



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

---

Efeitos de anisotropias em modelos de Ising de spins mistos

David Cristiano da Silva

- Cuiabá -

10 de maio de 2019



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

---

Efeitos de anisotropias em modelos de Ising de spins mistos

---

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

Orientador: *Prof. Dr. Mauricio Godoy*

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

-Cuiabá -

10 de maio de 2019

### **Dados Internacionais de Catalogação na Fonte.**

D111e Da Silva, David Cristiano.  
Efeitos de anisotropias em modelos de Ising de spins mistos / David Cristiano Da Silva. -- 2019  
49 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, 2019.  
Inclui bibliografia.

1. Modelo de Ising. 2. Simulação de Monte Carlo. 3. Algoritmo de Metropolis. 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 - Cap: 78060900 - CUIABÁ/MT  
Tel : (65) 3615-8937 - Email : pgfisica@fisica.ufmt.br

## FOLHA DE APROVAÇÃO

**TÍTULO : "Efeitos de anisotropias em modelos de Ising de spins mistos"**

**AUTOR : Mestrando David Cristiano da Silva**

**Dissertação defendida e aprovada em 26/04/2019.**

**Composição da Banca Examinadora:**

---

Presidente Banca / Orientador	Doutor(a)	Maurício Godoy
Instituição :	UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO	
Examinador Interno	Doutor(a)	Edson Ferreira Chagas
Instituição :	UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO	
Examinador Externo	Doutor(a)	Lucas Nunes Jorge
Instituição :	UFMT/Cáceres	
Examinador Suplente	Doutor(a)	Teldo Anderson da Silva Pereira
Instituição :	UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO	

CUIABÁ, 26/04/2019.

# Agradecimentos

A esta universidade, seu corpo docente, direção e administração que oportunizaram a janela que hoje vislumbro um horizonte superior, eivado pela acendrada confiança no mérito e ética aqui presentes.

Agradeço a todos os professores por me proporcionar o conhecimento não apenas racional, mas a manifestação do caráter e afetividade da educação no processo de formação profissional, por tanto que se dedicaram a mim, não somente por terem me ensinado, mas por terem me feito aprender. Mas principalmente ao professor e orientador Maurício Godoy. Muito obrigado!

Agradeço a minha família, pois felizmente pude contar com todo o apoio que precisava.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pela concessão da bolsa de estudos.

*"A persistência é o caminho do êxito."  
(Charles Chaplin)*

## Resumo

Neste trabalho, realizamos simulações de Monte Carlo para estudar os efeitos de anisotropias em dois sistemas ferromagnéticos de spins mistos em redes quadradas e cúbicas. Esses dois sistemas são constituídos por duas sub-redes interpenetrantes, tais como: **modelo-I** com spin-1/2 (estados  $\pm 1/2$ ) ocupando os sítios da sub-rede A, enquanto o spin-1 (estados  $\pm 1$  e 0) ocupa os sítios da sub-rede B, e o **modelo-II** com spin-1 (estados  $\pm 1$  e 0) ocupando os sítios da sub-rede A, enquanto o spin-3/2 (estados  $\pm 3/2$  e  $\pm 1/2$ ) ocupa os sítios da sub-rede B. Calculamos a magnetização total  $m_T$  e as magnetizações de sub-redes  $m_A$  e  $m_B$ , susceptibilidade magnética  $\chi_L$ , cumulantes de Binder de quarta ordem para a magnetização  $U_L$  e a energia  $V_L$ , calor específico  $C_e$ , ambos em função da temperatura  $T$  e das anisotropias, para os dois modelos. No **modelo-I**, encontramos o diagrama de fases no plano temperatura crítica  $T_c$  versus anisotropia  $D$  e mostramos que esse sistema não exibe um comportamento tricrítico, apresentando apenas linhas de transições de fase de segunda ordem entre as fases ordenada  $F$  e desordenada  $P$  na rede quadrada e cúbica. Para o caso do **modelo-II**, obtivemos o diagrama de fases no plano temperatura crítica  $T_c$  versus anisotropias  $D_A$  e  $D_B$  atuando nas sub-redes A e B, respectivamente. Esse modelo apresenta transições de fase de primeira e segunda ordem entre as fases ordenadas do tipo  $F_I$ ,  $F_{II}$  e a fase desordenada  $P$ , ou seja, apresenta um comportamento tricrítico e obtivemos também linhas de pontos tricríticos. O diagrama de fases também apresenta transições de fase de segunda ordem entre as duas diferentes fases ordenadas  $F_I$  e  $F_{II}$ .

**PALAVRAS CHAVE:** Modelo de Ising. Simulações de Monte Carlo. Diagrama de fase.

## Abstract

In this work, we have performed Monte Carlo simulations to study the effects of anisotropies on two mixed-spins ferromagnetic systems on the square and cubic lattices. These two systems consist of two interpenetrating sublattices, such as: **model-I** with spin-1/2 (states  $\pm 1/2$ ) occupying the sites of sublattice A, while the spin-1 (states  $\pm 1$  and 0) occupy the sites of sublattice B, and the **model-II** with spin-1 (states  $\pm 1$  and 0) occupying the sites of sublattice A, while spin-3/2 (states  $\pm 3/2$  and  $\pm 1/2$ ) occupy the sites of sublattice B. We calculated the total magnetization  $m_T$  and the sublattice magnetizations  $m_A$  and  $m_B$ , susceptibility  $chi_L$ , fourth-order Binder cumulants for magnetization  $U_L$  and energy  $V_L$ , specific heat  $C_e$ , both as a function of temperature  $T$  and anisotropy, for both models. In the **model-I**, we have found the phase diagram in the critical temperature  $T_c$  versus anisotropy  $D$  plane and shown that this system does not exhibit a tricritical behavior, presenting only second-order phase transition lines between the ordered  $F$  and disordered  $P$  phases on the square and cubic lattices. For the case of **model-II**, we have obtained the phase diagram in the critical temperature  $T_c$  versus anisotropies  $D_A$  and  $D_B$  plane acting on the sublattices A and B, respectively. This model presents first- and second-order phase transition lines between the ordered phases of the type  $F_I$ ,  $F_{II}$  and the disordered phase  $P$ , i. e., it presents a tricritical behavior and we also have obtained tricritical point lines. The phase diagram also present second-order phase transition lines between the two different ordered phases  $F_I$  and  $F_{II}$ .

**KEYWORDS:** Ising model. Monte Carlo Simulations. Phase diagram

## LISTA DE FIGURAS

- 1.1 Representação esquemática de uma rede quadrada com spins mistos. (a) **Modelo-I**, spins  $-1/2$  com estados  $(\pm 1/2)$  na sub-rede A ( $\bullet$ ) e os spins  $-1$  com estados  $(\pm 1; 0)$  na sub-rede B ( $\circ$ ). (b) **Modelo-II**, spins  $-1$  com estados  $(\pm 1; 0)$  na sub-rede A ( $\blacktriangle$ ) e os spins  $-3/2$  com estados  $(\pm 3/2; \pm 1/2)$  na sub-rede B ( $\square$ ). Em ambos os modelos a energia de interação entre as sub-redes é do tipo ferromagnética ( $J > 0$ ). . . . . 16
- 2.1 (a) Magnetização total  $m_T$  e (b) energia  $E$  em função dos passos de Monte Carlo (MCs) para vários valores da temperatura  $T$ , como mostrado nas figuras. Aqui, os resultados das simulações foram obtidos para uma rede quadrada de tamanho linear de rede  $L = 128$  e anisotropia  $D = 0$ . . . . . 24
- 2.2 (a) Magnetização total  $m_T$  e (b) energia  $E$  em função dos passos de Monte Carlo (MCs) para vários tamanhos de rede  $L$ , como mostrados nas figuras. Aqui, os resultados das simulações foram obtidos para uma rede quadrada, fixando a temperatura  $T = 1.0$  e anisotropia  $D = 0$ . . . . . 24
- 2.3 (a) Magnetização total  $m_T$  e (b) energia  $E$  em função da temperatura  $T$  para uma rede cúbica e para diversos valores de anisotropia  $D$ , como mostrado nas figuras. Aqui, as simulações foram realizadas para uma rede cúbica com tamanho linear de rede  $L = 32$ . . . . . 25
- 2.4 (a) Calor específico  $C_e$ , (b) cumulante de quarta-ordem para energia  $V_L$  e (c) susceptibilidade magnética  $\chi_m$  como função da temperatura  $T$ , para vários valores de anisotropia  $D$ , como mostrados nas figuras. Aqui, realizamos simulações para uma rede cúbica com tamanho linear de rede  $L = 32$ . . . . . 26

2.5	(a) Diagrama de fases do modelo-I no plano temperatura crítica $T_c$ versus anisotropia $D$ . As linhas com círculos (rede quadrada) e as com quadrados (rede cúbica) representam transições de fases de segunda ordem entre as fases ferromagnética $F$ e a paramagnética $P$ , respectivamente. (b) A linha sólida com quadrados representa as temperaturas críticas $T_c$ em função da anisotropia $D$ , no intervalo de $5.2 \leq D \leq 6.2$ , e a linha sólida com triângulos representa os pontos no diagrama em que as magnetizações de sub-rede são iguais $ m_A  =  m_B $ , que consiste em pontos de compensação. . . . .	27
2.6	Cumulante de quarta ordem para a energia $V_L$ em função da anisotropia $D$ para diversos tamanhos de rede $L$ , como mostrado nas figuras. Aqui, a simulação é realizada para uma temperatura fixa $T = 0.1$ . (a) Para a rede quadrada. (b) Para a rede cúbica. . . . .	28
2.7	Valor mínimo do cumulante da energia $V_{min}$ em função de $L^{-d}$ para uma temperatura fixa $T = 0.1$ . A linha pontilhada representa um ajuste linear aos valores representados pelos pontos. A linha sólida horizontal denota $V^* = 2/3$ . (a) $d = 2$ (rede quadrada) e (b) $d = 3$ (rede cúbica) . . . . .	28
2.8	(a) Magnetizações de sub-rede $m_A$ e $m_B$ em função da temperatura $T$ . (b) Magnetização alternada $m_S$ , em função da temperatura $T$ . As simulações foram realizadas para um tamanho linear de rede $L = 128$ . . . . .	29
2.9	(a) Magnetizações de sub-redes $m_A$ , $m_B$ e alternada $m_S$ em função da anisotropia $D$ para temperatura $T = 1.0$ fixa. (b) Magnetização alternada $m_S$ em função da anisotropia $D$ , para vários valores de temperatura $T$ fixa, como mostrado na figura. Aqui as simulações foram realizadas para uma rede cúbica, com tamanho linear de rede $L = 32$ . . . . .	30
2.10	(a) Calor específico $C_e$ em função da temperatura $T$ , para diversos valores da anisotropia $D$ , como mostrado na figura. Aqui as simulações foram realizadas para um tamanho linear de rede $L = 128$ em uma rede quadrada. (b) Calor específico $C_e$ em função da temperatura $T$ para vários tamanho de rede $L$ , como mostrado na figura, usamos anisotropia $D = 3.5$ fixa. . . . .	31
2.11	(a) Densidades $n_0$ e $n_1$ em função da temperatura $T$ , para vários valores de anisotropia $D$ . (b) Densidades $n_0$ e $n_1$ em função da anisotropia $D$ , para vários valores de temperatura $T$ , como mostrado na figura. Em ambas as figuras (a) e (b) as simulações foram realizadas para um tamanho linear de rede $L = 128$ em uma rede quadrada. . . . .	32

3.1	Diagrama do estado fundamental do <b>modelo-II</b> . As quatro fases: ordenadas $F_I$ , $F_{II}$ e desordenadas $P_I$ , $P_{II}$ são separados por transições de fase de primeira ordem. . . . .	34
3.2	Diagrama de fases no plano $D-T_c$ para o <b>modelo-II</b> nas redes quadradas e cúbicas. Aqui, consideramos o caso $D = D_A = D_B$ . As linhas com círculos (rede quadrada) e com quadrados (rede cúbica) denotam transições de fase de segunda ordem. . . . .	35
3.3	Quantidades termodinâmicas em função da temperatura $T$ para vários tamanhos de rede $L$ , como mostrado nas figuras. Aqui, usamos $D = D_A = D_B = 0$ em uma rede quadrada. (a) Cumulante de Binder de quarta-ordem da magnetização $U_L$ , (b) Magnetização total $m_T$ , (c) Energia $E$ , (d) Calor específico $C_e$ , (e) Susceptibilidade magnética $\chi_L$ e (f) Cumulante de Binder de quarta-ordem da energia $V_L$ . . . . .	37
3.4	Temperatura crítica $T_c$ versus anisotropia $D$ nas redes quadradas (a) e cúbicas (c), as linhas sólidas com círculos são pontos de compensação. (b) Magnetização alternada $m_S$ versus a temperatura $T$ para diferentes valores de $D$ , como mostrado na figura. (d) Magnetização alternada $m_S$ versus anisotropia $D$ para valores diferentes de $T$ , como mostrado na figura. Todos os resultados foram obtidos para $L = 128$ (rede quadrada) e $L = 32$ (rede cúbica). . . . .	39
3.5	(a) Diagrama de fases no plano $D_A - T_c$ para o modelo-II em uma rede quadrada, para diferentes valores de $D_B$ , como mostrado na figura. Todas as linhas sólidas representam transições de fase de segunda ordem. Os triângulos vazios denotam as larguras de histerese em transições de primeira ordem entre as fases $F_I$ e $P$ com o limite de transição de fase esperado representado pelas linhas pontilhadas. $F_I$ , $F_{II}$ são as fases ordenadas e $P$ é uma fase desordenada. (b) Diagrama de fases para o caso especial $D_B = 2.0$ , onde $F$ é uma fase ordenada e a linha sólida, para $T = 0$ , é uma fase com a coexistência de $F_I$ e $F_{II}$ . . . . .	40

- 3.6 Histerese da magnetização total  $m_T$  em função de forma crescente ( $\nabla$ ) e decrescente ( $\Delta$ ) da anisotropia  $D_A$ , para vários valores de  $T$  fixos indicados nas figuras. (a) Para anisotropia fixo  $D_B = 0.50$ , (b) para 1.00 e (c) para 1.50. Aqui as simulações foram realizadas para uma rede quadrada, com tamanho de rede linear  $L = 128$ . As setas de duas pontas denotam as larguras do ciclo de histerese, e as linhas pontilhadas são somente um guia para os olhos. . . . . 41
- 3.7 Diagrama de fases no plano  $D_B - T_c$  para o **modelo-II** na rede quadrada, para valores diferentes de  $D_A$ , como mostrado nas figuras: (a) para  $D_A = 1.00$ , (b) 0 e (c) -2.00. Todas as linhas com símbolos quadrados e círculos representam transições de fase de segunda ordem.  $F_I$  e  $F_{II}$  são fases ordenadas e  $P$  é uma fase desordenada. As linhas sólidas com triângulos são os pontos de compensação. . . . . 42
- 3.8 Magnetizações de sub-redes  $m_A$  (a) e  $m_B$  (b) em função da anisotropia  $D_B$ , para vários valores de  $T$ , como indicado nas figuras. Magnetização de sub-rede  $m_A$  (c) e  $m_B$  (d) em função da temperatura  $T$  para vários valores de  $D_B$ , conforme indicado nas figuras. Aqui, usamos um tamanho linear de rede  $L = 128$  (rede quadrada) e com anisotropia de sub-rede  $D_A = 1.0$  fixa. . . . . 44
- 3.9 Diagrama de fases no plano  $D_B - T_c$  para o modelo-II na rede quadrada, e para diferentes valores de  $D_A$  indicados na figura. Todas as linhas sólidas representam transições de fase de segunda ordem. Os triângulos vazios denotam as larguras de histerese em transições de primeira ordem entre as fases  $F_I$  e  $P$  com o limite de transição de fase esperado representado pelas linhas pontilhadas. A linha pontilhada com estrelas representa uma linha de pontos tricríticos.  $F_I$  e  $P$  são as fases ordenada e desordenada, respectivamente. . . . . 45
- 3.10 Histerese da magnetização total  $m_T$  em função da crescente ( $\nabla$ ) e decrescente ( $\Delta$ ) anisotropia  $D_B$  e para vários valores de temperaturas  $T$  fixas indicados nas figuras. (a) Para uma anisotropia fixa  $D_A = 3.00$ , (b) para 4.00 e (c) para 5.00. Aqui, usamos  $L = 128$  (rede quadrada) e as setas de duas pontas denotam as larguras do ciclo de histerese. As linhas pontilhadas são um guia para os olhos. . . . . 46

# SUMÁRIO

Agradecimentos

Epígrafe

Resumo

Abstract

Lista de Figuras

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>14</b>
1.1	Os modelos . . . . .	15
1.2	Método de Monte Carlo no modelo de Ising . . . . .	16
1.3	Descrição do algoritmo de Metropolis . . . . .	18
<b>2</b>	<b>Modelo de Ising ferromagnético com spins mistos <math>\sigma = 1/2</math> e <math>S = 1</math></b>	<b>20</b>
2.1	Estado fundamental . . . . .	20
2.2	Grandezas termodinâmicas . . . . .	21
2.3	Termalização . . . . .	23
2.4	Resultados . . . . .	25
2.5	Diagrama de fases . . . . .	26

2.6	Temperatura de compensação . . . . .	29
2.7	Calor específico . . . . .	30
<b>3</b>	<b>Modelo de Ising ferromagnético com spins mistos <math>\sigma = 1</math> e <math>S = 3/2</math></b>	<b>33</b>
3.1	Estado fundamental . . . . .	33
3.2	Caso $D = D_A = D_B$ . . . . .	34
3.2.1	Grandezas termodinâmicas . . . . .	35
3.2.2	Pontos de compensação . . . . .	37
3.3	Caso $D_B$ fixo . . . . .	39
3.3.1	Diagrama de fases . . . . .	39
3.4	Caso $D_A$ fixo . . . . .	41
<b>4</b>	<b>Conclusões e perspectivas futuras</b>	<b>47</b>
4.1	Conclusões . . . . .	47
4.2	Perspectivas futuras . . . . .	48
<b>A</b>	<b>Apêndice</b>	<b>49</b>
A.1	Certificados em eventos acadêmicos . . . . .	49
	<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>53</b>

Modelos de spins mistos são relevantes para se estudar as propriedades térmicas e magnéticas dos materiais ferrimagnéticos, fornecendo conhecimentos básicos necessários para possíveis produções de tecnologia. Além disso, são convenientes para estudos dos efeitos da inhomogeneidade no diagrama de fases e no comportamento multicrítico dos sistemas magnéticos. Esses modelos têm sido extensivamente estudados por várias abordagens, tais como, resultados exatos para casos especiais [1, 2, 3, 4, 5], por aproximação de campo médio [6, 7, 8, 9], teoria de campo efetivo [10, 11], simulações de Monte Carlo [12, 13, 14, 15] e outros métodos [16, 17].

