

**IAN JORDY LOPEZ DIAZ**

**TEMPERATURA DE COMPENSAÇÃO E  
COMPORTAMENTO CRÍTICO DE MODELOS DE ISING  
EM CAMADAS**

**FLORIANÓPOLIS**

**2017**



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO  
EM FÍSICA**

**TEMPERATURA DE COMPENSAÇÃO E COMPORTAMENTO CRÍTICO DE MODELOS  
DE ISING EM CAMADAS**

Tese submetida à  
Universidade Federal de Santa Catarina  
como parte dos requisitos para a  
obtenção do grau de Doutor em Física

**IAN JORDY LOPEZ DIAZ**

Florianópolis, Outubro de 2017

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor,  
através do Programa de Geração Automática da Biblioteca Universitária da UFSC.

Lopez Diaz, Ian Jordy  
TEMPERATURA DE COMPENSAÇÃO E COMPORTAMENTO  
CRÍTICO DE MODELOS DE ISING EM CAMADAS / Ian Jordy  
Lopez Diaz ; orientador, Nilton da Silva Branco,  
2017.  
132 p.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Santa  
Catarina, Centro de Ciências Físicas e Matemáticas,  
Programa de Pós-Graduação em Física, Florianópolis,  
2017.

Inclui referências.

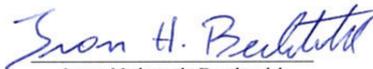
1. Física. 2. Monte Carlo. 3. modelo de Ising. 4.  
ferrimagnetismo. 5. sistemas desordenados. I. da  
Silva Branco, Nilton. II. Universidade Federal de  
Santa Catarina. Programa de Pós-Graduação em Física.  
III. Título.

Ian Jordy Lopez Diaz

**TEMPERATURA DE COMPENSAÇÃO E  
COMPORTAMENTO CRÍTICO DE MODELOS DE ISING EM  
CAMADAS**

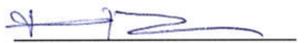
Esta Tese foi julgada adequada para a obtenção do título de  
DOUTOR EM FÍSICA, na área de concentração Física da Matéria  
Condensada e Mecânica Estatística e aprovada em sua forma final pelo  
Programa de Pós-Graduação em Física.

Florianópolis, 6 de outubro de 2017.



Ivan Helmuth Bechtold  
(Coordenador do Programa)

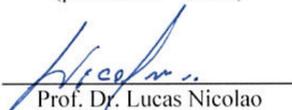
**Banca Examinadora:**



Prof. Dr. Nilton da Silva Branco  
(presidente - UFSC)



Prof. Dr. João Antônio Plascak  
(membro externo - UFPB)



Prof. Dr. Lucas Nicolao  
(membro titular - UFSC/FSC)



Prof. Dr. Wagner Figueiredo  
(membro titular - UFSC/FSC)



Prof. Dr. Daniel Girardi  
(membro titular - UFSC/Blumenau)



*À minha família e amigos.*



## AGRADECIMENTOS

Primeiramente agradeço ao Prof. Dr. Nilton da Silva Branco, pela orientação, pela amizade e pela paciência e disposição ao me ajudar com meus problemas, dos mais simples aos mais complexos. Também pela paciência de esperar este trabalho ficar pronto.

À minha família, por todo o apoio.

Aos amigos do MRT, por todo o companheirismo, pelo café, pelas regras e pelas páfias. Muitas páfias a todos.

Aos amigos e colegas do grupo de Mecânica Estatística da velha guarda, por proveitosas discussões e contribuições tanto para este trabalho quanto para minha formação acadêmica e profissional.

Aos amigos e colegas da sala da Mecânica Estatística, independente de serem ou não do grupo, por serem pessoas batráquias, *helpis* e inoxidáveis. Vocês são merecedores de todo o meu respeito tecnológico.

Aos amigos que conheci em Cerro Largo durante minha breve passagem pela Universidade Federal da Fronteira Sul. Saudades das reuniões do Clube dos Anjos.

A todos os meus amigos, pelo companheirismo.

Um agradecimento especial ao meu amigo William Schoenell, ao colega Alberto Torres e aos professores Evy Augusto Salcedo Torres e Lucas Nicolao, que estiveram, em períodos diferentes, envolvidos na montagem, manutenção e administração dos *clusters* utilizados para realizar as simulações deste trabalho.

Finalmente, agradeço ao povo brasileiro que sustenta as agências de fomento bem como todo o sistema público de educação deste país através dos seus impostos.



Resumo da Tese apresentada à UFSC como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Física.

## **TEMPERATURA DE COMPENSAÇÃO E COMPORTAMENTO CRÍTICO DE MODELOS DE ISING EM CAMADAS**

**Ian Jordy Lopez Diaz**

Outubro / 2017

Orientador: Nilton da Silva Branco, Dr.  
FSC/UFSC.

Área de Concentração: Mecânica Estatística e Transições de Fase.

Palavras-chave: Monte Carlo, Modelo de Ising, Ferrimagnetismo, Sistemas desordenados.

Número de Páginas: [132](#)

Estudamos as propriedades termodinâmicas e magnéticas de um modelo de Ising ferrimagnético em camadas. O sistema é composto por dois tipos de planos não equivalentes dispostos alternadamente, sendo que o sistema pode ter apenas dois planos (bicamada) ou infinitos planos (multicamadas). As interações intracamada são ferromagnéticas enquanto as interações inter-camadas são antiferromagnéticas e um dos tipos de plano é diluído aleatoriamente. O estudo é realizado em uma abordagem de Monte Carlo, empregando o método de repesagem dos múltiplos histogramas e ferramentas de análise de escala de tamanho finito. Além disso, realizamos cálculos de campo médio e campo efetivo para o mesmo modelo. Verificamos a ocorrência de um fenômeno de compensação e determinamos as temperaturas de compensação e temperaturas críticas do modelo em função dos parâmetros do hamiltoniano. Nós apresentamos uma discussão detalhada acerca das regiões do espaço de parâmetros para as quais o efeito de compensação está presente ou ausente. Nossos resultados de Monte Carlo, campo médio e campo efetivo são então comparados com a aproximação de pares aplicada ao mesmo modelo por Balcerzak e Szałowski (2014). Também estudamos o comportamento crítico do sistema multicamadas através do método de análise de escala de tamanho finito para várias grandezas termodinâmicas. Nossas estimativas dos expoentes críticos  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  e  $\nu$  são consistentes com a classe de universalidade do modelo de Ising tridimensional com diluição aleatória (de sítios ou de ligações).



Abstract of Thesis presented to UFSC as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor in Physics.

## **COMPENSATION TEMPERATURE AND CRITICAL BEHAVIOR OF LAYERED ISING MODELS**

**Ian Jordy Lopez Diaz**

Outubro / 2017

Advisor: Nilton da Silva Branco, Dr.  
FSC/UFSC.

Area of Concentration: Statistical Mechanics and Phase Transitions.

Keywords: Monte Carlo, Ising model, Ferrimagnetism, Disordered systems.

Number of pages: [132](#)

We study the thermodynamic and magnetic properties of a layered Ising ferrimagnet. The system is composed of two types of non-equivalent planes arranged alternately, so that the system can have only two planes (bilayer) or infinite planes (multilayer). The intralayer couplings are ferromagnetic while the interlayer interactions are antiferromagnetic and one of the types of plane is randomly diluted. The study is carried out within a Monte Carlo approach employing the multiple histogram reweighting method and finite-size scaling tools. In addition, we perform mean-field and effective-field calculations for the same model. The occurrence of a compensation phenomenon is verified and the compensation and critical temperatures of the model are obtained as functions of the Hamiltonian parameters. We present a detailed discussion of the regions of the parameter space where the compensation effect is present or absent. Our Monte Carlo, mean-field, and effective-field results are then compared with the pair approximation applied to the same model by Balcerzak and Szałowski (2014). We also studied the critical behavior of the multilayer system through a finite-size scaling analysis for various thermodynamic quantities. Our estimates of the critical exponents  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ , and  $\nu$  are consistent with the universality class of the three-dimensional random (-site or -bond) Ising model.



## SUMÁRIO

INTRODUÇÃO .....	p. 29
1 MODELOS DE ISING EM CAMADAS .....	p. 33
1.1 Modelo de Ising de <i>Spin</i> 1/2 .....	p. 33
1.2 Modelo, definições e notação .....	p. 34
1.3 Aproximação de Campo Médio .....	p. 38
1.4 Aproximação de Campo Efetivo .....	p. 39
2 TRANSIÇÕES DE FASE E FENÔMENOS CRÍTICOS .....	p. 43
2.1 Transições de fase .....	p. 43
2.2 Transições contínuas e comportamento crítico .....	p. 44
2.3 Renormalização, invariância de escala, e universalidade .....	p. 47
2.4 Relações de escala de tamanho finito .....	p. 51
3 MÉTODO DE MONTE CARLO .....	p. 57
3.1 Simulações de Monte Carlo .....	p. 57
3.1.1 Algoritmo de Metropolis .....	p. 59
3.1.2 Algoritmo de Wolff .....	p. 61
3.2 Detalhes das simulações .....	p. 65
4 ANÁLISE DE DADOS DAS SIMULAÇÕES .....	p. 67
4.1 Métodos de histograma .....	p. 67
4.1.1 Método do histograma .....	p. 67
4.1.2 Método dos múltiplos histogramas .....	p. 71
4.2 Determinação de $T_c$ .....	p. 76
4.3 Determinação de $T_{comp}$ .....	p. 79
4.4 Determinação dos expoentes críticos .....	p. 84
5 RESULTADOS E DISCUSSÃO .....	p. 93
5.1 Fenômeno de compensação .....	p. 93
5.1.1 Compensação no sistema bicamada (2D) .....	p. 94
5.1.2 Compensação no sistema multicamadas (3D) .....	p. 105
5.2 Comportamento crítico do sistema multicamadas .....	p. 117
CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS .....	p. 125



## LISTA DE FIGURAS

- 1.1 Representação esquemática dos sistemas compostos por dois tipos de camadas, **A** (esferas vermelhas) e **B** (esferas azuis). Em (a) temos um sistema com apenas duas camadas. Em (b) temos infinitas camadas **A** e **B** dispostas alternadamente. Ambos os sistemas se estendem infinitamente nas direções  $x$  e  $y$ , porém apenas (b) se estende infinitamente na direção  $z$ , ao passo que (a) tem apenas duas camadas nesta direção. A integral de troca entre dois átomos vizinhos pode ser  $J_{AA}$  (dois átomos do tipo **A**),  $J_{BB}$  (dois átomos do tipo **B**) ou  $J_{AB}$  (dois átomos de camadas adjacentes). Apenas camadas do tipo **B** apresentam diluição, representada na figura por esferas de cor cinza. . . . . p. 35
- 1.2 Resultado de campo médio para as magnetizações dos planos,  $m_A$  e  $pm_B$ , e magnetização total,  $m_{\text{tot}}$ , em função da temperatura adimensional,  $k_B T/J_{BB}$ , para um sistema multicamadas com  $p = 0,80$  e  $J_{AB}/J_{BB} = -0,50$ . A figura (a), para  $J_{AA}/J_{BB} = 0,20$ , mostra a existência de uma temperatura de compensação,  $T_{\text{comp}}$ , tal que  $m_{\text{tot}} = 0$  e  $0 < T_{\text{comp}} < T_c$  enquanto a figura (b), para  $J_{AA}/J_{BB} = 0,80$ , corresponde a um caso sem compensação. . . . . p. 40
- 1.3 Resultado de campo efetivo para as magnetizações dos planos,  $m_A$  e  $pm_B$ , e magnetização total,  $m_{\text{tot}}$ , em função da temperatura adimensional,  $k_B T/J_{BB}$ , para um sistema multicamadas com  $p = 0,80$  e  $J_{AB}/J_{BB} = -0,50$ . A figura (a), para  $J_{AA}/J_{BB} = 0,20$ , mostra a existência de uma temperatura de compensação,  $T_{\text{comp}}$ , tal que  $m_{\text{tot}} = 0$  e  $0 < T_{\text{comp}} < T_c$  enquanto a figura (b), para  $J_{AA}/J_{BB} = 0,80$ , corresponde a um caso sem compensação. . . . . p. 40
- 2.1 Representação do comportamento do parâmetro de ordem em uma transição de primeira ordem (esquerda; vermelho) e em uma transição contínua (direita; azul). . . . . p. 44
- 3.1 Representação esquemática do funcionamento do algoritmo de Wolff para o modelo de Ising bidimensional. Os círculos marcados com “+” representam átomos com  $s_i = +1$  e os círculos marcados com “-” representam átomos com  $s_i = -1$ . A figura (a) mostra a configuração inicial,  $\sigma$ , e uma possível ilha,  $C$ , criada. A figura (b) mostra a configuração final  $\sigma'$ , na qual a ilha  $C'$  corresponde a todos os sítios de  $C$  com o *spin* invertido. . . . . p. 62
- 4.1 Distribuição de probabilidade da energia em função de  $\mathcal{E}$ .  $P_{K_0}$  é o histograma de  $\mathcal{E}$  na temperatura  $T_0$  onde a simulação foi feita e os  $W_K$  são as estimativas da distribuição de probabilidade de  $\mathcal{E}$  feitas através do método do histograma em temperaturas  $T_1, T_2$  e  $T_3$  na vizinhança de  $T_0$ . A simulação foi feita com um sistema bicamada de  $L = 100$  para os valores  $p = 0,7, J_{AA}/J_{BB} = 0,3$  e  $J_{AB}/J_{BB} = -0,1$  na temperatura tal que  $k_B T_0/J_{BB} = 2,0$ . . . . . p. 69

- 4.2 Susceptibilidade magnética por sítio,  $\overline{\chi_{\text{tot}}}$ , em função da temperatura adimensional,  $k_B T/J_{BB}$ , para um sistema bicamada com  $J_{AA}/J_{BB} = 0,5$ ;  $J_{AB}/J_{BB} = -1,0$ ;  $p = 1,0$  e tamanhos lineares,  $L$ , variando de 10 a 900. O destaque corresponde simultaneamente a uma ampliação na escala horizontal e uma diminuição na escala vertical, para melhorar a visualização do comportamento de escala dos sistemas pequenos. Os símbolos correspondem às simulações e as linhas sólidas foram obtidas usando o método dos múltiplos histogramas. . . . . p. 75
- 4.3 Magnetização total,  $m_{\text{tot}}$ , em função da temperatura adimensional,  $k_B T/J_{BB}$ , para um sistema multicamadas com  $p = 0,80$ ;  $J_{AA}/J_{BB} = 0,65$ ;  $J_{AB}/J_{BB} = -0,80$  e tamanhos lineares,  $L$ , variando de 20 a 100. Os símbolos correspondem às simulações e as linhas sólidas foram obtidas usando o método dos múltiplos histogramas. . . . . p. 75
- 4.4 Temperatura pseudo-crítica adimensional,  $k_B T_c(L)/J_{BB}$ , em função de  $L^{-1/\nu}$  para o sistema bicamada com  $J_{AA}/J_{BB} = 0,5$ ;  $J_{AB}/J_{BB} = -1,0$ ;  $p = 1,0$  e  $1/\nu = 0,986810$ . Os símbolos são estimativas de  $T_c(L)$  feitas através da localização do máximo da susceptibilidade magnética no plano **B**,  $\chi_B$  para  $60 \leq L \leq 900$ . As linhas sólidas e tracejadas são ajustes feitos com a equação (4.35) para  $L_{\text{min}} \leq L \leq 900$  e diferentes valores de  $1/\nu$ . As linhas pontilhadas são extrapolações dos ajustes para  $L < L_{\text{min}}$ . Neste caso particular,  $L_{\text{min}} = 110$  e  $1/\nu = 0,986810$  são os valores que minimizam  $\chi^2/n_{\text{DOF}}$  e, portanto, dão o melhor ajuste. Onde as barras de erro não são visíveis, elas são menores do que os símbolos. . . . . p. 77
- 4.5 Soma ponderada reduzida dos quadrados dos erros,  $\chi^2/n_{\text{DOF}}$ , em função de  $1/\nu$  (acima) e estimativa de  $k_B T_c/J_{BB}$  em função de  $1/\nu$  (abaixo) obtidos com ajustes usando a equação (4.35). As estimativas de  $T_c(L)$  usadas nos ajustes correspondem aos máximos da susceptibilidade magnética no plano **B**,  $\overline{\chi_B}$ , para o sistema bicamada com  $J_{AA}/J_{BB} = 0,5$ ;  $J_{AB}/J_{BB} = -1,0$  e  $p = 1,0$ . O valor mínimo de  $\chi^2/n_{\text{DOF}}$  corresponde à melhor estimativa de  $T_c$ . A linha tracejada corresponde ao valor 20% acima do mínimo de  $\chi^2/n_{\text{DOF}}$ . . . . . p. 77
- 4.6 Magnetizações dos planos,  $m_A$  e  $pm_B$  e magnetização total,  $m_{\text{tot}}$ , em função da temperatura adimensional,  $k_B T/J_{BB}$ , para um sistema multicamadas com  $p = 0,80$ ,  $J_{AB}/J_{BB} = -0,50$  e  $L = 100$ . A figura (a), para  $J_{AA}/J_{BB} = 0,20$ , mostra a existência de uma temperatura de compensação,  $T_{\text{comp}}$ , tal que  $m_{\text{tot}} = 0$  e  $0 < T_{\text{comp}} < T_c$  enquanto a figura (b), para  $J_{AA}/J_{BB} = 0,80$ , corresponde a um caso sem compensação. Os símbolos correspondem aos dados das simulações e as linhas sólidas são interpolações feitas com *splines* cúbicas e extrapolações lineares apenas para auxiliar a visualização. As barras de erro são menores do que os símbolos. . . . . p. 80

- 4.7 Magnetização total,  $m_{\text{tot}}$ , em função da temperatura adimensional,  $k_B T/J_{BB}$ , para um sistema multicamadas com  $p = 0,80$ ,  $J_{AB}/J_{BB} = -0,50$  e para vários valores do tamanho linear,  $L$ . A figura (a), para  $J_{AA}/J_{BB} = 0,20$ , mostra a existência de uma temperatura de compensação,  $T_{\text{comp}}$ , tal que  $m_{\text{tot}} = 0$  e  $0 < T_{\text{comp}} < T_c$  enquanto a figura (b), para  $J_{AA}/J_{BB} = 0,80$ , corresponde a um caso sem compensação. Os símbolos correspondem aos dados das simulações e as linhas sólidas são interpolações feitas com *splines* cúbicas e extrapolações lineares apenas para auxiliar a visualização. As barras de erro são menores do que os símbolos. . . . . p. 81
- 4.8 Temperatura de compensação adimensional,  $k_B T_{\text{comp}}(L)/J_{BB}$ , em função de  $L$  para  $p = 0,80$ ;  $J_{AA}/J_{BB} = 0,65$  e  $J_{AB}/J_{BB} = -0,80$ . Os símbolos são estimativas feitas localizando-se o zero da magnetização total para sistemas de diversos tamanhos. As linhas são ajustes feitos com a equação (4.36) para os valores de  $\varepsilon$  que minimizam o  $\chi^2/n_{\text{DOF}}$  em cada caso ou ajustes feitos com a equação (4.37) para  $L_{\text{min}} \leq L \leq 100$  com  $L_{\text{min}} = 40$ , que é o valor que minimiza  $\chi^2/n_{\text{DOF}}$  do ajuste neste caso em particular. . . . . p. 82
- 4.9 Gráfico em escala log-log dos máximos das susceptibilidades magnéticas em função do tamanho linear do sistema para  $J_{AA}/J_{BB} = 1,0$ ;  $J_{AB}/J_{BB} = -1,0$  e  $p = 1,0$ . Os símbolos são os resultados das simulações e as linhas tracejadas são ajustes feitos com a equação (4.39) para  $10 \leq L \leq 160$ . . . . . p. 85
- 4.10 Gráfico em escala log-log dos máximos das derivadas  $\partial_K \mathcal{G}$  em função do tamanho linear do sistema para  $J_{AA}/J_{BB} = 1,0$ ;  $J_{AB}/J_{BB} = -1,0$ ;  $p = 0,9$  e diferentes grandezas  $\mathcal{G}$ . Os símbolos são os resultados das simulações e as linhas tracejadas são ajustes feitos com a equação (4.39) para  $10 \leq L \leq 160$ . . . . . p. 85
- 4.11 Gráfico em escala log-log das magnetizações em função do tamanho linear do sistema para  $J_{AA}/J_{BB} = 1,0$ ;  $J_{AB}/J_{BB} = -1,0$  e  $p = 0,9$ . O valor da magnetização  $m_\Lambda$  ( $\Lambda = \text{tot}, A, B$ ) é obtido na temperatura  $T_{m,\Lambda}$ , que corresponde ao ponto de máximo da susceptibilidade  $\overline{\chi_\Lambda}$ . Os símbolos são os resultados das simulações e as linhas tracejadas são ajustes feitos com a equação (4.39) para  $10 \leq L \leq 160$ . . . . . p. 87
- 4.12 Estimativas da derivada logarítmica  $D(L)$  obtida a partir das susceptibilidades  $\chi_A$  e  $\chi_B$  para  $J_{AA}/J_{BB} = 1,0$ ;  $J_{AB}/J_{BB} = -1,0$  e  $p = 1,0$  (mesmos dados da figura 4.9). As linhas cheias são os ajustes feitos com a equação (4.42) que minimizam o valor de  $\chi^2/n_{\text{DOF}}$ , que em ambos os casos corresponde a  $L_m \geq 40$ . As linhas tracejadas são extrapolações destes ajustes para  $L_m < 40$ . . . . . p. 91

