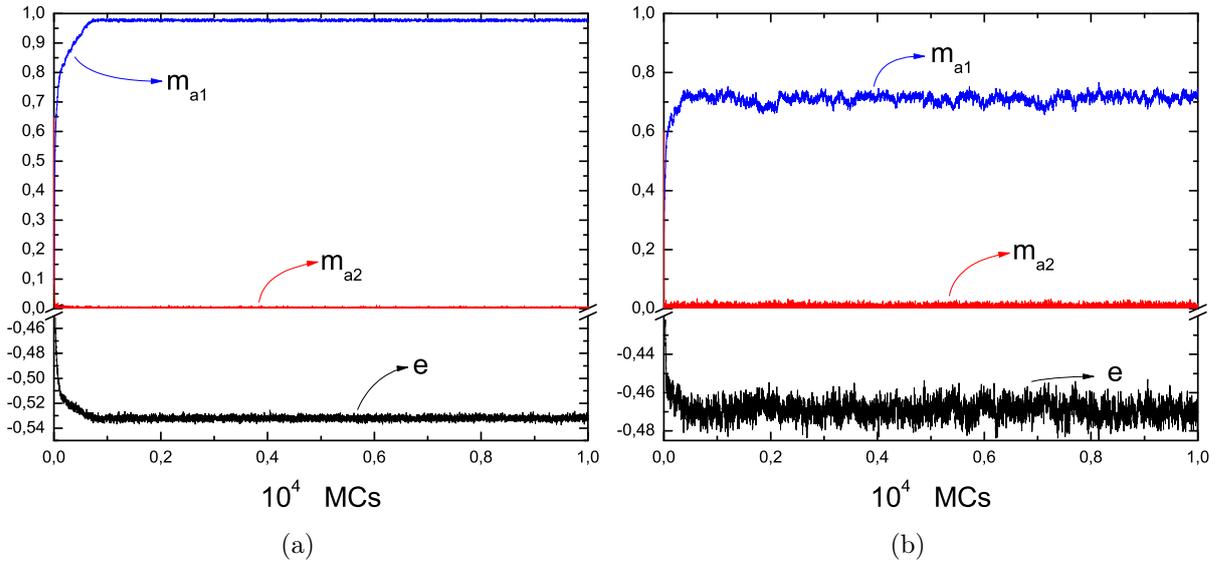


Figura 3.2: Termalização para as magnetizações alternadas m_{a1} , m_{a2} e energia e em (a) para $T = 0,35$, $p = 0,4$, $D = -1,0$ e em (b) para $T = 0,6$, $p = 0,8$, $D = -2,0$. Aqui usamos o tamanho de rede $L = 120$.

A energia total por sítio é dada por,

$$\langle E \rangle = \frac{1}{L^2 M} \sum_{i=1}^M E_i \quad (3.5)$$

sendo M o número de passos de Monte Carlo após a termalização do sistema e E_i é a energia no i -ésimo estado do sistema.

O cálculo do calor específico também foi utilizado, já que o mesmo é um fator determinante na obtenção das temperaturas críticas, dado por,

$$c = \frac{[\langle E^2 \rangle] - [\langle E \rangle]^2}{k_B T^2 L^2}, \quad (3.6)$$

sendo k_B a constante de Boltzmann, e T a temperatura do sistema.

Temos também os cumulantes de Binder de quarta ordem¹,

$$U_{a1} = 1 - \frac{[\langle M_{a1}^4 \rangle]}{3[\langle M_{a1}^2 \rangle]^2}, \quad (3.7a)$$

$$U_{a2} = 1 - \frac{[\langle M_{a2}^4 \rangle]}{3[\langle M_{a2}^2 \rangle]^2}. \quad (3.7b)$$

Utilizamos as quantidades acima pois elas são úteis na determinação das linhas de

¹Um cumulante de Binder para cada uma das magnetizações, U_{a1} para m_{a1} e U_{a2} para m_{a2} .

transições de fases bem como para a determinação de sua natureza. Por exemplo as temperaturas críticas podem ser obtidas pela localização dos picos das curvas do calor específico, também é possível a obtenção com maior precisão, pela intersecção das curvas do cumulante de Binder de quarta ordem, para diferentes tamanhos da rede L . Todavia neste trabalho utilizamos os picos do calor específico devido a necessidade precisarmos fazer mais de uma simulação para determinação de uma temperatura crítica, e também não foi utilizada as curvas da suscetibilidade magnética devido ao fato que temos duas e isso demanda mais tempo na análise das mesmas. Com isso poderemos ver o comportamento da transição de fase para diferentes valores da anisotropia D e do parâmetro p .

3.3 Resultados e Discussões

As temperaturas críticas podem ser determinadas pela intersecção das curvas do cumulante de Binder de quarta ordem para vários tamanhos de rede. Podemos também calcular a temperatura crítica de uma maneira mais rápida, pelo pico das curva do calor específico.

Podemos ver na Fig. 3.3 que ao utilizar esta metodologia devemos tomar cuidado, pois a medida que p aumenta a curva do calor específico pode deixar de ter um pico bem definido. À medida que p aumenta temos um deslocamento do pico do calor específico para a esquerda, ou seja, a uma diminuição na temperatura crítica, para uma anisotropia $D = 1, 0$.

Para $p = 1, 0$, onde não existe a influência² da anisotropia aleatória na sub-rede C , a Eq. (2.1) agora pode ser reescrita como a seguinte Hamiltoniana,

$$\mathcal{H} = -J \left(\sum_{i \in A, j \in B} \sigma_i \sigma_j + \sum_{i \in A, k \in C} \sigma_i S_k + \sum_{j \in B, k \in C} \sigma_j S_k \right), \quad (3.8)$$

onde podemos notar que a energia não será afetada pela anisotropia, isso implica que o calor específico Eq. (2.4) também não será afetado resultando num valor constante³ para $p = 1, 0$, que pode ser visto na Fig. 3.4(a).

Para $D = 0$ (Fig. 3.5(a)) em qualquer que seja o valor de p temos o mesmo resultado

²Como $p = 1, 0$, temos que: $p - 1 = 0$, ou seja a fração de sítios sob a influência da anisotropia aleatória é nula Eq. (3.2).

³Como os picos do calor específico nos dão as temperaturas críticas então como sempre temos a mesma energia, sempre teremos o mesmo valor para o pico.

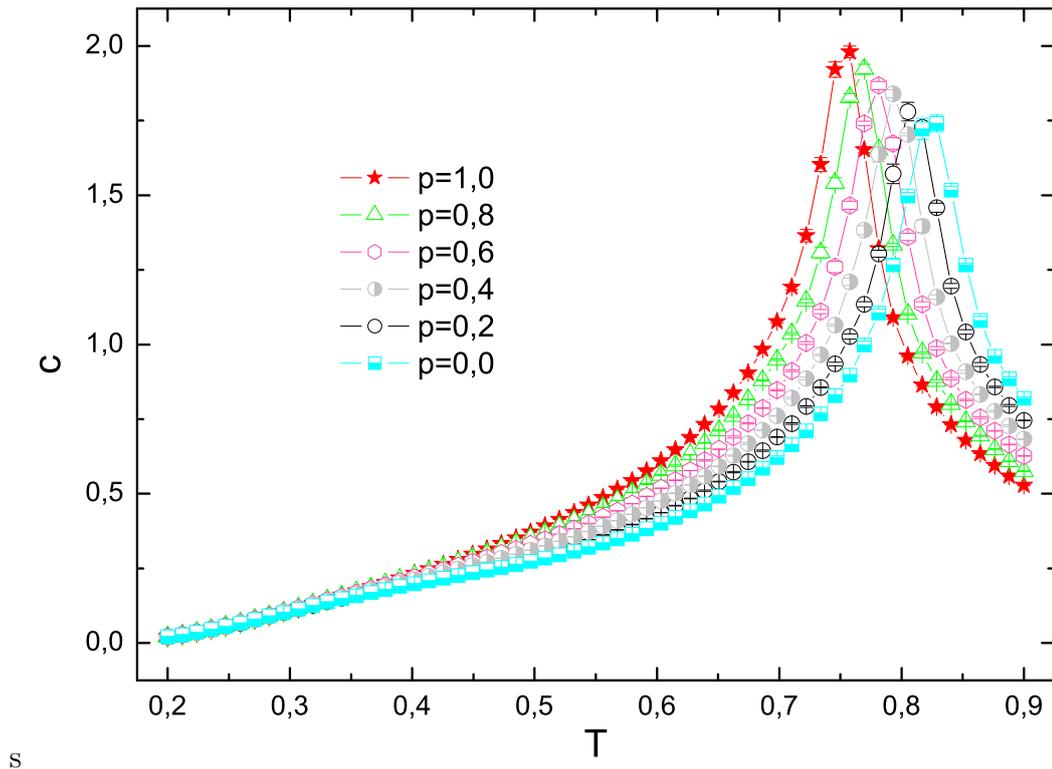


Figura 3.3: Calor específico c em função da temperatura T em $D = 1,0$ e para vários valores de p , como indicados na figura. Aqui as simulações foram realizadas para uma rede $L = 48$.