Utilizamos no estudo de modelos com spins mistos, dentre as técnicas, a simulação de Monte Carlo, que é uma abordagem extremamente útil na obtenção das propriedades magnéticas como transição de fase, loop de histerese e permeabilidade de sistemas bastantes complicados, onde soluções analíticas ou até mesmo numéricas são difíceis de serem executadas. Neste trabalho foram realizadas simulações de Monte Carlo utilizando o algoritmo de metropolis [18], para obter os efeitos da anisotropia para dois sistemas ferromagnéticos de spins mistos em redes quadradas (2D) e cúbicas (3D).

Estudamos dois sistemas com spins mistos, constituídos por duas sub-redes interpenetrantes, tais como: **modelo-I**, com spin  $-1/2$  (estados  $\pm 1/2$ ) ocupando os sítios da sub-rede A, enquanto o spin  $-1$  (estados  $\pm 1; 0$ ) ocupa os sítios da sub-rede B, e o **modelo-II**, com spin  $-1$  (estados  $\pm 1; 0$ ) ocupando os sítios da sub-rede A, enquanto o spin  $-3/2$  (estados  $\pm 3/2; \pm 1/2$ ) ocupa os sítios da sub-rede B.

Ambos os modelos, apresentam uma competição envolvendo a energia de interação  $J$ , anisotropia  $D$  e a temperatura  $T$ . O parâmetro de interação  $J$  tende a construir a ordem magnética, alinhando os spins de forma paralelamente quando  $J > 0$  (interação ferromagnética), de forma antiparalela  $J < 0$  (interação antiferromagnética) e a ausência

de interação quando  $J = 0$  (paramagnética). A anisotropia  $D$  tende a dar preferência a determinados estados dos spins, assim hora ajuda na produção da ordem magnética, e hora atrapalha. Finalmente a temperatura  $T$ , devido a agitação térmica tende sempre a levar o sistema a destruição da ordem magnética.

Parte da motivação desse trabalho é obter o diagrama de fases do modelo-I, obtidos por W. Selke e J. Oitmaa [12], o qual observaram que em uma rede quadrada há somente transições de fase de segunda ordem, e ausência de pontos de compensação. Próximo a  $D(T = 0)/|J| = 4$  o modelo exibe uma intrigante estrutura de três picos no calor específico em função da temperatura  $T$ . Na rede cúbica, o modelo apresenta pontos de compensação na região de  $5.5 < D/|J| < 6$ , e também com o mesmo comportamento intrigante do calor específico em função da temperatura, e uma possível transição de fase de primeira ordem levantada pelo autor.

Portanto, a motivação deste estudo é rever os aspectos desse trabalho [12], com a justificativa de mostrar que o sistema não apresenta nenhuma transição de fase de primeira ordem em ambas as dimensões e analisar o comportamento do calor específico, que possivelmente tem como origem, a diferença de comportamento das sub-redes do sistema.

No modelo-II, a motivação é analisar o comportamento do sistema quando uma anisotropia de sub-rede se torna predominante sobre a outra. Para fim de comparação podemos usar o caso particular  $D = D_A = D_B$  [14] e quando à anisotropia  $D$  respeita uma distribuição de probabilidade bimodal [6, 15]. No trabalho [9] os autores utilizam uma teoria de campo médio, para estudar as anisotropias de sub-rede, no caso  $D_A \neq D_B$ , e com uma distribuição de probabilidade bimodal. Dessa forma temos como motivação, estudar os aspectos desenvolvido nestes trabalhos, utilizando o método de simulação de Monte Carlo, entretanto sem o efeito de aleatoriedade na anisotropia.

## 1.1 Os modelos

O **modelo-I**, descrito na figura 1.1(a) é representado pela hamiltoniana:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i S_j + D \sum_j S_j^2, \quad (1.1)$$

onde  $\sigma_i = (\pm \frac{1}{2})$  e  $S_j = (\pm 1; 0)$ ,  $J$  é a energia de interação e  $D$  o termo de anisotropia. A primeira soma é sobre todos os pares de spins primeiros vizinhos e a segunda sobre todos os spins da sub-rede com spins  $S$ .

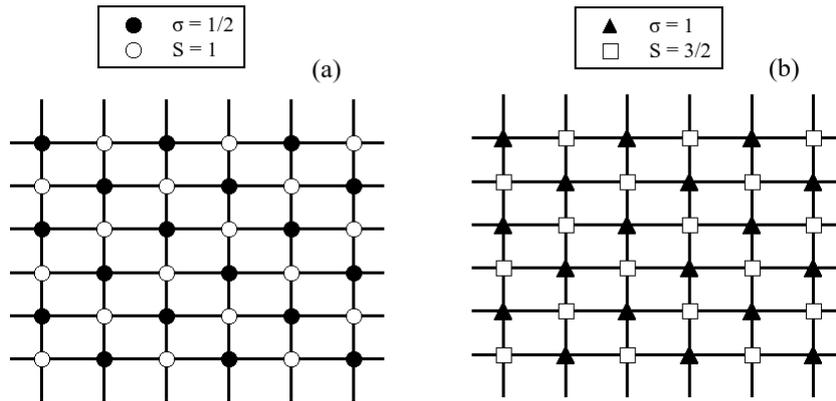


Figura 1.1: Representação esquemática de uma rede quadrada com spins mistos. (a) **Modelo-I**, spins  $-1/2$  com estados  $(\pm 1/2)$  na sub-rede A ( $\bullet$ ) e os spins  $-1$  com estados  $(\pm 1; 0)$  na sub-rede B ( $\circ$ ). (b) **Modelo-II**, spins  $-1$  com estados  $(\pm 1; 0)$  na sub-rede A ( $\blacktriangle$ ) e os spins  $-3/2$  com estados  $(\pm 3/2; \pm 1/2)$  na sub-rede B ( $\square$ ). Em ambos os modelos a energia de interação entre as sub-redes é do tipo ferromagnética ( $J > 0$ ).

De forma semelhante temos a hamiltoniana para o **modelo-II**, descrita da seguinte forma:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i S_j + D_A \sum_i \sigma_i^2 + D_B \sum_j S_j^2, \quad (1.2)$$

com  $\sigma_i = (\pm 1; 0)$  e  $S_j = (\pm \frac{3}{2}; \pm \frac{1}{2})$ ,  $J$  é a energia de interação entre os spins, o segundo e o terceiro termo corresponde as anisotropias  $D_A$  e  $D_B$  em suas respectivas sub-redes.

## 1.2 Método de Monte Carlo no modelo de Ising

O método de Monte Carlo [19, 20, 21] está relacionado com um processo estocástico, que depende de uma sequência aleatória de números gerados durante a simulação [22, 23] e a probabilidade do sistema de estar em uma configuração posterior depende apenas da sua configuração anterior. Em mecânica estatística de equilíbrio podemos relacionar as propriedades do sistema as suas configurações microscópicas, estamos dessa forma interessados no cálculo de médias do tipo:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_i A_i e^{-\beta H(i)}}{\sum_i e^{-\beta H(i)}}, \quad (1.3)$$

onde a soma é sobre todas as configurações microscópicas do sistema representado pela hamiltoniana  $H$ ,  $H(i)$  é a energia associada  $i$ -ésima configuração  $A_i$ , e  $\beta = 1/k_B T$ .

Para o modelo de Ising de spins mistos, constituído de duas sub-redes interpenetrantes, temos que a soma deve ser realizada sobre  $2^{N/2} 3^{N/2}$  configurações para o **modelo-I** e sobre  $3^{N/2} 4^{N/2}$  para o **modelo-II**. Dessa forma para  $N$  grande, torna-se impraticável este cálculo

analítico, e a solução é fazer a média considerando apenas configurações representativas do sistema. Para que  $N$ , dentro de um certo limite, possa representar o sistema no limite termodinâmico ( $N \rightarrow \infty$ ), é necessário usar uma teoria de escala [24], para estudar um tamanho reduzido do sistema e se estender ao caso para  $N$  tendendo ao infinito.

A essência da ideia por trás do método de Monte Carlo, é analisar quais configurações do sistema contribuem mais para o cálculo  $\langle A \rangle$  na equação (1.3) e ignorar todas as outras, e assim obter uma boa estimativa de seu valor. A técnica para escolher estas configurações representativas importantes é chamado de amostragem por importância, geralmente relacionado com o fator de Boltzmann.

Reescrevendo a equação (1.3), podemos mostrar a relação entre o valor médio e a probabilidade de ocorrência  $P = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(i)}$ , para valores discretos  $A_i$ , onde está relacionada com a função de partição  $Z = \sum_i e^{-\beta H(i)}$ , é dado por:

$$\langle A \rangle = \sum_i A_i P(A_i). \quad (1.4)$$

As configurações representativas devem ser obtidas quando o sistema estiver no seu estado de equilíbrio. Sendo condição necessário para se calcular as quantidades termodinâmicas, dessa forma tem que se levar em conta a dinâmica das transições entre as configurações do sistema  $w(y \rightarrow y')$ , através da equação mestra [22, 25]. Obtemos a variação das probabilidades das configurações com o tempo, dado por:

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = \sum_{y'} \left[ w(y' \rightarrow y) P(y', t) - w(y \rightarrow y') P(y, t) \right], \quad (1.5)$$

$y$  e  $y'$  as configurações microscópicas do sistema,  $P(y, t)$  é a probabilidade de encontrar o sistema na configuração  $y$  num instante de tempo,  $w(y \rightarrow y')$  a probabilidade de transição de  $y$  para  $y'$ .

Com uma determinada quantidade de seqüências de configurações, pois as configurações iniciais são geradas longe do equilíbrio termodinâmico, no equilíbrio as probabilidades  $P(y, t) \rightarrow P_o(y)$  a forma de Gibbs:

$$P_o(y) = \frac{1}{Z_N} e^{-\beta H(y)}, \quad (1.6)$$

onde  $Z_N$  é a função de partição canônica. Com isso, temos que uma condição necessária para o estado de equilíbrio, quando a equação de balanço detalhado, é dado por:

$$P_o(y)w(y \rightarrow y') = P_o(y')w(y' \rightarrow y), \quad (1.7)$$

que nos diz que em média, o sistema deve ir de  $y$  para  $y'$  com a mesma probabilidade que vai de  $y'$  para  $y$ .

Com as equações (1.6) e (1.7), podemos ajustar as probabilidades de transição, de forma a relacionar a variação de energia entre as configurações do sistema, que acaba sendo uma liberdade de como o sistema alcança o equilíbrio de Gibbs.

$$\frac{w(y \rightarrow y')}{w(y' \rightarrow y)} = \frac{P_o(y')}{P_o(y)} = e^{-\beta\Delta H}. \quad (1.8)$$

Portanto a probabilidade de transição na simulação de Monte Carlo pode ser fornecida pelo algoritmo de Metropolis [18], em que  $\tau$  é interpretado com um passo de Monte Carlo:

$$w(y \rightarrow y') = \begin{cases} \frac{1}{\tau} e^{-\beta\Delta H} & \Delta H > 0 \\ \frac{1}{\tau} & \Delta H < 0 \end{cases} \quad (1.9)$$

### 1.3 Descrição do algoritmo de Metropolis

Vamos limitar a tratar o Monte Carlo (MC) via o algoritmo de Metropolis, pois há diversas forma de implementação do método [26, 27]. Por simplicidade, vamos considerar o modelo de Ising [28] representado pela hamiltoniana:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle}^N S_i S_j, \quad (1.10)$$

onde  $J$  é o termo de energia de interação entre os spins primeiros vizinhos,  $S_i$  são os spins com estados ( $\pm 1$ ), e os subíndice denotam a sua localização ou denominação na rede. O algoritmo segue os seguintes passos:

- Primeiro passo, considerar uma configuração inicial do sistema. Por exemplo todos os spins com estados  $+1$  (para cima), porém é recomendado que as orientações dos spins sejam escolhidas aleatoriamente.
- Segundo passo, inverter a orientação de um dos spins, escolhido aleatoriamente e assim calcular  $K = e^{-\beta\Delta E}$ , onde  $\Delta E = E_f - E_i$  é a variação da energia associada

à mudança de estado do spin selecionado, que está relacionada com a disposição da configuração dos estados do spins da rede.

- O terceiro passo, consiste em aceitar a inversão do estado do spin selecionado se  $\Delta E < 0$ , em seguida, voltar ao segundo passo nessa nova configuração. Caso  $\Delta E > 0$ , a inversão do spin aumentou a energia do sistema, neste caso a inversão do spin não é aceita, a menos que  $K$  seja maior que um número aleatório  $Z$  escolhido entre zero e 1. Por fim, volta ao segundo passo na nova configuração, caso contrário, na configuração anterior a inversão do spin.
- Este processo se repete até todos os sítios da rede forem visitados, ou seja, todos os spins tem a oportunidade de flipar, e quando isto ocorre temos um passo de Monte Carlo (MC).

A quantidade necessária de MCs para se calcular as quantidades termodinâmicas, apresenta dependência com o nível de complexidade que o modelo se propõe a descrever, sendo ainda necessário o descarte dos MCs iniciais para se garantir um sistema em seu estado de equilíbrio. Isso também está relacionado com o nível de complexidade do modelo, sendo essencialmente um dos primeiros parâmetros a ser obtido em simulação de Monte Carlo.

Basicamente esta descrição reproduz as probabilidades de transição do algoritmo de metropolis, que leva o sistema ao seu estado de equilíbrio. As configurações nas quais o sistema não se apresenta termalizado são descartadas, dessa forma o cálculo dos observáveis são realizadas de acordo com a termodinâmica de equilíbrio.

## Modelo de Ising ferromagnético com spins mistos

$$\sigma = 1/2 \text{ e } S = 1$$

Nesta seção vamos estudar o **modelo-I**, na rede quadrada e cúbica, representado na equação (2.1), através do método de Monte Carlo usando o algoritmo de Metropolis. Nas simulações, o algoritmo percorre localmente cada ponto da rede, sendo esta constituída por  $L \times L$  sítios para uma rede quadrada e, de forma similar,  $L \times L \times L$  para a rede cúbica. Foram empregadas condições de contorno periódicas na rede.

A hamiltoniana para o **modelo-I** é descrito como:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i^A S_j^B + D \sum_{j \in B} S_j^2. \quad (2.1)$$

com a interação ferromagnética  $J > 0$  entre os  $\sigma_i^A = \pm 1$  da sub-rede A e os spins vizinhos  $S_j^B = \pm 1; 0$  da sub-rede B, sendo  $D$  o termo de anisotropia atuando apenas nos spins da sub-rede B. Nas simulações escolhemos a variável de spin  $\sigma_i^A = \pm 1$  em vez de  $\pm 1/2$ , essa escolha deve ser levada em consideração ao se calcular a magnetização de sub-rede  $m_A$  e os pontos de compensação. Esta mudança é equivalente a um reescalonamento do parâmetro de interação.