4.13	Comportamento das estimativas do expoente $\gamma/\nu$ em função de $L_{\min}$ e das diferentes estimativas da derivada $D(L)$ no ponto $L = L_m$ em função de $L_m$ a partir da susceptibilidade $\chi_A$ com $J_{AA}/J_{BB} = 1,0$ ; $J_{AB}/J_{BB} = -1,0$ e $p = 1,0$ (mesmos dados da figura 4.9). As linhas pontilhadas apenas ligam os pontos para auxiliar na visualização. As linhas horizontais tracejadas marcam os valores mínimo e máximo de nossa estimativa final do expoente $\gamma/\nu$ para estes valores dos parâmetros do hamiltoniano. . . . .	p. 91
5.1	Temperatura crítica $T_c$ (símbolos cheios) e temperatura de compensação, $T_{comp}$ (símbolos vazios), em função da concentração, $p$ . A linha pontilhada vertical marca a concentração característica, $p^*$ , para a qual $T_c = T_{comp}$ . Em (a) apresentamos os resultados de Monte Carlo deste trabalho. Nos casos em que as barras de erro não forem visíveis, elas são menores do que os símbolos. As linhas cheias são interpolações e extrapolações feitas com <i>splines</i> cúbicas apenas para auxiliar na visualização. Em (b), reproduzimos a figura 2 da referência 20 para fins de comparação. . . . .	p. 95
5.2	Comparação entre os resultados de campo médio (CM; vermelho; linha pontilhada), campo efetivo (CE; verde; linha tracejada), aproximação de pares [20] (AP; magenta; linha traço e ponto) e Monte Carlo (MC; azul; círculos vazios) para $T_c$ e $T_{comp}$ em função da concentração, $p$ , para um sistema bicamada com $J_{AB}/J_{BB} = -0,50$ . Em (a) e (b) temos os valores de $T_c$ para $J_{AA}/J_{BB} = 0,01$ e $J_{AA}/J_{BB} = 0,50$ , respectivamente. Em (c) e (d) temos os valores de $T_{comp}$ para $J_{AA}/J_{BB} = 0,01$ e $J_{AA}/J_{BB} = 0,50$ , respectivamente. Os valores de MC correspondem aos mesmo dados apresentados na figura 5.1a enquanto que os valores de AP são os dados da figura 5.1b (reprodução da figura 2 da referência 20) que foram multiplicados por 4 para que todos os resultados fiquem na mesma escala de energia. . . . .	p. 96
5.3	Concentração característica, $p^*$ , contra a razão $J_{AA}/J_{BB}$ para $J_{AB}/J_{BB} = -0,01$ (círculos) e $J_{AB}/J_{BB} = -1,0$ (quadrados). As linhas cheias são interpolações feitas com <i>splines</i> cúbicas apenas para auxiliar na visualização. . . . .	p. 98
5.4	Concentração característica, $p^*$ , contra a razão $J_{AB}/J_{BB}$ para $J_{AA}/J_{BB} = 0,5$ . As linhas cheias são interpolações feitas com <i>splines</i> cúbicas apenas para auxiliar na visualização. . . . .	p. 98

- 5.5 Resultados de Monte Carlo para a temperatura crítica,  $T_c$  (símbolos cheios), e temperatura de compensação,  $T_{comp}$  (símbolos vazios), em função da razão  $J_{AA}/J_{BB}$  para (a)  $p = 0,7$  e  $J_{AB}/J_{BB} = -1,0$  e (b)  $p = 0,9$  e  $J_{AB}/J_{BB} = -0,5$ . As linhas cheias são interpolações feitas com *splines* cúbicas apenas para auxiliar na visualização. As linhas pontilhadas verticais marcam os valores das razões  $J_{AA}/J_{BB}$  acima dos quais não há compensação. Nos casos em que as barras de erro não são visíveis, elas são menores do que os símbolos. . . . . p. 100
- 5.6 Resultado de aproximação de pares para a temperatura crítica,  $T_c$  (símbolos cheios), e temperatura de compensação,  $T_{comp}$  (símbolos vazios), em função da razão  $J_{AA}/J_{BB}$  para (a)  $J_{AB}/J_{BB} = -1,0$  e  $p = 0,7$  e (b)  $J_{AB}/J_{BB} = -0,5$  e  $p = 0,9$ . Estas figuras foram retiradas da referência 20 e são reproduzidas aqui para fins de comparação com a figura 5.5. . . . . p. 100
- 5.7 Comparação entre os resultados de campo médio (CM; vermelho; linha pontilhada), campo efetivo (CE; verde; linha tracejada), aproximação de pares [20] (AP; magenta; linha traço e ponto) e Monte Carlo (MC; azul; círculos vazios) para  $T_c$  e  $T_{comp}$  em função da razão  $J_{AA}/J_{BB}$  para o sistema bicamada. Em (a) e (b) temos os valores de  $T_c$  para  $(p; J_{AB}/J_{BB}) = (0,7; -1,0)$  e  $(0,9; -0,5)$ , respectivamente. Em (c) e (d) temos os valores de  $T_{comp}$  para  $(p; J_{AB}/J_{BB}) = (0,7; -1,0)$  e  $(0,9; -0,5)$ , respectivamente. Os resultados de MC correspondem aos mesmos dados apresentados nas figuras 5.5a ((a) e (c)) e 5.5b ((b) e (d)). As temperaturas obtidas a partir da AP correspondem aos valores das figuras 5.6a (reprodução da figura 6 da referência 20) e 5.6b (reprodução da figura 7 da referência 20) multiplicados por 4 para que todos os resultados fiquem na mesma escala de energia. . . . . p. 101
- 5.8 Temperatura crítica,  $T_c$  (símbolos cheios), e temperatura de compensação,  $T_{comp}$  (símbolos vazios), em função da razão  $J_{AB}/J_{BB}$  para  $p = 0,70$  e  $J_{AA}/J_{BB} = 0,30$  (quadrados) e  $p = 0,90$  e  $J_{AA}/J_{BB} = 0,80$  (círculos). As linhas cheias são interpolações feitas com *splines* cúbicas apenas para auxiliar na visualização. As linhas pontilhadas verticais marcam os valores de  $J_{AB}/J_{BB}$  abaixo dos quais não há compensação para cada conjunto de valores dos parâmetros. As barras de erro, nos casos em que não forem visíveis, são menores do que os símbolos. . . . . p. 103
- 5.9 Temperatura crítica,  $T_c$  (símbolos cheios), e temperatura de compensação,  $T_{comp}$  (símbolos vazios), em função da razão  $J_{AB}/J_{BB}$  para  $p = 0,60$  e  $J_{AA}/J_{BB} = 0,20$  (quadrados) e  $p = 0,70$  e  $J_{AA}/J_{BB} = 0,50$  (círculos). Esta figura corresponde aos resultados de aproximação de pares (figura 8 da referência 20) aqui reproduzidos para fins de comparação com a figura 5.8. . . . . p. 103

5.10 Diagramas de fase  $J_{AB}/J_{BB} \times J_{AA}/J_{BB}$  para (a)  $p = 0,70$  e (b)  $p = 0,90$ . As linhas marcam a separação entre uma fase ferrimagnética com compensação (à esquerda) e uma fase ferrimagnética sem compensação (à direita). Os resultados de campo médio (CM), campo efetivo (CE) e Monte Carlo (MC) são deste trabalho enquanto os de aproximação de pares (AP) correspondem aos dados apresentados nas figuras 11 ( $p = 0,70$ ) e 12 ( $p = 0,90$ ) da referência 20 e são reproduzidos aqui para fins de comparação. Apenas no caso dos resultados de MC, os símbolos correspondem às simulações e as linhas cheias são interpolações feitas com *splines* cúbicas apenas para auxiliar na visualização. . . . . p. 104

5.11 Temperatura crítica,  $T_c$  (símbolos cheios), e temperatura de compensação,  $T_{comp}$  (símbolos vazios), em função da concentração de sítios magnéticos em **B**,  $p$ , para  $J_{AB}/J_{BB} = -1,00$  em ambos os casos:  $J_{AA}/J_{BB} = 0,01$  (círculos) e  $J_{AA}/J_{BB} = 0,50$  (quadrados). As linhas sólidas são interpolações com *splines* cúbicas ou extrapolações lineares para auxiliar na visualização. As linhas tracejadas verticais marcam a concentração característica,  $p^*$ , para a qual  $T_c = T_{comp}$  e abaixo da qual não há compensação. As barras de erro são menores do que os símbolos. . . . . p. 105

5.12 Comparação entre os resultados de campo médio (CM; vermelho; linha pontilhada), campo efetivo (CE; verde; linha tracejada), e Monte Carlo (MC; azul; círculos vazios) para  $T_c$  e  $T_{comp}$  em função da concentração,  $p$ , para um sistema multicamadas com  $J_{AB}/J_{BB} = -0,50$ . Em (a) e (b) temos os valores de  $T_c$  para  $J_{AA}/J_{BB} = 0,01$  e  $J_{AA}/J_{BB} = 0,50$ , respectivamente. Em (c) e (d) temos os valores de  $T_{comp}$  para  $J_{AA}/J_{BB} = 0,01$  e  $J_{AA}/J_{BB} = 0,50$ , respectivamente. Os resultados de MC correspondem aos mesmo dados apresentados na figura 5.11. . . . p. 106

5.13 Concentração característica,  $p^*$ , abaixo da qual não há compensação, em função da razão  $J_{AA}/J_{BB}$  para  $J_{AB}/J_{BB} = -0,01$  (círculos) e  $J_{AB}/J_{BB} = -1,00$  (quadrados). As linhas sólidas são interpolações com *splines* cúbicas para auxiliar na visualização. As barras de erro são menores do que os símbolos. . . . . p. 108

5.14 Concentração característica,  $p^*$ , abaixo da qual não há compensação, em função da razão  $J_{AB}/J_{BB}$  para vários valores de  $J_{AA}/J_{BB}$ . As linhas sólidas são interpolações com *splines* cúbicas para auxiliar na visualização. As barras de erro são menores do que os símbolos. . . . . p. 108

- 5.15 Temperatura crítica,  $T_c$  (símbolos cheios), e temperatura de compensação,  $T_{comp}$  (símbolos vazios), em função da razão  $J_{AA}/J_{BB}$  para  $J_{AB}/J_{BB} = -0,50$  e  $J_{AB}/J_{BB} = -1,00$  e ambos os casos: (a)  $p = 0,70$  e (b)  $p = 0,90$ . As linhas sólidas são interpolações com *splines* cúbicas ou extrapolações lineares para auxiliar na visualização. As linhas verticais tracejadas marcam o valor de  $J_{AA}/J_{BB}$  para o qual  $T_c = T_{comp}$  e acima do qual não há compensação. As barras de erro são menores do que os símbolos. . . . . p.110
- 5.16 Comparação entre os resultados de campo médio (CM; vermelho; linha pontilhada), campo efetivo (CE; verde; linha tracejada), e Monte Carlo (MC; azul; círculos vazios) para  $T_c$  e  $T_{comp}$  em função da razão  $J_{AA}/J_{BB}$  para o sistema multicamadas. Em (a) e (b) temos os valores de  $T_c$  para  $(p; J_{AB}/J_{BB}) = (0,7; -1,0)$  e  $(0,9; -0,5)$ , respectivamente. Em (c) e (d) temos os valores de  $T_{comp}$  para  $(p; J_{AB}/J_{BB}) = (0,7; -1,0)$  e  $(0,9; -0,5)$ , respectivamente. Os resultados de MC em correspondem aos mesmos dados apresentados nas figuras 5.15a e 5.15b. . . . p.111
- 5.17 Temperatura crítica,  $T_c$  (símbolos cheios), e temperatura de compensação,  $T_{comp}$  (símbolos vazios), em função da razão  $J_{AB}/J_{BB}$ . Em (a) temos  $p = 0,60$  para ambos  $J_{AA}/J_{BB} = 0,25$  e  $J_{AA}/J_{BB} = 0,30$ . Em (b) temos  $p = 0,70$  para ambos  $J_{AA}/J_{BB} = 0,46$  e  $J_{AA}/J_{BB} = 0,50$ . As linhas sólidas são interpolações com *splines* cúbicas ou extrapolações lineares para auxiliar na visualização. As linhas verticais tracejadas marcam o valor de  $J_{AB}/J_{BB}$  para o qual  $T_c = T_{comp}$  e abaixo do qual não há compensação. As barras de erro são menores do que os símbolos. . p.113
- 5.18 Diagramas de fase  $J_{AB}/J_{BB} \times J_{AA}/J_{BB}$  do sistema multicamadas para  $p = 0,5; 0,6; 0,7; 0,8$  e  $0,9$ . Para cada concentração, a linha marca a separação entre uma fase ferrimagnética com compensação (à esquerda) e uma fase ferrimagnética sem compensação (à direita). Em (a) apresentamos os resultados de campo médio deste trabalho. Em (b) apresentamos os resultados de campo efetivo deste trabalho. . . . . p.114
- 5.19 Diagramas de fase  $J_{AB}/J_{BB} \times J_{AA}/J_{BB}$  do sistema multicamadas para  $p = 0,5; 0,6; 0,7; 0,8$  e  $0,9$ . Para cada concentração, a linha marca a separação entre uma fase ferrimagnética com compensação (à esquerda) e uma fase ferrimagnética sem compensação (à direita). Em (a) reproduzimos a figura 2 da referência 21 para fins de comparação com os nossos resultados. Em (b) apresentamos os resultados de Monte Carlo deste trabalho, sendo que os símbolos correspondem às simulações e as linhas cheias são interpolações feitas com *splines* cúbicas apenas para auxiliar na visualização. . . . . p.115

- 5.20 Comportamento das estimativas do expoente  $1/\nu$  em função de  $L_{\min}$  e das diferentes estimativas da derivada  $D(L)$  no ponto  $L = L_m$  em função de  $L_m$  obtidas a partir das derivadas  $\partial_K U_4^B$  para  $(J_{AA}/J_{BB}; J_{AB}/J_{BB}) = (1, 0; -1, 0)$  e para as concentrações  $p = 0, 8$  e  $p = 1, 0$ . As linhas pontilhadas apenas ligam os pontos para auxiliar na visualização. As linhas horizontais tracejadas marcam os valores mínimo e máximo de nossa estimativa final do expoente  $1/\nu$  para estes valores dos parâmetros do hamiltoniano. . . . . p. 118
- 5.21 Comportamento das estimativas do expoente  $\gamma/\nu$  em função de  $L_{\min}$  e das diferentes estimativas da derivada  $D(L)$  no ponto  $L = L_m$  em função de  $L_m$  a partir das susceptibilidades  $\chi_B$  para  $(J_{AA}/J_{BB}; J_{AB}/J_{BB}) = (1, 0; -1, 0)$  e para as concentrações  $p = 0, 8$  e  $p = 0, 9$ . As linhas pontilhadas apenas ligam os pontos para auxiliar na visualização. As linhas horizontais tracejadas marcam os valores mínimo e máximo de nossa estimativa final do expoente  $\gamma/\nu$  para estes valores dos parâmetros do hamiltoniano. . . . . p. 119
- 5.22 Comportamento das estimativas do expoente  $\beta/\nu$  em função de  $L_{\min}$  e das diferentes estimativas da derivada  $D(L)$  no ponto  $L = L_m$  em função de  $L_m$  obtidas a partir das magnetizações  $m_B$  para  $(J_{AA}/J_{BB}; J_{AB}/J_{BB}) = (1, 0; -1, 0)$  e para as concentrações  $p = 0, 8$  e  $p = 1, 0$ . As linhas pontilhadas apenas ligam os pontos para auxiliar na visualização. As linhas horizontais tracejadas marcam os valores mínimo e máximo de nossa estimativa final do expoente  $\beta/\nu$  para estes valores dos parâmetros do hamiltoniano. . . . . p. 119
- 5.23 Gráfico em escala log-log dos máximos do calor específico em função do tamanho linear do sistema para  $J_{AA}/J_{BB} = 1, 0$  e  $J_{AB}/J_{BB} = -1, 0$ . Os símbolos são os resultados das simulações para  $p = 0, 8$  (quadrados),  $p = 0, 9$  (diamantes) e  $p = 1, 0$  (círculos). As linhas tracejadas são ajustes feitos com a equação (4.39) para  $10 \leq L \leq 160$ . O destaque corresponde aos mesmos dados, porém em escala linear. . . . . p. 120
- 5.24 Comportamento das estimativas do expoente  $\alpha/\nu$  em função de  $L_{\min}$  e das diferentes estimativas da derivada  $D(L)$  no ponto  $L = L_m$  em função de  $L_m$  obtidas a partir do calor específico para  $(J_{AA}/J_{BB}; J_{AB}/J_{BB}) = (1, 0; -1, 0)$  e para as concentrações  $p = 0, 8$ ;  $p = 0, 9$  e  $p = 1, 0$  (mesmos dados da figura 5.23). As linhas pontilhadas apenas ligam os pontos para auxiliar na visualização. As linhas horizontais tracejadas marcam os valores mínimo e máximo de nossa estimativa final do expoente  $\alpha/\nu$  para estes valores dos parâmetros do hamiltoniano. . . . . p. 121

**LISTA DE TABELAS**

2.1	Comportamento crítico e expoentes críticos de algumas grandezas termodinâmicas [58]. . . . .	p. 46
2.2	Relações entre os expoentes críticos [57]. . . . .	p. 46
4.1	Estimativas de $k_B T_c / J_{BB}$ obtidas através de ajustes usando a equação (4.35) com $L \leq L_{\max}$ para diferentes valores de $L_{\max}$ . Assim como na figura 4.4, as estimativas de $T_c(L)$ usadas nos ajustes correspondem aos máximos da susceptibilidade magnética no plano $\mathbf{B}, \overline{\chi_B}$ , para o sistema bicamada com $J_{AA}/J_{BB} = 0,5$ ; $J_{AB}/J_{BB} = -1,0$ e $p = 1,0$ . . . . .	p. 78
4.2	Resultados dos ajustes da dependência de $T_{comp}$ com $L$ para $p = 0,80$ ; $J_{AA}/J_{BB} = 0,65$ e $J_{AB}/J_{BB} = -0,80$ , usando a equação (4.36) para diferentes valores de $L_{\min}$ e $\varepsilon$ . Os números entre parênteses são o erro estatístico dado pelo ajuste não linear. Estes ajustes foram feitos usando os dados apresentados na figura 4.8. . . . .	p. 83
4.3	Resultados dos ajustes da dependência de $T_{comp}$ com $L$ para $p = 0,80$ ; $J_{AA}/J_{BB} = 0,65$ e $J_{AB}/J_{BB} = -0,80$ usando a equação (4.37) para valores diferentes de $L_{\min}$ . Os números entre parênteses são o erro estatístico dado pelo ajuste não linear. Estes ajustes foram feitos usando os dados apresentados na figura 4.8. . . . .	p. 83
4.4	Resultados dos ajustes da dependência de $\overline{\max\{\chi_B\}}$ com $L$ para $p = 1,0$ ; $J_{AA}/J_{BB} = 1,0$ e $J_{AB}/J_{BB} = -1,0$ usando a equação (4.38) com $L_{\min} \leq L \leq 160$ para diversos valores de $L_{\min}$ . Os números entre parênteses são o erro estatístico dado pelo ajuste não linear. Estes ajustes foram feitos usando os dados apresentados na figura 4.9. . . . .	p. 88
4.5	Resultados dos ajustes da dependência de $\overline{\max\{\chi_B\}}$ com $L$ para $p = 1,0$ ; $J_{AA}/J_{BB} = 1,0$ e $J_{AB}/J_{BB} = -1,0$ usando a equação (4.39) para valores diferentes de $L_{\min}$ e $\omega$ . Os números entre parênteses são o erro estatístico dado pelo ajuste não linear. Estes ajustes foram feitos usando os dados apresentados na figura 4.9. . . . .	p. 88

5.1 Comparação entre estimativas dos expoentes  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  e  $\nu$  obtidas neste e em outros trabalhos. As linhas que começam com  $p = 0,8$ ;  $p = 0,9$  ou  $p = 1,0$  correspondem às estimativas finais deste trabalho para  $(J_{AA}/J_{BB}; J_{AB}/J_{BB}) = (1,0; -1,0)$ . A tabela também contém resultados de Monte Carlo [60,82], expansão em série para altas temperaturas [83] e de teoria quântica de campos [84, 85] para a classe de universalidade do modelo de Ising puro em três dimensões, bem como resultados de Monte Carlo para o modelo de Ising com diluição de sítios [46], para o modelo de Ising com diluição de ligações [43, 47] e para o modelo de Ising desordenado com ligações  $\pm J$  [48]. A referência 73 apresenta resultados de Monte Carlo tanto para o modelo de Ising 3D puro quanto para um modelo de Ising 3D desordenado com interações ferromagnéticas e antiferromagnéticas. A referência 45 também apresenta resultados experimentais para ambos sistemas puros e desordenados. As linhas nas quais temos  $2 - \alpha - 3\nu \equiv 0$  correspondem aos casos para os quais o expoente  $\alpha$  foi obtido a partir da igualdade de Josephson. Já as linhas que contém  $\alpha + 2\beta + \gamma \equiv 2$  correspondem aos casos para os quais apenas dois expoentes foram obtidos de forma independente e os demais são determinados a partir das igualdades de Josephson e Rushbrook (ver tabela 2.2 na seção 2.2). . . . . p. 123

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

CM	Aproximação de campo médio.
MC	Monte Carlo.
AP	Aproximação de pares.
CE	Aproximação de campo efetivo.
GR	Grupo de Renormalização.
FHG	Função Homogênea Generalizada.
MCS	Passo de Monte Carlo (do inglês, <i>Monte Carlo step</i> ).
BFGS	Algoritmo de Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno.