esperado para a situação de $p = 1,0$ pois para $D = 0$ a hamiltoniana se tornará novamente a Eq. (3.8). Na Fig. 3.4(b) temos o gráfico do calor específico c em função da temperatura T , para diferentes valores de p . Isso também indica que as curvas de transição de fase de segunda ordem para cada valor de p devem se cruzar no ponto em que a anisotropia é nula ($D = 0$) (veja apêndice D), como pode ser visto na Fig. 3.10.

Para $p = 0,2$ (Fig. 3.9) temos o deslocamento do ponto para a menor temperatura para a esquerda em relação ao caso em $p = 0$. Com base no cálculo das áreas relacionadas ao ciclo de histerese, apresentadas na Fig. 3.6 para diferentes valores da temperatura $T = 0,14$, podemos obter uma estimativa para a linha de transição de fase de primeira ordem. Na tabela 3.1 apresentamos as áreas normalizadas (em porcentagem) com relação à área obtida na Fig. 3.6(a) para $T = 0,14$ (maior área). Nós também representamos por triângulos (\triangleright e \triangleleft) uma estimativa da largura das curvas de histerese, como pode ser visto nas Fig. 3.9 e 3.10. A curva tracejada representa uma “tentativa” de ligar o ponto de anisotropia crítica D_C (para $T = 0$) ao ponto tricrítico na linha de transição de fase de segunda ordem, onde podemos observar que ao longo dessa linha ocorre uma diminuição da área do ciclo de histerese. Essa linha representa a linha de transição de fase de primeira

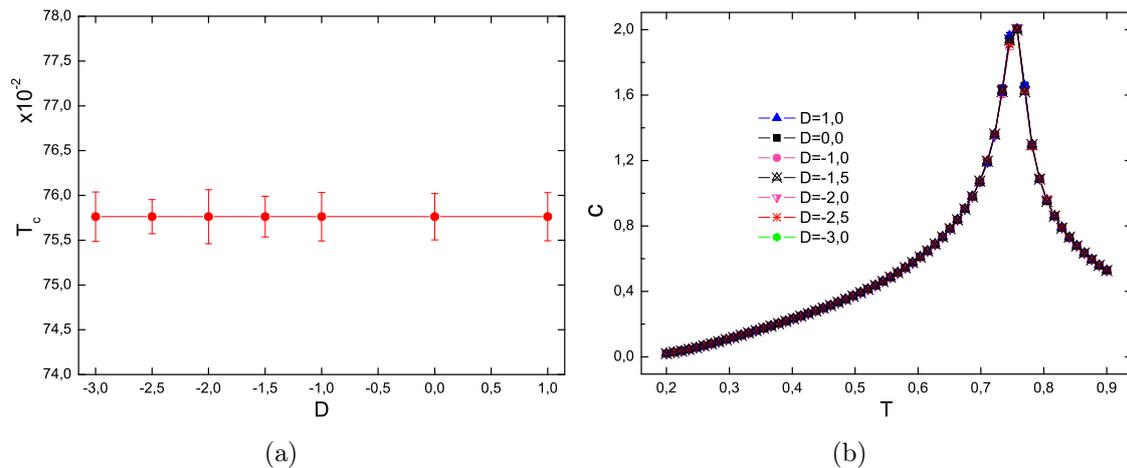


Figura 3.4: (a) Temperatura crítica T_c em função anisotropia D . (b) calor específico c em função da temperatura T . Em (b) temos diferentes valores de anisotropia D , como mostrado na figura e para $p = 1, 0$.

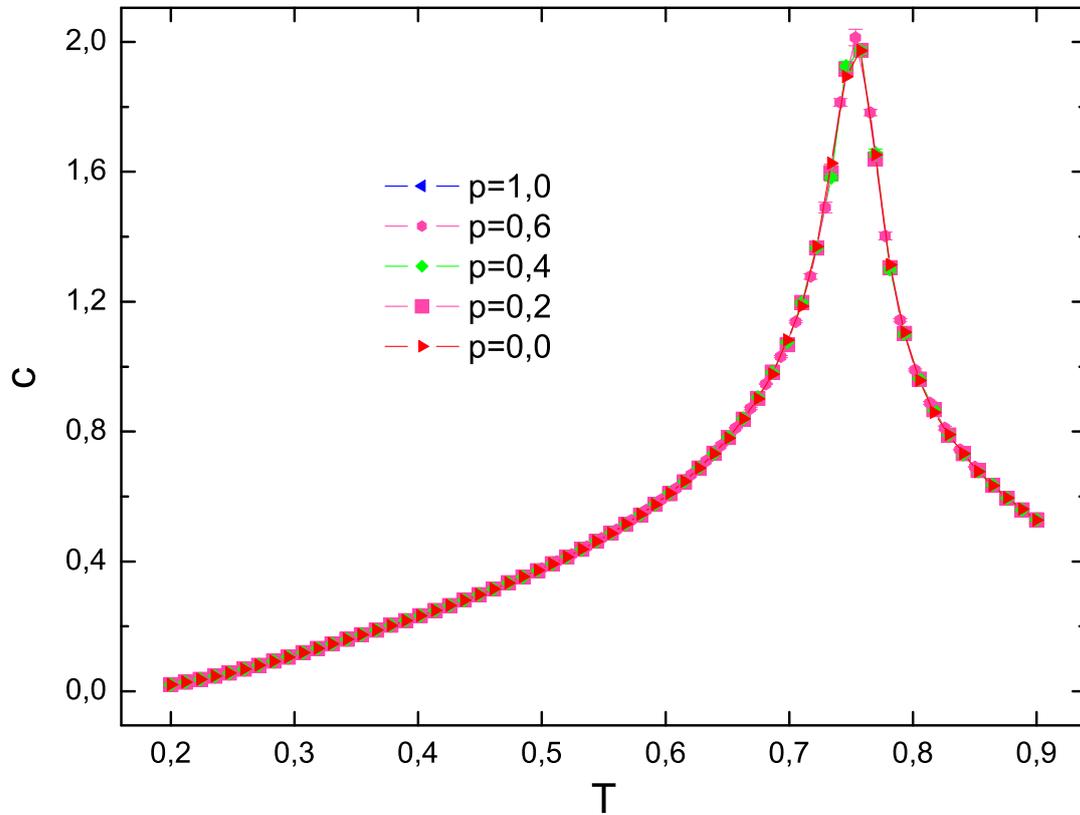
ordem entre as fases ordenadas FR_1 e FR_2 .

Tabela 3.1: Área normalizada (em porcentagem) para as diferentes temperaturas presentes na Fig. 3.6.

Temperatura T	Área (normalizada)
0,14	100,00%
0,16	60,59%
0,17	36,90%
0,18	19,43%
0,20	10,58%
0,25	2,78%

Podemos observar também que na Fig. 3.9 (para $p = 0, 2$) os pontos representados pelos símbolos quadrados (\square) são os valores da temperatura crítica obtidos pelo método do cumulante de Binder de quarta ordem. Por exemplo, na Fig. 3.7 apresentamos os resultados para $D = 0$ (Fig. 3.7(a)) e $D = -2, 5$ (Fig. 3.7(b)) cujo objetivo aqui é verificar se os resultados obtidos pelo método do cumulante são similares aos do obtidos pelo método do calor específico. Na tabela 3.2 apresentamos uma comparação entre os dois métodos.