### 2.1 Estado fundamental

A partir da hamiltoniana do **modelo-I** (equação (2.1)), considerando  $\sigma_i^A = \pm 1/2$  e  $S_j^B = \pm 1; 0$ , podemos estudar o modelo no estado fundamental, quando a temperatura é  $T = 0$ . A energia na fase ferromagnética, na qual é definida pelas magnetizações de sub-rede  $m_A = 1/2$  e  $m_B = 1$  (para  $T = 0$ ), é  $e/J = -z/4 + D/2J$ , sendo  $z$  o número de coordenação do sistema. O **modelo-I** se encontra na fase ferromagnético

$F = (\pm 1/2, \pm 1)$  para  $(-\infty < D/J < z/2)$  e na fase paramagnética  $P = (0, 0)$  para valores de  $(z/2 < D/J < \infty)$ , sendo  $z/2$  um ponto crítico que representa uma transição de primeira ordem entre a fase ferromagnética e paramagnética. Podemos reescalonar o parâmetro de interação  $J$  de forma a obter o diagrama do estado fundamental, quando consideramos  $\sigma_i^A = \pm 1$  e  $S_j^B = \pm 1; 0$ , sendo a energia da fase ferromagnética definida como  $e/J = -z/2 + D/2J$ , temos assim uma fase ferromagnética no intervalo  $-\infty < D/J < z$  e uma fase paramagnética para  $z < D/J < \infty$ , com este reescalonamento, temos que  $D_c/J = 4$  e  $D_c/J = 6$  para uma rede quadrada e cúbica, respectivamente, representam pontos de transições de fase de primeira ordem (descontinuidade no parâmetro de ordem no ponto de transição) entre a fase ferromagnética e paramagnética.

## 2.2 Grandezas termodinâmicas

Para ambas as dimensões de rede, as simulações foram realizadas com  $3 \times 10^5$  passos de Monte Carlo, sendo descartados os primeiros  $1 \times 10^5$ . Aqui, um passo de Monte Carlo (MC) é definido quando todos os spins da rede são visitados pelo algoritmo de Metropolis e o cálculo das médias das quantidades termodinâmicas são realizadas para tamanhos lineares de rede  $L = 16$  a  $128$  na rede quadrada e  $L = 8$  a  $32$  na rede cúbica, sendo  $J/k_B = 1$ . Utilizamos também pelo menos 10 amostras independentes no cálculo das médias.

Calculamos a magnetização total  $m_T$ , alternada  $m_S$ , as magnetizações de sub-rede  $m_A$  e  $m_B$ , susceptibilidade magnética  $\chi_L$ , calor específico  $C_e$  e a energia do sistema  $E$ , juntamente com os cumulantes de Binder de quarta-ordem para a magnetização  $U_L$  e para a energia  $V_L$ .

A magnetização de uma configuração é dado pela soma de todos os spins da rede, mas como temos duas redes distintas de mesma proporções é necessário dividir o cálculo. Podemos assim definir  $m_A$  sendo a magnetização da sub-rede A,  $m_B$  da sub-rede B:

$$m_A = \frac{2}{N} \left\langle \sum_A \sigma_i \right\rangle, \quad (2.2)$$

$$m_B = \frac{2}{N} \left\langle \sum_B S_i \right\rangle, \quad (2.3)$$

e  $m_T$  a magnetização total, que consiste na soma da magnetizações das sub-redes:

$$m_T = \left\langle \sum_A \sigma_i + \sum_B S_j \right\rangle / N, \quad (2.4)$$

e ainda uma diferença das sub-redes como  $m_S$ , que vamos denominar de magnetização alternada:

$$m_S = \left\langle \sum_B S_j - \sum_A \sigma_i \right\rangle / N, \quad (2.5)$$

onde  $N$  é um número que representa a quantidade de spins no sistema, sendo  $N = L^2$  para uma rede quadrada e  $N = L^3$  para uma rede cúbica. Note que a magnetização da sub-rede  $m_A$  na equação (2.2) é para os spins-1/2, que por simplicidade podem assumir os valores  $(\pm 1)$ , sendo necessário posteriormente dividir seu valor pelo fator 2, pois temos que  $m_A(T = 0) = 1/2$  no estado fundamental e a magnetização de sub-rede  $m_B$  está relacionado com os spins-1 que podem assumir os estados  $(\pm 1; 0)$ . Em ambos os modelos vamos usar a magnetização total  $m_T$  como parâmetro de ordem [19], que é caracterizado como uma quantidade física para distinguir entre as diferentes fases, sendo  $m_T \neq 0$  para uma fase magnética e  $m_T = 0$  para uma fase paramagnética.

A partir das flutuações da magnetização total podemos calcular a susceptibilidade magnética  $\chi_L$  em função da temperatura  $T$ :

$$\chi_L = \frac{\langle m_T^2 \rangle - \langle m_T \rangle^2}{Nk_B T}. \quad (2.6)$$

A flutuação na energia  $E = \langle H \rangle / N$  fornece o calor específico:

$$C_e = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{Nk_B T^2}, \quad (2.7)$$

cumulante de Binder de quarta-ordem para magnetização total, para encontrar a temperatura crítica:

$$U_L = 1 - \frac{\langle m_T^4 \rangle}{3 \langle m_T^2 \rangle^2}, \quad (2.8)$$

e o cumulante de Binder de quarta-ordem da energia, para verificar as transição de fase:

$$V_L = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle}{3 \langle E^2 \rangle^2}. \quad (2.9)$$

A temperatura crítica  $T_c$  em uma transição de fase de segunda ordem, pode ser estimada pela posição dos picos das funções respostas, calor específico  $C_e$  e susceptibilidade magnética  $\chi_L$ , entretanto pode ser obtida com maior precisão pela intersecção dos cumulantes de Binder de quarta-ordem da magnetização total, para diferentes tamanhos de

rede  $L$ , embora eles não tenham nenhum significado experimental evidente, são quantidades extremamente úteis em simulações e apresentam comportamentos característicos nas transições de fase.

Através da teoria de escala de tamanho finito [24], podemos analisar o comportamento dos cumulantes em função do tamanho de rede  $L$ , e assim considerar o limite termodinâmico, quando a quantidade  $N$  tende ao infinito, para definir os pontos críticos e os tipos de transições de fase, ainda de forma complementar é possível analisar os histogramas da magnetização total  $p(m_T)$  em função de MCs, ou seja a probabilidade de encontrar uma configuração com a magnetização  $m_T$ .

### 2.3 Termalização

O primeiro passo, antes de se calcular as grandezas termodinâmicas de interesse, é necessário saber a quantidade de MCs para o modelo alcançar seu estado de equilíbrio termodinâmico, sendo que esta quantidade tem dependência no número  $N$  de spins da rede, temperatura  $T$ , configuração inicial, até mesmo do gerador de números aleatórios [23] utilizado pelo algoritmo Metropolis. Em cada simulação descartamos os passos iniciais, por estes se encontrar fora do equilíbrio. A termalização do sistema é uma condição necessária, pois estamos simulando um ensemble estatístico em equilíbrio e, por consequência obtendo as propriedades termodinâmicas.

Podemos observar o comportamento da magnetização total  $m_T$  (ver fig. 2.1(a)) e da energia  $E$  (ver fig. 2.1(b)) em função dos MCs para anisotropia  $D = 0$  e, alguns valores de temperatura  $T$  fixa, como mostrados nas figuras. Aqui, as grandezas termodinâmicas estão sendo analisadas, considerando o sistema com configurações iniciais dos estados de spins distribuídos aleatoriamente, para deixar explícito o MCs para o modelo alcançar seu estado de equilíbrio e, ainda sua relação com o aumento da temperatura. Todavia, esta quantidade necessária pode ser minimizada com a escolha de uma configuração inicial adequada, por exemplo, uma distribuição dos estados dos spins mais próxima do equilíbrio termodinâmico.

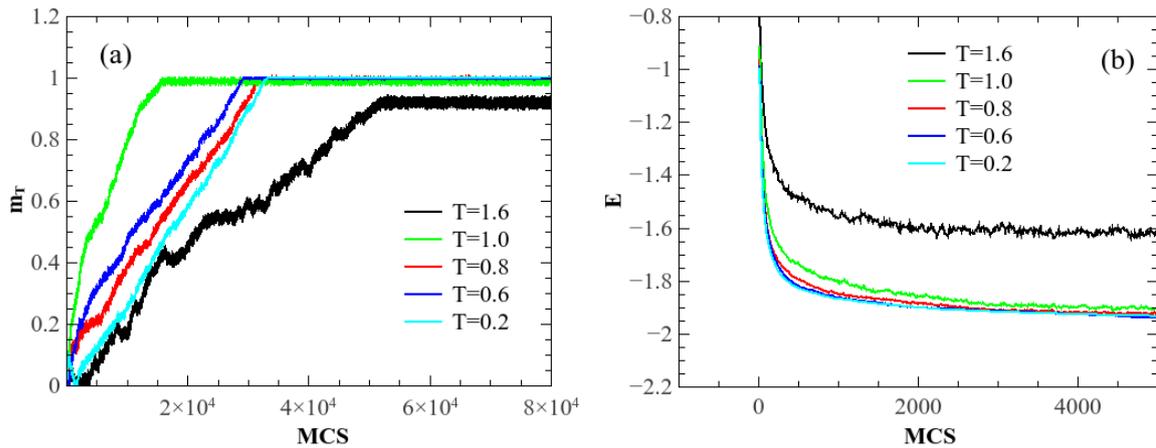


Figura 2.1: (a) Magnetização total  $m_T$  e (b) energia  $E$  em função dos passos de Monte Carlo (MCs) para vários valores da temperatura  $T$ , como mostrado nas figuras. Aqui, os resultados das simulações foram obtidos para uma rede quadrada de tamanho linear de rede  $L = 128$  e anisotropia  $D = 0$ .

De forma a complementar o raciocínio da figura 2.1, vamos mostrar o comportamento da magnetização total  $m_T$  e da energia  $E$  para diferentes tamanhos de rede e fixando a temperatura  $T = 1.0$  e  $D = 0$  (ver fig. 2.2). Quanto maior o tamanho de rede, mais tempo é necessário para termalizar, sendo que o tempo aqui é caracterizado como sendo os passos de Monte Carlo (MCs).

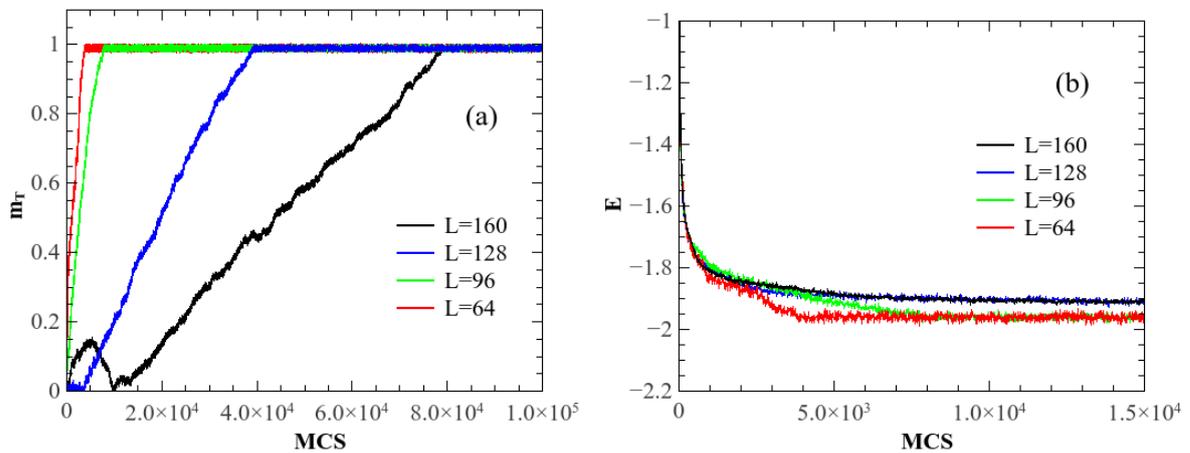


Figura 2.2: (a) Magnetização total  $m_T$  e (b) energia  $E$  em função dos passos de Monte Carlo (MCs) para vários tamanhos de rede  $L$ , como mostrados nas figuras. Aqui, os resultados das simulações foram obtidos para uma rede quadrada, fixando a temperatura  $T = 1.0$  e anisotropia  $D = 0$ .

## 2.4 Resultados

Agora vamos apresentar os resultados para as grandezas termodinâmicas, calculadas para uma rede cúbica, em função da temperatura  $T$  e da anisotropia  $D$ . Calculamos a magnetização total  $m_T$  e as magnetizações de sub-redes  $m_A$  e  $m_B$ , energia  $E$ , calor específico  $C_e$ , susceptibilidade magnética  $\chi_L$ , o cumulante de quarta-ordem da energia  $V_L$  e da magnetização total  $U_L$ .

Na figura 2.3(a)) temos a magnetização total e na figura 2.3(b)) a energia em função da temperatura  $T$ , para valores de anisotropia  $0 \leq D \leq 5.0$ . Podemos notar que o aumento da anisotropia favorece uma maior desordem no sistema, valores de anisotropia  $D > 0$  favorecem o estado zero dos spins da sub-rede B e, para valores de  $D < 0$  os estados  $\pm 1$ . Com o aumento da anisotropia, é necessário assim um menor incremento da temperatura para levar o sistema de uma fase ferromagnética  $F$  para uma fase paramagnética  $P$ .

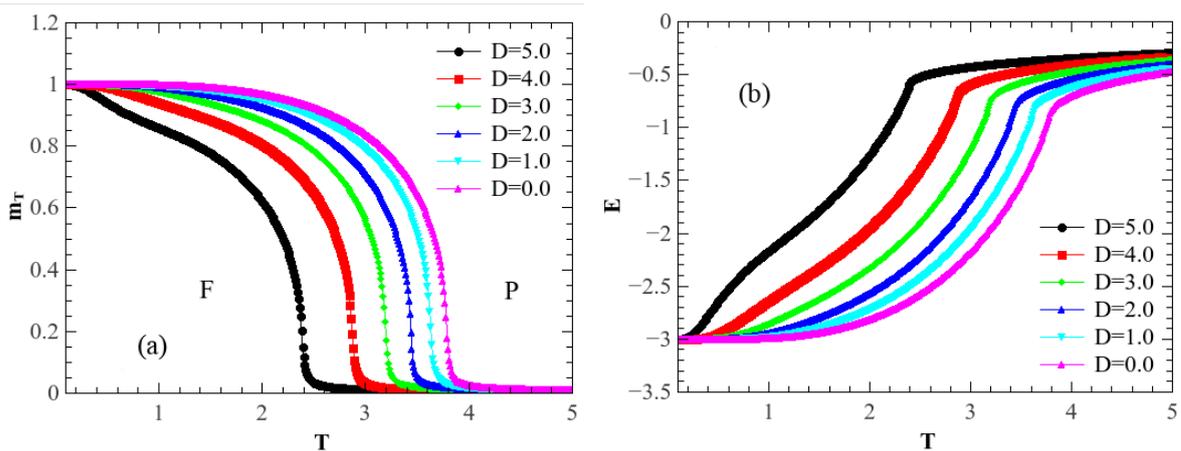


Figura 2.3: (a) Magnetização total  $m_T$  e (b) energia  $E$  em função da temperatura  $T$  para uma rede cúbica e para diversos valores de anisotropia  $D$ , como mostrado nas figuras. Aqui, as simulações foram realizadas para uma rede cúbica com tamanho linear de rede  $L = 32$ .

Na figura 2.4, exibimos as quantidades termodinâmicas, tais como, calor específico  $C_e$ , cumulante de quarta-ordem para energia  $V_L$  e a susceptibilidade magnética  $\chi_m$  em função da temperatura  $T$ , para alguns valores de anisotropia  $D$ , como mostrado nas figuras. Cada quantidade apresenta um comportamento característico em torno da temperatura crítica  $T_c$ , entretanto temos uma ressalva ao comportamento do calor específico, na qual vamos detalhar posteriormente.