## INTRODUÇÃO

O interesse no estudo de materiais ferrimagnéticos tem crescido consideravelmente nas últimas décadas, especialmente devido à quantidade de fenômenos associados a esses materiais que apresentam grande potencial para aplicações tecnológicas [1–4]. Desde o descobrimento do ferrimagnetismo em 1948 [5], vários modelos teóricos foram propostos para explicar seu comportamento magnético [6, 7]. Essencialmente, nestes modelos, o ferrimagneto é descrito como a combinação de duas ou mais subestruturas magneticamente acopladas, como por exemplo sub-redes, ou camadas ou subconjuntos de átomos do sistema. O comportamento magnético de cada subestrutura em função da temperatura pode levar ao surgimento de pontos de compensação, isto é, temperaturas abaixo do ponto crítico para as quais a magnetização total do sistema é nula enquanto as subestruturas individuais permanecem magneticamente ordenadas [8]. Apesar deste fenômeno não ter relação alguma com criticalidade, no ponto de compensação há certas propriedades físicas, tais como a coercividade do sistema, que apresentam comportamento singular [1, 9, 10]. O fato da temperatura de compensação de alguns ferrimagnetos ser próxima à temperatura ambiente ainda os torna particularmente importantes para aplicações relacionadas a dispositivos de armazenamento de dados tais como discos magneto-ópticos [1].

Modelos magnéticos com *spin* misto, isto é, redes bipartite com *spins* de diferentes magnitudes em cada sub-rede, são comumente usados para estudar ferrimagnetismo. A ocorrência do fenômeno de compensação neste tipo de sistema já foi verificada para diversas combinações de magnitudes de *spin* ( $s = 1/2, 1, 3/2, 2, 5/2$  etc) [11–19]. Alguns sistemas com apenas um tipo de *spin*, tais como sistemas em camadas compostos de planos ferromagnéticos com propriedades diferentes dispostos alternadamente, também podem apresentar uma temperatura de compensação em algumas circunstâncias específicas [20, 21]. Em trabalhos experimentais recentes, encontramos realizações deste tipo de sistemas com duas camadas [22], três camadas [23, 24], ou múltiplas camadas [25–29]. Em particular, a realização de acoplamentos antiferromagnéticos entre camadas adjacentes tem importantes aplicações tecnológicas tais como em dispositivos magneto-ópticos [1], spintrônica [2], magnetoresistência gigante [3], e o efeito magnetocalórico [4]. Além disso, há um grande interesse teórico no estudo das propriedades destes sistemas, a fim de obter informações sobre o *crossover* entre os comportamentos característicos de sistemas magnéticos de duas e três dimensões.

Neste trabalho, estudamos o comportamento magnético de um modelo de Ising de *spin* 1/2 composto por camadas atômicas não equivalentes de dois tipos diferentes, **A** e **B**. As camadas são dispostas alternadamente e cada uma é modelada por uma rede quadrada com acoplamentos intracamadas ferromagnéticos. As camadas do tipo **B** ainda são diluídas aleatoriamente e a interação entre átomos em camadas vizinhas é antiferromagnética. Estudamos tanto o caso em que o sistema tem apenas duas camadas (sistema bicamada) quanto para o caso em que ele é uma rede cúbica composto de redes **A** e **B** alternadas (sistema multicamadas).

Nosso objetivo principal é estabelecer as condições para a presença ou ausência da temperatura de compensação e como isso depende dos parâmetros do hamiltoniano. De um ponto de vista teórico, soluções exatas para modelos magnéticos existem, mas estão limitadas a certos casos em uma ou duas dimensões [30]. Portanto, a análise de modelos mais complexos, com a introdução de diferentes interações ferromagnéticas e antiferromagnéticas, bem como a presença de desordem atômica, torna necessário o uso de métodos aproximados. Métodos como matriz de transferência [31,32], grupo de renormalização [33–35], aproximações de campo médio (CM) e simulações de Monte Carlo (MC) [33] já foram aplicados a modelos de Ising bicamada sem desordem. Uma versão mais sofisticada da abordagem de campo médio, chamada de aproximação de pares (AP), também já foi aplicada ao estudo de sistemas bicamada e multicamadas com *spins* de Ising e Heisenberg sem desordem [36,37], e para um sistema bicamada com *spins* de Ising e Heisenberg com desordem [20]. A AP leva em conta correlações entre primeiros vizinhos, diferente de uma abordagem mais direta de CM na qual todas as correlações são desprezadas. No entanto, a AP ainda despreza todas as correlações além de primeiros vizinhos e, apesar de dar estimativas mais precisas do ponto crítico do que uma abordagem padrão de CM, a AP ainda assim superestima a temperatura crítica real do modelo. Além disso, aproximações como CM e AP podem não ser as ferramentas mais adequadas para descrever as propriedades físicas de alguns sistemas (veja a referência 16 e suas referências). Portanto, necessitamos de métodos mais precisos a fim de estabelecer o panorama físico correto.

Uma vez que não encontramos na literatura trabalhos com simulações de Monte Carlo tratando destes sistemas bicamada ou multicamadas com desordem, neste trabalho apresentamos uma análise das propriedades termodinâmicas e magnéticas de sistemas bicamada e multicamadas desordenados. A análise é feita em uma abordagem de Monte Carlo, usando os algoritmos de Metropolis [38] e Wolff [39], com o auxílio do método dos múltiplos histogramas [40, 41]. Ainda realizamos cálculos de campo médio e campo efetivo (CE) para fins de comparação com nossos resultados de MC e com os resultados de AP na literatura [20, 21].

Outro aspecto importante deste trabalho é a análise de escala de tamanho finito para determinar os expoentes críticos. O estudo deste modelo é um exemplo de investigação dos efeitos de desordem temperada no comportamento crítico de um sistema de spins de Ising, como outros tantos exemplos teóricos e experimentais apresentados ao longo das últimas três décadas ou mais. Um fato interessante destes sistemas desordenados é a previsão teórica de que a introdução de desordem deve alterar a classe de universalidade do sistema se  $\alpha > 0$ , sendo que  $\alpha$  é o expoente crítico do calor específico do sistema sem desordem. Este resultado é conhecido como critério de Harris [42]. Este critério é satisfeito para o caso do modelo de Ising puro em três dimensões, logo, podemos esperar que os modelos de Ising tridimensionais desordenados pertençam a outra classe de universalidade. No entanto, o critério de Harris nada diz sobre qual a classe de universalidade do novo sistema, mas esperamos que o expoente  $\alpha$  seja menor do que no caso puro, o que pode nos levar a uma situação onde  $\alpha < 0$ . Neste caso, o critério de Harris prevê que as aleatoriedades não sejam mais relevantes,

isto é, a inclusão de mais desordem não altere mais a classe de universalidade do sistema. De fato, resultados experimentais mostram que para pequenas concentrações<sup>1</sup> de ligações antiferromagnéticas (como em ligas  $Fe_pMn_{1-p}$ ,  $Fe_pZn_{1-p}F_2$ ,  $Fe_pRu_{1-p}$  etc) ou não magnéticas (por exemplo em ligas  $Fe_pAl_{1-p}$ ), estes sistemas apresentam uma transição contínua entre as fases paramagnética e ferromagnética com um comportamento crítico claramente diferente do caso sem desordem mas que parece ser independente da concentração, dentro da precisão experimental [45].

É curioso que, contrariando a previsão de resultados experimentais, os trabalhos de simulação tenham apresentado resultados mais diversos para os expoentes críticos destes sistemas desordenados. Só recentemente (final da década de 1990 em diante), com o crescimento da capacidade dos processadores e dos recursos disponíveis para simulações, é que a investigação teórica tem caminhado na direção de uma solução para esta aparente inconsistência e trabalhos têm apresentado expoentes críticos independentes da concentração de impurezas ao longo da linha de transição para-ferro de modelos de Ising desordenados [43, 46–48]. Estes trabalhos mostram a importância de uma análise cuidadosa do comportamento de escala de grandezas termodinâmicas, levando em consideração termos de correção de escala de tamanho finito devidos a campos de escala irrelevantes para a correta avaliação dos expoentes críticos destes sistemas.

Por outro lado, note que o modelo estudado neste trabalho é um exemplo de desordem correlacionada, já que a diluição atua em planos alternados. Resultados anteriores indicam que uma correlação de curto alcance não muda a classe de universalidade do sistema puro (ver referência 49 e referências lá contidas), enquanto que correlação de longo alcance, decaindo com a distância  $r$  como  $r^{-a}$ , é relevante se: (i)  $2 - \nu a > 0$ , para  $a < d$  ou (ii)  $2 - \nu d > 0$ , para  $a > d$ , sendo que  $d$  é a dimensão do sistema [50]. No nosso caso (modelo de Ising tridimensional), a diluição aleatória já é relevante; assim, o fato dela ser correlacionada não muda este resultado. Entretanto, ainda é uma questão em aberto qual a classe de universalidade do sistema desordenado com correlação, ou seja, a correlação é ou não capaz de mudar os expoentes em relação àqueles obtidos para desordem aleatória no modelo de Ising em três dimensões? Para estudar esta questão, usamos simulações numéricas com o algoritmo de Wolff e análise de escala de tamanho finito, tomando o cuidado de incluir os termos de correção de escala na análise para estimar os expoentes críticos do modelo.

No capítulo 1, apresentamos e discutimos o modelo para o sistema bicamada. No capítulo 2, discutimos conceitos de transição de fase, criticalidade e universalidade, relevantes para este trabalho. Os métodos de simulação e análise de dados usados neste trabalho são apresentados nos capítulos 3 e 4, respectivamente. Nossos resultados e discussões são apresentados no capítulo 5. No último

<sup>1</sup> Para o caso de impurezas não magnéticas, existe um valor crítico para a concentração de sítios magnéticos, também conhecido como ponto de percolação,  $p_c$ , para o qual não há mais uma transição entre as fases paramagnética e ferromagnética [43]. Abaixo de  $p_c$  não faz sentido falar do comportamento crítico destes sistemas pois existe apenas uma fase paramagnética. No caso de impurezas antiferromagnéticas, pode existir uma concentração de ligações antiferromagnéticas para a qual a linha de transição entre as fases paramagnética e ferromagnética encontra a linha de transição entre as fases paramagnética e vidro de spin, onde a frustração é muito relevante [44]. O comportamento crítico destas duas transições é diferente.

capítulo, apresentamos a conclusão, as perspectivas e considerações finais.

## 1 MODELOS DE ISING EM CAMADAS

Neste capítulo descreveremos brevemente o modelo de Ising de  $spin\ 1/2$ , apresentando inicialmente o hamiltoniano em sua forma homogênea e sem campo magnético externo. Neste modelo, a energia do sistema depende apenas das interações entre pares de primeiros vizinhos e as magnitudes das interações de todos os pares são iguais. Em seguida apresentaremos uma generalização direta do modelo, levando em consideração a presença de diluição e de integrais de troca não homogêneas devido à presença de diferentes átomos. Finalmente, introduziremos o hamiltoniano para um sistema composto de dois tipos de planos magneticamente não equivalentes, o qual será objeto de estudo deste trabalho.

### 1.1 Modelo de Ising de $Spin\ 1/2$

Um modelo muito simples, porém também incrivelmente útil no estudo de sistemas magnéticos, o modelo de Ising é, a julgar pelo número de trabalhos publicados sobre o tema desde a década de 1930, o mais estudado dentre os modelos da Mecânica Estatística e um dos mais estudados em toda a Física [51–55]. Inicialmente criado para descrever um sistema ferromagnético [51], este modelo tem sido usado para descrever os mais diversos fenômenos nos mais variados contextos desde sua concepção. Aplicações para o modelo de Ising variam de descrever sistemas magnéticos, gases, sistemas biológicos, neurológicos, econômicos e até sociais [52–55].

Para apresentar o modelo, devemos considerar um sistema de  $N$  átomos com momentos de dipolo magnético  $\mu_i$ , que podem estar paralelos ou antiparalelos ao eixo  $z$ . O sistema pode ser descrito por um vetor  $\sigma = (s_1, s_2, \dots, s_N)$ , onde os  $s_i$  são variáveis estocásticas que podem assumir os valores  $+1$  se  $\mu_i$  for paralelo ao eixo  $z$  e  $-1$  se  $\mu_i$  for antiparalelo ao eixo  $z$ . O número de estados (diferentes vetores  $\sigma$ ) para este sistema é  $2^N$ .

Consideremos agora dois átomos vizinhos,  $i$  e  $j$ . Seus momentos de dipolo magnético podem estar paralelos ou antiparalelos. Consideremos que a energia de interação entre esses dois átomos seja  $-Js_i s_j$ . Se  $J > 0$ , os estados favorecidos são aqueles em que  $\mu_i$  e  $\mu_j$  são paralelos: assim o sistema descreve bem o comportamento de um ferromagneto. Se  $J < 0$ , os estados favorecidos são os que têm os momentos magnéticos dos dois átomos antiparalelos e o sistema se comporta como um antiferromagneto.

O raciocínio feito para dois átomos pode ser estendido para todos os  $N$  átomos. Assim a energia de interação de cada átomo com seus vizinhos é

$$\mathcal{E}_i(\sigma) = -J s_i \sum_{\delta} s_{i+\delta}, \quad (1.1)$$

sendo que a soma sobre os  $\delta$  se refere aos átomos vizinhos ao sítio  $i$ . A energia total do sistema é a soma da energia de cada par de átomos vizinhos. Se somarmos (1.1) sobre todos os valores  $1 \leq i \leq N$ ,

o valor obtido é o dobro da energia total, pois esta soma considera o mesmo par de átomos  $i, j$  duas vezes. O hamiltoniano é então dado por

$$\mathcal{H}(\sigma) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \mathcal{E}_i(\sigma) = -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^N s_i \sum_{\delta} s_{i+\delta}, \quad (1.2)$$

mas é mais comumente expresso como

$$\mathcal{H}(\sigma) = -J \sum_{\langle i, j \rangle} s_i s_j, \quad (1.3)$$

na qual a somatória sobre  $\langle i, j \rangle$  é realizada sobre todos os pares de primeiros vizinhos. As equações (1.3) e (1.2) são equivalentes se  $\delta$  ligar apenas primeiros vizinhos.

De uma forma geral, não é necessário que o valor de  $J$  seja o mesmo para todos os pares de sítios. Poderíamos, por exemplo, levar em consideração os efeitos da distância na magnitude da interação entre os pares de *spins* ou, também, poderíamos ter átomos de tipos diferentes distribuídos na rede. Seja qual for a natureza da inhomogeneidade, a energia de interação entre o par de átomos dos sítios  $i, j$ , neste caso, é  $-J_{ij} s_i s_j$ , sendo que a integral de troca  $J_{ij}$  pode assumir valores diferentes para diferentes pares de átomos na rede. Podemos ainda adicionar um efeito de diluição, removendo alguns dos átomos da rede. Desta forma, a energia do par  $ij$  pode ser escrita como  $-J_{ij} s_i s_j \epsilon_i \epsilon_j$ , sendo que  $\epsilon_i = 1$  indica que o átomo do sítio  $i$  está presente e  $\epsilon_i = 0$  indica que o átomo está ausente. Através de um raciocínio análogo ao apresentado para a obtenção da equação (1.3), podemos obter um hamiltoniano desse sistema mais geral como

$$\mathcal{H}(\sigma) = - \sum_{\langle i, j \rangle} J_{ij} s_i s_j \epsilon_i \epsilon_j, \quad (1.4)$$

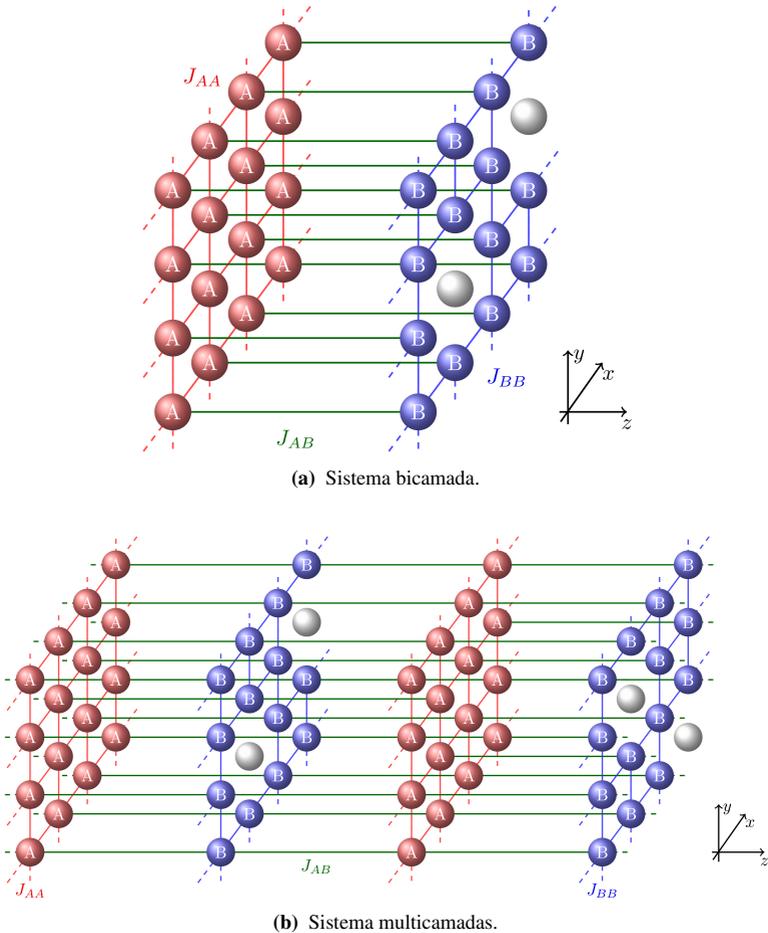
sendo que o valor dos  $J_{ij}$  depende das propriedades do par de átomos em questão.

## 1.2 Modelo, definições e notação

Os sistemas tratados neste trabalho são compostos por camadas monoatômicas diferentes, de tipos **A** e **B**, dispostas alternadamente (veja a figura 1.1). Cada camada é modelada como uma rede quadrada de tamanho linear  $L$  com interação entre primeiros vizinhos. No caso do sistema bicamada (figura 1.1a), as condições de contorno são periódicas apenas nas direções  $x$  e  $y$ . Já no caso do sistema multicamadas (figura 1.1b), as condições de contorno são periódicas nas direções  $x$ ,  $y$  e  $z$ . A interação entre dois átomos vizinhos que pertençam à mesma camada é ferromagnética enquanto a interação entre átomos de planos diferentes é antiferromagnética. As camadas do tipo **B** ainda são diluídas aleatoriamente para modelar a presença de impurezas não magnéticas.