Representado pelo símbolo \blacklozenge no diagrama de fases (ver Fig. 3.10 e 3.9), podemos observar uma coexistência entre os estados FR_1 , FR_2 e P . Para o caso $p = 0, 2$, nós estimamos as coordenadas do ponto tricrítico como sendo ($T_t = 0, 242$, $D_t = -1, 749$). Na Fig. 3.8 apresentamos as magnetizações de sub-redes A , B e C em função dos MCs, onde podemos observar nitidamente a coexistência de fases onde inicialmente temos o



(a)

Figura 3.5: Calor específico c em função da temperatura T . Temos diferentes valores da distribuição p , como mostrado na figura e para uma anisotropia $D = 0$.

Tabela 3.2: Comparação entre os métodos do cumulante de Binder de quarta ordem e o calor específico para a determinação da temperatura crítica em $p = 0,2$.

		Temperatura		Erro	
		Calor específico	Binder	Calor específico	Binder
Anisotropia	0	0,746	0,749	$\pm 0,003$	$\pm 0,001$
	-2,5	0,283	0,270	$\pm 0,004$	$\pm 0,004$

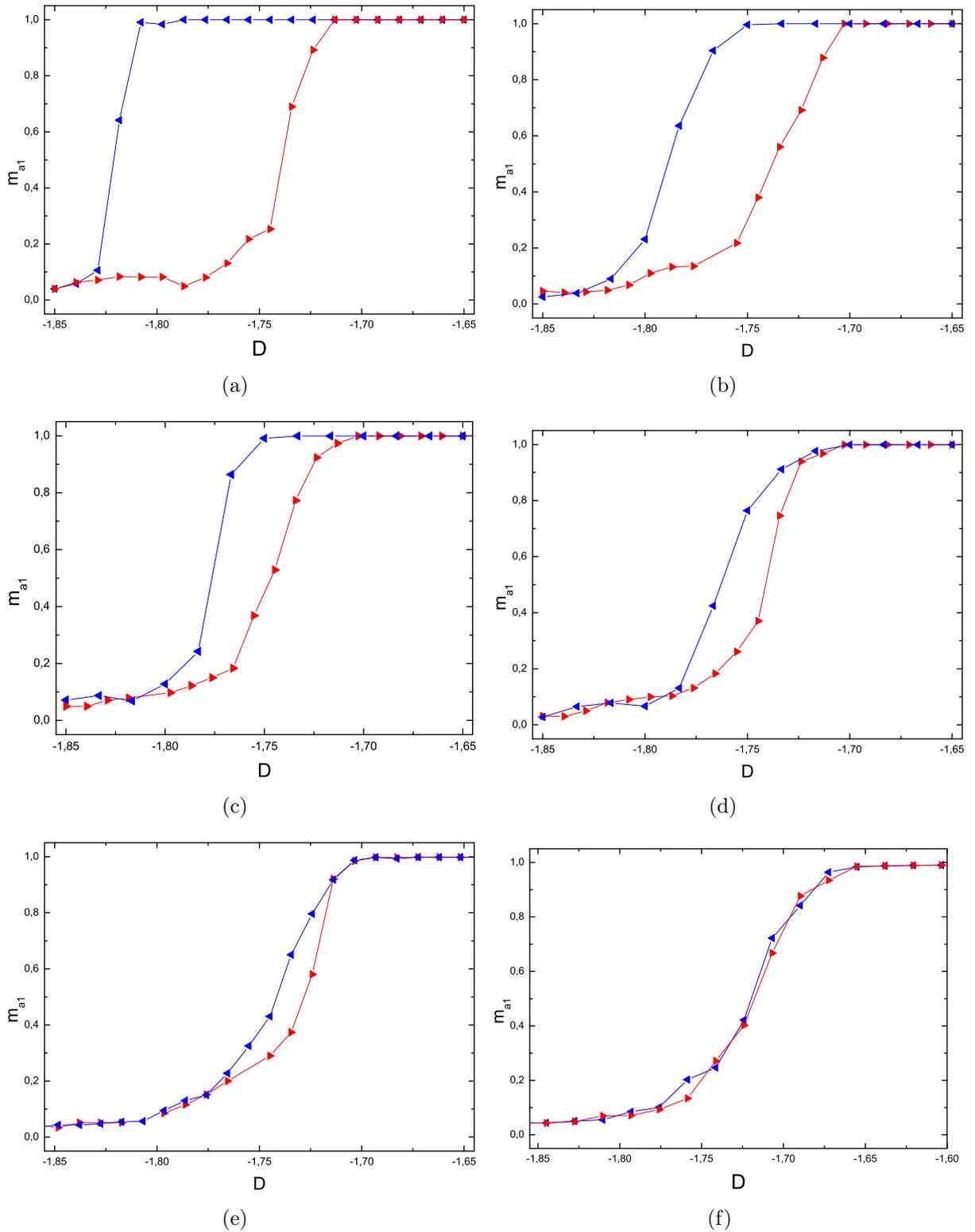


Figura 3.6: Magnetização alternada m_{a1} em função da anisotropia D crescente (\blacktriangleright) e decrescente (\blacktriangleleft), para $p = 0,2$ e $L = 66$. Para as temperaturas (a) $T = 0, 14$, (b) $T = 0, 16$, (c) $T = 0, 17$, (d) $T = 0, 18$, (e) $T = 0, 20$ e (f) $T = 0, 25$.

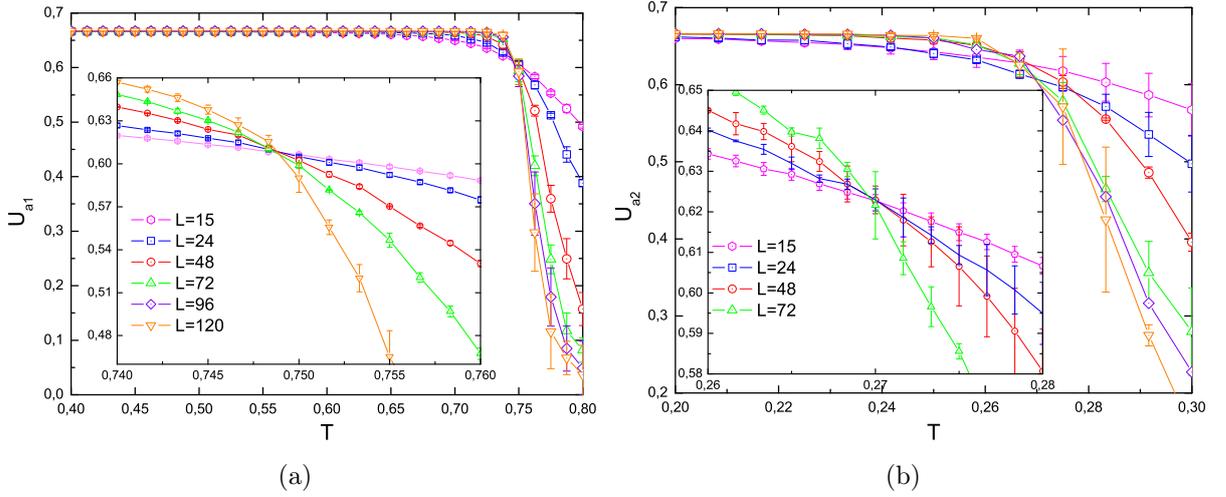


Figura 3.7: Cumulante de Binder de quarta ordem em função da temperatura T . (a) Para a magnetização alternada m_{a1} e $D = 0, 0$. (b) Para a magnetização alternada m_{a2} e $D = -2, 5$.

estado FR_2 (região 1) depois o sistema passa por regimes de FR_1 (região 2) e vai para o estado P (região 3). Essas simulações foram realizadas para um tamanho de rede $L = 60$, uma temperatura fixa em $T = 0,242$ e para uma anisotropia $D = -1,749$.

Unindo os resultados do capítulo anterior (caso $p = 0$, presente na Fig. 2.8) com o caso $p = 0,2$ (presente na Fig. 3.9) e as curvas para a transição de segunda ordem para os casos $p = 0,4, 0,6, 0,8$ e $1,0$ (calculadas pelas simulações) construímos o diagrama de fases completo do modelo e a apresentamos na Fig. 3.10. Portanto, temos o resultado final deste trabalho que é o diagrama de fases da temperatura crítica T_c versus a intensidade da anisotropia aleatória D , para diferentes valores de p . Em resumo, nesse diagrama de fases encontramos linhas de transições de fase de segunda ordem e uma região de transição de fase de primeira ordem para os casos com um parâmetro de distribuição da anisotropia aleatória $p = 0$ e $p = 0,2$ e, por outro lado, somente linhas de transições de fase de segunda ordem para os casos de $p = 0,4, 0,6, 0,8$ e $1,0$.