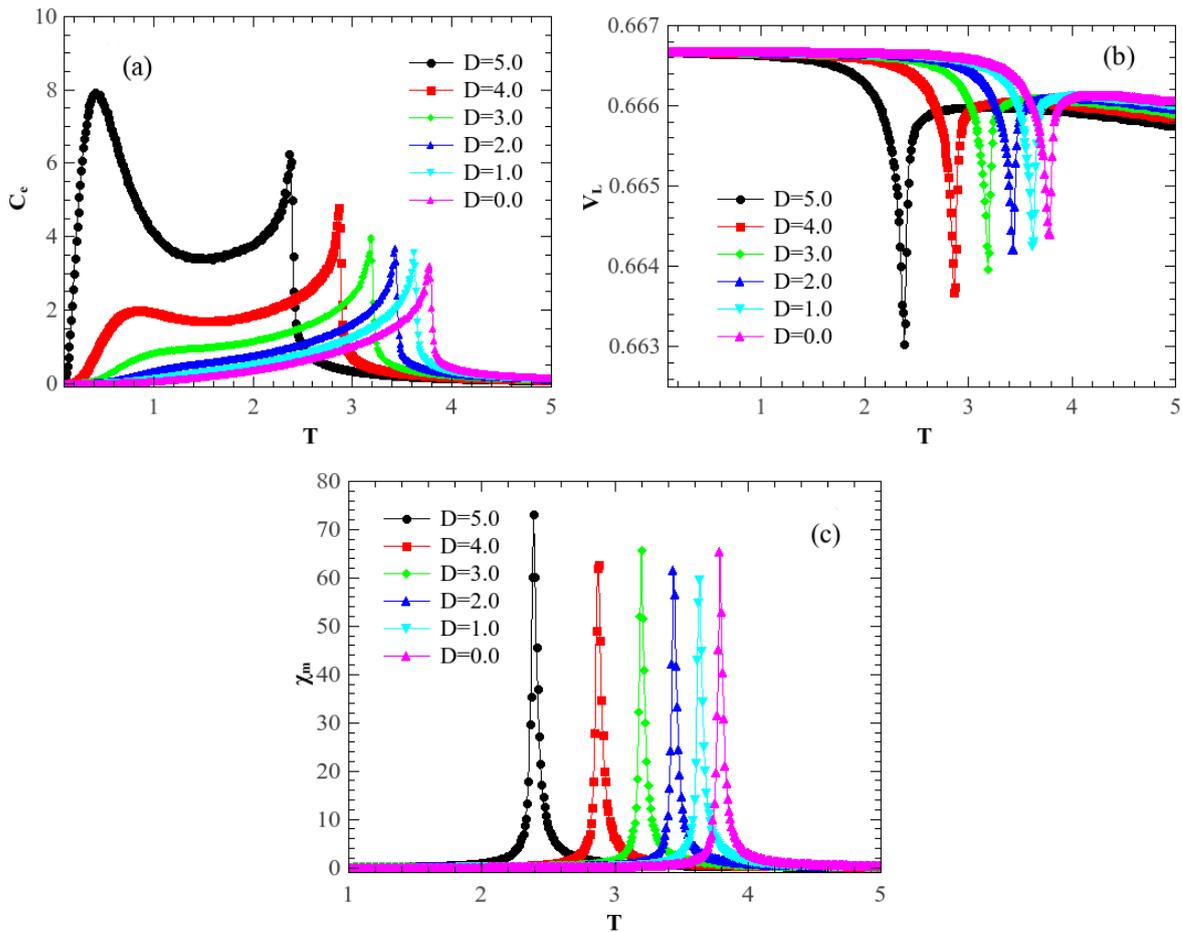


Figura 2.4: (a) Calor específico  $C_e$ , (b) cumulante de quarta-ordem para energia  $V_L$  e (c) susceptibilidade magnética  $\chi_m$  como função da temperatura  $T$ , para varios valores de anisotropia  $D$ , como mostrados nas figuras. Aqui, realizamos simulações para uma rede cúbica com tamanho linear de rede  $L = 32$ .

## 2.5 Diagrama de fases

Os pontos do diagrama de fases podem ser obtido de várias formas, entretanto neste trabalho fazemos do uso dos comportamentos característicos das quantidades para definir as temperaturas críticas  $T_c$  do sistema, sendo os picos da susceptibilidade magnética, intersecção do cumulante de quarta-ordem da magnetização para diversos tamanhos de rede e do mínimo do cumulante de quarta-ordem da energia.

Observando o diagrama de fases no plano temperatura crítica  $T_c$  versus anisotropia  $D$  do **modelo-I** na figura 2.5(a), temos que os pontos  $D = 4.0$  para a rede quadrada e  $D = 6.0$  para rede cúbica para temperatura  $T = 0$ , consiste nos pontos de transição de fase do estado fundamental. As linhas sólidas representam transições de fase de segunda ordem entre as fases ferromagnética  $F$  e paramagnética  $P$ . A figura 2.5(b) representa uma ampliação do diagrama de fases para a rede cúbica, no intervalo de anisotropia

$5.2 \leq D \leq 6.2$ , juntamente com as temperaturas em que as magnetizações de sub-redes  $|m_A|=|m_B|$ , e que temos definido como pontos de compensação.

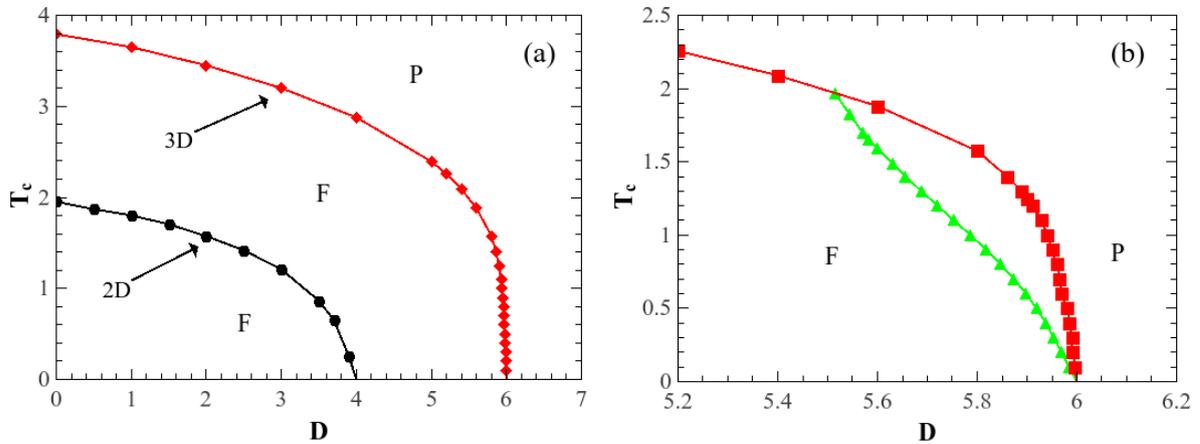


Figura 2.5: (a) Diagrama de fases do modelo-I no plano temperatura crítica  $T_c$  versus anisotropia  $D$ . As linhas com círculos (rede quadrada) e as com quadrados (rede cúbica) representam transições de fases de segunda ordem entre as fases ferromagnética  $F$  e a paramagnética  $P$ , respectivamente. (b) A linha sólida com quadrados representa as temperaturas críticas  $T_c$  em função da anisotropia  $D$ , no intervalo de  $5.2 \leq D \leq 6.2$ , e a linha sólida com triângulos representa os pontos no diagrama em que as magnetizações de sub-rede são iguais  $|m_A| = |m_B|$ , que consiste em pontos de compensação.

Analisando o comportamento do cumulante de quarta-ordem para energia  $V_L$  em função da anisotropia  $D$ , na rede quadrada (ver fig. 2.6(a)) e cúbica (ver fig. 2.6(b)), para  $T = 0.1$  fixa ( $T < T_c$ ),  $V_L$  apresenta um valor mínimo em torno da anisotropia crítica  $D_c$ , comportamento similar quando se analisa  $V_L$  em função da temperatura para um valor de anisotropia  $D$  fixa. Portanto, através de uma teoria de escala, podemos analisar como o valor mínimo de  $V_L$  se escala com a tamanho do sistema. Para isso, vamos denominar este valor mínimo de  $V_{min}$ , e ver como esse valor de tamanho finito se comporta quando  $N \rightarrow \infty$ , se tender a  $V_* = 2/3$  o modelo apresenta uma transição de fase de segunda ordem, caso o valor seja  $V_* < 2/3$  o sistema apresenta uma transição de primeira ordem [14, 30].

Podemos assim analisar a ordem das transições de fase do **modelo-I**, na figura 2.7(a) para uma rede quadrada e, na figura 2.7(b) para uma rede cúbica, as simulações foram realizadas em ambas as dimensões, para a temperatura  $T = 0.1$ . Dessa forma podemos caracterizar o modelo, tendo somente transições de fase de segunda ordem entre as fases ferromagnética  $F$  e paramagnética  $P$ , com exceção do estado fundamental em que as transições de fase são de primeira ordem.

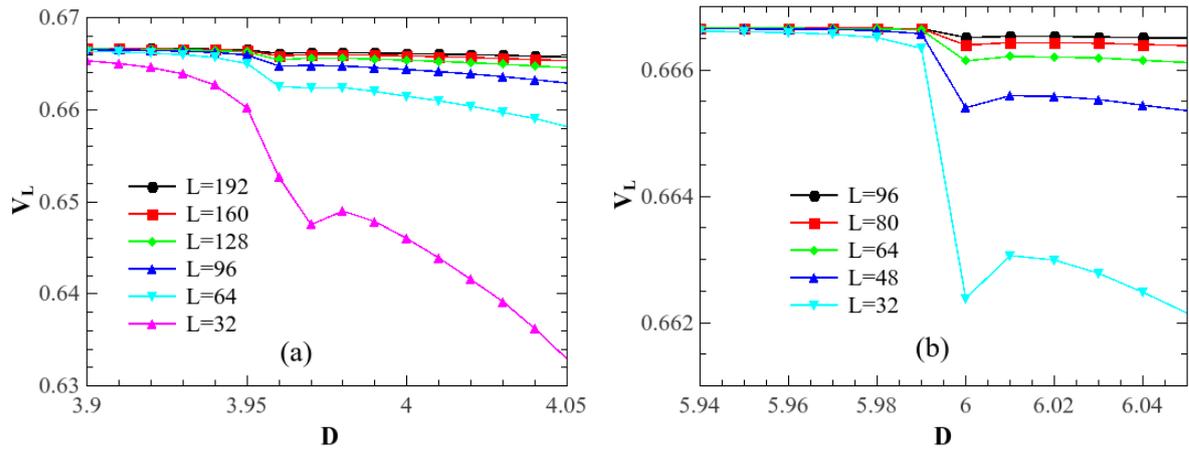


Figura 2.6: Cumulante de quarta ordem para a energia  $V_L$  em função da anisotropia  $D$  para diversos tamanhos de rede  $L$ , como mostrado nas figuras. Aqui, a simulação é realizada para uma temperatura fixa  $T = 0.1$ . (a) Para a rede quadrada. (b) Para a rede cúbica.

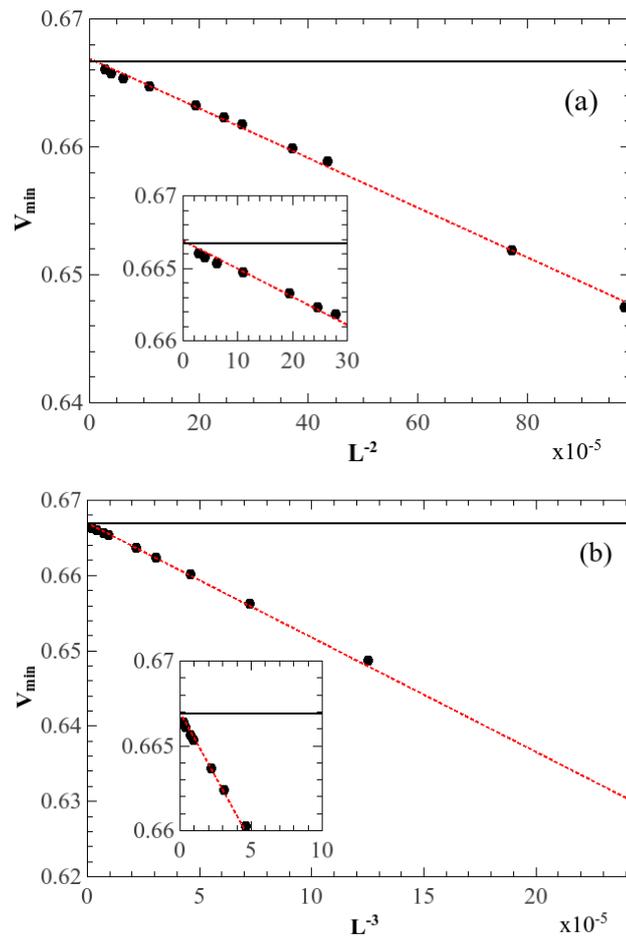


Figura 2.7: Valor mínimo do cumulante da energia  $V_{min}$  em função de  $L^{-d}$  para uma temperatura fixa  $T = 0.1$ . A linha pontilhada representa um ajuste linear aos valores representados pelos pontos. A linha sólida horizontal denota  $V^* = 2/3$ . (a)  $d = 2$  (rede quadrada) e (b)  $d = 3$  (rede cúbica) .

## 2.6 Temperatura de compensação

Vamos calcular os pontos de compensação do **modelo-I**, para isso vamos analisar as magnetizações de sub-rede  $m_A$  e  $m_B$  em função da temperatura  $T$  e mostrar que se cruzam, pela influência da anisotropia  $D$ .

Na figura 2.8(a) temos o comportamento das magnetizações de sub-redes em uma rede quadrada, para dois valores de anisotropia  $D = 3.5$  e  $D = 3.7$ , podemos observar que as magnetizações não se cruzam, na figura 2.8(b) temos a magnetização alternada  $m_S$  para os mesmos parâmetros, demonstrando que os valores das magnetizações de sub-rede se tornar mais próximas com o aumento da anisotropia, tendência vista com a diminuição da área sob a curva da magnetização  $m_S$ , entretanto não se cruzam.

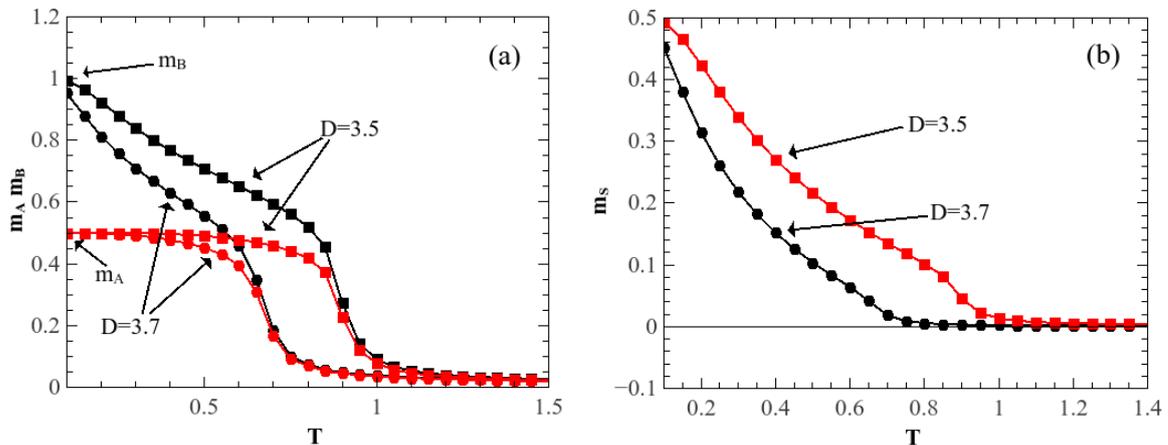


Figura 2.8: (a) Magnetizações de sub-rede  $m_A$  e  $m_B$  em função da temperatura  $T$ . (b) Magnetização alternada  $m_S$ , em função da temperatura  $T$ . As simulações foram realizadas para um tamanho linear de rede  $L = 128$ .

De forma similar, podemos mostrar o comportamento das magnetizações de sub-redes  $m_A$  e  $m_B$  em função da anisotropia  $D$ , em uma rede cúbica na figura 2.9(a), para temperatura  $T = 1.0$  fixa e, na figura 2.9(b) o comportamento da magnetização  $m_S$  em função da anisotropia  $D$ , para vários valores de temperatura  $T$  fixa, como mostrado na figura. Nas figuras os pontos em que as magnetizações de sub-redes são iguais, temos definidos como pontos de compensação, sendo este os mesmos apresentados na figura 2.5(b).

É necessário deixar claro que em um sistema ferromagnético ( $J > 0$ ), temos definido que  $m_A(T_{comp}) = m_B(T_{comp})$ ,  $m_S(T_{comp}) = 0$  e  $m_T(T_{comp}) \neq 0$ . Por outro lado, quando temos a energia de interação  $J < 0$ , estes pontos consistem na magnetização total do sistema nula, tendo as magnetizações de sub-redes  $m_A \neq 0$  e  $m_B \neq 0$ .

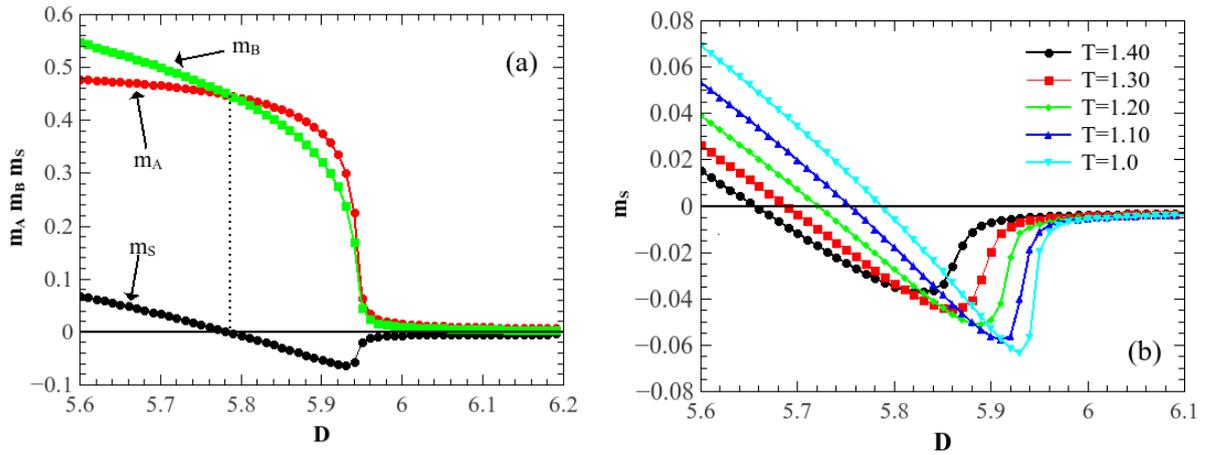


Figura 2.9: (a) Magnetizações de sub-redes  $m_A$ ,  $m_B$  e alternada  $m_S$  em função da anisotropia  $D$  para temperatura  $T = 1.0$  fixa. (b) Magnetização alternada  $m_S$  em função da anisotropia  $D$ , para vários valores de temperatura  $T$  fixa, como mostrado na figura. Aqui as simulações foram realizadas para uma rede cúbica, com tamanho linear de rede  $L = 32$ .