Cada átomo tem um momento de dipolo magnético, o qual supomos se comportar como um *spin* de Ising, logo, usando a equação (1.4) como base, podemos escrever o hamiltoniano do sistema

**Figura 1.1:** Representação esquemática dos sistemas compostos por dois tipos de camadas, **A** (esferas vermelhas) e **B** (esferas azuis). Em (a) temos um sistema com apenas duas camadas. Em (b) temos infinitas camadas **A** e **B** dispostas alternadamente. Ambos os sistemas se estendem infinitamente nas direções  $x$  e  $y$ , porém apenas (b) se estende infinitamente na direção  $z$ , ao passo que (a) tem apenas duas camadas nesta direção. A integral de troca entre dois átomos vizinhos pode ser  $J_{AA}$  (dois átomos do tipo **A**),  $J_{BB}$  (dois átomos do tipo **B**) ou  $J_{AB}$  (dois átomos de camadas adjacentes). Apenas camadas do tipo **B** apresentam diluição, representada na figura por esferas de cor cinza.



como

$$\mathcal{H} = -J_{AA} \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - J_{AB} \sum_{\langle j,k \rangle} s_j s_k \epsilon_k - J_{BB} \sum_{\langle k,\ell \rangle} s_k s_\ell \epsilon_k \epsilon_\ell, \quad (1.5)$$

sendo que as somas em  $\langle i,j \rangle$ ,  $\langle j,k \rangle$  e  $\langle k,\ell \rangle$  são realizadas sobre todos os pares de primeiros vizinhos **A-A**, **A-B** e **B-B**, respectivamente. As variáveis de *spin* assumem os valores  $s_n = \pm 1$  para todo sítio  $n$ , os  $\epsilon_n$  são variáveis aleatórias descorrelacionadas, valendo 1 com probabilidade  $p$  (concentração de sítios magnéticos), ou 0 com probabilidade  $1-p$  (concentração de impurezas, ou de sítios inativos). As integrais de troca  $J_{AA}$  e  $J_{BB}$  são positivas e  $J_{AB}$  é negativa.

Para fins de cálculos numéricos com o modelo, como simulações de Monte Carlo, é útil definir algumas grandezas adimensionais, como a energia

$$\mathcal{E} = -(J_{AA}/J_{BB}) \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - (J_{AB}/J_{BB}) \sum_{\langle j,k \rangle} s_j s_k \epsilon_k - \sum_{\langle k,\ell \rangle} s_k s_\ell \epsilon_k \epsilon_\ell, \quad (1.6)$$

de tal forma que o hamiltoniano (1.5) se reduz a  $\mathcal{H} = J_{BB}\mathcal{E}$ . Também definimos as magnetizações dos planos **A** e **B**, respectivamente, como

$$\mathcal{M}_A = \frac{1}{N_A} \sum_{j \in A} s_j \quad (1.7)$$

e

$$\mathcal{M}_B = \frac{1}{N_B} \sum_{k \in B} s_k \epsilon_k, \quad (1.8)$$

sendo que  $N_A$  é o número de sítios magnéticos na rede **A** e  $N_B$  é o número de sítios magnéticos na rede **B**. Para o sistema bicamada temos  $N_A = L^2$  e  $N_B = pL^2$ . Já para o sistema multicamada, temos  $N_A = L^3/2$  e  $N_B = pL^3/2$ . A magnetização total é

$$\mathcal{M}_{\text{tot}} = \frac{1}{2} (\mathcal{M}_A + p\mathcal{M}_B). \quad (1.9)$$

Com as definições acima, podemos medir outras grandezas. Tipicamente, estamos interessados em observáveis com forma funcional  $\mathcal{O} = \mathcal{M}_\Lambda^n \mathcal{E}^{n'}$ , sendo que  $n, n' = 0, 1, 2, 3, \dots$  e  $\Lambda = \text{tot}, A, B$ . É importante ressaltar que as grandezas representadas com fonte caligráfica ( $\mathcal{E}$ ,  $\mathcal{M}_A$ ,  $\mathcal{M}_B$ ,  $\mathcal{M}_{\text{tot}}$ ,  $\mathcal{O}$ ) são calculadas para uma configuração específica de desordem e para uma configuração específica de *spins*. Nós denotamos a média canônica do observável  $\mathcal{O}$  para uma dada configuração de desordem como  $\langle \mathcal{O} \rangle$ , ou seja,

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{\{\text{config.}\}} \mathcal{O} e^{-K\mathcal{E}}, \quad (1.10)$$

na qual a soma é realizada sobre todas as possíveis configurações dos *spins* do sistema,  $K \equiv \beta_T J_{BB}$ ,  $\beta_T \equiv (k_B T)^{-1}$ ,  $T$  é a temperatura,  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $\mathcal{Z}$  é a função de partição [56–58],

dada por

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{\text{config.}\}} e^{-K\mathcal{E}}. \quad (1.11)$$

Desta forma, definimos o calor específico

$$c = \frac{K^2}{N_{\text{tot}}} (\langle \mathcal{E}^2 \rangle - \langle \mathcal{E} \rangle^2), \quad (1.12)$$

sendo que  $N_{\text{tot}} = N_A + N_B$  é o número total de sítios magnéticos do sistema. Definimos também as susceptibilidades magnéticas

$$\chi_\Lambda = N_\Lambda K (\langle \mathcal{M}_\Lambda^2 \rangle - \langle |\mathcal{M}_\Lambda| \rangle^2) \quad (1.13)$$

e o cumulante reduzido de quarta ordem da magnetização, também conhecido como cumulante de Binder [44, 46, 59, 60],

$$U_4^\Lambda = 1 - \frac{\langle \mathcal{M}_\Lambda^4 \rangle}{3 \langle \mathcal{M}_\Lambda^2 \rangle^2}, \quad (1.14)$$

sendo que  $\Lambda = \text{tot}, A, B$ .

Também estamos interessados em certas derivadas térmicas como

$$\partial_K \mathcal{G} \equiv \frac{d\mathcal{G}}{dK}, \quad (1.15)$$

na qual  $\mathcal{G} = U_4^\Lambda$ ,  $\mathcal{G} = \langle |\mathcal{M}_\Lambda|^n \rangle$  ou  $\mathcal{G} = \ln \langle |\mathcal{M}_\Lambda|^n \rangle$ , e  $n$  é um número inteiro. Estas derivadas podem ser obtidas a partir de médias do tipo  $\langle \mathcal{M}_\Lambda^k \mathcal{E}^\ell \rangle$ , tendo em vista que é fácil mostrar que a derivada da equação (1.10) em relação a  $K$  nos dá

$$\partial_K \langle \mathcal{O} \rangle = \frac{d}{dK} \left[ \frac{\sum_{\{\sigma\}} \mathcal{O} e^{-K\mathcal{E}}}{\sum_{\{\sigma\}} e^{-K\mathcal{E}}} \right] = \langle \mathcal{E} \rangle \langle \mathcal{O} \rangle - \langle \mathcal{E} \mathcal{O} \rangle. \quad (1.16)$$

Por exemplo, podemos expressar as derivadas de  $\langle |\mathcal{M}_\Lambda|^n \rangle$  e  $\ln \langle |\mathcal{M}_\Lambda|^n \rangle$ , respectivamente, como

$$\partial_K \langle |\mathcal{M}_\Lambda|^n \rangle = \langle \mathcal{E} \rangle \langle |\mathcal{M}_\Lambda|^n \rangle - \langle \mathcal{E} |\mathcal{M}_\Lambda|^n \rangle$$

e

$$\partial_K \ln \langle |\mathcal{M}_\Lambda|^n \rangle = \frac{1}{\langle |\mathcal{M}_\Lambda|^n \rangle} \partial_K \langle |\mathcal{M}_\Lambda|^n \rangle = \langle \mathcal{E} \rangle - \frac{\langle \mathcal{E} |\mathcal{M}_\Lambda|^n \rangle}{\langle |\mathcal{M}_\Lambda|^n \rangle}.$$

Finalmente, a média sobre diferentes configurações de desordem de uma grandeza qualquer é representada com uma linha sobre o símbolo que representa esta grandeza (e. g.,  $\overline{\langle \mathcal{O} \rangle}$ ,  $\overline{\partial_K \ln \langle |\mathcal{M}_\Lambda|^n \rangle}$ ). Para o caso particular das magnetizações do sistema, por questão de conveniência, ainda definimos a notação

$$m_\Lambda \equiv \overline{\langle \mathcal{M}_\Lambda \rangle}, \quad (1.17)$$

para  $\Lambda = \text{tot}, A, B$ .

O cálculo destes observáveis através de simulações de Monte Carlo, bem como a utilização des-

tas grandezas para a determinação das propriedades magnéticas e comportamento crítico do sistema, serão discutidos nos capítulos 3 e 4.

### 1.3 Aproximação de Campo Médio

Uma primeira abordagem muito comum para se estudar o comportamento magnético de sistemas mais complexos, como o apresentado na seção anterior, é a aproximação de campo médio [56,58]. Esta abordagem é muito simples e consiste em, ao invés de considerar as interações entre todos os pares de vizinhos, supor que cada átomo do sistema interage apenas com uma média dos demais. Isto é equivalente a desprezar correlações entre *spins* [58].

Há várias formas equivalentes de aplicar a aproximação de campo médio [42, 56, 58], todavia, para a análise do hamiltoniano (1.5), escolhemos partir da identidade de Callen [56, 61], através da qual expressamos as magnetizações do sistema como

$$\overline{\langle s_n \rangle} = \overline{\langle \tanh(\beta_T E_n) \rangle}, \quad (1.18)$$

tal que os  $E_n$  correspondem ao termo do hamiltoniano (1.5) que multiplica uma variável de *spin*  $s_n$  de um átomo magnético que pertence a uma camada **A** ou **B**, ou seja,

$$\begin{aligned} E_{n \in A} &= J_{AA} \sum_j s_j + J_{AB} \sum_{\ell} s_{\ell} \epsilon_{\ell}, \\ E_{n \in B} &= J_{BB} \sum_k s_k \epsilon_k + J_{AB} \sum_i s_i, \end{aligned} \quad (1.19)$$

nas quais as somas são realizadas sobre os primeiros vizinhos do  $n$ -ésimo sítio, de forma que as somas nos índices  $j$  e  $k$  levam em conta apenas os vizinhos da mesma camada (quatro para ambos os sistemas bicamada e multicamadas) e as somas em  $i$  e  $\ell$  consideram os vizinhos das demais camadas (apenas um para o sistema bicamada e dois para o sistema multicamadas). Na equação (1.19), usamos a mesma convenção de índices do hamiltoniano (1.5), isto é, os índices  $i$  e  $j$  são usados para os átomos das camadas **A**, enquanto os índices  $k$  e  $\ell$  são usados para átomos das camadas **B**. Note que parece faltar um termo  $\epsilon_n$  multiplicando o lado direito da expressão para  $E_{n \in B}$ , no entanto este termo seria redundante, tendo em vista que na equação (1.19) consideramos apenas os sítios ocupados por átomos magnéticos do sistema, ou seja, apenas os casos para os quais  $\epsilon_n = 1$ .

É importante ressaltar que a expressão (1.18) é exata, porém, para calcular as médias no lado direito da equação, é necessário conhecer a distribuição de probabilidades de encontrar o sistema em todas as possíveis configurações, o que na maioria das vezes é intratável. A aproximação de campo médio neste caso corresponde a substituir

$$\overline{\langle \tanh(\beta_T E_n) \rangle} = \tanh \overline{\langle \beta_T E_n \rangle}$$

na equação (1.18). Desta forma, utilizando as identidades  $\overline{\langle s_{n \in \Lambda} \rangle} = m_{\Lambda}$  e  $\overline{\langle \epsilon_n \rangle} = p$ , obtemos as magne-

tizações

$$\begin{aligned} m_A &= \tanh \left\{ \beta_T (z J_{AA} m_A + p z' J_{AB} m_B) \right\}, \\ m_B &= \tanh \left\{ \beta_T (p z J_{BB} m_B + z' J_{AB} m_A) \right\}, \end{aligned} \quad (1.20)$$

sendo que  $z$  é o número de primeiros vizinhos que um átomo tem em sua própria camada (e. g.,  $z = 4$  para uma rede quadrada) e  $z'$  é o número de primeiros vizinhos que um átomo tem nas demais camadas, isto é,  $z' = 1$  para o sistema bicamada e  $z' = 2$  para o sistema multicamadas.

Os sistemas de equações não lineares (1.20) pode ser resolvido numericamente, por exemplo com o método de Newton-Raphson [62], para determinar as magnetizações,  $m_A$ ,  $m_B$  e  $m_{\text{tot}} = \frac{1}{2}(m_A + p m_B)$ , em função da temperatura para vários valores dos parâmetros do hamiltoniano, como podemos ver no exemplo da figura 1.2, para um sistema multicamadas com  $p = 0,80$  e  $J_{AB}/J_{BB} = -0,50$ , nos casos:  $J_{AA}/J_{BB} = 0,20$  (figura 1.2a) e  $J_{AA}/J_{BB} = 0,80$  (figura 1.2b).

#### 1.4 Aproximação de Campo Efetivo

Com o objetivo de melhorar os resultados da aproximação de campo médio, podemos aplicar o método de campo efetivo, proposto por Honmura e Kaneyoshi [63]. Embora este método tenha sido inicialmente aplicado para o modelo de Ising puro, nós utilizaremos a versão generalizado para sistemas desordenados [64]. Nesta abordagem, usamos o operador diferencial

$$e^{\lambda \nabla} f(x) = f(x + \lambda),$$

na qual  $\nabla \equiv \frac{\partial}{\partial x}$ , para reescrever a equação (1.18) como

$$\overline{\langle s_n \rangle} = \overline{\langle \exp(\beta_T E_n \nabla) \rangle} \tanh x \Big|_{x=0}, \quad (1.21)$$

na qual os  $E_n$  são dados pela equação (1.19) e, conseqüentemente, as exponenciais da equação (1.27) podem ser escritas como

$$\begin{aligned} \exp(\beta_T E_{n \in A} \nabla) &= \left\{ \prod_j \exp(\beta_T J_{AA} s_j \nabla) \right\} \left\{ \prod_\ell \exp(\beta_T J_{AB} s_\ell \epsilon_\ell \nabla) \right\} \\ \exp(\beta_T E_{n \in B} \nabla) &= \left\{ \prod_k \exp(\beta_T J_{BB} s_k \epsilon_k \nabla) \right\} \left\{ \prod_i \exp(\beta_T J_{AB} s_i \nabla) \right\}, \end{aligned} \quad (1.22)$$

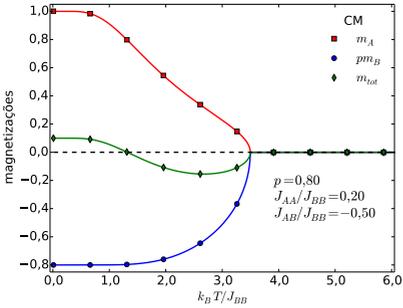
nas quais usamos a mesma convenção de índices da equação (1.19), ou seja, os produtórios com índices  $j$  e  $k$  têm quatro fatores no caso de uma rede quadrada e os produtórios com índices  $i$  ou  $\ell$  podem ter apenas um fator para o sistema bicamada ou dois fatores para o sistema multicamadas.

Na equação (1.22), tendo em vista que  $\epsilon_n$  pode valer 0 ou 1, as exponenciais da forma  $e^{x s_n \epsilon_n}$  podem ser expressas como

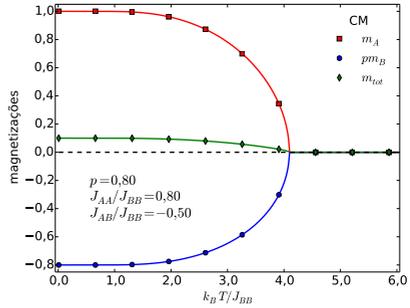
$$e^{x s_n \epsilon_n} = 1 + \epsilon_n [e^{x s_n} - 1].$$

Já  $e^{x s_n}$  pode ser escrita como uma série de potências, que por sua vez pode ser separada em duas

**Figura 1.2:** Resultado de campo médio para as magnetizações dos planos,  $m_A$  e  $pm_B$ , e magnetização total,  $m_{tot}$ , em função da temperatura adimensional,  $k_B T/J_{BB}$ , para um sistema multicamadas com  $p = 0,80$  e  $J_{AB}/J_{BB} = -0,50$ . A figura (a), para  $J_{AA}/J_{BB} = 0,20$ , mostra a existência de uma temperatura de compensação,  $T_{comp}$ , tal que  $m_{tot} = 0$  e  $0 < T_{comp} < T_c$  enquanto a figura (b), para  $J_{AA}/J_{BB} = 0,80$ , corresponde a um caso sem compensação.

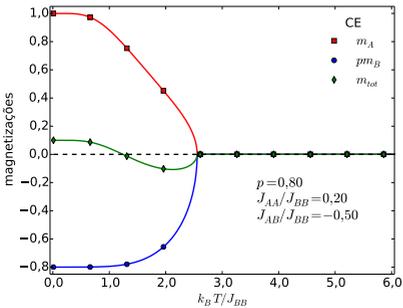


(a) Com compensação.

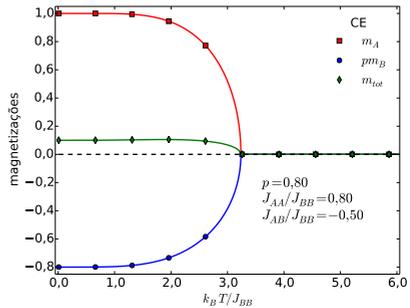


(b) Sem compensação.

**Figura 1.3:** Resultado de campo efetivo para as magnetizações dos planos,  $m_A$  e  $pm_B$ , e magnetização total,  $m_{tot}$ , em função da temperatura adimensional,  $k_B T/J_{BB}$ , para um sistema multicamadas com  $p = 0,80$  e  $J_{AB}/J_{BB} = -0,50$ . A figura (a), para  $J_{AA}/J_{BB} = 0,20$ , mostra a existência de uma temperatura de compensação,  $T_{comp}$ , tal que  $m_{tot} = 0$  e  $0 < T_{comp} < T_c$  enquanto a figura (b), para  $J_{AA}/J_{BB} = 0,80$ , corresponde a um caso sem compensação.



(a) Com compensação.



(b) Sem compensação.

séries: uma para os índices pares e outra para os índices ímpares:

$$e^{xs_n} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(xs_n)^{2k}}{(2k)!} + \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{(xs_n)^{2\ell+1}}{(2\ell+1)!}.$$

Como  $s_n = \pm 1$ , sabemos que  $s_n^{2k} = 1$  e  $s_n^{2\ell+1} = s_n$ . Logo, obtemos

$$e^{xs_n} = \left( \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^{2k}}{(2k)!} \right) + s_n \left( \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{x^{2\ell+1}}{(2\ell+1)!} \right) = \cosh(x) + s_n \sinh(x) \quad (1.23)$$

e, portanto,

$$e^{xs_n \epsilon_n} = 1 + \epsilon_n [\cosh(x) + s_n \sinh(x) - 1]. \quad (1.24)$$

Substituindo (1.23) e (1.24) em (1.22), obtemos

$$\begin{aligned} \exp(\beta_T E_{n \in A} \nabla) &= \Pi_j \left\{ \cosh(\beta_T J_{AA} \nabla) + s_j \sinh(\beta_T J_{AA} \nabla) \right\} \\ &\quad \times \Pi_\ell \left\{ 1 + \epsilon_\ell [\cosh(\beta_T J_{AB} \nabla) + s_\ell \sinh(\beta_T J_{AB} \nabla) - 1] \right\} \\ \exp(\beta_T E_{n \in B} \nabla) &= \Pi_k \left\{ 1 + \epsilon_k [\cosh(\beta_T J_{BB} \nabla) + s_k \sinh(\beta_T J_{BB} \nabla) - 1] \right\} \\ &\quad \times \Pi_i \left\{ \cosh(\beta_T J_{AB} \nabla) + s_i \sinh(\beta_T J_{AB} \nabla) \right\}. \end{aligned} \quad (1.25)$$

Analogamente ao que foi feito para obter as expressões para as magnetizações na seção 1.3, vamos obter uma aproximação para as médias  $\overline{\langle \exp(\beta_T E_n \nabla) \rangle}$  desprezando correlações entre spins, ou seja, utilizando  $\langle \Pi_n s_n \rangle = \Pi_n \langle s_n \rangle$ . Como sabemos que as variáveis  $\epsilon_n$  são descorrelacionadas, ainda temos que  $\overline{\Pi_n \epsilon_n} = \Pi_n \overline{\epsilon_n}$ . Usando as identidades:  $\overline{\langle s_{n \in \Lambda} \rangle} = m_\Lambda$  e  $\overline{\epsilon_n} = p$ , escrevemos as médias de (1.25) como

$$\begin{aligned} \overline{\langle \exp(\beta_T E_{n \in A} \nabla) \rangle} &= \Pi_j \left\{ \cosh(\beta_T J_{AA} \nabla) + m_A \sinh(\beta_T J_{AA} \nabla) \right\} \\ &\quad \times \Pi_\ell \left\{ 1 + p [\cosh(\beta_T J_{AB} \nabla) + m_B \sinh(\beta_T J_{AB} \nabla) - 1] \right\} \\ \overline{\langle \exp(\beta_T E_{n \in B} \nabla) \rangle} &= \Pi_k \left\{ 1 + p [\cosh(\beta_T J_{BB} \nabla) + m_B \sinh(\beta_T J_{BB} \nabla) - 1] \right\} \\ &\quad \times \Pi_i \left\{ \cosh(\beta_T J_{AB} \nabla) + m_A \sinh(\beta_T J_{AB} \nabla) \right\}. \end{aligned} \quad (1.26)$$

Finalmente, substituindo (1.26) em (1.27) e utilizando a identidade

$$\cosh a + x \sinh a = \frac{1}{2} \left[ (1+x)e^a + (1-x)e^{-a} \right],$$

podemos facilmente obter as expressões para magnetizações na aproximação de campo efetivo como

$$\begin{aligned}
 m_A &= \frac{1}{2^{(z+z')}} \left\{ (1+m_A)e^{\beta_T J_{AA}\nabla} + (1-m_A)e^{-\beta_T J_{AA}\nabla} \right\}^z \\
 &\quad \times \left\{ 2(1-p) + p \left[ (1+m_B)e^{\beta_T J_{AB}\nabla} + (1-m_B)e^{-\beta_T J_{AB}\nabla} \right] \right\}^{z'} \tanh x \Big|_{x=0}, \\
 m_B &= \frac{1}{2^{(z+z')}} \left\{ 2(1-p) + p \left[ (1+m_B)e^{\beta_T J_{BB}\nabla} + (1-m_B)e^{-\beta_T J_{BB}\nabla} \right] \right\}^z \\
 &\quad \times \left\{ (1+m_A)e^{\beta_T J_{AB}\nabla} + (1-m_A)e^{-\beta_T J_{AB}\nabla} \right\}^{z'} \tanh x \Big|_{x=0}, \tag{1.27}
 \end{aligned}$$

nas quais, como na equação (1.20),  $z$  e  $z'$  são os números de primeiros vizinhos que um sítio tem, respectivamente, em sua própria camada e nas demais camadas. Para o sistema bicamada temos  $z' = 1$  e para o sistema multicamadas temos  $z' = 2$ .