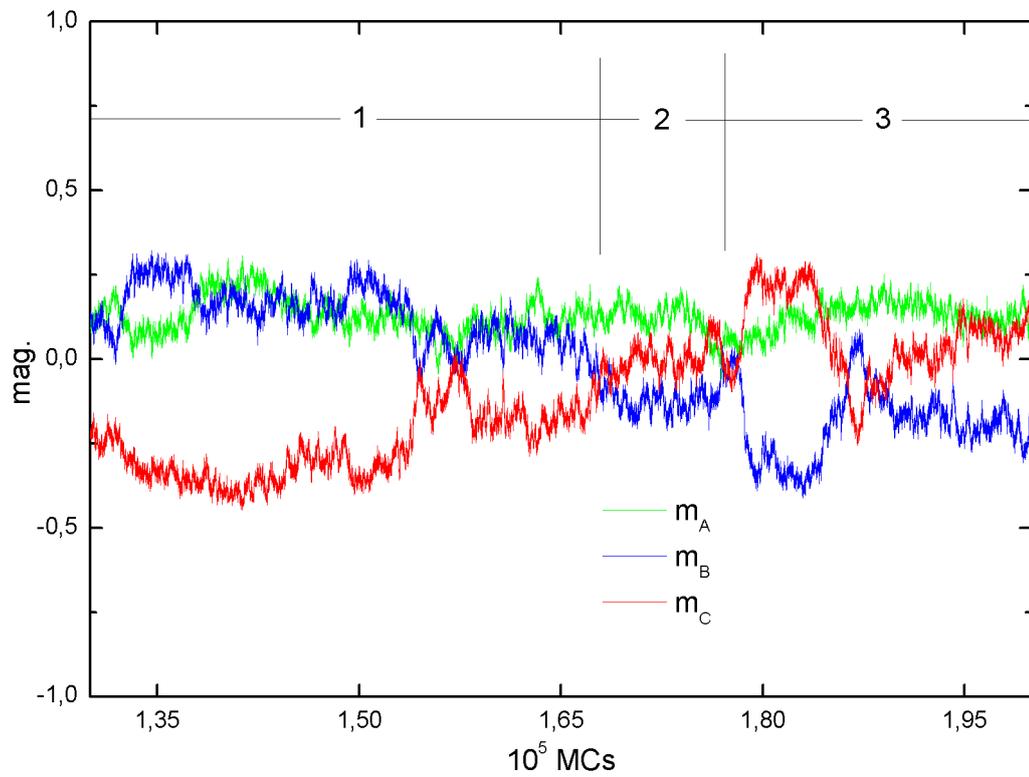


Figura 3.8: Magnetização das sub-redes A , B e C em função dos MCs. As simulações foram realizadas para uma rede com tamanho $L = 60$, $T = 0,242$ e $D = -1,749$. As regiões 1, 2 e 3 são os estados $FR_2(+1/2, +1/2, -1)$, $FR_1(+1/2, -1/2, 0)$ e P , respectivamente.

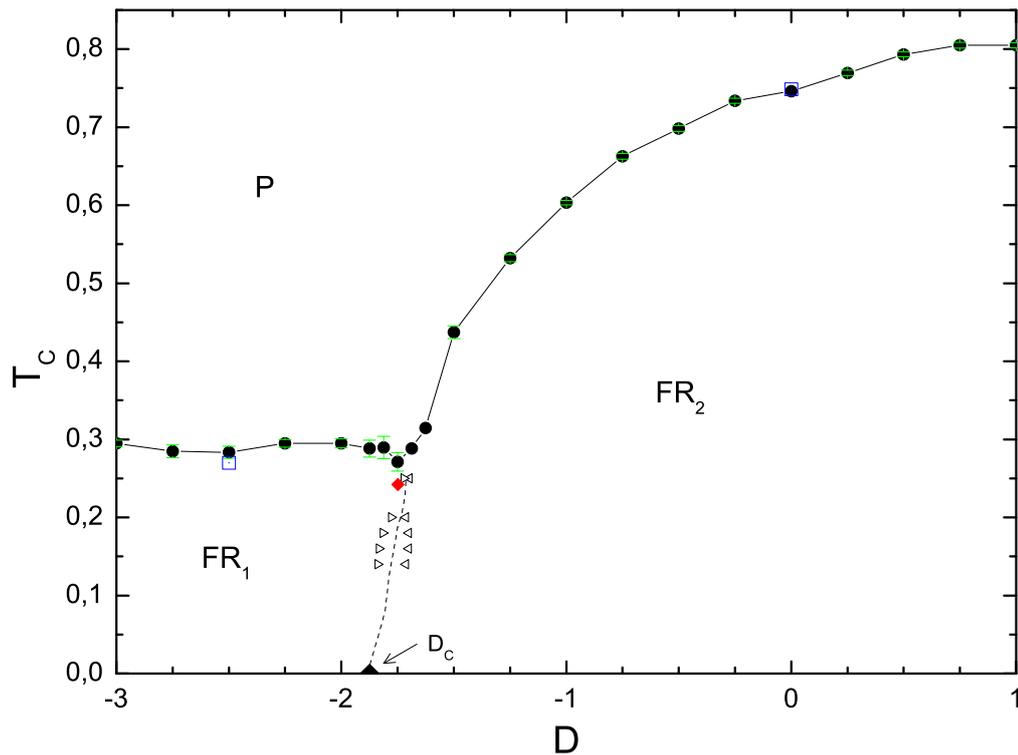


Figura 3.9: Diagrama de fases no plano temperatura crítica T_c versus anisotropia D para $p = 0, 2$. Na linha cheia temos uma transição de fase de segunda ordem, com o ponto com a menor temperatura é o ponto coexistência de fases (♦). Os quadrados (□) são pontos calculados pelo método do cumulante de Binder. A linha tracejada é uma tentativa de formar um caminho para uma transição de fase de primeira ordem que inicia no ponto de anisotropia crítica D_c vai até o ponto crítico final (•) e os símbolos \triangleright e \triangleleft representam as larguras das curvas de histerese. As simulações foram realizadas para um rede de tamanho linear $L = 60$ e temos três fases P , FR_1 e FR_2 , sendo respectivamente paramagnético, ferrimagnético, do tipo 1 e ferrimagnético do tipo 2.