## 2.7 Calor específico

Uma grandeza termodinâmica, que apresentou um comportamento muito interessante neste **modelo-I**, é o calor específico (ver fig. 2.10 (a)), principalmente pelo surgimento de um máximo adicional em uma temperatura inferior a  $T_c$ , que vamos denominar de  $T_l$ . Este comportamento, torna-se mais evidente a partir de valores de anisotropia próximo de  $D(T = 0) = 4.0$  e  $D(T = 0) = 6.0$ , para uma rede quadrada e cúbica, respectivamente. Podemos evidenciar que  $T_l$  não depende do tamanho da rede  $L$  (ver fig 2.10 (b)), ou seja não obedece a uma lei de escala, dessa forma não se caracteriza com um ponto de transição de fase.

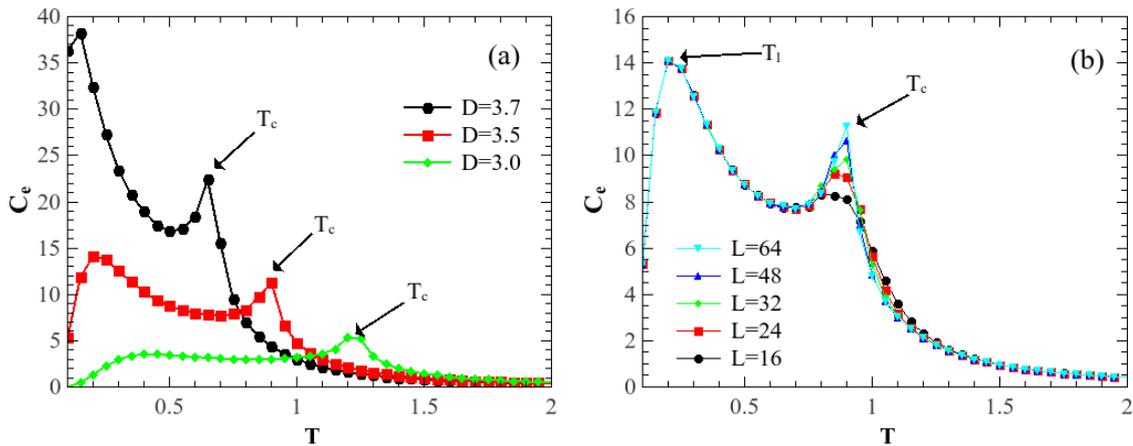


Figura 2.10: (a) Calor específico  $C_e$  em função da temperatura  $T$ , para diversos valores da anisotropia  $D$ , como mostrado na figura. Aqui as simulações foram realizadas para um tamanho linear de rede  $L = 128$  em uma rede quadrada. (b) Calor específico  $C_e$  em função da temperatura  $T$  para vários tamanho de rede  $L$ , como mostrado na figura, usamos anisotropia  $D = 3.5$  fixa.

Pelo carácter da anisotropia  $D$ , que dá preferência a determinados estados do spins da sub-rede B, para  $D > 0$  temos a preferência dos estados  $S = 0$ . Com o aumento de  $D$ , a quantidade de spins no estado  $S = 0$  aumentam, ou seja, temos uma competição na sub-rede B, da quantidade de spins em estados diferentes de zero e iguais a zero. Vamos denominar a quantidade de estados  $S = 0$  de  $n_0$  e os diferentes de zeros, ou seja os estados  $\pm 1$  de  $n_1$ . Fazendo esta análise somente na sub-rede B, pois somente os spins dessa sub-rede estão sobre a influência da anisotropia  $D$  e ainda pode fazer-se uma análise considerando uma densidades de estados  $\rho_S$ , pois a proporção de spins da sub-rede B é fixa, ou seja metade do sistema.

Podemos estudar as densidades de estados dos spin-1 da sub-rede B na figura 2.11 (a), em função da temperatura  $T$ , para vários valores de anisotropia  $D$  como mostrado na figura. Sendo  $n_0$  a densidade de estados  $S = 0$  e  $n_1$  a densidade de estados  $S = \pm 1$ , com o aumento de  $D$ ,  $n_0$  aumenta rapidamente, até o momento em que as densidades se torna iguais, estes pontos são bem próximos de  $T_c$ , entretanto este comportamento não ocorre para todos os valores de anisotropia  $D$ , ocorrendo com mais clareza para valores  $D > 3.0$ .

Observamos um comportamento similar das densidades de estados em função da anisotropia  $D$ , para valores de temperatura  $T$  fixa, na figura 2.11 (b), com o crescimento da temperatura  $n_0$  cresce rapidamente.

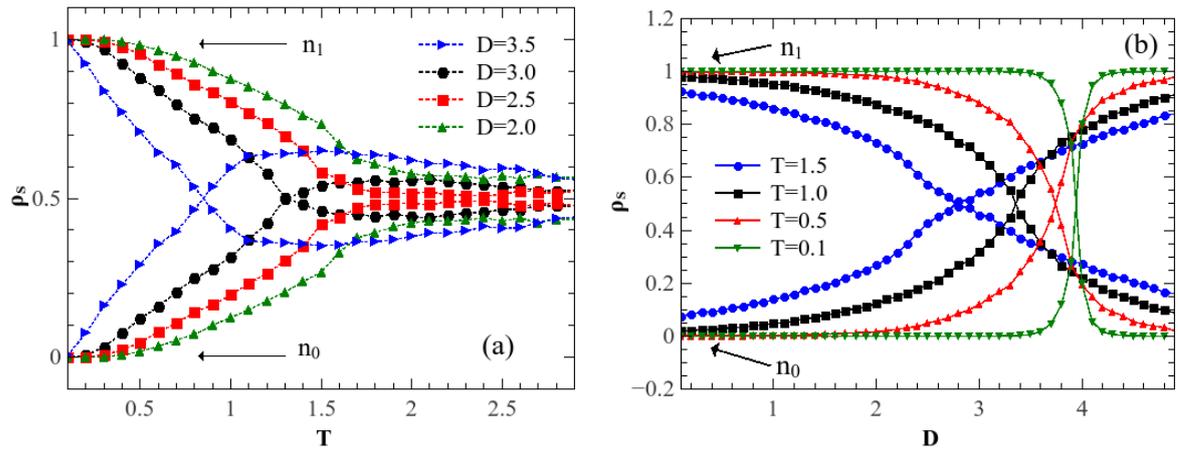


Figura 2.11: (a) Densidades  $n_0$  e  $n_1$  em função da temperatura  $T$ , para vários valores de anisotropia  $D$ . (b) Densidades  $n_0$  e  $n_1$  em função da anisotropia  $D$ , para vários valores de temperatura  $T$ , como mostrado na figura. Em ambas as figuras (a) e (b) as simulações foram realizadas para um tamanho linear de rede  $L = 128$  em uma rede quadrada.

De fato analisar somente a distribuição de densidades de estados  $n_0$  ou  $n_1$  não justifica o surgimento de  $T_l$ , mas evidência os efeitos da temperatura  $T$  e da anisotropia  $D$  para a transição ordem-desordem do sistema.

## Modelo de Ising ferromagnético com spins mistos

$$\sigma = 1 \text{ e } S = 3/2$$

Vamos agora apresentar os resultados do **modelo-II**, obtidos com o uso do método de Monte Carlo via o algoritmo de Metropolis. O modelo é constituído por duas sub-redes interpenetrantes com spin-1 (estados  $\pm 1$  e 0) que ocupa os sítios da sub-rede A, enquanto o spin-3/2 (estados  $\pm 3/2$  e  $\pm 1/2$ ) ocupa os sítios da sub-rede B. As interações entre os spins primeiros vizinhos são do tipo ferromagnética ( $J > 0$ ), em cada um dos sítios das sub-redes temos anisotropias, que são  $D_A$  e  $D_B$  atuando respectivamente em cada sub-rede. Este sistema é descrito pela seguinte hamiltoniana,

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i S_j + D_A \sum_i \sigma_i^2 + D_B \sum_j S_j^2, \quad (3.1)$$

onde o primeiro termo representa a interação entre os vizinhos mais próximos nas posições  $i$  e  $j$  localizadas nas sub-rede A e B, respectivamente.  $J$  é o parâmetro de interação e a soma é sobre todos os pares de spins vizinhos mais próximos. O segundo e terceiro termo representa as anisotropias  $D_A$  e  $D_B$  atuando em todos os sítios das sub-redes A e B, respectivamente. Portanto, esta soma é realizada sobre  $N/2$  spins da sub-rede A e B.

### 3.1 Estado fundamental

Primeiro, fazendo uma análise do estado fundamental do sistema, ou seja, para a temperatura  $T = 0$ , realizada de forma semelhante por Abubrig et al [7]. Para isso, vamos definir os parâmetro  $m_A$ ,  $m_B$ ,  $q_A$  e  $q_B$ , sendo  $m_A$  e  $m_B$  as magnetizações de sub-redes e  $q_A = \langle (\sigma_i^A)^2 \rangle$  e  $q_B = \langle (S_j^B)^2 \rangle$  os momentos de quadrupolo das sub-redes. O estado fundamental consiste de fases ordenadas e desordenadas, sendo as ordenadas ferromagnéticas definidas como:

$$F_I \equiv \left\{ 1, \frac{3}{2}, 1, \frac{9}{4} \right\} \text{ ou } F_I \equiv \left\{ -1, -\frac{3}{2}, 1, \frac{9}{4} \right\}, \quad (3.2)$$

e

$$F_{II} \equiv \left\{ 1, \frac{1}{2}, 1, \frac{1}{4} \right\} \text{ ou } F_{II} \equiv \left\{ -1, -\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{4} \right\}, \quad (3.3)$$

e as desordenadas como:

$$P_I \equiv \left\{ 0, 0, 0, \frac{9}{4} \right\} \text{ e } P_{II} \equiv \left\{ 0, 0, 0, \frac{1}{4} \right\}. \quad (3.4)$$

O diagrama de fases do estado fundamental (ver fig. 3.1) é determinado a partir da equação (3.1), comparando as energias das diferentes fases.

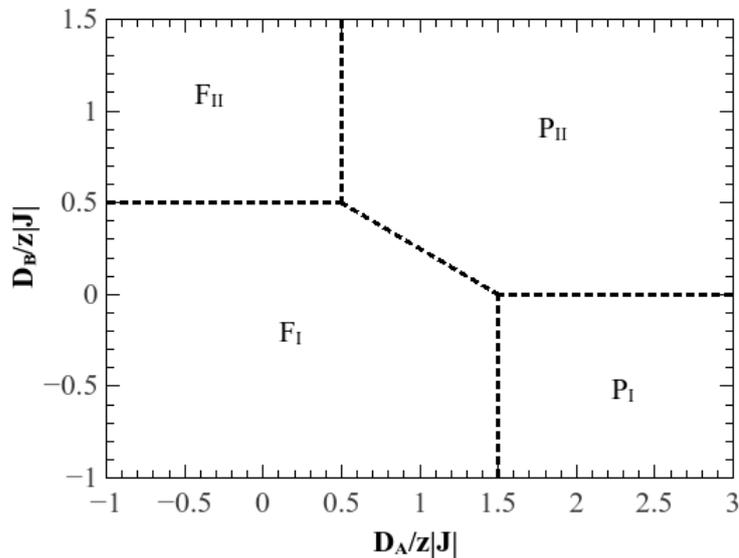


Figura 3.1: Diagrama do estado fundamental do **modelo-II**. As quatro fases: ordenadas  $F_I$ ,  $F_{II}$  e desordenadas  $P_I$ ,  $P_{II}$  são separados por transições de fase de primeira ordem.

### 3.2 Caso $D = D_A = D_B$

Nós também calculamos o diagrama de fases no plano  $D - T_c$  para um sistema ferromagnético em uma rede quadrada e cúbica (ver figura 3.2), obtido de forma semelhante por Žukovič e Bobák [14]. Considerando um caso particular, quando  $D_A = D_B$  na equação 3.1, podemos definir um novo parâmetro de anisotropia,  $D = D_A = D_B$ , de forma que todo o sistema tenha o mesmo valor de anisotropia.

Assim, podemos calcular as quantidades termodinâmicas definidas na seção 2.2, que são as seguintes: magnetização total  $m_T$ , magnetização alternada  $m_S$ , magnetizações de sub-rede A  $m_A$  e de sub-rede B  $m_B$ , susceptibilidade magnética  $\chi_m$ , calor específico  $C_e$ ,

energia do sistema  $E$  e os cumulantes de Binder de quarta-ordem para a magnetização  $U_L$  e para a energia  $V_L$ .

O diagrama de fases nesse caso particular apresenta somente linhas de transição de segunda ordem para rede quadrada e cúbica, entre a fase ordenada  $F_I$  e a desordenada  $P$  como pode ser visto na figura 3.2. Os pontos de transição podem ser estimados a partir das localizações dos picos do calor específico  $C_e$  (ver fig. 3.3(d)) e da susceptibilidade magnética  $\chi_L$  (ver fig. 3.3(e)). Para determinar os pontos críticos com maior precisão, podemos utilizar a intersecção das curvas do cumulante de quarta-ordem  $U_L$  para diferentes tamanhos de rede  $L$  (ver figura 3.3(a)) [20].

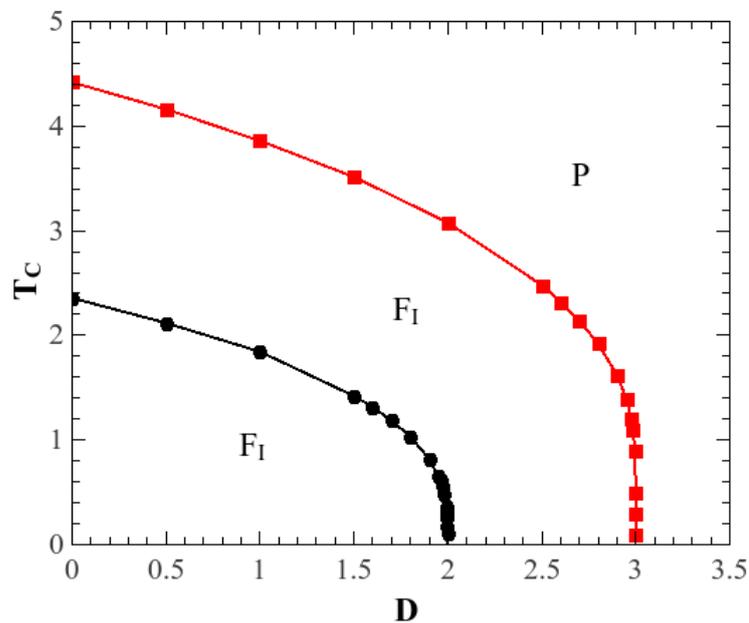


Figura 3.2: Diagrama de fases no plano  $D - T_c$  para o **modelo-II** nas redes quadradas e cúbicas. Aqui, consideramos o caso  $D = D_A = D_B$ . As linhas com círculos (rede quadrada) e com quadrados (rede cúbica) denotam transições de fase de segunda ordem.

### 3.2.1 Grandezas termodinâmicas

Podemos mostrar o comportamento das grandezas termodinâmicas (ver fig. 3.3) para o caso  $D = D_A = D_B = 0.0$  em uma rede quadrada, como apresentado anteriormente no **modelo-I**, estas quantidades respeitam uma certa relação com o tamanho do sistema, ou seja, com a quantidade de spins que constitui a rede quadrada ou cúbica, o que acontece pois estamos estudando uma porção finita de um sistema infinito, situação minimizada pelo uso de condições de contorno periódicas.

Na figura 3.3(a) temos o cumulante de Binder de quarta-ordem da magnetização total

$U_L$  em função da temperatura  $T$ , para vários tamanhos de rede  $L$ , como mostrado na figura, a partir da interseção das curvas podemos obter o valor da temperatura crítica  $T_c$ . Assim, obtivemos o valor de  $T_c$  para anisotropia  $D = 0.0$ , sendo  $T_c = 2.354 \pm 0.003$  para uma rede quadrada, em concordância com o valor obtido por Žukovič e Bobák [14], e também obtivemos para uma rede cúbica o valor de  $T_c = 4.419 \pm 0.002$  com o valor de anisotropia  $D = 0.0$ .