Assim como na seção 1.3, o sistema de equações não lineares em (1.27) pode ser resolvido numericamente para determinar  $m_A$ ,  $m_B$  e  $m_{\text{tot}}$  em função da temperatura para vários valores dos parâmetros do hamiltoniano, como podemos ver no exemplo da figura 1.3, para um sistema multicamadas com  $p = 0,80$  e  $J_{AB}/J_{BB} = -0,50$ , nos casos:  $J_{AA}/J_{BB} = 0,20$  (figura 1.3a) e  $J_{AA}/J_{BB} = 0,80$  (figura 1.3b).

## 2 TRANSIÇÕES DE FASE E FENÔMENOS CRÍTICOS

Neste capítulo, apresentaremos uma breve discussão sobre transições de fase e fenômenos críticos. Em seguida, introduziremos três conceitos fundamentais para o estudo de fenômenos críticos: renormalização, invariância de escala e universalidade.

### 2.1 Transições de fase

Transições de fase são caracterizadas por uma singularidade em um potencial termodinâmico. O comportamento singular do potencial termodinâmico costuma ser usado para classificar transições de fase em duas categorias: transições de primeira ordem (transição descontínua), ou transições contínuas. No primeiro caso, deve haver uma descontinuidade finita em uma ou mais das primeiras derivadas do potencial termodinâmico em questão. Já no caso de uma transição contínua as primeiras derivadas do potencial são todas contínuas, no entanto, deve haver uma divergência em alguma derivada de ordem superior [58].

Para sistemas magnéticos, o potencial termodinâmico adequado é a energia livre

$$\mathcal{F} = -k_B T \ln \mathcal{Z} = U - TS, \quad (2.1)$$

na qual  $k_B$  é a constante de Boltzmann,  $T$  é a temperatura,  $\mathcal{Z}$  é a função de partição,  $S$  é a entropia e  $U$  é a energia interna. Sabemos que  $U$  é função da entropia e de um campo magnético externo  $H$  da seguinte forma:

$$dU = TdS - MdH, \quad (2.2)$$

na qual  $M$  é a magnetização total. Logo, temos

$$d\mathcal{F} = dU - TdS - SdT = -MdH - SdT \quad (2.3)$$

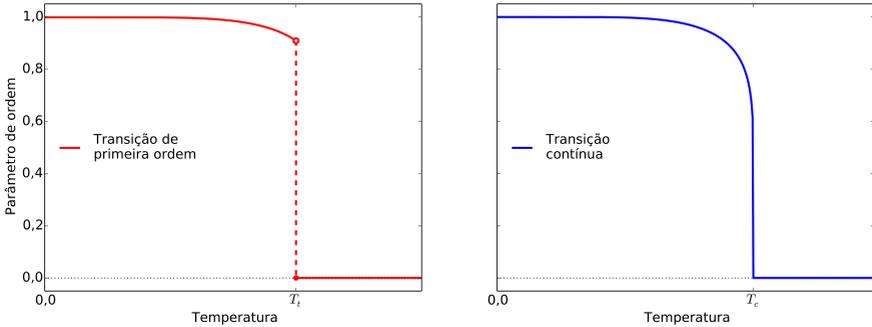
e podemos escrever a magnetização por partícula como

$$m = \frac{M}{N} = -\frac{1}{N} \left( \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial H} \right)_T. \quad (2.4)$$

Sistemas que passam por transições de fase costumam apresentar alterações drásticas em suas propriedades termodinâmicas, bem como mudanças de simetria. Analisemos o caso particular de um sistema ferromagnético a campo nulo. Neste caso a transição ocorre entre as fases paramagnética e ferromagnética. Na fase ferromagnética, também chamada de fase ordenada, os *spins* apresentam ordem de longo alcance, o que resulta em uma magnetização diferente de zero mesmo sem a presença de um campo externo. Já a fase paramagnética, também chamada de fase desordenada, apresenta *spins* desordenados e magnetização nula. Há uma diferença clara entre a simetria espacial das duas fases em questão. Na fase desordenada, por não apresentar magnetização, o sistema é invariante por

rotação enquanto que na fase ordenada, na qual há uma direção preferencial para a magnetização, a invariância rotacional do sistema é quebrada. Para uma melhor compreensão das diferenças de simetria entre as duas fases, definimos uma nova quantidade, chamado parâmetro de ordem. Este novo parâmetro é alguma grandeza termodinâmica associada ao sistema que é idênticamente nula na fase desordenada e diferente de zero na fase ordenada [57,58].

**Figura 2.1:** Representação do comportamento do parâmetro de ordem em uma transição de primeira ordem (esquerda; vermelho) e em uma transição contínua (direita; azul).



Outro aspecto importante do parâmetro de ordem é o fato de que o seu comportamento na proximidade da transição está intimamente ligado à classificação da transição como contínua ou de primeira ordem. Para o caso do sistema ferromagnético o parâmetro de ordem é a própria magnetização, cujo comportamento qualitativo para os dois tipos de transição é apresentado na figura 2.1. A curva azul mostra a magnetização se aproximando de zero de forma contínua conforme a temperatura aumenta até a temperatura crítica,  $T_c$ , como ocorre em uma transição contínua. Já a curva vermelha mostra uma descontinuidade no parâmetro de ordem em uma temperatura chamada de temperatura de transição,  $T_t$ , característica de uma transição de primeira ordem [58].

## 2.2 Transições contínuas e comportamento crítico

Transições de fase contínuas podem ser caracterizadas pela divergência de grandezas relacionadas com a segunda derivada ou derivadas de ordem superior de algum potencial termodinâmico em uma certa temperatura  $T = T_c$ , chamada de temperatura crítica. No caso de um sistema ferromagnético, a transição entre as fases paramagnética e ferromagnética é caracterizada pela divergência da susceptibilidade magnética,  $\chi$ , que é a derivada do parâmetro de ordem em relação ao campo externo, dada por

$$\chi = \left( \frac{\partial m}{\partial H} \right)_{H=0} = -\frac{1}{N} \left( \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial H^2} \right)_{H=0}, \quad (2.5)$$

assim como pela possível divergência de outras grandezas relacionadas com derivadas de segunda ordem de  $\mathcal{F}$ , como é o caso do calor específico a campo nulo

$$c = \frac{1}{N} \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_{H=0} = -\frac{T}{N} \left( \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial T^2} \right)_{H=0}. \quad (2.6)$$

Nas proximidades do ponto crítico, podemos descrever o comportamento de certos observáveis,  $\mathcal{O}$ , como leis de potência da seguinte forma:

$$\mathcal{O}(t) \sim |t|^\lambda, \quad t \rightarrow 0, \quad (2.7)$$

na qual  $t \equiv (T - T_c)/T_c$  é a temperatura reduzida, uma espécie de medida da “distância” à temperatura crítica, e  $\lambda$  é o expoente crítico associado à grandeza  $\mathcal{O}$ , definido como:

$$\lambda = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\ln |\mathcal{O}(t)|}{\ln |t|}. \quad (2.8)$$

Na tabela 2.1, apresentamos a definição de alguns expoentes críticos relacionados a grandezas termodinâmicas em sistemas magnéticos, como o calor específico, susceptibilidade magnética, entre outras. Uma outra grandeza importante mencionada nesta tabela é a função de correlação de pares, definida como:

$$\Gamma(\vec{r}) = \langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle, \quad (2.9)$$

na qual  $s_i$  e  $s_j$  são variáveis de *spin* e  $\vec{r} = \vec{r}_j - \vec{r}_i$  é o vetor posição relativa entre  $s_i$  e  $s_j$ . O comportamento assintótico da função de correlação de pares para  $t \rightarrow 0$  e  $r \gg \xi$  é

$$\Gamma(\vec{r}) \sim \frac{e^{-r/\xi}}{r^{d-2+\eta}}, \quad (2.10)$$

na qual  $\xi$  é o comprimento de correlação [42]. Já no ponto crítico, este comportamento se reduz ao apresentado na tabela 2.1.

É importante ressaltar que apenas dois dos seis expoentes da tabela 2.1 são independentes, sendo que eles estão relacionados através das leis de escala apresentadas na tabela 2.2, obtidas a partir do grupo de renormalização, como veremos na seção 2.3.

**Tabela 2.1:** Comportamento crítico e expoentes críticos de algumas grandezas termodinâmicas [58].

Calor específico	$c \sim  t ^{-\alpha}$ ,	$t \rightarrow 0, H = 0$
Susceptibilidade magnética	$\chi \sim  t ^{-\gamma}$ ,	$t \rightarrow 0, H = 0$
Magnetização	$m \sim t^\beta$ ,	$t \rightarrow 0^-, H = 0$
Isoterma crítica	$H \sim \frac{ m }{m}  m ^\delta$ ,	$t = 0$
Função de correlação de pares	$\Gamma(\vec{r}) \sim 1/r^{d-2+\eta}$ ,	$t = 0, H = 0$
Comprimento de correlação	$\xi \sim  t ^{-\nu}$ ,	$t \rightarrow 0, H = 0$

**Tabela 2.2:** Relações entre os expoentes críticos [57].

Fisher	$\gamma = \nu(2 - \eta)$
Rushbrooke	$\alpha + 2\beta + \gamma = 2$
Widom	$\gamma = \beta(\delta - 1)$
Josephson	$\nu d = 2 - \alpha$

### 2.3 Renormalização, invariância de escala, e universalidade

Nesta seção, discutiremos brevemente três conceitos fundamentais para a nossa compreensão acerca de fenômenos críticos: renormalização, invariância de escala, e universalidade. Para tal, apresentaremos uma abordagem na qual partimos do grupo de renormalização e obtemos os demais conceitos como consequência deste, cientes de que esta abordagem não segue uma ordem histórica de surgimento e eventual inter-relação destes conceitos [65].

No grupo de renormalização (GR) [42, 58, 65], partimos da análise de um sistema descrito pelo hamiltoniano reduzido  $\bar{\mathcal{H}} = \mathcal{H}/(k_B T)$  e de como seu comportamento termodinâmico se modifica após este sistema sofrer uma transformação de escala. Não especificamos o hamiltoniano, mas devemos supor que ele seja função de um espaço de parâmetros  $\{K\}$ , de tal forma que a aplicação da transformação sobre  $\bar{\mathcal{H}}$  gera um novo hamiltoniano reduzido  $\bar{\mathcal{H}}'$  que é função de um novo espaço de parâmetros  $\{K'\}$ . Formalmente, escrevemos esta transformação como

$$\bar{\mathcal{H}}'(\{K'\}) = \mathbf{R}\bar{\mathcal{H}}(\{K\}), \quad (2.11)$$

na qual o operador  $\mathbf{R}$  reduz o número de graus de liberdade do hamiltoniano original de  $N$  para  $N'$  de tal forma que  $\bar{\mathcal{H}}'$  e  $\bar{\mathcal{H}}$  sejam estatisticamente equivalentes, ou seja, a transformação  $\mathbf{R}$  apenas multiplica a função de partição por uma constante, isto é

$$\mathcal{Z}_{N'}(\bar{\mathcal{H}}') = [\text{constante}]\mathcal{Z}_N(\bar{\mathcal{H}}). \quad (2.12)$$

Desta forma, a energia livre  $\mathcal{F}$  também é invariante, a menos de uma constante aditiva. Como  $\mathcal{F}$  é extensiva, a energia livre reduzida por sítio,  $\bar{f} = \mathcal{F}/(Nk_B T)$ , deve se transformar como

$$\bar{f}(\bar{\mathcal{H}}') = b^d \bar{f}(\bar{\mathcal{H}}) + [\text{constante}'], \quad (2.13)$$

sendo que  $d$  é a dimensão e  $b \equiv (N/N')^{1/d}$  é o fator de escala, que define como são transformadas as escalas de comprimento em nossa rede:  $\vec{r} \Rightarrow (\vec{r}') = b^{-1}\vec{r}$ .

Quase todos os resultados do GR para transições de fase provêm do fato de que, após sucessivas renormalizações, esperamos encontrar pontos fixos, ou seja, pontos no espaço de parâmetros para os quais  $\{K'\} = \{K\} \equiv \{K^*\}$  [58]. Dependendo do comportamento do sistema nas proximidades destes pontos fixos, podemos classificá-los como estáveis ou instáveis. Um ponto fixo  $\{K^*\}$  é estável se a transformação  $\mathbf{R}$  realizada com o sistema em um ponto  $\{K\}$  nas proximidades de  $\{K^*\}$  leva o sistema transformado a um ponto  $\{K'\}$  mais próximo de  $\{K^*\}$ . Já  $\{K^*\}$  é um ponto fixo instável se a transformação realizada com o sistema inicialmente em um ponto  $\{K\}$  nas proximidades de  $\{K^*\}$  leva o sistema transformado para mais longe de  $\{K^*\}$ . Sucessivas transformações aplicadas a um sistema fora de um ponto fixo levam este sistema para longe dos pontos fixos instáveis e na direção de um dos pontos fixos estáveis.

No caso de uma transformação aplicada a um sistema exatamente em um ponto fixo, deveríamos ter invariância, por exemplo, do comprimento de correlação:  $\xi' = \xi \equiv \xi^*$ . No entanto, o comprimento de correlação deve variar de acordo com o fator de escala,  $\xi' = b^{-1}\xi$ , e a condição de invariância pela transformação  $\mathbf{R}$  só pode ser satisfeita se o comprimento de correlação for zero ou infinito. Os casos em que  $\xi = 0$  correspondem a pontos fixos estáveis, também conhecidos como atratores. A determinação destes atratores nos leva a caracterizar as diferentes fases do sistema. Já a divergência do comprimento de correlação, característica de uma transição contínua, ocorre em pontos fixos instáveis, ou seja, pontos fixos instáveis estão relacionados a fenômenos críticos. Portanto, a determinação de um ponto fixo instável nos permite estimar o ponto crítico do sistema [42].

Fisicamente, uma transformação de escala realizada sobre um sistema exatamente em um ponto fixo instável preserva as características do sistema original, tendo em vista que a escala típica de comprimento dos dois sistemas, dada pelo comprimento de correlação, permanece inalterada. Este comportamento é chamado de invariância de escala e sua principal consequência para o estudo de fenômenos críticos consiste no fato de que, o comportamento singular da energia livre reduzida do sistema na região próxima ao ponto fixo instável é dado assintoticamente por uma função homogênea generalizada (FHG) [65] dos parâmetros do hamiltoniano  $\mathcal{H}$ , ou seja, escrevemos a parte singular de (2.13) perto do ponto fixo como

$$\bar{f}_{\text{sing}}(\{u_i\}) \sim b^{-d} \tilde{f}(\{u_i b^{y_i}\}), \quad (2.14)$$

na qual os  $u_i$  são campos de escala lineares do hamiltoniano. Os  $y_i$  são chamados de autovalores de grupo de renormalização e, conforme mostraremos a seguir, estão ligados aos expoentes críticos.

O comportamento das variáveis  $g_i \equiv u_i b^{y_i}$  após a aplicação de sucessivas renormalizações com  $b > 0$  pode ser de três formas:

- (a) Se  $y_i > 0$ ,  $g_i$  cresce a cada renormalização e o campo  $u_i$  é necessário para descrever o comportamento crítico do sistema no limite termodinâmico. Neste caso dizemos que  $u_i$  é um campo relevante.
- (b) Se  $y_i < 0$ ,  $g_i$  decresce a cada renormalização. Neste caso, como o valor de  $g_i$  tende a zero conforme o sistema aumenta,  $f_{\text{sing}}$  não depende de  $u_i$  no limite termodinâmico e este campo é dito irrelevante.
- (c) Se  $y_i = 0$ ,  $g_i$  pode crescer ou decrescer com sucessivas renormalizações e não podemos prever se  $f_{\text{sing}}$  é ou não função de  $u_i$  no limite termodinâmico. Neste caso, o campo  $u_i$  é dito marginal.

Tipicamente, em sistemas magnéticos, a temperatura e o campo magnético são os únicos campos relevantes. Nestes casos, reescrevemos (2.14) como

$$\bar{f}_{\text{sing}}(t, h, \{\tilde{u}_i\}) \sim b^{-d} \tilde{f}(tb^{y_t}, hb^{y_h}, \{\tilde{u}_i b^{-\omega_i}\}), \quad (2.15)$$

na qual  $u_t = t \equiv (T - T_c)/T_c$  é a temperatura reduzida, e  $u_h = h \equiv H/(k_B T)$  é o campo magnético reduzido. Os demais campos lineares,  $\{\bar{u}_i\}$ , são todos irrelevantes. Escolhendo  $b = L$ , podemos escrever (2.15) como

$$\bar{f}_{\text{sing}}(t, h, L) \sim L^{-d} \tilde{f}(tL^{y_t}, hL^{y_h}, \{\bar{u}_i L^{-\omega_i}\}). \quad (2.16)$$

Note que os expoentes  $\omega_i$  devem ser positivos, garantindo assim que, no limite termodinâmico, os  $g_i \equiv \bar{u}_i L^{-\omega_i}$  sejam nulos e a energia livre seja função apenas dos campos relevantes. No entanto, para melhor compreender a contribuição dos campos irrelevantes para sistemas de tamanho finito, podemos expandir (2.16) em torno de  $g_i = 0$ , supondo que  $\tilde{f}$  seja analítica em relação aos  $\bar{u}_i$ . Desta forma, obtemos

$$\bar{f}_{\text{sing}}(t, h, L) \sim L^{-d} \left\{ \tilde{f}(tL^{y_t}, hL^{y_h}, \{g_j = 0\}) + \sum_i g_i \tilde{f}_i + \dots \right\}, \quad (2.17)$$

na qual  $\{g_j = 0\}$  denota que a função é avaliada com  $g_j = 0, \forall j \neq h, t$ . Os  $\tilde{f}_i$  são definidos como

$$\tilde{f}_i \equiv \left( \frac{\partial \tilde{f}}{\partial g_i} \right)_{\{g_j=0\}}.$$

As consequências da invariância de escala seguem das propriedades das funções homogêneas generalizadas: como uma transformada de Legendre de uma FHG é também uma FHG, temos que todos os potenciais termodinâmicos são, assintoticamente, FHGs. Além disso, como podemos expressar qualquer grandeza termodinâmica como uma derivada de algum potencial termodinâmico e a derivada de uma FHG é também uma FHG, todas as grandezas termodinâmicas são, nas proximidades do ponto crítico (fixo), funções homogêneas generalizadas [65]. Esta noção é empregada na obtenção das relações entre os expoentes críticos dadas na tabela 2.2. Como há apenas dois campos relevantes, apenas os expoentes  $y_t$  e  $y_h$  são necessários para descrever o comportamento crítico destes sistemas, sendo que os demais expoentes podem ser escritos como função destes dois. Através da equação (2.17) e das definições (2.4), (2.5) e (2.6), podemos obter o comportamento de escala de grandezas a campo nulo, como a magnetização, susceptibilidade e calor específico, respectivamente:

$$m \sim \left( \frac{\partial \bar{f}_{\text{sing}}}{\partial h} \right)_{h=0} = L^{y_h-d} \left\{ \tilde{f}_h + \sum_i g_i \tilde{f}_{ih} + \dots \right\}, \quad (2.18)$$

$$\chi \sim \left( \frac{\partial^2 \bar{f}_{\text{sing}}}{\partial h^2} \right)_{h=0} = L^{-(d-2y_h)} \left\{ \tilde{f}_{hh} + \sum_i g_i \tilde{f}_{ihh} + \dots \right\} \quad (2.19)$$

e

$$c \sim \left( \frac{\partial^2 \bar{f}_{\text{sing}}}{\partial t^2} \right)_{h=0} = L^{-(d-2y_t)} \left\{ \tilde{f}_{tt} + \sum_i g_i \tilde{f}_{itt} + \dots \right\}, \quad (2.20)$$

nas quais

$$\tilde{f}_n \equiv \left( \frac{\partial \tilde{f}}{\partial g_n} \right)_{\{g_j=0\}, g_h=0}, \quad \tilde{f}_{nk} \equiv \left( \frac{\partial^2 \tilde{f}}{\partial g_k \partial g_n} \right)_{\{g_j=0\}, g_h=0}$$

e

$$\tilde{f}_{nk\ell} \equiv \left( \frac{\partial^3 \tilde{f}}{\partial g_\ell \partial g_k \partial g_n} \right)_{\{g_j=0\}, g_h=0},$$

sendo que  $n, k, \ell = i, h, t$ ;  $g_i \equiv \bar{u}_i L^{-\omega_i}$ ,  $g_h \equiv hL^{y_h}$  e  $g_t \equiv tL^{y_t}$ .