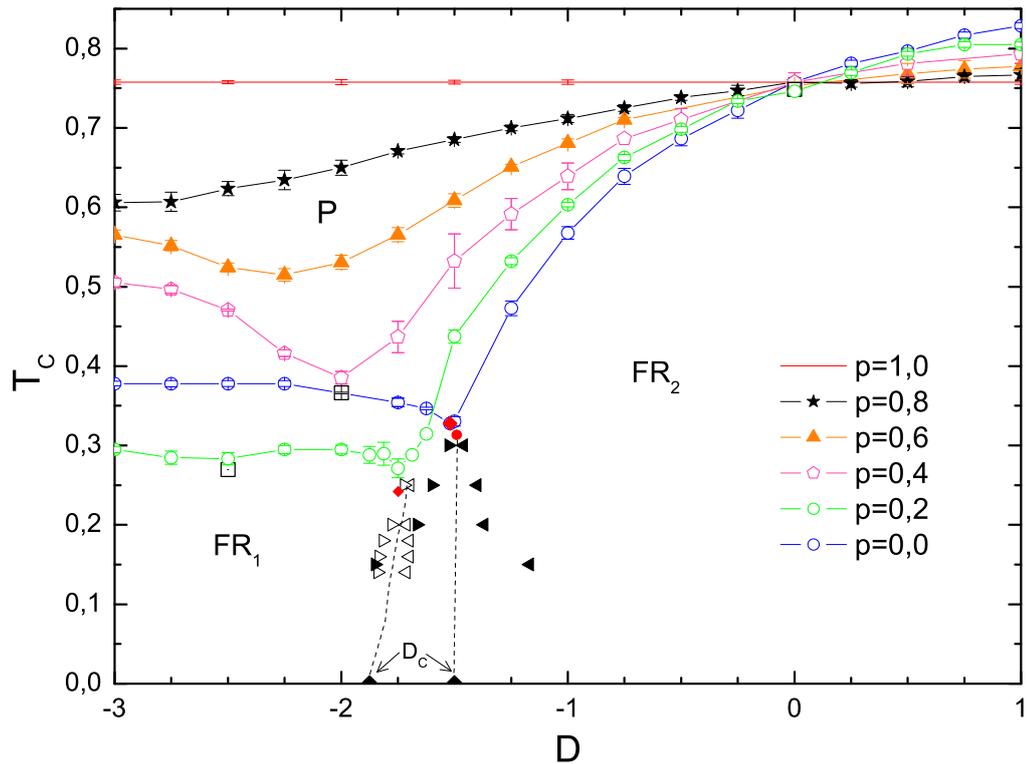


Figura 3.10: Diagrama de fases temperatura crítica T_c versus anisotropia D . Nas linhas cheias temos as transições de fase de segunda ordem, com os pontos com menor temperatura sendo o ponto de coexistência de fases (\blacklozenge). As linhas tracejadas são transições de fase de primeira ordem que iniciam no ponto de anisotropia crítica D_c e vão até o ponto crítico final (\bullet). Os símbolos \blacktriangleright e \blacktriangleleft são concernentes as larguras das curvas de histerese para $p = 0,0$ e os símbolos \triangleright e \triangleleft são para $p = 0,2$. As simulações foram realizadas para diferentes tamanhos de rede e temos P, FR_1 e FR_2 , sendo, paramagnético, ferrimagnético do tipo 1 e 2, respectivamente.

Conclusões e Perspectivas de Trabalhos Futuros

Neste trabalho estudamos os efeitos das anisotropias aleatórias no diagrama de fases do modelo de Ising ferrimagnético de spins mistos spin-1/2 e 1 em uma rede triangular. Para isso utilizamos a técnica de simulação de Monte Carlo.

A dissertação foi dividida em duas partes. Na primeira parte, capítulo 2, estudamos o efeito da anisotropia uniforme D na sub-rede C no modelo de Ising ferrimagnético de spins mistos com $S = (\sigma_A = 1/2, \sigma_B = 1/2, S_C = 1)$. Na segunda parte, capítulo 3, estudamos o efeito das anisotropias aleatórias D na sub-rede C com uma distribuição de probabilidade $P(D_k^C)$ no modelo de Ising ferrimagnético de spins mistos $S = (\sigma_A = 1/2, \sigma_B = 1/2, S_C = 1)$.

Para o caso em que temos uma anisotropia D uniforme, observamos que o sistema apresenta transições de fase de segunda e primeira ordens. Analisamos valores para a anisotropia D variando entre $-3, 0$ e $1, 0$.

Para o caso da anisotropia que segue uma distribuição de probabilidade bimodal $P(D_k^C)$ para os spins na sub-rede C , observamos também a existência de uma linha de transição de fase de segunda e uma linha de primeira ordem para $p = 0, 2$ e somente linhas de segunda ordem para os casos de $p = 0, 4, 0, 6, 0, 8$ e $1, 0$.

Em trabalhos posteriores, poderemos analisar o sistema com outros métodos como método de Bethe-Peirls, Parallel Tempering [28] ou Banho Térmico, para determinação das linhas de primeira ordem com maior precisão. Além disso o sistema apresenta frustração que não foi abordada neste trabalho. Em trabalhos posteriores seria essencial a análise da frustração apresentada pelo sistema.

APÊNDICE

Calculo de Algumas Quantidades

Aqui temos o calculo de algumas quantidades que podem ser do interesse do leitor.

A.1 Cálculo do calor específico

A energia média $\langle E \rangle$ do sistema é dada pela soma da relação entre a probabilidade p_ω de uma determinada configuração de spins da rede e a energia E_ω associada a essa configuração.

$$\langle E \rangle = \sum_{\omega} E_{\omega} p_{\omega}, \quad (\text{A.1})$$

A probabilidade p_ω pode ser escrita como:

$$p_{\omega} = \frac{e^{-\beta E_{\omega}}}{Z} \quad (\text{A.2})$$

onde Z é a função de partição do sistema. Então a Eq. (A.1) fica:

$$\langle E \rangle = \sum_{\omega} E_{\omega} \frac{e^{-\beta E_{\omega}}}{Z} \quad (\text{A.3})$$

A função de partição descreve as propriedades estatísticas de um sistema termodinâmico, ela é dada por:

$$Z = \sum_{\omega} e^{-\beta E_{\omega}} \quad (\text{A.4})$$

Derivando em relação a β , fica:

$$\frac{\partial Z}{\partial \beta} = \sum_{\omega} (-E_{\omega}) e^{-\beta E_{\omega}} \quad (\text{A.5})$$

Reescrevendo a Eq. (A.3),

$$\langle E \rangle = -\frac{1}{Z} \sum_i (-E_\omega) e^{-\beta E_\omega}.$$

Podemos simplificar utilizando a Eq. (A.5), temos:

$$\langle E \rangle = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$$

Agora vamos nos ater ao calor específico. O calor específico é a medida da variação da energia do sistema em relação à temperatura e, é dado por:

$$c = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}$$

Utilizando $\beta = 1/k_B T$, podemos reescrevê-la como:

$$c = -\frac{1}{k_B T^2} \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta}. \quad (\text{A.6})$$

Derivando novamente a função de partição Eq. (A.4),

$$\frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} = \sum_\omega E_\omega^2 e^{-\beta E_\omega} \quad (\text{A.7})$$

e utilizando as Eqs. (A.6) e (A.7), temos:

$$c = -\frac{1}{k_B T^2} \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2},$$

rearranjando,

$$c = \frac{1}{k_B T^2} \frac{\partial}{\partial \beta} \left(-\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right).$$

Substituindo $\langle E \rangle$ e Eq. (A.5), temos:

$$c = -\frac{1}{k_B T^2} \left[\sum_\omega E_\omega^2 \frac{e^{-\beta E_\omega}}{Z} - \left(\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right)^2 \right]$$

Portanto o calor específico pode ser dado em termos da variância da energia do sistema:

$$c = -\frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B T^2}. \quad (\text{A.8})$$

A.2 Cálculo da suscetibilidade magnética

A magnetização média pode ser dada por:

$$\langle M \rangle = \sum_{\omega} p_{\omega} M_{\omega}.$$

Utilizando p_{ω} da Eq. (A.2)

$$\langle M \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\omega} M_{\omega} e^{-\beta E_{\omega}}.$$

Agora podemos escrever em termos da derivada da função de partição em relação ao campo aplicado H ,

$$\langle M \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial H} = \frac{\partial}{\partial H} \ln Z \quad (\text{A.9})$$

A susceptibilidade magnética é dada em termos da variação da magnetização em função do campo magnético aplicado:

$$\chi = \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial H} = \frac{\partial^2}{\partial H^2} \ln Z$$

Reescrevendo a equação anterior, temos:

$$\chi = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial H^2} - \left(\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial H} \right)^2$$

Utilizando a Eq. (A.9), podemos reescrever assim:

$$\chi = \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2. \quad (\text{A.10})$$

Estado Fundamental

Analisando uma célula triangular elementar composta pelos spins σ_A, σ_B e S_C , e considerando todas as possibilidades dos estados dos spins, podemos fazer uma análise do estado fundamental.