Na figura 3.3(b), apresentamos o comportamento da magnetização total  $m_T$  em função da temperatura  $T$ , para tamanhos de rede no intervalo  $16 \leq L \leq 128$ , pela definição de parâmetro de ordem [29], temos que a magnetização total  $m_T \neq 0$  na região  $T < T_c$  e  $m_T = 0$  para  $T > T_c$ , entretanto na figura observamos um efeito de escala que se caracteriza como sendo  $m_T \neq 0$  para  $T > T_c$ .

Na figura 3.3(c) temos a energia total  $E$  por spins, quantidade importante para se calcular o calor específico  $C_e$  (ver fig. 3.3(d)), juntamente com seu cumulante de Binder de quarta-ordem  $V_L$  (ver fig. 3.3(f)).

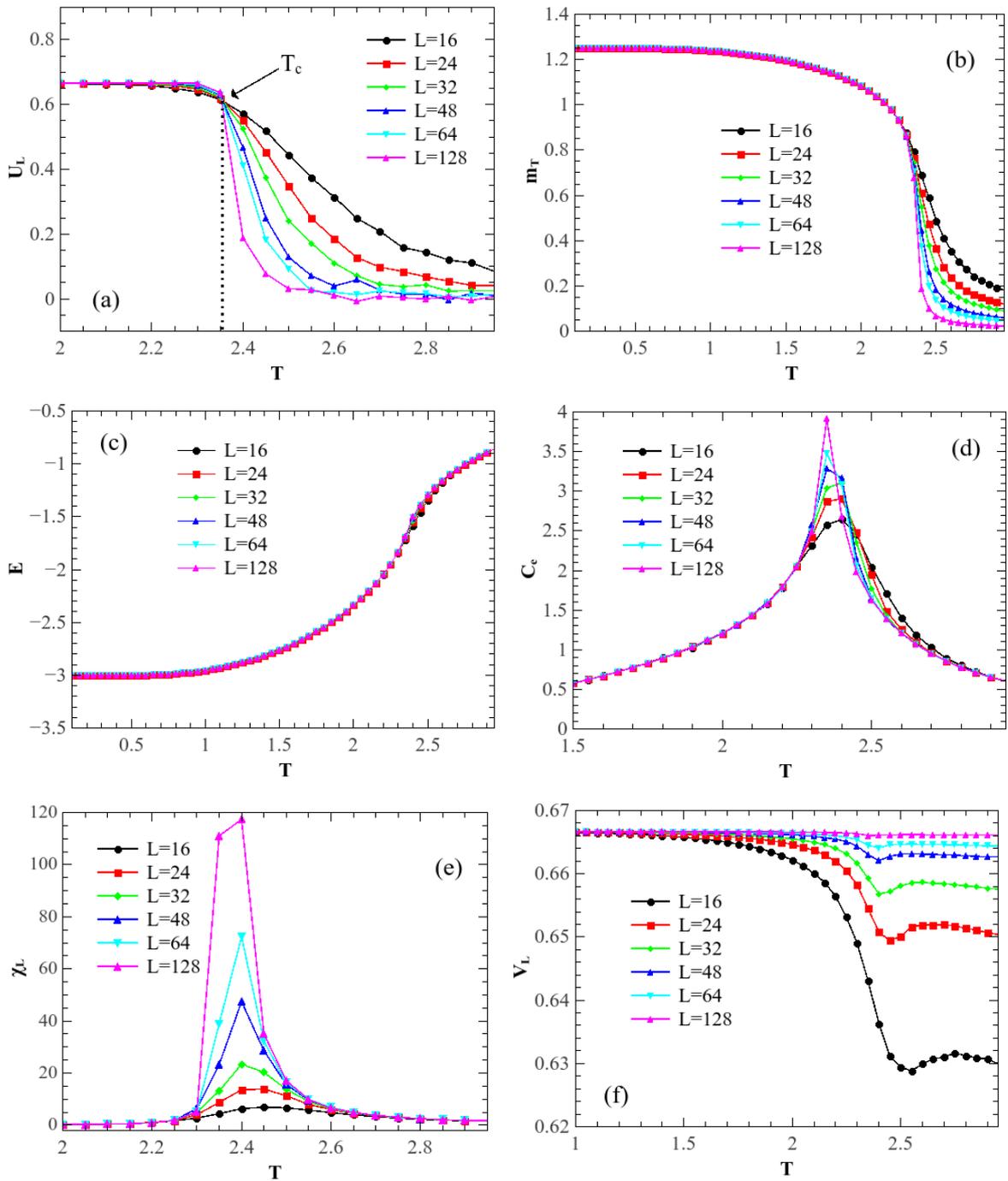


Figura 3.3: Quantidades termodinâmicas em função da temperatura  $T$  para vários tamanhos de rede  $L$ , como mostrado nas figuras. Aqui, usamos  $D = D_A = D_B = 0$  em uma rede quadrada. (a) Cumulante de Binder de quarta-ordem da magnetização  $U_L$ , (b) Magnetização total  $m_T$ , (c) Energia  $E$ , (d) Calor específico  $C_e$ , (e) Susceptibilidade magnética  $\chi_L$  e (f) Cumulante de Binder de quarta-ordem da energia  $V_L$ .

### 3.2.2 Pontos de compensação

Podemos também analisar o comportamento da magnetização alternada  $m_s$  para encontrar os pontos de compensação ou sua ausência na rede quadrada e cúbica. Con-

siderando se tratar de um sistema ferromagnético, estamos caracterizando este ponto de compensação como um ponto no qual  $m_A(T_{comp}) = m_B(T_{comp})$  com a condição  $T_{comp} < T_c$ . Sendo assim verificamos a existência do ponto de compensação em função da anisotropia  $D$  para uma rede quadrada (fig. 3.4(a)) e cúbica (fig. 3.4(c)). Na figura 3.4(a), podemos observar que não há ponto de compensação para valores de  $D < 1.954$ . Por outro lado, para o intervalo  $1.954 < D \leq 1.970$  encontramos dois pontos de compensação e, no intervalo de  $1.970 < D < 2.0$ , o sistema exhibe apenas um ponto de compensação. Para exhibir este comportamento de múltiplas compensação temos o comportamento do parâmetro  $m_S$  em função da temperatura  $T$ , para diferentes valores de  $D$ , como mostrado na figura 3.4(b).

Agora, para o caso da rede cúbica na figura 3.4(c), não encontramos nenhum ponto de compensação para  $D < 2.9067$ , enquanto que na faixa de  $2.9067 \leq D \leq 2.9809$  encontramos dois pontos de compensação e na faixa de  $2.9809 < D < 3.0$  apenas um ponto de compensação. Aqui, nós plotamos a magnetizada  $m_S$  em função da anisotropia  $D$ , para diferentes valores de  $T$ , como mostrado na figura 3.4(d), para evidenciar os múltiplos pontos de compensação na faixa de  $2.9067 \leq D \leq 2.9809$ , seria conveniente  $m_S$  em função da temperatura  $T$ , entretanto esta escolha é arbitrária, sendo completamente equivalente.

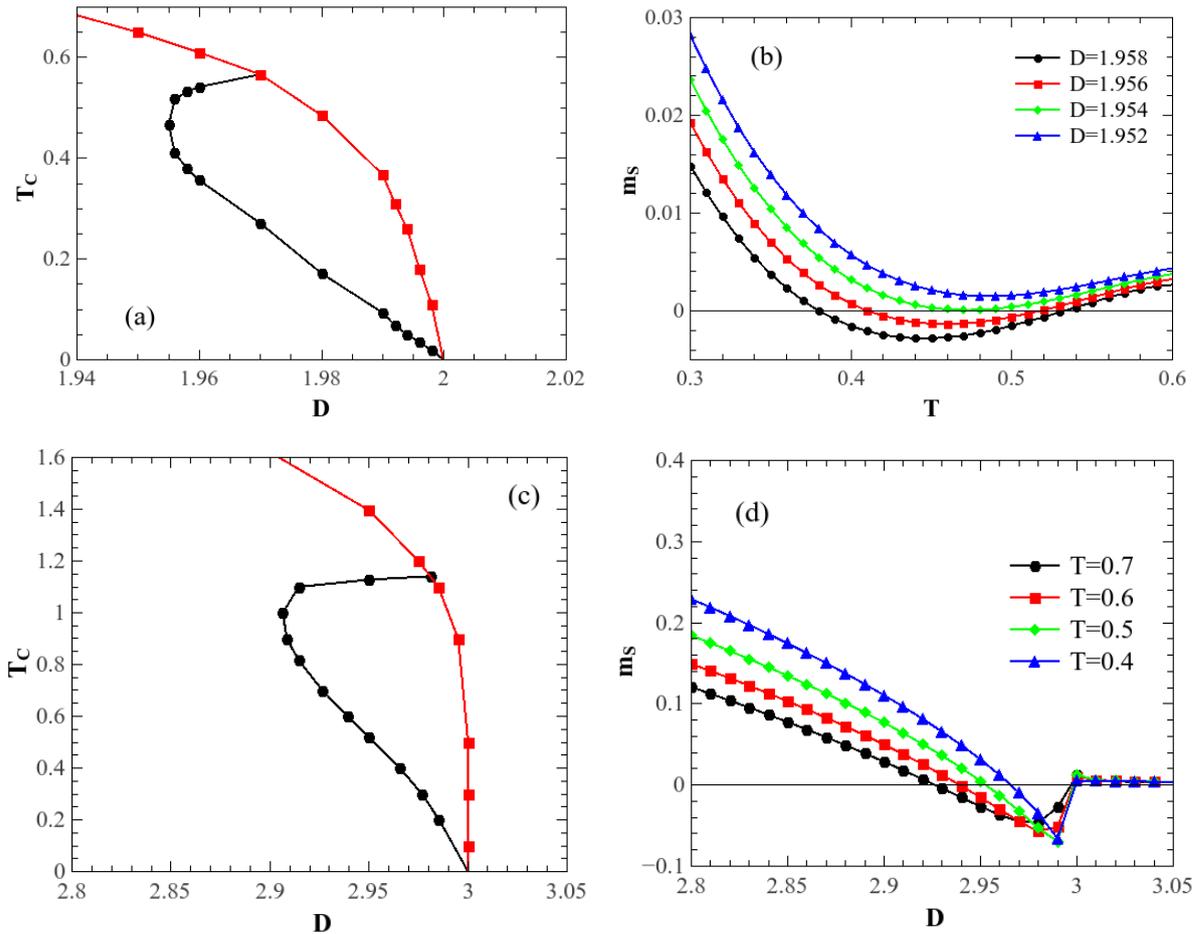


Figura 3.4: Temperatura crítica  $T_c$  versus anisotropia  $D$  nas redes quadradas (a) e cúbicas (c), as linhas sólidas com círculos são pontos de compensação. (b) Magnetização alternada  $m_S$  versus a temperatura  $T$  para diferentes valores de  $D$ , como mostrado na figura. (d) Magnetização alternada  $m_S$  versus anisotropia  $D$  para valores diferentes de  $T$ , como mostrado na figura. Todos os resultados foram obtidos para  $L = 128$  (rede quadrada) e  $L = 32$  (rede cúbica).

### 3.3 Caso $D_B$ fixo

Vamos agora considerar o caso que  $D_B$  é fixo na equação (3.1), o objetivo é estudar o comportamento das quantidades termodinâmicas em função da temperatura  $T$  e anisotropia  $D_A$ .

#### 3.3.1 Diagrama de fases

Na figura 3.5(a) apresentamos o diagrama de fases no plano  $D_A - T_c$  para uma rede quadrada ( $z = 4$ ) e para diferentes valores de  $D_B$  no intervalo  $0.0 < D_B < 2.50$ . Todas as linhas sólidas com símbolos representam transições de fase de segunda ordem entre

a fase ordenada  $F_I$  e a desordenada  $P$  para  $D_B \leq 0.0$ , e entre a fase ordenada  $F_{II}$  e a desordenada  $P$  para  $D_B \geq 2.0$ . Por outro lado, temos transições de fase de segunda ordem e de primeira ordem entre as fases  $F_I$  e  $P$  no intervalo de  $0.0 < D_B < 2.0$ . Nesta região, a fase ordenada  $F_I$  é separada da fase desordenada  $P$  por uma linha de transições de fase, que mudam no ponto tricrítico de segunda para primeira ordem, sendo que um ponto tricrítico é definido como o ponto do diagrama de fases que separa as transições de fase de segunda ordem e de primeira.

Calculamos as coordenadas dos pontos tricríticos representados por ( $\star$ ), por exemplo, as coordenadas de alguns pontos são:  $D_B = 1.50$  ( $D_A^t = 2.62$ ,  $T^t = 0.65$ ),  $D_B = 1.0$  ( $D_A^t = 3.48$ ,  $T^t = 0.75$ ) e  $D_B = 0.50$  ( $D_A^t = 4.43$ ,  $T^t = 0.70$ ). Assim, podemos observar que existe uma linha de pontos tricríticos que é representada por uma linha pontilhada de estrelas no diagrama de fases, esta linha está no intervalo de  $0.10 \leq D_B \leq 1.90$ . Por outro lado, o limite das transições de primeira ordem é obtido pela simples interpolação linear entre os pontos de transição estimados tricríticos e os pontos de transição do estado fundamental ( $T = 0$ ) do modelo, sendo esta linha pontilhada apenas um guia para os olhos.

Na figura 3.5(b) exibimos o diagrama de fases para o caso especial  $D_B = 2.0$ , onde definimos  $F$  ( $m_A \cong m_B \neq 0$ ) como uma fase ordenada diferente de  $F_I$  e  $F_{II}$ . A linha sólida, para  $T = 0$ , representa a coexistência das fases  $F_I$  e  $F_{II}$ .

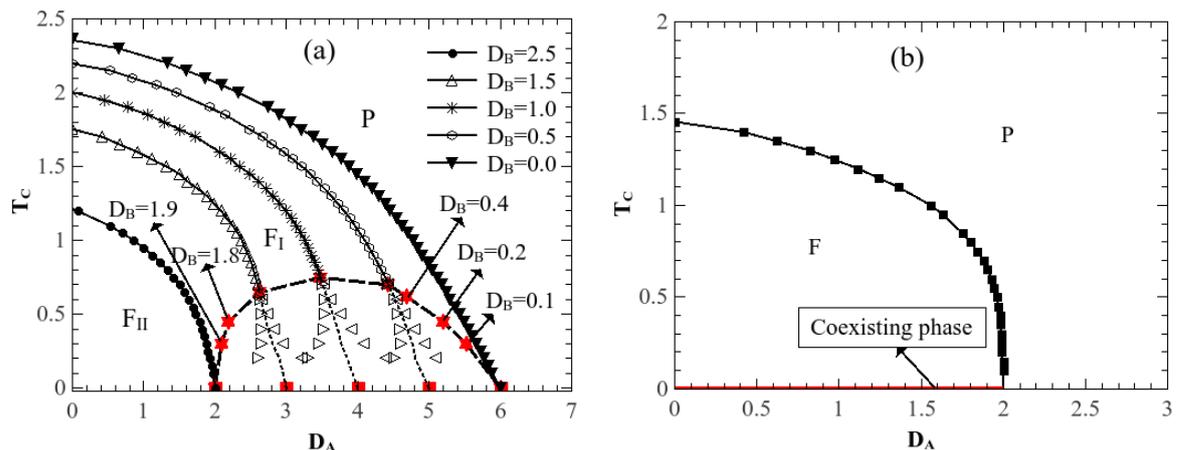


Figura 3.5: (a) Diagrama de fases no plano  $D_A - T_c$  para o modelo-II em uma rede quadrada, para diferentes valores de  $D_B$ , como mostrado na figura. Todas as linhas sólidas representam transições de fase de segunda ordem. Os triângulos vazios denotam as larguras de histerese em transições de primeira ordem entre as fases  $F_I$  e  $P$  com o limite de transição de fase esperado representado pelas linhas pontilhadas.  $F_I$ ,  $F_{II}$  são as fases ordenadas e  $P$  é uma fase desordenada. (b) Diagrama de fases para o caso especial  $D_B = 2.0$ , onde  $F$  é uma fase ordenada e a linha sólida, para  $T = 0$ , é uma fase com a coexistência de  $F_I$  e  $F_{II}$ .

Agora, observando a transição entre as duas fases  $F_I$  e  $P$  para baixas temperaturas, figura 3.5(a) e no intervalo de  $2.0 < D_B < 0$ . Apresentamos a magnetização total  $m_T$  como crescente ( $\nabla$ ) e decrescente ( $\triangle$ ) em função de  $D_A$ , para  $D_B = 0.50$  (ver fig. 3.6(a)), 1.00 (ver fig. 3.6(b)) e 1.50 (ver fig. 3.6(c)), podemos observar seu caráter descontínuo e o aparecimento de ciclos de histerese, cujas larguras aumentam com a diminuição da temperatura  $T$ . Aqui as simulações foram realizados para um tamanho linear  $L = 128$  (rede quadrada) e as setas de duas pontas denotam as larguras do ciclos de histereses.