Note que, como as funções  $\tilde{f}_{nk\ell}$  são avaliadas para  $g_h = 0$  e  $\{g_j = 0\}$ , as grandezas nas equações (2.18), (2.19) e (2.20) são funções apenas de  $g_t$  e  $L$ . Em particular, se tomarmos o limite  $L \rightarrow \infty$ , obtemos:

$$m \sim L^{y_h-d} \tilde{f}_h(tL^{y_t}),$$

$$\chi \sim L^{2y_h-d} \tilde{f}_{hh}(tL^{y_t})$$

e

$$c \sim L^{2y_t-d} \tilde{f}_{tt}(tL^{y_t}),$$

Se escolhermos  $L = |t|^{-1/y_t}$ , obtemos

$$m \sim A_{\pm}^{(m)} |t|^{(d-y_h)/y_t},$$

$$\chi \sim A_{\pm}^{(\chi)} |t|^{-(2y_h-d)/y_t}$$

e

$$c \sim A_{\pm}^{(c)} |t|^{-(2y_t-d)/y_t},$$

nas quais os  $A_{+}^{(G)}$  e  $A_{-}^{(G)}$  são as amplitudes de uma grandeza  $G$  para  $t > 0$  e  $t < 0$ , respectivamente. A partir da tabela 2.1, podemos identificar os expoentes:  $\alpha = 2 - d/y_t$ ,  $\beta = (d - y_h)/y_t$  e  $\gamma = (2y_h - d)/y_t$ , com  $A_{+}^{(m)} = 0$ .

De forma análoga, identificamos o expoente do comprimento de correlação como  $\nu = 1/y_t$ , partindo da análise da função de correlação de pares e seu comportamento crítico. Ou ainda, de forma alternativa, da análise direta de  $\xi$ : como sabemos que o comprimento de correlação deve divergir no sistema infinito, a forma renormalizada desta grandeza deve ser comparável ao tamanho linear de um sistema finito, na região crítica:

$$\xi \sim L, \tag{2.21}$$

de onde, comparando com a tabela 2.1, obtemos:

$$|t| \sim L^{-1/\nu}, \quad (2.22)$$

que nos dá  $\nu = 1/y_t$ , se comparada com a condição  $L = |t|^{-1/y_t}$  imposta para encontrarmos os demais expoentes. As relações de escala da tabela 2.2 são facilmente obtidas se compararmos as expressões (2.21) a (2.21) com o comportamento crítico das grandezas apresentado na tabela 2.1.

Os expoentes críticos se tornam um conceito particularmente importante e fundamental para o estudo de fenômenos críticos devido a um intrigante comportamento conhecido como universalidade. Este comportamento é caracterizado pela existência de diferentes sistemas que apresentam o mesmo comportamento assintótico próximo da criticalidade. De fato, da infinidade de sistemas físicos e modelos teóricos distintos existentes, pode-se identificar um número aparentemente finito de classes que apresentam o mesmo comportamento crítico, caracterizado por um conjunto de expoentes críticos. Dizemos que dois sistemas distintos que têm o mesmo conjunto de expoentes críticos pertencem à mesma classe de universalidade [58]. O conceito de universalidade já era empiricamente conhecido há mais de quatro décadas, sendo que este nome foi proposto por Kadanoff em 1970 [65]. No entanto, uma melhor compreensão teórica da universalidade só foi possível através do GR.

O que permite que sistemas distintos sejam agrupados em uma mesma classe de universalidade é justamente o fato de que as diferenças entre estes sistemas são descritas em termos de campos irrelevantes, isto é, sua influência no comportamento crítico é desprezível conforme nos aproximamos do limite termodinâmico. Há apenas uma pequena quantidade de fatores relevantes para a descrição do comportamento crítico dos sistemas. Sabe-se por exemplo que a dimensionalidade do sistema, a dimensão do parâmetro de ordem e o alcance das interações (interações de curto alcance ou de longo alcance) estão entre estes fatores. Sabe-se também que outros aspectos, como a topologia da rede ou particularidades sobre as interações, contanto que estas se mantenham de curto alcance, por sua vez, não são fatores determinantes para a criticalidade. Há ainda fatores como a introdução de inhomogeneidades, seja de forma ordenada ou desordenada, que podem ou não ser relevantes, dependendo do sistema.

## 2.4 Relações de escala de tamanho finito

Em simulações de Monte Carlo, invariavelmente lidamos com sistemas de tamanho  $L$  finito. Todavia, o comportamento crítico dos sistemas se manifesta no limite termodinâmico. Assim, para que possamos determinar com precisão o comportamento crítico do nosso modelo, devemos analisar a dependência dos observáveis medidos em nossas simulações com o tamanho do sistema e extrapolar este comportamento para o limite  $L \rightarrow \infty$ . O método que nos permite fazer estas extrapolações é a análise de escala de tamanho finito (do inglês, *finite-size scaling*) [58]. Nesta abordagem, partimos das expressões de Grupo de Renormalização obtidas na seção 2.3. Especificamente as equações (2.18),

(2.19) e (2.20), as quais reescrevemos explicitando a dependência com os expoentes  $\alpha, \beta, \gamma, \nu, \omega_i$  e com o tamanho  $L$  do sistema. Desta forma, obtemos

$$m(g_t, L) \sim L^{-\beta/\nu} \left\{ \tilde{f}_h + \sum_i \tilde{f}_{ih} \bar{u}_i L^{-\omega_i} + \dots \right\}, \quad (2.23)$$

$$\chi(g_t, L) \sim L^{\gamma/\nu} \left\{ \tilde{f}_{hh} + \sum_i \tilde{f}_{ihh} \bar{u}_i L^{-\omega_i} + \dots \right\} \quad (2.24)$$

e

$$c(g_t, L) \sim L^{\alpha/\nu} \left\{ \tilde{f}_{tt} + \sum_i \tilde{f}_{itt} \bar{u}_i L^{-\omega_i} + \dots \right\}, \quad (2.25)$$

nas quais  $g_t \equiv tL^{1/\nu}$ . Algumas grandezas, como a susceptibilidade ou o calor específico (apenas no caso em que  $\alpha > 0$ ), divergem no ponto crítico no limite  $L \rightarrow \infty$ , como fica claro das equações (2.24) e (2.25).

Para um sistema finito, no entanto, cada uma dessas quantidades tem um valor máximo a uma dada temperatura,  $T_c(L)$ , que é a temperatura pseudo-crítica ou temperatura crítica efetiva. Por exemplo, no caso de  $\chi$ , para um valor fixo de  $L$  o máximo ocorre quando

$$\left. \frac{\partial \chi(g_t, L)}{\partial g_t} \right|_{T=T_c(L)} = 0,$$

o que é equivalente a

$$\left\{ \tilde{f}_{hht} + \sum_i \tilde{f}_{ihht} \bar{u}_i L^{-\omega_i} + \dots \right\}_{t=(T_c(L)-T_c)/T_c} = 0, \quad (2.26)$$

na qual

$$\tilde{f}_{ihht} \equiv \left( \frac{\partial^4 \tilde{f}}{\partial g_i \partial g_i^2 \partial g_i} \right)_{\{g_j=0\}, g_h=0}.$$

Como esperamos que a temperatura crítica efetiva,  $T_c(L)$ , seja próxima de  $T_c$  para valores grandes de  $L$ , podemos expandir as funções  $\tilde{f}_{hht}(g_t)$  e  $\tilde{f}_{ihht}(g_t)$  em torno de  $g_t = 0$ , obtendo, até primeira ordem:

$$\tilde{f}_{hht}(tL^{1/\nu}) \approx c_0 + d_0 t L^{1/\nu} \quad (2.27)$$

e

$$\bar{u}_i \tilde{f}_{ihht}(tL^{1/\nu}) \approx c_i + d_i t L^{1/\nu}. \quad (2.28)$$

Substituindo as expansões (2.27) e (2.28) em (2.26), obtemos:

$$\{c_0 + \sum_i c_i\} + tL^{1/\nu} \{d_0 + \sum_i d_i L^{-\omega_i}\} + \dots = 0$$

e, isolando  $t$ , utilizando a expansão  $(1+z)^{-1} \approx 1-z$  e desprezando os termos  $\mathcal{O}(L^{-(\omega_i+\omega_j)})$  e  $\mathcal{O}(L^{-2\omega_i})$ ,  $\forall i, j$ , obtemos

$$t \sim L^{-1/\nu} \left\{ 1 + \sum_i b_i L^{-\omega_i} + \dots \right\},$$

que pode ser reescrita como

$$T_c(L) - T_c \sim L^{-1/\nu} \left\{ 1 + \sum_i a_i L^{-\omega_i} + \dots \right\}. \quad (2.29)$$

Apesar de ter sido deduzida a partir do comportamento de escala da susceptibilidade, a equação (2.29) pode ser obtida a partir do calor específico ou de qualquer outra grandeza que divirja no ponto crítico no limite termodinâmico. Exemplos de grandezas que apresentam comportamentos de escala similares e podem fornecer estimativas de  $T_c(L)$  são as derivadas termodinâmicas discutidas na seção 1.2, i. e.,  $\partial_K \mathcal{G}$ , para  $\mathcal{G} = \langle |\mathcal{M}|^n \rangle$ ,  $\mathcal{G} = \ln \langle |\mathcal{M}|^n \rangle$  ou  $\mathcal{G} = U_4$  [60]. Estas derivadas não apenas fornecem estimativas adicionais para  $T_c(L)$ , como também podem ser utilizadas para calcular o expoente  $\nu$ . Para tal, como  $U_4$  e  $\ln \langle |\mathcal{M}|^n \rangle$  dependem de  $\langle |\mathcal{M}|^n \rangle$ , precisamos de uma relação de  $\langle |\mathcal{M}|^n \rangle$  com  $\bar{f}$  para encontrar seu comportamento de escala a partir de (2.17). Sabemos que a energia livre reduzida se relaciona com a função de partição como  $N\bar{f} = -\ln \mathcal{Z}$ . Desta forma, podemos obter potências da magnetização a partir de derivadas da função de partição em relação ao campo magnético [56], ou seja,

$$\langle |\mathcal{M}|^n \rangle \sim \frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{\partial^n \mathcal{Z}}{\partial h^n} = e^{N\bar{f}} \frac{\partial^n (e^{-N\bar{f}})}{\partial h^n}. \quad (2.30)$$

Para o caso particular de  $n = 2$ , por exemplo, obtemos a seguinte expressão, válida próximo do ponto crítico

$$\langle \mathcal{M}^2 \rangle \sim e^{N\bar{f}_{\text{sing}}} \frac{\partial^2 (e^{-N\bar{f}_{\text{sing}}})}{\partial h^2} = -N \left( \frac{\partial^2 \bar{f}_{\text{sing}}}{\partial h^2} \right) + N^2 \left( \frac{\partial \bar{f}_{\text{sing}}}{\partial h} \right)^2.$$

A derivada logarítmica de  $\langle \mathcal{M}^2 \rangle$  em relação a  $K$  a campo nulo é então dada por

$$\begin{aligned} \partial_K \ln \langle \mathcal{M}^2 \rangle &\sim \frac{d}{dt} \ln \langle \mathcal{M}^2 \rangle = \frac{1}{\langle \mathcal{M}^2 \rangle} \frac{d \langle \mathcal{M}^2 \rangle}{dt} \\ \partial_K \ln \langle \mathcal{M}^2 \rangle &\sim \frac{N \left( \frac{\partial^3 \bar{f}_{\text{sing}}}{\partial t \partial h^2} \right) - 2N^2 \left( \frac{\partial \bar{f}_{\text{sing}}}{\partial h} \right) \left( \frac{\partial^2 \bar{f}_{\text{sing}}}{\partial t \partial h} \right)}{N \left( \frac{\partial^2 \bar{f}_{\text{sing}}}{\partial h^2} \right) - N^2 \left( \frac{\partial \bar{f}_{\text{sing}}}{\partial h} \right)^2}. \end{aligned} \quad (2.31)$$

A seguir, precisaremos calcular algumas derivadas de  $\tilde{f}_{\text{sing}}$ . Partindo da equação (2.17), temos:

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial \tilde{f}_{\text{sing}}}{\partial h} \right)_{h=0} &= L^{-d+y_h} \left\{ \tilde{f}_h + \sum_i \tilde{f}_{ih} \tilde{u}_i L^{-\omega_i} + \dots \right\}, \\ \left( \frac{\partial^2 \tilde{f}_{\text{sing}}}{\partial h^2} \right)_{h=0} &= L^{-d+2y_h} \left\{ \tilde{f}_{hh} + \sum_i \tilde{f}_{ihh} \tilde{u}_i L^{-\omega_i} + \dots \right\}, \\ \left( \frac{\partial^2 \tilde{f}_{\text{sing}}}{\partial t \partial h} \right)_{h=0} &= L^{-d+y_h+y_t} \left\{ \tilde{f}_{ht} + \sum_i \tilde{f}_{iht} \tilde{u}_i L^{-\omega_i} + \dots \right\}, \\ \left( \frac{\partial^3 \tilde{f}_{\text{sing}}}{\partial t \partial h^2} \right)_{h=0} &= L^{-d+2y_h+y_t} \left\{ \tilde{f}_{hht} + \sum_i \tilde{f}_{ihht} \tilde{u}_i L^{-\omega_i} + \dots \right\}. \end{aligned}$$

Desta forma, sabendo que  $N \sim L^d$ , podemos escrever numerador e o denominador de (2.31), respectivamente, como

$$\begin{aligned} &L^{2y_h+y_t} \left\{ \left[ \tilde{f}_{hht} + \sum_i \tilde{f}_{ihht} \tilde{u}_i L^{-\omega_i} + \dots \right] \right. \\ &\quad \left. + 2 \left[ \tilde{f}_h + \sum_i \tilde{f}_{ih} \tilde{u}_i L^{-\omega_i} + \dots \right] \left[ \tilde{f}_{ht} + \sum_i \tilde{f}_{iht} \tilde{u}_i L^{-\omega_i} + \dots \right] \right\} \\ &= L^{2y_h+y_t} \left\{ F_0(g_t) + \sum_i F_i(g_t) L^{-\omega_i} + \dots \right\} \end{aligned} \quad (2.32)$$

e

$$\begin{aligned} &L^{2y_h} \left\{ \left[ \tilde{f}_{hh} + \sum_i \tilde{f}_{ihh} \tilde{u}_i L^{-\omega_i} + \dots \right] + \left[ \tilde{f}_h + \sum_i \tilde{f}_{ih} \tilde{u}_i L^{-\omega_i} + \dots \right]^2 \right\} \\ &= L^{2y_h} \left\{ F'_0(g_t) + \sum_i F'_i(g_t) L^{-\omega_i} + \dots \right\}, \end{aligned} \quad (2.33)$$

nas quais desprezamos os termos  $\mathcal{O}(L^{-2\omega_i})$  e  $\mathcal{O}(L^{-(\omega_i+\omega_j)})$ ,  $\forall i, j$  e definimos:

$$\begin{aligned} F_0(g_t) &\equiv \tilde{f}_{hht} + 2\tilde{f}_h \tilde{f}_{ht}, \\ F_i(g_t) &\equiv \tilde{u}_i (\tilde{f}_{ihht} + 2\tilde{f}_h \tilde{f}_{iht} + 2\tilde{f}_{ih} \tilde{f}_{ht}), \\ F'_0(g_t) &\equiv \tilde{f}_{hh} + 2\tilde{f}_h^2, \\ F'_i(g_t) &\equiv \tilde{u}_i (\tilde{f}_{ihh} + 2\tilde{f}_h \tilde{f}_{ih}). \end{aligned}$$

Substituindo as expressões (2.32) e (2.33) em (2.31), obtemos

$$\partial_K \ln |\mathcal{M}|^2 \sim L^{y_t} \left\{ \frac{F_0(g_t) + \sum_i F_i(g_t) L^{-\omega_i} + \dots}{F'_0(g_t) + \sum_i F'_i(g_t) L^{-\omega_i} + \dots} \right\} \quad (2.34)$$

e, de forma análoga ao procedimento usado para obter a equação (2.29), podemos expandir as funções  $F_0(g_t)$ ,  $F_i(g_t)$ ,  $F'_0(g_t)$  e  $F'_i(g_t)$  até primeira ordem em torno de  $g_t = 0$  e, novamente, usando (1 +

$z)^{-1} \approx 1 - z$ , obtemos

$$\partial_K \ln \langle |\mathcal{M}|^2 \rangle \sim L^{y_t} \left\{ 1 + \sum_i A_i L^{-\omega_i} + \dots \right\}. \quad (2.35)$$

Este procedimento pode ser repetido para as demais derivadas termodinâmicas, de forma que é possível escrever uma relação geral para o comportamento de escala de  $\partial_K \mathcal{G}$  nas proximidades do ponto crítico como

$$\partial_K \mathcal{G} \sim L^{1/\nu} \left\{ 1 + \sum_i G_i L^{-\omega_i} + \dots \right\}, \quad (2.36)$$

para  $\mathcal{G} = \ln \langle |\mathcal{M}|^n \rangle$  e  $\mathcal{G} = U_4$ .



### 3 MÉTODO DE MONTE CARLO

Neste capítulo vamos descrever os métodos empregados na obtenção dos resultados. Iniciaremos pela apresentação do método de Monte Carlo, mais especificamente dos algoritmos de Metropolis e Wolff. Adiante, apresentaremos alguns detalhes técnicos sobre a implementação do algoritmo e procedimentos utilizados nas simulações.

#### 3.1 Simulações de Monte Carlo

Ao estudarmos um sistema com um conjunto bem definido de estados discretos,

$$\sigma = (s_1, s_2, \dots, s_N),$$

como é o caso do modelo de Ising, usado neste trabalho, uma abordagem comum se faz a partir do hamiltoniano,  $\mathcal{H}(\sigma)$ , do sistema. Podemos supor, sem perda de generalidade, que o hamiltoniano de um sistema genérico deste tipo pode ser escrito como  $\mathcal{H}(\sigma) = J\mathcal{E}(\sigma)$ , sendo que  $\mathcal{E}(\sigma)$  é a energia extensiva adimensional do sistema. Isto é análogo ao que fizemos com o hamiltoniano (1.5), apenas com a condição  $J \equiv J_{BB}$ .