B.1 Energia Reduzida

Com base na Eq. (2.1) reescrita abaixo,

$$\mathcal{H} = -J \left(\sum_{i \in A, j \in B} \sigma_i \sigma_j + \sum_{i \in A, k \in C} \sigma_i S_k + \sum_{j \in B, k \in C} \sigma_j S_k \right) - D \sum_{k \in C} S_k^2,$$

podemos calcular a energia reduzida por sítio do sistema que fica como:

$$\begin{aligned} \frac{e}{|J|} = & -\frac{1}{2N} \frac{J}{|J|} \left(\sum_{i=1 \in A}^{N/3} \sigma_i \sum_{j=1 \in B}^3 \sigma_j + \sum_{i=1 \in A}^{N/3} \sigma_i \sum_{k=1 \in C}^3 S_k + \sum_{j=1 \in B}^{N/3} \sigma_j \sum_{i=1 \in A}^3 \sigma_i + \right. \\ & \left. \sum_{j=1 \in B}^{N/3} \sigma_j \sum_{k=1 \in C}^3 S_k + \sum_{k=1 \in C}^{N/3} S_k \sum_{i=1 \in A}^3 \sigma_i + \sum_{k=1 \in C}^{N/3} S_k \sum_{j=1 \in B}^3 \sigma_j \right) - \frac{D}{N|J|} \sum_{k=1 \in C}^{N/3} S_k^2, \end{aligned}$$

onde N é o número total de sítios. O fator $1/2$ aparece pois temos uma contagem dupla de cada interação,

$$\begin{aligned} \frac{e}{|J|} = & \frac{1}{2N} \frac{N}{3} [\sigma_A(3 \cdot \sigma_B) + \sigma_A(3 \cdot S_C) + \sigma_B(3 \cdot \sigma_A) + \\ & \sigma_B(3 \cdot S_C) + S_C(3 \cdot \sigma_A) + S_C(3 \cdot \sigma_B)] - \frac{D}{N|J|} \frac{N}{3} S_C^2, \end{aligned}$$

sendo $\sigma_{A(B)}$ e S_C os spins que pertencem as sub-redes A , B ou C , respectivamente. Assim,

$$\frac{e}{|J|} = \frac{1}{2} (\sigma_A \sigma_B + \sigma_A S_C + \sigma_B \sigma_A + \sigma_B S_C + S_C \sigma_A + S_C \sigma_B) - \frac{D}{3|J|} S_C^2.$$

Esta é a equação da energia reduzida. Podemos remover os termos duplicados visto que $\sigma_A \sigma_B = \sigma_B \sigma_A$, $\sigma_A S_C = S_C \sigma_A$ e $S_C \sigma_B = \sigma_B S_C$, ficando como

$$\frac{e}{|J|} = \sigma_A \sigma_B + \sigma_A S_C + \sigma_B S_C - \frac{D}{3|J|} S_C^2. \quad (\text{B.1})$$

B.2 Determinação do Estado Ferrimagnético do Tipo 1

Utilizando a Eq. (B.1) podemos calcular a energia do sistema. No caso que $S_C = 0$, temos,

$$\frac{e_1}{|J|} = \sigma_A \sigma_B. \quad (\text{B.2})$$

Agora para o caso $\pm\sigma_A = \mp\sigma_B$, ou seja temos uma sub-rede com spins “para cima” e outra com spins “para baixo”, ficamos com,

$$\frac{e}{|J|} = \left(\pm\frac{1}{2}\right) \left(\mp\frac{1}{2}\right) = -\frac{1}{4}. \quad (\text{B.3})$$

Agora para $\pm\sigma_A = \pm\sigma_B$, ou seja as duas sub-redes A e B estão “para cima” (ou “para baixo”)

$$\frac{e}{|J|} = \left(\pm\frac{1}{2}\right) \left(\pm\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{4}. \quad (\text{B.4})$$

A configuração $(\pm 1/2, \mp 1/2, 0)$ tem menor energia em relação à configuração $(\pm 1/2, \pm 1/2, 0)$, portanto, esse estado corresponde ao estado fundamental. Definimos a configuração $(\pm 1/2, \mp 1/2, 0)$ como sendo o estado ferrimagnético do tipo 1 (FR_1) com a energia reduzida Eq. (B.3).

B.3 Determinação do Estado Ferrimagnético do Tipo 2

No caso de $S_C = \pm 1$, temos duas situações possíveis para os spins das sub-redes A e B . Ou $\sigma_A = \sigma_B$, ou $\sigma_A = -\sigma_B$ mas como o sistema é antiferromagnético¹ não temos o

¹Os spins menores se opõem ao spin maior.

caso em que σ_A é oposta a σ_B . Portanto só temos o caso em que $\sigma_A = \sigma_B$, todavia as sub-redes A e B podem estar paralelas ou antiparalelas com a sub-rede C .

Utilizando a Eq. (B.1), vamos ver as duas situações.

- Quando são paralelas: $\sigma_A = \sigma_B = \pm 1/2$ e $S_C = \pm 1$, temos

$$\frac{e}{|J|} = \left[\left(\pm \frac{1}{2} \right) \left(\pm \frac{1}{2} \right) + \left(\pm \frac{1}{2} \right) \pm 1 + \left(\pm \frac{1}{2} \right) \pm 1 \right] - \frac{D}{3|J|} (\pm 1)^2,$$

$$\frac{e}{|J|} = \frac{5}{4} - \frac{D}{3|J|}.$$

- Quando são antiparalelas: $\sigma_A = \sigma_B = \pm 1/2$ e $S_C = \mp 1$, temos,

$$\frac{e}{|J|} = \left[\left(\pm \frac{1}{2} \right) \left(\pm \frac{1}{2} \right) + \left(\pm \frac{1}{2} \right) \mp 1 + \left(\pm \frac{1}{2} \right) \mp 1 \right] - \frac{D}{3|J|} (\mp 1)^2,$$

$$\frac{e}{|J|} = \left(\frac{1}{4} - 1 \right) - \frac{D}{3|J|} = -\frac{3}{4} - \frac{D}{3|J|}. \quad (\text{B.5})$$

Então temos um outro estado ferrimagnético do tipo 2 (FR_2) com a configuração $(\pm 1/2, \pm 1/2, \mp 1)$. Portanto temos dois estados ordenados ferrimagnéticos do tipo 1 e 2 (FR_1 e FR_2) que estão listados na tabela B.1. Na primeira coluna temos os estados ferrimagnéticos, na segunda coluna escrevemos as as energias reduzidas dadas pelas Eqs. (B.3) e (B.5).

B.4 Anisotropias Críticas

O ponto de anisotropia crítica é onde as duas energias são iguais (as energias são dadas pelas Eqs. (B.3) e (B.5)),

$$\begin{aligned} \frac{e_1}{|J|} = -\frac{1}{4} \text{ e } \frac{e_2}{|J|} = -\frac{3}{4} - \frac{D}{3|J|}, \\ \frac{e_1}{|J|} = \frac{e_2}{|J|}, \\ -\frac{1}{4} = -\frac{3}{4} - \frac{D}{3|J|} \rightarrow -\frac{1}{4} + \frac{3}{4} = -\frac{D}{3|J|}, \\ \frac{-1+3}{4} = -\frac{D}{3|J|}, \\ \frac{D}{|J|} = -\frac{3}{2}. \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Com base nas informações obtidas até aqui construímos a tabela abaixo (Tab. B.1):

Tabela B.1: Configurações do estado do sistema, com suas energias reduzidas para diferentes alcances da anisotropia.

Estado	$e/ J $	$D/ J $
$FR_1 : (\pm 1/2, \mp 1/2, 0)$	$-1/4$	$(-\infty, -3/2)$
$FR_2 : (\pm 1/2, \pm 1/2, \mp 1)$	$-3/4 - D/3 J $	$(-3/2, +\infty)$

Também podemos determinar a anisotropia crítica para uma distribuição aleatória na rede. Com base na Eq. (3.2) podemos escrever que,

$$(1-p)\frac{D_c}{|J|} = -\frac{3}{2},$$

$$\frac{D_c}{|J|} = -\frac{3}{2(1-p)}, \quad (\text{B.7})$$

onde $(1-p)$ indica que uma porcentagem da sub-rede C está sob ação da anisotropia D . Usando a Eq. (B.7) podemos calcular as anisotropias críticas D_c para alguns valores de p como mostrado na tabela B.1.

Devemos tomar cuidado para o caso $p = 1, 0$, pois como já foi mostrado na seção 3.3 (pg. 34), não há dependência da hamiltoniana com a anisotropia D . Portanto podemos afirmar que para $p = 1, 0$ a anisotropia crítica não existe. Formando a tabela abaixo.