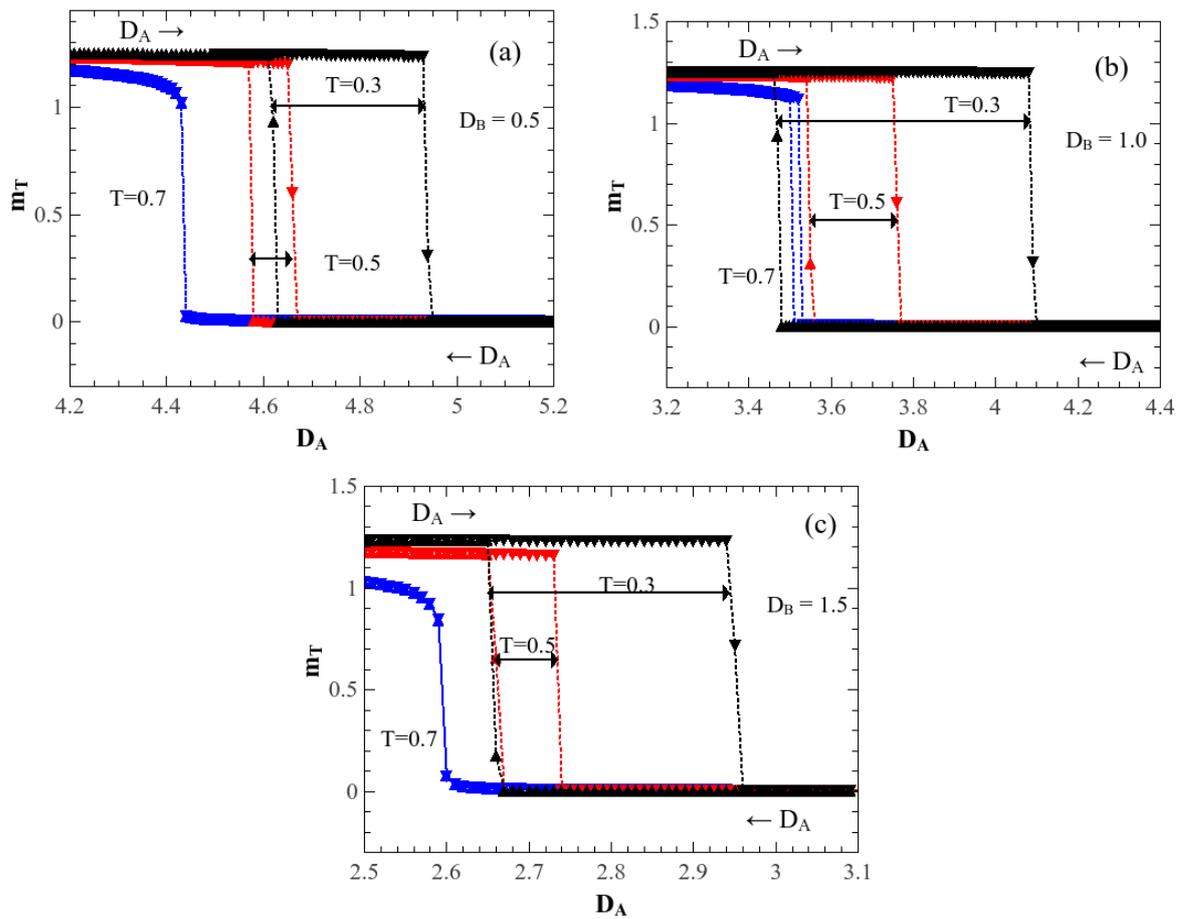


Figura 3.6: Histerese da magnetização total  $m_T$  em função de forma crescente ( $\nabla$ ) e decrescente ( $\triangle$ ) da anisotropia  $D_A$ , para vários valores de  $T$  fixos indicados nas figuras. (a) Para anisotropia fixo  $D_B = 0.50$ , (b) para 1.00 e (c) para 1.50. Aqui as simulações foram realizadas para uma rede quadrada, com tamanho de rede linear  $L = 128$ . As setas de duas pontas denotam as larguras do ciclo de histerese, e as linhas pontilhadas são somente um guia para os olhos.

### 3.4 Caso $D_A$ fixo

Finalmente nesta seção, exibimos o diagrama de fases no plano  $D_B - T_c$  para uma rede quadrada e com diferentes valores de  $D_A$  fixo, como mostrado nas figuras 3.7 e 3.9.

Primeiramente, nos diagramas de fases da figura 3.7(a) com  $D_A = 1.0$ , figura 3.7(b) com  $D_A = 0.0$  e figura 3.7(c) com  $D_A = -2.0$  encontramos apenas transições de fase de segunda ordem das fases ordenadas  $F_I$  e  $F_{II}$  com a fase desordenada  $P$  e, entre as fases ordenadas  $F_I$  e  $F_{II}$ . Também calculamos os pontos de compensação que são representados por linhas sólidas com triângulos.

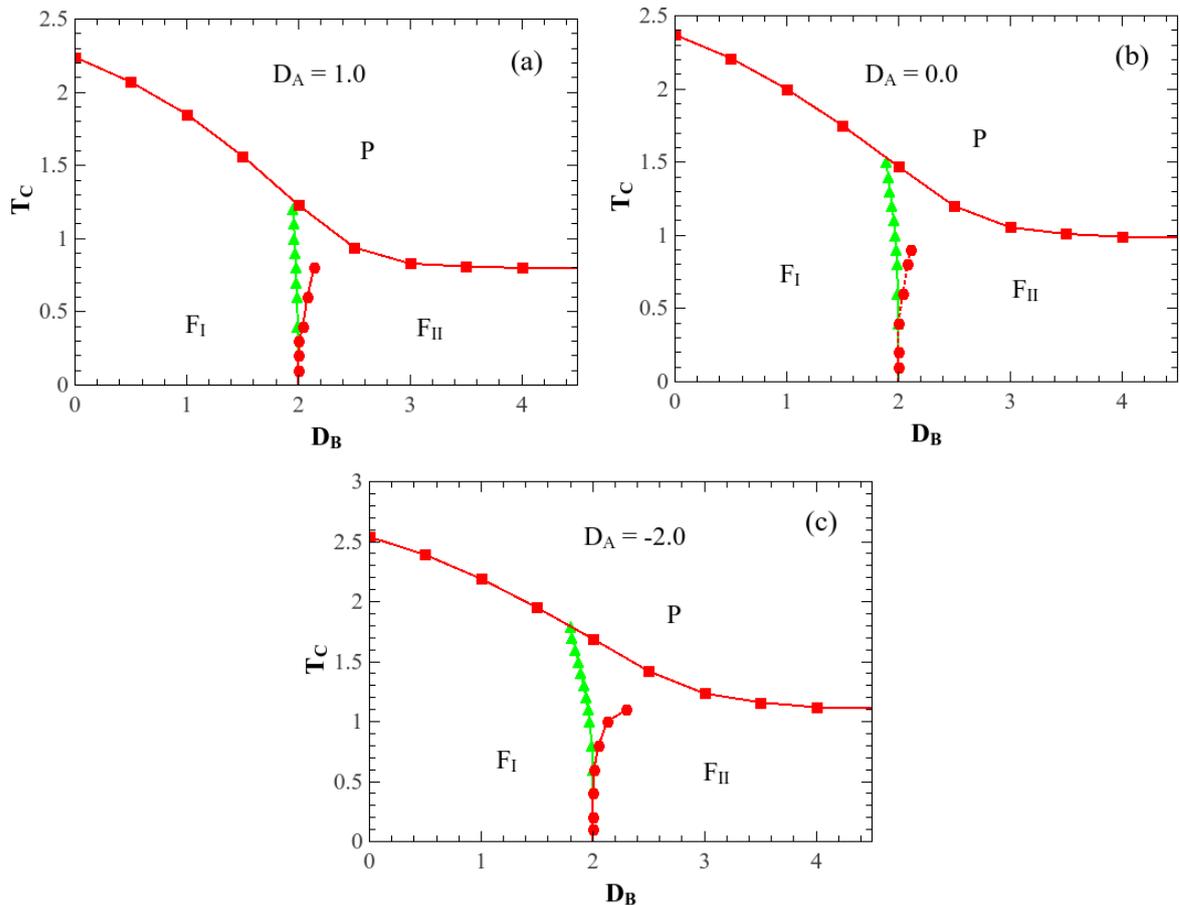


Figura 3.7: Diagrama de fases no plano  $D_B - T_c$  para o **modelo-II** na rede quadrada, para valores diferentes de  $D_A$ , como mostrado nas figuras: (a) para  $D_A = 1.00$ , (b) 0 e (c) -2.00. Todas as linhas com símbolos quadrados e círculos representam transições de fase de segunda ordem.  $F_I$  e  $F_{II}$  são fases ordenadas e  $P$  é uma fase desordenada. As linhas sólidas com triângulos são os pontos de compensação.

É importante agora examinar o comportamento das magnetizações de sub-redes  $m_A$  e  $m_B$  nas regiões de transição de fase de segunda ordem e verificar os diagramas de fases apresentados na figura 3.7. No entanto, restringimos nosso estudo ao comportamento da magnetização apenas para um valor de parâmetro  $D_A = 1.0$  (fig. 3.7(a)).

Assim, o comportamento de  $m_A$  e  $m_B$ , nessas transições, é mostrado na figura 3.8. Na figura 3.8(a) e (b), exibimos o comportamento  $m_A$  e  $m_B$  em função da anisotropia  $D_B$  para vários valores de  $T$ . No intervalo de  $0.0 \leq T \leq 0.2$  as magnetizações de sub-rede

são constantes  $m_A = 1.0$  e  $m_B = 1.5$  na fase  $F_I$  e vão para  $m_A = 1.0$  (sem alteração) e  $m_B = 0.5$  na fase  $F_{II}$ , com o mesmo valor crítico de  $D_B = 2.0$ . Por outro lado, na faixa de  $0.2 < T \leq 0.8$ , as magnetizações de sub-rede são  $m_A \approx 1.0$  e  $m_B \approx 1.5$  na fase  $F_I$  e vão para qualquer valor, mas com  $m_A \neq 0$  e  $m_B \neq 0$  na fase  $F_{II}$ . A linha de transição  $F_I$  para  $F_{II}$  termina no ponto final crítico que tem a coordenada: para  $D_A = 1.0$  ( $D_B^e = 2.14$ ,  $T_e = 0.80$ ),  $D_A = 0.0$  ( $D_B^e = 2.11$ ,  $T_e = 0.90$ ) e  $D_A = -2.0$  ( $D_B^e = 2.30$ ,  $T_e = 1.10$ ). Na figura 3.7(a) para  $T > 0.9$  a magnetização  $m_A$  e o  $m_B$  começam na fase  $F_I$ , cruza para a fase  $F_{II}$  e depois vão para a fase  $P$ , como por exemplo, podemos ver na curva para  $T = 1.0$  na figura 3.8(a).

Também podemos observar o comportamento de magnetizações de sub-rede na linha de transição  $F_I$ ,  $F_{II}$  para  $P$ . A dependência de  $m_A$  e  $m_B$  com a temperatura  $T$ , para vários valores de  $D_B$  como mostrados nas figuras 3.8 (c) e (d), respectivamente. Para baixas temperaturas, a magnetização de sub-rede  $m_B$  apresenta o fenômeno de reentrância, como pode ser visto para  $D_B = 2.1$  e  $D_B = 2.5$  na figura 3.8(d).

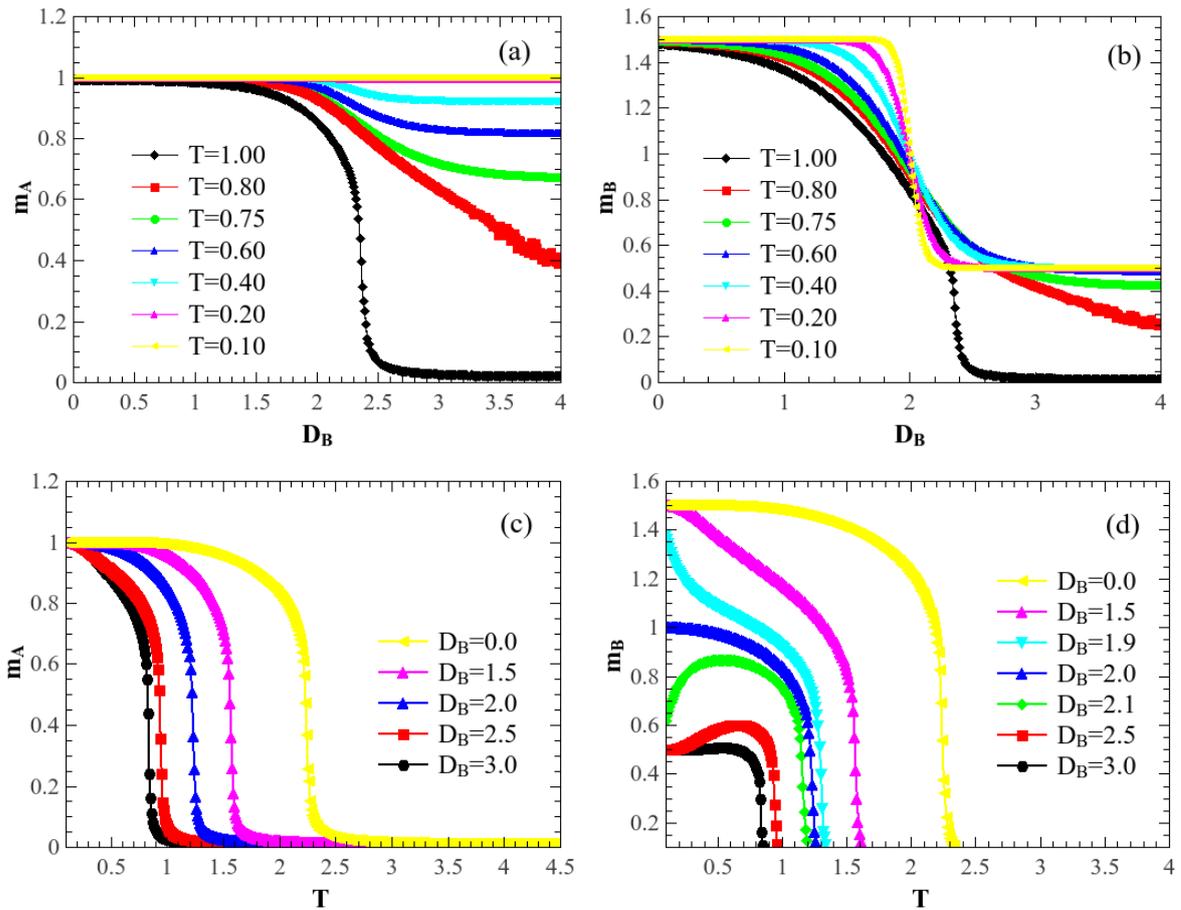


Figura 3.8: Magnetizações de sub-redes  $m_A$  (a) e  $m_B$  (b) em função da anisotropia  $D_B$ , para vários valores de  $T$ , como indicado nas figuras. Magnetização de sub-rede  $m_A$  (c) e  $m_B$  (d) em função da temperatura  $T$  para vários valores de  $D_B$ , conforme indicado nas figuras. Aqui, usamos um tamanho linear de rede  $L = 128$  (rede quadrada) e com anisotropia de sub-rede  $D_A = 1.0$  fixa.

Outro diagrama de fases que é importante, é o diagrama no plano  $D_B - T_c$  para alguns valores de  $D_A$  no intervalo  $2.0 < D_A < 6.0$  fixos, como indicado na figura 3.9. Para valores no intervalo de  $0.0 < D_B < 2.0$ , também temos linhas de transição de fase de segunda e primeira ordem ligadas por um ponto tricrítico que separam a fase  $F_I$  da fase  $P$ . Nós conectamos esses pontos por uma linha (linha pontilhada de estrelas) e mostramos que existe uma região, onde todas as linhas de transição de fase são de primeira ordem. Também podemos observar no diagrama de fases que os triângulos vazios representam as larguras de ciclo de histerese nas transições de primeira ordem entre as fases  $F_I$  e  $P$ . Essa linha de transição foi obtida usando o mesmo procedimento da seção anterior e a linha de transição de fase esperada é denotada por uma linha pontilhada.