No âmbito da Mecânica Estatística, particularmente no *ensemble* canônico, o objetivo é calcular a função de partição

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{\sigma\}} \exp\{-\mathcal{H}(\sigma)/k_B T\} = \sum_{\{\sigma\}} e^{-K\mathcal{E}(\sigma)}, \quad (3.1)$$

na qual  $K \equiv J/k_B T$  é o inverso da temperatura adimensional e a soma é realizada sobre todos os possíveis estados,  $\sigma$ , do sistema. Uma vez que se conheça a função de partição, todas as propriedades termodinâmicas do sistema em questão podem ser determinadas, tendo em vista que, para o sistema em equilíbrio termodinâmico a uma temperatura  $T$ , a probabilidade de encontrá-lo na configuração  $\sigma$  é [66]

$$P_K(\sigma) = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-K\mathcal{E}(\sigma)} \quad (3.2)$$

e o valor esperado (média térmica) de um observável qualquer,  $\mathcal{O}(\sigma)$ , do sistema é dado por

$$\langle \mathcal{O} \rangle_K = \sum_{\{\sigma\}} \mathcal{O}(\sigma) P_K(\sigma). \quad (3.3)$$

No caso do modelo de Ising, o número de estados é  $2^N$ , sendo  $N$  é o número total de sítios na rede. Para um sistema composto por duas redes quadradas de tamanho linear  $L = 10$ , que é o menor tamanho dentre as redes usadas neste trabalho, por exemplo, temos  $N = 2 \times 10^2$ , o que nos dá  $2^{200} \approx 10^{60}$  estados. Se fôssemos apenas calcular a soma em (3.1) exatamente para este sistema, considerando que dispomos de computadores com capacidade de realizar  $\sim 10^{10}$  operações de soma por segundo, o tempo de computação necessário seria  $t_{\text{cpu}} \sim 10^{50}$  segundos. É claro que esta abordagem é inviável, pois demoraríamos um tempo dezenas de ordens de grandeza maior do que a

idade do universo para obter o comportamento exato de um sistema extremamente pequeno, quando na verdade estamos interessados no comportamento do sistema no limite termodinâmico ( $N \rightarrow \infty$ ).

O método de Monte Carlo surge como uma poderosa ferramenta em casos como o do exemplo anterior, nos quais a função de partição não pode ser calculada exatamente. O método consiste em estimar o valor de  $\langle \mathcal{O} \rangle$  supondo que seja possível gerar um certo número  $n$  de estados de acordo com a probabilidade  $P(\sigma)$  e que estes estados levem a médias representativas do cálculo feito com todos os estados. Assim obtemos simplesmente

$$\mathcal{O}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathcal{O}_i, \quad (3.4)$$

na qual  $\mathcal{O}_n$  é a estimativa do valor de  $\langle \mathcal{O} \rangle$  para  $n$  estados gerados, que será tanto mais próxima do valor real quanto maior for o valor de  $n$ .

O problema agora é gerar estes  $n$  estados de acordo com a probabilidade  $P_K(\sigma)$ . As técnicas que tornam isto possível são chamadas de amostragem por importância [44]. Devemos escolher um processo estocástico [66] cuja probabilidade estacionária seja  $P_K(\sigma)$ , ou seja, no qual a probabilidade de encontrarmos o sistema em um estado  $\sigma$  em um dado instante  $t$ ,  $P(\sigma, t)$ , se aproxime assintoticamente de  $P_K(\sigma)$  conforme  $t \rightarrow \infty$ . De uma forma geral, podemos descrever o processo através do qual os estados serão gerados por uma equação mestra, que descreve a evolução temporal de  $P(\sigma, t)$ , relacionando sua taxa de variação temporal a um balanço entre as possibilidades que o sistema tem de estar no estado  $\sigma$  e transitar para um estado  $\sigma'$  ou estar em qualquer outro estado  $\sigma'$  e transitar para o estado  $\sigma$ . Matematicamente, a equação mestra é escrita como

$$\frac{dP(\sigma, t)}{dt} = \sum_{\sigma' (\neq \sigma)} \left\{ P(\sigma', t) \omega(\sigma' \rightarrow \sigma) - P(\sigma, t) \omega(\sigma \rightarrow \sigma') \right\}, \quad (3.5)$$

na qual  $\omega(\sigma \rightarrow \sigma')$  é a taxa de transição do estado  $\sigma$  para o estado  $\sigma'$ . Ainda podemos escolher, dentre os processos descritos por (3.5), uma classe de processos chamados markovianos. Um processo markoviano é um mecanismo que, a partir de um estado  $\sigma$ , gera um novo estado  $\sigma'$  com uma taxa de transição  $\omega(\sigma \rightarrow \sigma')$  que depende apenas dos estados inicial  $\sigma$  e final  $\sigma'$  [44].

No limite  $t \rightarrow \infty$ , temos  $\frac{dP(\sigma, t)}{dt} = 0$  e  $P(\sigma, t \rightarrow \infty) \rightarrow P_K(\sigma)$ , ou seja, a condição para que o sistema atinja o equilíbrio é

$$\sum_{\sigma' (\neq \sigma)} \left\{ P_K(\sigma') \omega(\sigma' \rightarrow \sigma) - P_K(\sigma) \omega(\sigma \rightarrow \sigma') \right\} = 0. \quad (3.6)$$

Um conjunto possível de soluções para a equação (3.6) satisfaz a condição conhecida como balanceamento detalhado [66]:

$$P_K(\sigma) \omega(\sigma \rightarrow \sigma') = P_K(\sigma') \omega(\sigma' \rightarrow \sigma), \quad \forall \sigma, \sigma', \quad (3.7)$$

que é condição suficiente mas não necessária para esta equação seja verdadeira. Substituindo a equa-

ção (3.2), para  $P_K(\sigma)$ , na equação (3.7), a condição de balanceamento detalhado se reduz a

$$\frac{\omega(\sigma \rightarrow \sigma')}{\omega(\sigma' \rightarrow \sigma)} = e^{-K(\mathcal{E}(\sigma') - \mathcal{E}(\sigma))}. \quad (3.8)$$

Existe ainda uma condição a ser obedecida, além de (3.8), para que possamos garantir que o nosso processo markoviano atinja o equilíbrio e gere estados de acordo com  $P_K(\sigma)$ : o processo deve ser ergódico, ou seja, o mecanismo que usarmos para gerar um estado  $\sigma'$  a partir de um estado  $\sigma$  deve permitir que, se transcorrido tempo suficiente, todos os estados do sistema sejam acessíveis. Não poderíamos, por exemplo, gerar uma sequência de estados de um sistema de *spins* de Ising através de uma regra que impossibilite que um *spin* troque de valor ao longo da simulação após ter assumido um valor  $s_i = -1$  pois, independente do estado inicial, eventualmente este sistema ficaria preso em um estado com todos os *spins* assumindo o mesmo valor  $s_i = -1$ .

Mesmo tendo de satisfazer as condições acima, ainda temos bastante liberdade para a escolha das taxas de transição. Para auxiliar na compreensão dos algoritmos empregados nas simulações, costuma-se dividir estas taxas em duas parcelas, associadas a duas etapas distintas da atualização de estado, da seguinte forma

$$\omega(\sigma \rightarrow \sigma') = g(\sigma \rightarrow \sigma') \mathcal{A}(\sigma \rightarrow \sigma'), \quad (3.9)$$

sendo que  $g(\sigma \rightarrow \sigma')$ , conhecida como probabilidade de seleção, é a probabilidade do algoritmo gerar a configuração  $\sigma'$  a partir de  $\sigma$  e  $\mathcal{A}(\sigma \rightarrow \sigma')$ , também chamada de taxa de aceite, é a taxa com a qual essa mudança de configuração é aceita. O que determina o algoritmo de Monte Carlo é justamente a escolha tanto da dinâmica de geração do novo estado, associada aos  $g(\sigma \rightarrow \sigma')$ , quanto dos valores dos  $\mathcal{A}(\sigma \rightarrow \sigma')$ . Nas próximas seções, apresentaremos dois exemplos tradicionais destas escolhas, associadas aos algoritmos de Metropolis e Wolff, usados neste trabalho.

### 3.1.1 Algoritmo de Metropolis

O algoritmo de Metropolis é o mais comum e amplamente usado em simulações de Monte Carlo. Como em outros algoritmos, a ideia é gerar, a partir de um estado inicial  $\sigma$ , um novo estado  $\sigma'$ . A dinâmica de Metropolis, além de satisfazer (3.10), consiste em variar o estado de uma partícula de cada vez. Este algoritmo, como proposto originalmente por Metropolis *et al.* (1953), foi empregado para simular o comportamento de um gás de esferas rígidas [38].

Aplicada a modelos de *spin*, esta dinâmica propõe a variação de um único *spin* por vez. Para a geração do novo estado, um *spin*,  $s_k$ , da configuração  $\sigma$  é sorteado e seu valor é alterado para  $s'_k$ . No caso particular do modelo de Ising, o *spin* é invertido, ou seja, temos simplesmente  $s'_k = -s_k$ , de forma que cada possível novo estado é gerado com probabilidade  $g(\sigma \rightarrow \sigma') = 1/N$ . O mesmo pode-se dizer sobre a probabilidade de seleção inversa, ou seja, a probabilidade de o algoritmo gerar a configuração  $\sigma$ , a partir de  $\sigma'$ , que também vale  $g(\sigma' \rightarrow \sigma) = 1/N$ .

O aceite ou não desta mudança na configuração é feito com base na variação da energia do

sistema em decorrência desta alteração. Se a alteração de estado diminui ou não varia a energia do sistema, geramos o novo estado em nossa cadeia de Markov, levando o sistema de  $\sigma$  para  $\sigma'$  de acordo com a proposta. Se a energia do sistema aumenta com a alteração, o novo estado é aceito com probabilidade  $e^{-K\Delta\mathcal{E}}$  ou rejeitado com probabilidade  $1 - e^{-K\Delta\mathcal{E}}$ . Portanto, a taxa de aceite do algoritmo de Metropolis é dada por

$$\mathcal{A}(\sigma \rightarrow \sigma') = \begin{cases} 1 & , \text{ se } \Delta\mathcal{E} \leq 0 \\ e^{-K\Delta\mathcal{E}} & , \text{ se } \Delta\mathcal{E} > 0 \end{cases}, \quad (3.10)$$

na qual  $\Delta\mathcal{E} = \mathcal{E}(\sigma') - \mathcal{E}(\sigma)$ . Caso a alteração seja rejeitada, o novo estado na cadeia de Markov é apenas uma réplica do estado inicial.

A escolha (3.10) para as taxas de aceite claramente satisfaz a condição de balanceamento detalhado (3.8), pois se  $\mathcal{E}(\sigma') \leq \mathcal{E}(\sigma)$ , temos  $\mathcal{A}(\sigma \rightarrow \sigma') = 1$  e  $\mathcal{A}(\sigma' \rightarrow \sigma) = e^{-K(\mathcal{E}(\sigma) - \mathcal{E}(\sigma'))}$ , o que nos dá

$$\frac{\omega(\sigma \rightarrow \sigma')}{\omega(\sigma' \rightarrow \sigma)} = \frac{(1/N)}{(1/N)e^{-K(\mathcal{E}(\sigma) - \mathcal{E}(\sigma'))}} = e^{-K(\mathcal{E}(\sigma') - \mathcal{E}(\sigma))}$$

e se  $\mathcal{E}(\sigma') > \mathcal{E}(\sigma)$ , temos  $\mathcal{A}(\sigma \rightarrow \sigma') = e^{-K(\mathcal{E}(\sigma') - \mathcal{E}(\sigma))}$  e  $\mathcal{A}(\sigma' \rightarrow \sigma) = 1$ , assim temos

$$\frac{\omega(\sigma \rightarrow \sigma')}{\omega(\sigma' \rightarrow \sigma)} = \frac{(1/N)e^{-K(\mathcal{E}(\sigma') - \mathcal{E}(\sigma))}}{(1/N)} = e^{-K(\mathcal{E}(\sigma') - \mathcal{E}(\sigma))}.$$

Vale a pena ressaltar ainda que qualquer dinâmica que inverta apenas um *spin* por vez é ergódica, mesmo que não obedeça as mesmas taxas de aceite do algoritmo de Metropolis. O raciocínio por trás disso é simples, tendo em vista que é possível atingir qualquer configuração a partir de uma configuração inicial através de sucessivas inversões de um *spin* por vez.

Um dos problemas associados ao algoritmo de Metropolis é justamente o fato de apenas um *spin* ser alterado por vez. Este tipo de dinâmica local pode levar muitas iterações (ou passos) e, conseqüentemente, muito tempo para que o algoritmo passe a gerar estados de equilíbrio partindo de um estado inicial qualquer. Mesmo depois de atingido o equilíbrio, as configurações adjacentes em nossa cadeia de Markov são altamente correlacionadas dado que diferem pela inversão de apenas um ou nenhum *spin*. Assim, o algoritmo necessita de um grande número de passos para gerar uma quantidade razoável de configurações descorrelacionadas [44].

Este problema da correlação temporal entre os estados se torna uma desvantagem ainda maior para as dinâmicas locais quando nos aproximamos da temperatura crítica do modelo. Isto ocorre por dois motivos distintos: (i) na região crítica, as grandezas termodinâmicas do sistema apresentam mais flutuações, de forma que é necessário gerar um número maior de configurações para que seja possível obter uma amostragem representativa destas flutuações; (ii) próximo à temperatura crítica, os sítios tendem a ficar agrupados em domínios de *spins* com a mesma orientação, de forma que a probabilidade de sortear um sítio cercado por vizinhos no mesmo estado é grande, portanto as taxas de aceite,  $\mathcal{A}(\sigma \rightarrow \sigma')$ , tendem a cair drasticamente, ou seja, muitas tentativas de gerar um novo estado

serão rejeitadas durante a simulação.

Este fenômeno é conhecido como desaceleração crítica (do inglês, *critical slowing down*) e seu efeito é que, perto de  $T_c$ , o tempo de correlação,  $\tau$ , associado ao número de passos necessários para que o algoritmo gere uma configuração final sem correlação com a inicial, cresce como uma lei de potência, ou seja,

$$\tau \sim L^z,$$

na qual  $L$  é o tamanho linear do sistema e  $z$  é chamado de expoente crítico dinâmico [44]. Este expoente crítico dinâmico depende do modelo e do algoritmo usado nas simulações. Devido ao *critical slowing down*, o tempo computacional gasto com as simulações próximas ao ponto crítico cresce muito mais rapidamente com o tamanho do sistema do que longe da região crítica, dificultando o estudo de redes muito grandes quando  $T \rightarrow T_c$ . Uma forma de minimizar este efeito é desenvolver um algoritmo visando diminuir o valor de  $z$ . Vários algoritmos de Monte Carlo já foram propostos nesse sentido e, na próxima seção, apresentaremos um deles.

### 3.1.2 Algoritmo de Wolff

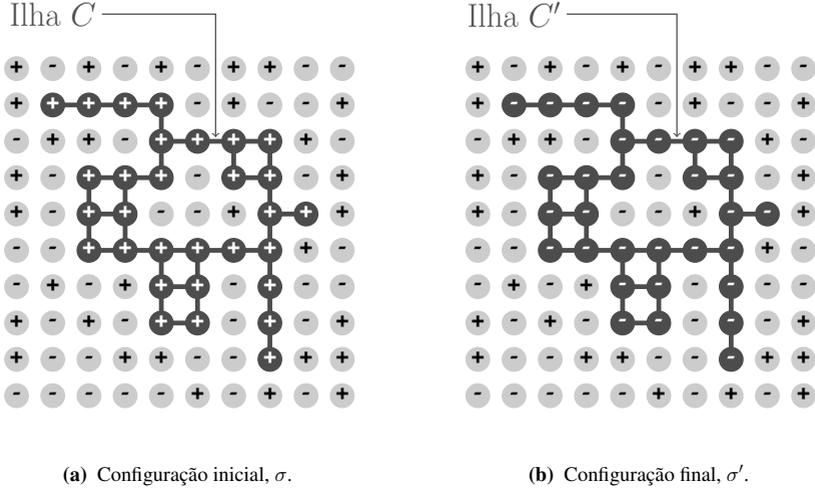
O algoritmo de Wolff pertence a uma classe de algoritmos de Monte Carlo conhecidos como algoritmos de ilha (ou do inglês, *cluster algorithms*), na qual o objetivo é gerar a nova configuração alterando o estado de grupos, ou ilhas, de *spins* ao mesmo tempo. A proposta de alterar vários *spins* de uma vez visa justamente reduzir os problemas associados às dinâmicas locais, discutidos na seção 3.1.1, permitindo que o sistema transite entre configurações de maneira mais ágil e eficiente, aumentando as taxas de aceite e gerando estados menos correlacionados. Em um algoritmo de ilhas, cada ilha é criada por um processo de crescimento a partir de um *spin* “semente” sorteado aleatoriamente, sendo que os demais *spins* vizinhos e com orientação semelhante vão sendo acrescentados recursivamente a esta ilha com uma probabilidade  $p_{\text{add}}$ . Uma vez construída(s) a(s) ilha(s), todos os *spins* são alterados com probabilidade  $\mathcal{A}(\sigma \rightarrow \sigma')$  [44].

O algoritmo de Wolff, como proposto originalmente por Ulli Wolff em 1989 [39], baseado no trabalho prévio de Swendsen e Wang de 1987 [67], propõe uma dinâmica na qual, após a ilha ser criada, o novo estado é aceito com probabilidade  $\mathcal{A}(\sigma \rightarrow \sigma') = 1$ . Aplicado ao modelo de Ising dado pelo hamiltoniano (1.3), o algoritmo parte do estado inicial,  $\sigma$ , como no exemplo da figura 3.1a, sorteia um sítio “semente” e o adiciona à ilha, verifica todos os vizinhos deste sítio “semente” que estejam no mesmo estado e os adiciona à ilha com probabilidade

$$p_{\text{add}} = 1 - e^{-2K}. \quad (3.11)$$

Depois, cada sítio adicionado à ilha passa a ser o novo sítio “semente” e o processo é repetido até que nenhum sítio novo seja adicionado. Então o processo de geração da ilha acaba e os *spins* de todos os

**Figura 3.1:** Representação esquemática do funcionamento do algoritmo de Wolff para o modelo de Ising bidimensional. Os círculos marcados com “+” representam átomos com  $s_i = +1$  e os círculos marcados com “-” representam átomos com  $s_i = -1$ . A figura (a) mostra a configuração inicial,  $\sigma$ , e uma possível ilha,  $C$ , criada. A figura (b) mostra a configuração final  $\sigma'$ , na qual a ilha  $C'$  corresponde a todos os sítios de  $C$  com o *spin* invertido.



sítios da ilha são “virados”, gerando o estado final  $\sigma'$ , como na figura 3.1b.

Entretanto, o algoritmo de Wolff deve ser modificado a fim de que possamos aplicá-lo a um sistema mais complexo, que envolva integrais de troca com valores diferentes, como é o caso do hamiltoniano na equação (1.4). O procedimento de crescimento da ilha permanece o mesmo, no entanto a probabilidade de acrescentar à ilha um sítio  $j$ , vizinho de um sítio  $i$  que já pertence à ilha, deve ser alterada de forma que dependa não apenas da temperatura e das orientações dos spins  $s_i$  e  $s_j$ , mas também da interação  $J_{ij}$  e das variáveis de ocupação  $\epsilon_i$  e  $\epsilon_j$ . A equação (3.11) pode então ser reescrita como

$$p_{\text{add}} = \max \left\{ 0, 1 - e^{-2J_{ij}s_i s_j \epsilon_i \epsilon_j / k_B T} \right\}, \quad (3.12)$$

de forma que agora a probabilidade de adicionar à ilha o spin  $s_j$  com orientação oposta à de seu vizinho  $s_i$  deixa de ser nula no caso de interações antiferromagnéticas, isto é,  $J_{ij} < 0$ .