Tabela B.2: Anisotropia crítica D_c para diferentes valores de p .

p	$D_c/ J $
0	$-3/2 = -1,5$
0,2	$-15/8 = -1,875$
0,4	$-5/2 = -2,5$
0,6	$-15/4 = -3,75$
0,8	$-15/2 = -7,5$
1,0	—

B.5 Magnetização Total no Estado Fundamental

A magnetização total é dada pela equação,

$$M_T = \sum_{i \in A} \sigma_i + \sum_{j \in B} \sigma_j + \sum_{k \in C} S_k. \quad (\text{B.8})$$

Como no estado fundamental temos dois estados FR_1 e FR_2 então temos:

- Para o estado FR_1 :

O estado FR_1 é caracterizado por seus spins estarem em $(\mp 1/2, \pm 1/2, 0)$, então a magnetização total será:

$$M_T = \sum_{i=1}^{N/3} \left(\pm \frac{1}{2} \right) + \sum_{j=1}^{N/3} \left(\mp \frac{1}{2} \right) + \sum_{k=1}^{N/3} 0,$$

$$M_T = \frac{N}{3} \left[\left(\pm \frac{1}{2} \right) + \left(\mp \frac{1}{2} \right) \right] = 0. \quad (\text{B.9})$$

Portanto, resulta em uma magnetização total nula para o estado FR_1 .

- Para o estado FR_2 :

Com relação ao estado FR_2 temos $(\pm 1/2, \pm 1/2, \mp 1)$, calculando a soma:

$$M_T = \sum_{i=1}^{N/3} \left(\pm \frac{1}{2} \right) + \sum_{j=1}^{N/3} \left(\pm \frac{1}{2} \right) + \sum_{k=1}^{N/3} (\mp 1),$$

$$M_T = \frac{N}{3} \left[\left(\pm \frac{1}{2} \right) + \left(\pm \frac{1}{2} \right) + (\mp 1) \right] = 0. \quad (\text{B.10})$$

também resulta em uma magnetização total nula.

Com isso podemos ver que para os dois estados FR_1 e FR_2 a magnetização total é nula.

Podemos ter também uma combinação qualquer dos dois estados.

- Combinação de FR_1 e FR_2 :

Supondo que tenhamos uma combinação de q (porcentagem) dos sítios no estado FR_1 e $1 - q$ no estado FR_2 , então teremos uma certa quantidade de sítios em um estado e outra em outro estado, então

$$M_T = \left[\sum_{i=1}^{qN/3} \left(\pm \frac{1}{2} \right) + \sum_{j=1}^{qN/3} \left(\mp \frac{1}{2} \right) + \sum_{k=1}^{qN/3} 0 \right]_{FR_1} +$$

$$\left[\sum_{i=1}^{(1-q)N/3} \left(\pm \frac{1}{2} \right) + \sum_{j=1}^{(1-q)N/3} \left(\pm \frac{1}{2} \right) + \sum_{k=1}^{(1-q)N/3} (\mp 1) \right]_{FR_2}.$$

Utilizando o resultado das contas anteriores (Eqs.(B.9) e (B.10)) podemos concluir

que em média² a magnetização total será nula para a combinação,

$$M_T = 0. \tag{B.11}$$

²A palavra “média” é utilizada pois deve haver uma diferença entre as quantidades de sítios que não torne a magnetização total nula como pode ser visto as flutuações na Fig. 2.4, mas ele é muito inexpressiva na ordem de $\pm 1,55\%$ quando o sistema não esta termalizado, para $\mp 0,301\%$ quando termalizado, segundo nossas simulações.



Magnetizações Alternadas

Temos duas magnetizações alternadas m_{a1} e m_{a2} (Eq. (2.3)), sabendo¹ que $N = L^2$, elas podem ser reescritas como:

$$m_{a1} = \left| \sum_{k \in C} S_k - 2 \sum_{i \in A} \sigma_i - 2 \sum_{j \in B} \sigma_j \right| / N,$$

e

$$m_{a2} = 3 \left| \sum_{i \in A} \sigma_i - \sum_{j \in B} \sigma_j \right| / N.$$

- Para o estado FR_1 :

O estado FR_1 é caracterizado por $(\mp 1/2, \pm 1/2, 0)$, então as magnetizações:

$$\begin{aligned} m_{a1} &= \left| \sum_{k \in C}^{N/3} (0) - 2 \sum_{i \in A}^{N/3} \left(\pm \frac{1}{2} \right) - 2 \sum_{j \in B}^{N/3} \left(\mp \frac{1}{2} \right) \right| / N \\ m_{a1} &= \frac{N}{3N} \left| 2 \left(\pm \frac{1}{2} \right) + 2 \left(\mp \frac{1}{2} \right) \right| = 0. \end{aligned} \quad (C.1)$$

e

$$\begin{aligned} m_{a2} &= 3 \left| \sum_{i \in A}^{N/3} \left(\pm \frac{1}{2} \right) - \sum_{j \in B}^{N/3} \left(\mp \frac{1}{2} \right) \right| / N \\ m_{a2} &= \frac{3N}{3N} \left| \left(\pm \frac{1}{2} \right) - \left(\mp \frac{1}{2} \right) \right| = 1. \end{aligned} \quad (C.2)$$

Portanto, para o estado FR_1 a m_{a1} tende a ser nulo, enquanto que temos m_{a2}

¹ N é o número total de sítio da rede, e como a rede é bidimensional $N = L \times L$.

- Para o estado FR_2 :

Para o estado FR_2 , o spins são $(\pm 1/2, \pm 1/2, \mp 1)$, então as magnetizações são:

$$\begin{aligned}
 m_{a1} &= \left| \sum_{k \in C}^{N/3} (\mp 1) - 2 \sum_{i \in A}^{N/3} \left(\pm \frac{1}{2} \right) - 2 \sum_{j \in B}^{N/3} \left(\pm \frac{1}{2} \right) \right| / N \\
 m_{a1} &= \frac{N}{3N} \left| (\mp 1) - 2 \left(\pm \frac{1}{2} \right) - 2 \left(\pm \frac{1}{2} \right) \right| \\
 m_{a1} &= \frac{1}{3} |(\mp 1) + (\mp 1) + (\mp 1)| = 1.
 \end{aligned} \tag{C.3}$$

e

$$\begin{aligned}
 m_{a2} &= 3 \left| \sum_{i \in A}^{N/3} \left(\pm \frac{1}{2} \right) - \sum_{j \in B}^{N/3} \left(\pm \frac{1}{2} \right) \right| / N \\
 m_{a2} &= \frac{3N}{3N} \left| \left(\pm \frac{1}{2} \right) - \left(\mp \frac{1}{2} \right) \right| = 0.
 \end{aligned} \tag{C.4}$$

Logo no estado FR_2 a magnetização $m_{a2} = 0$, enquanto que temos m_{a1} .

- Combinação de FR_1 e FR_2 :

Suponto que tenhamos uma combinação de q (porcentagem) dos sítios no estado FR_1 e $(1 - q)$ no estado FR_2 , então teremos:

$$\begin{aligned}
 m_{a1} &= \left[\left| \sum_{k \in C}^{qN/3} (0) - 2 \sum_{i \in A}^{qN/3} \left(\pm \frac{1}{2} \right) - 2 \sum_{j \in B}^{qN/3} \left(\mp \frac{1}{2} \right) \right|_{FR_1} + \right. \\
 &\quad \left. \left| \sum_{k \in C}^{(1-q)N/3} (\mp 1) - 2 \sum_{i \in A}^{(1-q)N/3} \left(\pm \frac{1}{2} \right) - 2 \sum_{j \in B}^{(1-q)N/3} \left(\pm \frac{1}{2} \right) \right|_{FR_2} \right] / N,
 \end{aligned}$$

Utilizando os resultados anteriores Eqs. (C.1) e (C.3)

$$m_{a1} = |0|_{FR_1} + |(1 - q)|_{FR_2} = 1 - q \tag{C.5}$$

e

$$\begin{aligned}
 m_{a2} &= 3 \left[\left| \sum_{i \in A}^{qN/3} \left(\pm \frac{1}{2} \right) - \sum_{j \in B}^{qN/3} \left(\mp \frac{1}{2} \right) \right|_{FR_1} + \right. \\
 &\quad \left. \left| \sum_{i \in A}^{(1-q)N/3} \left(\pm \frac{1}{2} \right) - \sum_{j \in B}^{(1-q)N/3} \left(\pm \frac{1}{2} \right) \right|_{FR_2} \right] / N.
 \end{aligned} \tag{C.6}$$

Utilizando os resultados anteriores Eqs. (C.2) e (C.4)

$$m_{a2} = |q|_{FR_1} + |0|_{FR_2} = q \tag{C.7}$$

Portanto quanto maior for q maior será a m_{a2} e menor será m_{a1} .