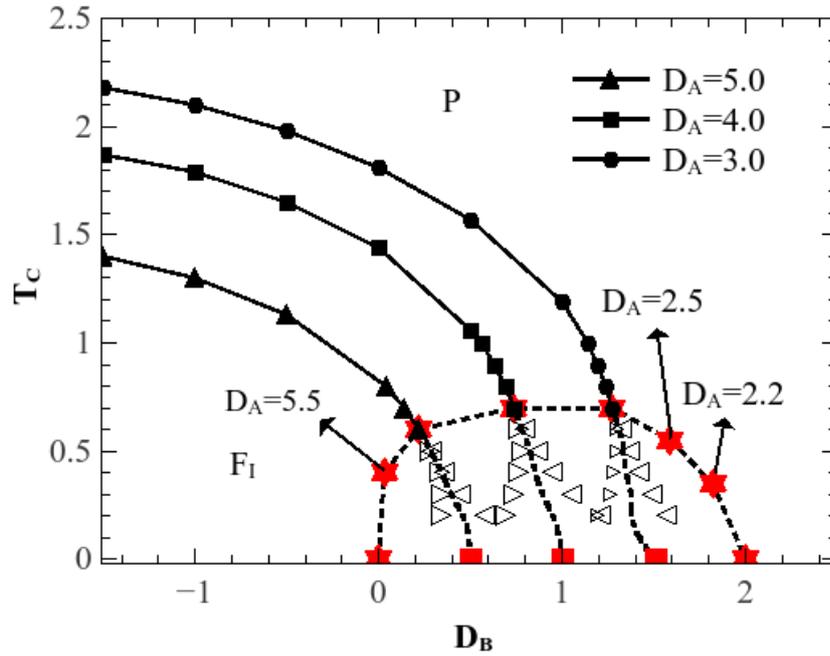


Figura 3.9: Diagrama de fases no plano  $D_B - T_c$  para o modelo-II na rede quadrada, e para diferentes valores de  $D_A$  indicados na figura. Todas as linhas sólidas representam transições de fase de segunda ordem. Os triângulos vazios denotam as larguras de histerese em transições de primeira ordem entre as fases  $F_I$  e  $P$  com o limite de transição de fase esperado representado pelas linhas pontilhadas. A linha pontilhada com estrelas representa uma linha de pontos tricríticos.  $F_I$  e  $P$  são as fases ordenada e desordenada, respectivamente.

Na figura 3.10, exibimos o ciclo de histerese da magnetização total  $m_T$  em função crescente ( $\nabla$ ) e decrescente ( $\triangle$ ) da anisotropia  $D_B$  e de vários valores de temperaturas  $T$  fixos indicados nas figuras. A figura 3.10(a) é para uma anisotropia fixa  $D_A = 3.0$ , (b) para  $D_A = 4.0$  e (c) para  $D_A = 5.0$ . Aqui, as setas de duas pontas denotam as larguras do ciclo de histerese e as linhas pontilhadas são um guia para os olhos.

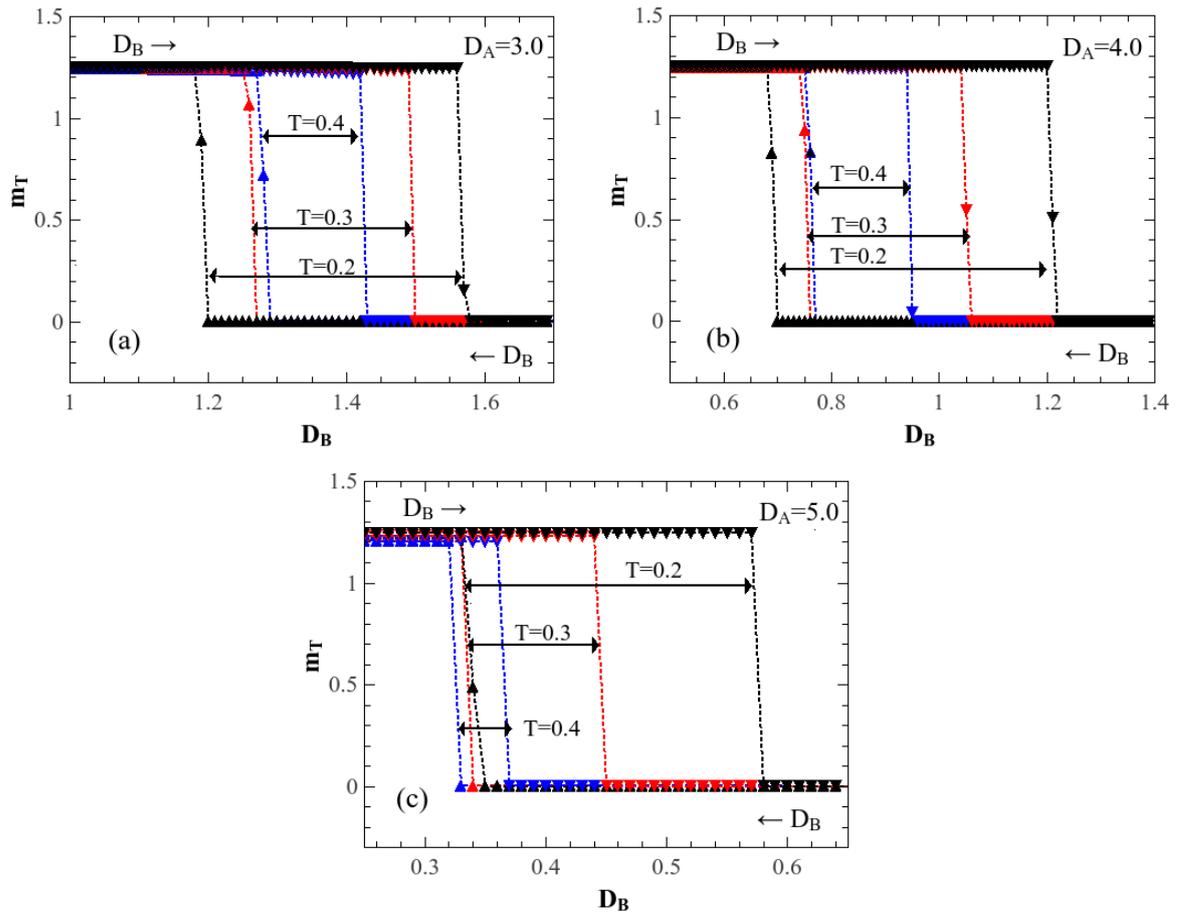


Figura 3.10: Histerese da magnetização total  $m_T$  em função da crescente ( $\nabla$ ) e decrescente ( $\triangle$ ) anisotropia  $D_B$  e para vários valores de temperaturas  $T$  fixas indicados nas figuras. (a) Para uma anisotropia fixa  $D_A = 3.00$ , (b) para 4.00 e (c) para 5.00. Aqui, usamos  $L = 128$  (rede quadrada) e as setas de duas pontas denotam as larguras do ciclo de histerese. As linhas pontilhadas são um guia para os olhos.

## Conclusões e perspectivas futuras

### 4.1 Conclusões

Primeiramente, estudamos o modelo de Ising de spins mistos com interação ferromagnético entre os spin-1/2 (estados  $\pm 1$ ) e spin-1 (estados  $\pm 1$  e 0), denominado neste trabalho de **modelo-I**. Representamos esse modelo em uma rede quadrada (2D) e cúbica (3D), na qual cada tipo de spin está em uma sub-rede e incluímos um termo de anisotropia que atua sobre os spins-1. Nós utilizamos simulações de Monte Carlo via algoritmo de Metropolis para calcular as propriedades termodinâmicas do sistema, tais como: magnetização total  $m_T$ , magnetizações de sub-rede  $m_A$  e  $m_B$ , susceptibilidade  $\chi_L$ , energia  $e$  e calor específico  $C_e$ . Para melhor determinar as transições de fases empregamos os cumulantes de Binder de quarta-ordem da magnetização total  $U_L$  e da energia  $V_L$ . Encontramos o diagrama de fases do **modelo-I** em uma rede quadrada e cúbica, onde apresenta somente transições de fase de segunda ordem (ver fig. 2.5). Mostramos também que o sistema apresenta ausência de pontos de compensação na rede quadrada e exibe pontos de compensação próximos a  $D(T = 0) = 6$  na rede cúbica. Encontramos também que o calor específico apresenta um máximo adicional para baixas temperaturas, entretanto, não é um ponto crítico, pois não se escala com o tamanho do sistema. Portanto, o diagrama de fases **modelo-I** na rede quadrada e cúbica apresenta somente transições de fase de segunda ordem entre a fase ferromagnética  $F$  e paramagnética  $P$ . Observamos que com o aumento do número de coordenação não temos uma mudança no grau da transição de fase.

Uma segunda parte da dissertação se refere ao estudo do modelo de Ising de spins misto com interação ferromagnética entre os spin-1 (estados  $\pm 1$  e 0) e spins-3/2 (estados  $\pm 1/2$  e  $\pm 3/2$ ), que denominamos de **modelo-II**. Assim como no **modelo-I** as simulações foram realizadas em uma rede quadrada (2D) e cúbica (3D), onde cada tipo de spin está fixo em uma sub-rede e com anisotropias de sub-rede  $D_A$  e  $D_B$  nas respectivas sub-redes A e B.

Inicialmente estudamos um caso particular do **modelo-II** no qual as anisotropias de sub-rede são iguais  $D = D_A = D_B$ . Esse trabalho foi realizado por Zukovic et al. [14] somente para o sistema em 2D. No diagrama de fases, encontramos somente transições de fase de segunda ordem para ambas as dimensões 2D e 3D entre as fases ordenada  $F$  e desordenada  $P$  e um comportamento de multi-compensação, ou seja, com dois pontos de compensação para o mesmo valor de anisotropia  $D$  na rede cúbica (ver fig. 3.2). No caso da anisotropia  $D_B$  fixa, o diagrama de fases apresenta duas fases ferromagnéticas diferentes  $F_I$  e  $F_{II}$  (ver fig. 3.5). No intervalo  $0 < D_B < 2.0$  encontramos transições de fase de primeira e segunda ordem entre as fases ordenada  $F_I$  e desordenada  $P$ , ou seja, comportamento tricrítico. Por outro lado, no intervalo  $-\infty \leq D_B \leq 0.0$  e  $2.0 < D_B \leq \infty$  temos somente transições de fase de segunda ordem entre as fases  $F_I/P$  e  $F_{II}/P$ , respectivamente. Observamos também que nesse caso o modelo não exibiu pontos de compensação (rede quadrada).

Para o caso de  $D_A$  fixo, mas no intervalo de  $-\infty < D_A < 2.0$ , observamos transições de fases de segunda ordem entre as fases ordenadas  $F_I$  e  $F_{II}$  para baixas temperaturas,  $T \leq 0.3$ , onde o sistema carrega as características das fases do estado fundamental ( $T = 0$ ). Com o aumento da temperatura para  $T > 0.3$ , o sistema continua apresentando transições de fase de segunda ordem entre as fases:  $F_I$  para  $F_{II}$ , mas agora a fase  $F_I$  é definida como sendo uma região onde  $m_A \neq 0$  ( $0 < m_A < 1.0$ ) e  $m_B \neq 0$  ( $0 < m_B < 1.5$ ) e  $F_{II}$  uma região onde  $m_A \neq 0$  ( $0 < m_A < 1.0$ ) e  $m_B \neq 0$  ( $0 < m_B < 0.5$ ) para diferentes valores da temperatura  $T$  e para qualquer valor de  $D_B > 2.0$ . Encontramos também transições de fase de segunda ordem entre as fases:  $F_I - P$  e  $F_{II} - P$  (ver fig. 3.7). Observamos ainda transições de fase de primeira e segunda ordem entre a fase  $F_I$  e a fase  $P$ , no intervalo de  $2.0 < D_A < 6.0$ , ou seja, apresentando nesse intervalo um comportamento tricrítico com uma linha de pontos tricríticos (ver fig. 3.9).

## 4.2 Perspectivas futuras

O estudo apresentado aqui nesta dissertação demonstrou os efeitos das anisotropias uniforme no **modelo-I** e **modelo-II**, sobretudo temos a perspectiva de estudar seus efeitos de uma anisotropia aleatória, realizada por uma distribuição de probabilidade bimodal. Contudo, dentre as perspectivas de estudos, temos um maior interesse em analisar modelos de Ising de spins mistos em rede complexas.

*A*

## Apêndice

### A.1 Certificados em eventos acadêmicos



## CERTIFICADO

O Comitê Organizador certifica que David Cristiano Da Silva participou da 15ª ESCOLA MATO-GROSSENSE DE FÍSICA, realizada entre os dias 23 a 26 de Outubro de 2018 em Cuiabá, MT, Brasil.

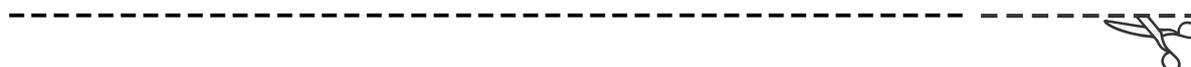
TOTAL DE HORAS = 40h



Maurício Godoy

Alesandro Ferreira dos Santos

Coordenação Geral - 15ª EMF





## CERTIFICADO

O Comitê Organizador certifica que o trabalho ANISOTROPY EFFECTS IN THE MIXED-SPIN ISING FERROMANGETIC SYSTEMS, dos autores David Cristiano da Silva, Alberto S. de Arruda e Mauricio Godoy foi apresentado, na forma de pôster durante o 5º Encontro de Física do Centro-Oeste, realizado de 24 a 26 de setembro no Câmpus UEG Pirenópolis, Pirenópolis, GO, Brasil.

Pirenópolis, 26 de setembro de 2018

*Luciano Ribeiro*

Prof. Dr. Luciano Ribeiro

Coordenador Geral do 5º EFCO

Realização



Apoio





## ENCONTRO DE OUTONO 2018 SOCIEDADE BRASILEIRA DE FÍSICA

### CERTIFICATE

The Organizing Committee hereby certifies that the work "Anisotropy effects in mixed-spins Ising ferromagnetic systems" by D. C. da Silva, A. S. de Arruda, M. Godoy was presented in the session THEORY AND SIMULATION IN MAGNETISM of the Encontro de Outono da SBF 2018, which took place in Foz do Iguaçu, PR from May 06 to 11, 2018.

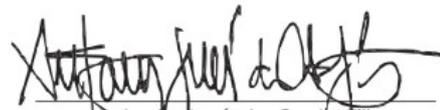


190-388-2

Foz do Iguaçu, May 11, 2018



  
Celia Anteneodo  
Coordenadora de Programa

  
Antonio José da Costa Filho  
Coordenador Geral

## REFERÊNCIAS

- [1] L. L. Goncalves, Phys. Scripta 32, 248. [1985](#)
- [2] A. Lipowski, T. Horiguchi, J. Phys. A: Math. Gen. 28, L261. [1995](#)
- [3] M. Jaščur, Phys. A 252, 217. [1998](#)
- [4] A. Dakhama, Physica A 252, 225. [1998](#)
- [5] M. Jaščur, J. Strečka, L. Čanová, J. Phys. B, 76, 1. [2007](#)
- [6] A. Yigit, E. Albayrak, J. Supercond Nov Magn 30, 3103-3018. [2017](#)
- [7] O. F. Abubrig, D. Horvath, A. Bobak, M. Jaščur, Phys. A 296, 437-450. [2001](#)
- [8] M. Godoy, V. S. Leite, W. Figueiredo, Phys. B, 69, 054428. [2004](#)
- [9] I. J. Souza, P. H. Z. de Arruda, M. Godoy, L. Craco, A. S. de Arruda, Phy. A 444, 589-600. [2016](#)
- [10] W. Jiang, G. Z. Wei, Z. H. Xin, J. Phys. A 293, 455-464. [2001](#)
- [11] A. Bobák, O. F. Abubrig, D. Horváth, J. Mag 246, 177-183. [2002](#)
- [12] W. Selke, J. Oitmaa, J.Phys.:Condens. Matter 22, 076004. [2010](#)
- [13] Y. Nakamura, J. W. Tucker, IEEE Transactions on Magnetics, 38(5), 2406-2408. [2002](#)
- [14] M. Žukovič and A. Bobák, Physica A: 389, 5402. [2010](#)
- [15] J. R. V. Pereira, T. M. Tunes, A. S. de Arruda, M. Godoy, Physica A 500, 265-272 [2018](#)
- [16] G. Mert, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 324(18), 2706-2710. [2002](#)
- [17] M. Madani, A. Gaye, M. El Bouziani, A. Alrajhi, Phys. A: 437, 396-404. [2015](#)
- [18] N. Metropolis, et al. J. Chem. Phys. 21, 1087. [1953](#)

- [19] M. Newman, G. Barkema, *Monte carlo methods in statistical physics chapter 1-4*. Oxford University Press. [1999](#)
- [20] D. Landau and K. Binder, *A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics*. (2005).
- [21] C. P. Robert, G. Casella, *Monte Carlo Statistical Methods* (2004).
- [22] S. R. Salinas, *Introdução a física estatística vol. 09*. (1997).
- [23] Press, William H., *Numerical Recipes in Fortran 77, The Art of Scientific Computing*. (1992)
- [24] V. Privman, *Finite size scaling and numerical simulation of statistical systems*. (1990).
- [25] M. J. de Oliveira, *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade Vol. 35*. (2001).
- [26] D. P. Landau, F. Wang, *J. Phys. Brazilian* , 34(2A), 354-362. [2004](#)
- [27] F. W. S. Lima, D. Stauffer, *Phys. A*: 359, 423-429. [2006](#)
- [28] S. G. Brush, *Reviews of Modern Physics*, 39(4), 883. [1967](#)
- [29] J. M. Thijssen, *Computational physics. Cambridge university press*. (2007).
- [30] A. M. Ferrenberg and R. H Swendsen, *Phys. Rev. Lett.* 61, 2635. [1988](#)