Se analisarmos os extremos, no $\lim_{q \rightarrow 0}$ teremos como resultado C.3. Já o extremo $\lim_{q \rightarrow 1}$ retorna ao resultado de C.2.

Cruzamento das Linhas de Segunda Ordem

Na Fig. 3.10 as linhas de segunda ordem para \neq valores de p para $D \approx 0$ se cruzam. O objetivo deste apêndice é demonstrar matematicamente de forma sucinta em que situação isto ocorre.

Como as curvas são formadas pelos picos do calor específico podemos dizer que,

$$c(p_i)_{Max} \cong c(p_q)_{Max},$$

onde p_i e p_q são pontos de simulações arbitrários desde de que $p_i \neq p_q$ e $c(p_i)$ é o calor específico para o p_i (o mesmo vale para $c(p_q)$), por estarmos em uma simulação não podemos afirmar que eles são iguais¹ por isso o sinal “ \cong ”, contudo vamos aceitar como iguais e nos concentrar apenas no ponto máximo², então,

$$c(p_i) = c(p_q).$$

Devemos nos recordar que o calor específico depende da energia média (veja Eq. (2.4)), então temos,

$$\langle E_{p_i}^2 \rangle - \langle E_{p_i} \rangle^2 = \langle E_{p_q}^2 \rangle - \langle E_{p_q} \rangle^2,$$

onde $\langle E_{p_i} \rangle$ é a energia média para p_i (o mesmo vale para E_{p_q}). Daí temos que

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle E_{p_i} \rangle = \langle E_{p_q} \rangle \\ \langle E_{p_i}^2 \rangle = \langle E_{p_q}^2 \rangle \end{array} \right.$$

¹Eles não são iguais pois temos flutuações nas simulações, mas estão muito próximos como pode ser visto na Fig. 3.5(a).

²A partir daqui estamos sempre considerando o c no ponto máximo.

Para o primeiro caso temos que a média da energia $\langle E \rangle$ é dado pela Eq. (3.5). Contudo a média da energia depende da Hamiltoniana (Eq. (3.1)), note que esta Hamiltoniana temos que somente D_k^C depende do parâmetro p para distribuição da anisotropia na sub-rede C , então temos que inspecionar a Eq. (3.2), reescrita abaixo,

$$P(D_k^C) = p\delta(D_k) + (1 - p)\delta(D_k - D_k^C).$$

Temos que tornar a Hamiltoniana independente de p , para isso temos dois casos possíveis. Ou $p = 1$: então não teremos a presença da anisotropia na sub-rede C como já foi discutido neste trabalho, porem isso não nos satisfaz, já que desejamos que isso ocorra para qualquer p . Então temos que a única forma é se a intensidade da anisotropia for nula.

Portanto para que as linhas de segunda ordem se cruzem em um mesmo ponto a anisotropia deve ser nula,

$$D = 0.$$

Quanto a situação $\langle E_{p_i}^2 \rangle = \langle E_{p_q}^2 \rangle$ podemos proceder da mesmo forma apenas tomando o cuidado de nos lembrar que na equação da energia média cada valor da energia deve estar ao quadrado.

Referências Bibliográficas

- [1] L. L. Gonçalves, “Uniaxial anisotropy effects in the ising model: an exactly soluble model,” *Physica Scripta*, vol. 32, no. 3, p. 248, 1985.
- [2] M. Jascur and J. Strecka, “Reentrant transitions of a mixed-spin ising model on the diced lattice,” *Condensed Matter Physics*, vol. 8, no. 44, p. 869, 2005.
- [3] T. Kaneyoshi and J. Chen, “Mean-field analysis of a ferrimagnetic mixed spin system,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 98, no. 1, p. 201, 1991.
- [4] O. Abubrig, D. Horváth, A. Bobák, and M. Jaščur, “Mean-field solution of the mixed spin-1 and spin-3/2 ising system with different single-ion anisotropies,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 296, no. 3, p. 437, 2001.
- [5] T. Iwashita and N. Uryû, “The curie temperature of the two-dimensional quadratic ising ferromagnet with mixed spins of $s=1/2$ and $s=1$,” *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 53, no. 2, p. 721, 1984.
- [6] G.-M. Zhang and C.-Z. Yang, “Monte carlo study of the two-dimensional quadratic ising ferromagnet with spins $s=1/2$ and $s=1$ and with crystal-field interactions,” *Phys. Rev. B*, vol. 48, p. 9452, 1993.
- [7] W. Selke and J. Oitmaa, “Monte carlo study of mixed-spin $s = (1/2, 1)$ ising ferrimagnets,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 22, p. 076004, 2010.
- [8] M. Žukovič and A. Bobák, “Mixed spin-1/2 and spin-1 ising ferromagnets on a triangular lattice,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 436, p. 509, 2015.

- [9] M. Žukovič and A. Bobák, “Frustrated mixed spin-1/2 and spin-1 ising ferrimagnets on a triangular lattice,” *Physica E*, vol. 91, p. 052138, 2015.
- [10] T. Kaneyoshi, “Curie temperatures and tricritical points in mixed ising ferromagnetic systems,” *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 56, no. 8, p. 2675, 1987.
- [11] J. Oitmaa and I. G. Enting, “A series study of a mixed-spin $s=(1/2,1)$ ferrimagnetic ising model,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 18, no. 48, p. 10931, 2006.
- [12] M. Godoy, V. Souza Leite, and W. Figueiredo, “Mixed-spin ising model and compensation temperature,” *Phys. Rev. B*, vol. 69, p. 054428, Feb 2004.
- [13] T. Kaneyoshi and J. Chen, “Mean-field analysis of a ferrimagnetic mixed spin system,” *Journal of magnetism and magnetic materials*, vol. 98, pp. 201–204, 1991.
- [14] G. M. A. Sousa, “Propriedades termodinâmicas de sistemas magnéticos frustrados,” Master’s thesis, Universidade Federal de Minas Gerais, 2013.
- [15] A. M. Ferrenberg, “Histogram techniques for studying phase transitions,” in *Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics III* (K. K. Landau, David P. and Mon and H.-B. Schüttler, eds.), (Berlin, Heidelberg), pp. 30–42, Springer Berlin Heidelberg, 1991.
- [16] S. R. A. Salinas, *Introdução à física estatística*, vol. 2ed. São Paulo, São Paulo: EDUSP, 2008.
- [17] G. Jaeger, “The Ehrenfest Classification of Phase Transitions: Introduction and Evolution,” *Archive for History of Exact Sciences*, vol. 53, no. 1, pp. 51–81, 1998.
- [18] D. P. Landau and K. Binder, *A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics*. Cambridge University Press, 3 ed., 2009.
- [19] J. M. Hammersley and D. C. Handscomb, “General principles of the monte carlo method,” in *Monte Carlo Methods*, p. 50, Springer, 1964.
- [20] M. A. E. Maria, “Propriedades magnéticas do modelo de Ising bidimensional em uma rede bipartida de spins 1/2 e 1: um estudo de ferrimagnetismo com vacâncias,” Master’s thesis, Universidade Estadual Paulista, 2009.

- [21] D. Filho and A. Ayjara, “A simulação de variáveis aleatórias e os métodos Monte Carlo e Quase-Monte Carlo na quadratura multidimensional,” Master’s thesis, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2000.
- [22] M. L. Santos, “Simulação de monte carlo no modelo de ising na rede quadrada,” Master’s thesis, Universidade Federal de Minas Gerais, 2014.
- [23] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller, “Equation of state calculations by fast computing machines,” *The journal of chemical physics*, vol. 21, pp. 1087–1092, 1953.
- [24] W. K. Hastings, “Monte Carlo sampling methods using markov chains and their applications,” *Biometrika*, vol. 57, no. 1, p. 97, 1970.
- [25] J. D. M. Vianna, *Teoria Quântica de Moléculas e Sólidos: simulação computacional*. Livraria da Física, 2004.
- [26] E. Ising, “Beitrag zur theorie des ferromagnetismus,” *Zeitschrift für Physik*, vol. 31, p. 253, 1925.
- [27] K. Binder, “Finite size scaling analysis of ising model block distribution functions,” *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, vol. 43, no. 2, pp. 119–140, 1981.
- [28] B. Miasojedow, E. Moulines, and M. Vihola, “Adaptive parallel tempering algorithm,” *ArXiv e-prints*, may 2012.