Para demonstrar que esta versão do algoritmo de Wolff obedece o balanceamento detalhado, devemos analisar os dois lados da equação (3.8) separadamente. Primeiramente, para analisar o lado direito desta equação, devemos calcular a variação da energia do sistema na transição de uma configuração  $\sigma$  para outra  $\sigma'$ , isto é,  $\Delta \mathcal{E} = \mathcal{E}(\sigma') - \mathcal{E}(\sigma)$ . Sabendo que cada par de vizinhos contribui com  $-J_{ij}s_i s_j \epsilon_i \epsilon_j$  para a energia do sistema, sendo que  $s_i$  e  $s_j$  se referem aos valores dos spins antes da alteração de estado, vamos dividir os possíveis pares de vizinhos em dois tipos: um corresponde aos

pares que satisfazem  $J_{ij}s_i s_j \epsilon_i \epsilon_j > 0$  (ligações “satisfeitas”), que denotamos como  $\langle i, j \rangle_+$ ; o outro tipo são os pares que satisfazem  $J_{ij}s_i s_j \epsilon_i \epsilon_j < 0$  (ligações “frustradas”), que denotamos como  $\langle i, j \rangle_-$ . Note que não precisamos considerar as ligações para as quais  $J_{ij}s_i s_j \epsilon_i \epsilon_j = 0$ , já que neste caso, tanto  $p_{\text{add}}$  quanto a variação da energia do sistema são sempre nulas. Ao ser efetuada alteração de estado  $\sigma \rightarrow \sigma'$ , as energias dos pares que não pertencem à ilha,  $\langle i \notin C, j \notin C \rangle$  ou  $\langle i \notin C', j \notin C' \rangle$ , não se alteram. Também não se alteram as energias devidas aos pares de vizinhos quando ambos pertencem à ilha,  $\langle i \in C, j \in C \rangle$  ou  $\langle i \in C', j \in C' \rangle$ , pois os *spins* destes pares mantém as mesmas orientações relativas tanto em  $C$  quanto em  $C'$ , mantendo-se do mesmo tipo,  $\langle i, j \rangle_+$  ou  $\langle i, j \rangle_-$ , em ambas configurações.

Os únicos pares que contribuem para a variação da energia são os da fronteira,  $\langle i \in C, j \notin C \rangle$  ou  $\langle i \in C', j \notin C' \rangle$ . Cada ligação do tipo  $\langle i \in C, j \notin C \rangle_+$  passa a ser do tipo  $\langle i \in C', j \notin C' \rangle_-$  com a alteração de estado, contribuindo para uma variação de  $2J_{ij}s_i s_j \epsilon_i \epsilon_j > 0$  na energia do sistema. A contribuição de todas estas ligações para a variação total é dada por

$$\Delta\mathcal{E}_+ = \frac{1}{J} \left( \sum_{\langle i \in C, j \notin C \rangle_+} 2J_{ij}s_i s_j \epsilon_i \epsilon_j \right). \quad (3.13)$$

Em contrapartida, cada ligação do tipo  $\langle i \in C, j \notin C \rangle_-$ , após a alteração de estado passa a ser  $\langle i \in C', j \notin C' \rangle_+$ , contribuindo assim a uma variação de  $2J_{ij}s_i s_j \epsilon_i \epsilon_j < 0$  na energia. A contribuição de todas estas ligações para a variação total é dada por

$$\Delta\mathcal{E}_- = \frac{1}{J} \left( \sum_{\langle i \in C, j \notin C \rangle_-} 2J_{ij}s_i s_j \epsilon_i \epsilon_j \right). \quad (3.14)$$

A variação da energia total do sistema é simplesmente a soma das contribuições acima,  $\Delta\mathcal{E} = \mathcal{E}(\sigma') - \mathcal{E}(\sigma) = \Delta\mathcal{E}_+ + \Delta\mathcal{E}_-$ .

Agora, para analisar o lado esquerdo da equação (3.8), precisamos calcular a probabilidade de gerar uma ilha através do procedimento descrito acima. Para isto, vamos mais uma vez dividir os pares em  $\langle i, j \rangle_+$  ou  $\langle i, j \rangle_-$ . Assim, a probabilidade de acrescentar à ilha um sítio  $j$ , vizinho de um sítio  $i$  que já pertence à ilha, de acordo com a equação (3.12), é  $p_- = 0$  para os pares  $\langle i, j \rangle_-$ , enquanto para os pares  $\langle i, j \rangle_+$  esta probabilidade é dada por

$$p_+ = 1 - e^{-2J_{ij}s_i s_j \epsilon_i \epsilon_j / k_B T}. \quad (3.15)$$

Imaginemos um sistema de  $N$  *spins* de Ising como mostra a figura 3.1. A probabilidade de sortear um sítio,  $k$ , qualquer no nosso sistema é  $1/N$ . Depois de desenharmos uma possível ilha  $C$  de sítios, como mostra a figura 3.1a, podemos calcular a probabilidade de que esta ilha seja construída a partir deste sítio específico como

$$p_{C_k} = \left( \frac{C}{N} \right) \left( \prod_{\langle i \in C, j \in C \rangle_+} p_+ \right) \left( \prod_{\langle i \in C, j \notin C \rangle_+} (1 - p_+) \right), \quad (3.16)$$

na qual  $\mathcal{C}$  é uma constante que está associada com o número de sequências diferentes que o algoritmo pode seguir para gerar a mesma configuração começando pelo mesmo sítio. Para que esta ilha  $\mathcal{C}$  seja construída, qualquer um de seus  $n_{\mathcal{C}}$  sítios pode ser o primeiro sorteado, então a probabilidade de construir esta ilha específica, que pode ser interpretada como a probabilidade de seleção do novo estado, é apenas  $n_{\mathcal{C}}p_{\mathcal{C}_k}$ , ou seja,

$$g(\sigma \rightarrow \sigma') = \left(\frac{n_{\mathcal{C}}\mathcal{C}}{N}\right) \left(\prod_{\langle i \in \mathcal{C}, j \in \mathcal{C} \rangle_+} p_+\right) \left(\prod_{\langle i \in \mathcal{C}, j \notin \mathcal{C} \rangle_+} (1-p_+)\right). \quad (3.17)$$

Analogamente, a probabilidade de partirmos da configuração  $\sigma'$  e construirmos a ilha  $\mathcal{C}'$  é dada por

$$g(\sigma' \rightarrow \sigma) = \left(\frac{n_{\mathcal{C}'}\mathcal{C}'}{N}\right) \left(\prod_{\langle i \in \mathcal{C}', j \in \mathcal{C}' \rangle_+} p_+\right) \left(\prod_{\langle i \in \mathcal{C}', j \notin \mathcal{C}' \rangle_+} (1-p_+)\right). \quad (3.18)$$

Mais uma vez, usamos o fato de que a mudança  $\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}'$  não altera as orientações relativas dos pares do tipo  $\langle i \in \mathcal{C}, j \in \mathcal{C} \rangle$ , logo também não altera o valor de  $p_+$ . Em consequência disso, o produtório sobre os pares  $\langle i \in \mathcal{C}, j \in \mathcal{C} \rangle$  na equação (3.17) e o produtório sobre os pares  $\langle i \in \mathcal{C}', j \in \mathcal{C}' \rangle$  na equação (3.18) são iguais. Além disso, por simetria podemos ver que  $n_{\mathcal{C}} = n_{\mathcal{C}'}$  e  $\mathcal{C} = \mathcal{C}'$ . Então, a razão entre as taxas de geração de  $\mathcal{C}$  e  $\mathcal{C}'$  é

$$\begin{aligned} \frac{g(\sigma \rightarrow \sigma')}{g(\sigma' \rightarrow \sigma)} &= \frac{\prod_{\langle i \in \mathcal{C}, j \notin \mathcal{C} \rangle_+} (1-p_+)}{\prod_{\langle i \in \mathcal{C}', j \notin \mathcal{C}' \rangle_+} (1-p_+)} \\ &= \frac{\prod_{\langle i \in \mathcal{C}, j \notin \mathcal{C} \rangle_+} (e^{-2J_{ij}s_i s_j \epsilon_i \epsilon_j / k_B T})}{\prod_{\langle i \in \mathcal{C}', j \notin \mathcal{C}' \rangle_+} (e^{-2J_{ij}s_i s_j \epsilon_i \epsilon_j / k_B T})}. \end{aligned} \quad (3.19)$$

O denominador de (3.19) pode ainda ser reescrito trocando-se  $\langle i \in \mathcal{C}', j \notin \mathcal{C}' \rangle_+$  por  $\langle i \in \mathcal{C}, j \notin \mathcal{C} \rangle_-$ , apenas tomando o cuidado de inverter o sinal do argumento da exponencial por conta da inversão de *spin* em  $\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}'$ , de forma que

$$\frac{g(\sigma \rightarrow \sigma')}{g(\sigma' \rightarrow \sigma)} = \frac{\prod_{\langle i \in \mathcal{C}, j \notin \mathcal{C} \rangle_+} (e^{-2J_{ij}s_i s_j \epsilon_i \epsilon_j / k_B T})}{\prod_{\langle i \in \mathcal{C}, j \notin \mathcal{C} \rangle_-} (e^{+2J_{ij}s_i s_j \epsilon_i \epsilon_j / k_B T})}. \quad (3.20)$$

Os produtórios no numerador e no denominador podem ser escritos, respectivamente, como:

$$\prod_{\langle i \in \mathcal{C}, j \notin \mathcal{C} \rangle_+} (e^{-2J_{ij}s_i s_j \epsilon_i \epsilon_j / k_B T}) = \exp \left\{ - \sum_{\langle i \in \mathcal{C}, j \notin \mathcal{C} \rangle_+} 2J_{ij}s_i s_j \epsilon_i \epsilon_j / k_B T \right\} \quad (3.21)$$

e

$$\prod_{\langle i \in \mathcal{C}, j \notin \mathcal{C} \rangle_-} (e^{+2J_{ij}s_i s_j \epsilon_i \epsilon_j / k_B T}) = \exp \left\{ + \sum_{\langle i \in \mathcal{C}, j \notin \mathcal{C} \rangle_-} 2J_{ij}s_i s_j \epsilon_i \epsilon_j / k_B T \right\}. \quad (3.22)$$

Note que, pela equação (3.13), o argumento da exponencial no lado direito da equação (3.21) é justamente  $-J\Delta\mathcal{E}_+/k_B T = -K\Delta\mathcal{E}_+$ . Da mesma forma, pela equação (3.14), o argumento da expo-

nencial em (3.22) é  $+J\Delta\mathcal{E}_-/k_B T = +K\Delta\mathcal{E}_-$ . Assim, a equação (3.19) se reduz a

$$\frac{g(\sigma \rightarrow \sigma')}{g(\sigma' \rightarrow \sigma)} = e^{-K(\Delta\mathcal{E}_+ + \Delta\mathcal{E}_-)} = e^{-K(\mathcal{E}(\sigma') - \mathcal{E}(\sigma))}$$

e, finalmente, a razão entre as taxas de transição é dada por

$$\frac{\omega(\sigma \rightarrow \sigma')}{\omega(\sigma' \rightarrow \sigma)} = \frac{\mathcal{A}(\sigma \rightarrow \sigma')}{\mathcal{A}(\sigma' \rightarrow \sigma)} e^{-K(\mathcal{E}(\sigma') - \mathcal{E}(\sigma))}. \quad (3.23)$$

Note que, comparando a equação (3.23) com a equação (3.8), verificamos que este algoritmo satisfaz a condição de balanceamento detalhado para quaisquer valores das taxas de aceite, contanto que  $\mathcal{A}(\sigma \rightarrow \sigma') = \mathcal{A}(\sigma' \rightarrow \sigma)$ . No caso do algoritmo de Wolff, a escolha é justamente a que maximiza o aceite,  $\mathcal{A}(\sigma \rightarrow \sigma') = \mathcal{A}(\sigma' \rightarrow \sigma) = 1$ .

Vale a pena ressaltar que sempre existe a possibilidade de uma “ilha” conter apenas um sítio. E assim como no caso do algoritmo de Metropolis, como é possível atingir qualquer configuração através de sucessivas inversões de um *spin* por vez, concluímos que o algoritmo de Wolff também é ergódico.

### 3.2 Detalhes das simulações

Neste trabalho, estudamos sistemas bicamada e multicamadas descritos pelo hamiltoniano (1.5) usando simulações de Monte Carlo. Nós empregamos ambos os algoritmos de Metropolis e Wolff, descritos nas seções anteriores, para simular redes quadradas não equivalentes de tipos **A** e **B** dispostas alternadamente. Cada rede tem  $L^2$  sítios. Todos os sítios nas redes de tipo **A** são ativos. Cada sítio nas redes do tipo **B** é aleatoriamente designado para ser um átomo magneticamente ativo ( $\epsilon_i = 1$ ) ou uma vacância ( $\epsilon_i = 0$ ) com probabilidades  $p$  ou  $1 - p$ , respectivamente. As condições de contorno são periódicas apenas para as interações intra-rede no caso do sistema bicamada. Já no caso do sistema multicamada, usamos condições de contorno periódicas tanto para as interações intra-rede quanto inter-redes. A dinâmica de Metropolis foi usada para algumas simulações longe do ponto crítico e a dinâmica de Wolff foi usada para temperaturas próximas de  $T_c$ , para as quais este algoritmo é mais eficiente. Todos os números aleatórios foram gerados usando o gerador de números pseudo-aleatórios Mersenne Twister [68].

Um passo de Monte Carlo (MCS) corresponde a  $N$  atualizações de estado para a dinâmica de Metropolis, ou uma virada de ilha para a dinâmica de Wolff. A cada MCS, o programa imprime o valor da energia e das magnetizações em uma tabela. Estas sequências de valores são utilizadas para o cálculo de funções de correlação temporal

$$\begin{aligned} \phi(t) &= \int dt' [\mathcal{O}(t') - \langle \mathcal{O} \rangle] [\mathcal{O}(t+t') - \langle \mathcal{O} \rangle] \\ &= \int dt' [\mathcal{O}(t')\mathcal{O}(t+t') - \langle \mathcal{O} \rangle^2], \end{aligned} \quad (3.24)$$

que são ajustadas a um decaimento exponencial do tipo  $\phi(t) \sim e^{-t/\tau}$  para obtermos o valor aproximado do tempo de correlação,  $\tau$  [69]. Neste trabalho não utilizamos o ajuste direto da função de correlação, e sim o método do tempo de correlação integrado [44], que consiste em integrar a função de correlação normalizada no intervalo de tempo  $0 \leq t < \infty$  para obter

$$\int_0^{\infty} \frac{\phi(t)}{\phi(0)} dt = \int_0^{\infty} e^{-t/\tau} dt = \tau. \quad (3.25)$$

A integral (3.25) é avaliada numericamente através do método do trapézio [62, 70], o que nos dá

$$\tau_{\text{int}} = \frac{1}{2} + \frac{1}{\phi(0)} \sum_{t=1}^{t_{\text{max}}} \phi(t), \quad (3.26)$$

sendo que  $t_{\text{max}}$  é um valor de tempo, medido em MCSs, para truncar a soma, que será escolhido de tal forma que  $\phi(t_{\text{max}})$  seja suficientemente próximo de zero.

Nossas simulações rodaram tipicamente entre  $2 \times 10^4$  e  $5 \times 10^7$  MCSs, sempre de forma a garantir que cada simulação gerasse no mínimo  $n = 1000$  estados decorrelacionados, com  $n$  dado por

$$n = \frac{n_{\text{MCS}} - t_{\text{eq}}}{2\tau}, \quad (3.27)$$

sendo que  $n_{\text{MCS}}$  é o número de MCSs,  $t_{\text{eq}}$  é o tempo de chegada ao equilíbrio e  $\tau$  é o maior tempo de correlação. Para a dinâmica de Metropolis, usamos apenas o tempo de correlação integrado,  $\tau = \tau_{\text{int}}$ , enquanto para a dinâmica de Wolff as escalas de tempo devem ser ajustadas de tal forma que o tempo de correlação real é dado por

$$\tau = \tau_{\text{int}} \times \frac{\langle n_C \rangle}{N_{\text{tot}}}, \quad (3.28)$$

sendo que  $\langle n_C \rangle$  é o tamanho médio da ilha gerada a cada MCS na simulação [44]. Os dados gerados em nossas simulações foram analisados usando os métodos descritos no capítulo 4.

## 4 ANÁLISE DE DADOS DAS SIMULAÇÕES

Neste capítulo procuraremos esclarecer os métodos utilizados na análise dos dados das simulações de Monte Carlo. Iniciaremos com a apresentação dos métodos de repesagem conhecidos por método do histograma (do inglês, *single histogram method*) e método dos múltiplos histogramas (do inglês, *multiple histogram method*). A seguir, discutiremos em detalhes os procedimentos usados na determinação das temperaturas de compensação e das temperaturas críticas, bem como os métodos para estimar os expoentes críticos do modelo.

### 4.1 Métodos de histograma

Os métodos de histograma são técnicas de repesagem que nos permitem obter informações sobre o comportamento crítico de um sistema a partir dos dados de uma ou várias simulações de Monte Carlo, estimando os valores de grandezas termodinâmicas em um intervalo contínuo de temperaturas nas proximidades da(s) temperatura(s) onde foi(foram) realizada(s) esta(s) simulação(ões).

Ideias de métodos de repesagem já estão presentes na literatura desde a década de 1970 [71], mas as formas mais usadas hoje em dia foram apresentadas por Ferrenberg e Swendsen (1988; 1989) em dois artigos que introduzem o método do histograma único e o método dos múltiplos histogramas, respectivamente. Neste trabalho apresentamos apenas uma descrição superficial e simplificada dos métodos. Descrições mais formais e detalhes técnicos sobre a implementação dos métodos podem ser encontrados em outras fontes [40, 41, 44, 60, 69].

#### 4.1.1 Método do histograma

Consideremos um sistema genérico descrito por um hamiltoniano do tipo  $\mathcal{H} = J\mathcal{E}(\sigma)$ , como já fizemos nas seções 1.2 e 3.1 de forma que as equações (3.1), (3.2) e (3.3) sejam válidas. O valor esperado do observável  $\mathcal{O}$  em uma temperatura  $T_0$  é dado por

$$\langle \mathcal{O} \rangle_{K_0} = \frac{\sum_{\{\sigma\}} \mathcal{O} e^{-K_0 \mathcal{E}}}{\sum_{\{\sigma\}} e^{-K_0 \mathcal{E}}}, \quad (4.1)$$

sendo que  $K_0 = J/k_B T_0$ . O valor esperado do mesmo observável em outra temperatura  $T$  é dado por

$$\langle \mathcal{O} \rangle_K = \frac{\sum_{\{\sigma\}} \mathcal{O} e^{-K \mathcal{E}}}{\sum_{\{\sigma\}} e^{-K \mathcal{E}}}, \quad (4.2)$$

o que pode ser reescrito como

$$\langle \mathcal{O} \rangle_K = \frac{\sum_{\{\sigma\}} \mathcal{O} e^{-(K+K_0-K_0)\mathcal{E}}}{\sum_{\{\sigma\}} e^{-(K+K_0-K_0)\mathcal{E}}} = \frac{\sum_{\{\sigma\}} [\mathcal{O} e^{-\Delta K \mathcal{E}}] e^{-K_0 \mathcal{E}}}{\sum_{\{\sigma\}} [e^{-\Delta K \mathcal{E}}] e^{-K_0 \mathcal{E}}} = \frac{\langle \mathcal{O} e^{-\Delta K \mathcal{E}} \rangle_{K_0}}{\langle e^{-\Delta K \mathcal{E}} \rangle_{K_0}}, \quad (4.3)$$

onde  $\Delta K = K - K_0$ , e as médias  $\langle \dots \rangle_{K_0}$  são calculadas utilizando a distribuição de probabilidade  $P_{K_0}(\sigma)$  do sistema na temperatura  $T_0$ . O resultado (4.3) é exato, mas é claro que para que este

cálculo pudesse ser feito, deveríamos conhecer a densidade de estados  $\rho(\mathcal{E}, \mathcal{O})$  do sistema para cada observável  $\mathcal{O}$  de interesse, uma vez que a equação (4.2) pode ser reescrita em termos de  $\rho(\mathcal{E}, \mathcal{O})$  como

$$\langle \mathcal{O} \rangle_K = \sum_{\{\mathcal{E}, \mathcal{O}\}} \mathcal{O} \rho(\mathcal{E}, \mathcal{O}) \frac{e^{-K\mathcal{E}}}{\mathcal{Z}}, \quad (4.4)$$

na qual

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{\mathcal{E}, \mathcal{O}\}} \rho(\mathcal{E}, \mathcal{O}) e^{-K\mathcal{E}}, \quad (4.5)$$

sendo que agora as somas são realizadas sobre todos os valores de  $\mathcal{E}$  e de  $\mathcal{O}$  ao invés de todas as configurações do sistema. Isto seria equivalente a termos uma solução exata para o modelo. Como a densidade de estados não é conhecida, podemos estimar as médias de (4.3) através do método de Monte Carlo. Como sabemos, em uma simulação de Monte Carlo, a média de um observável  $\mathcal{O}$  é simplesmente

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathcal{O}_i, \quad (4.6)$$

na qual  $n$  é o número de estados estatisticamente independentes gerados na simulação. Desta forma, dentro desta aproximação, podemos reescrever a equação (4.3) como

$$\langle \mathcal{O} \rangle_K = \frac{\sum_{i=1}^n \mathcal{O}_i e^{-\Delta K \mathcal{E}_i}}{\sum_{i=1}^n e^{-\Delta K \mathcal{E}_i}}, \quad (4.7)$$

sendo que os  $\mathcal{O}_i$  e  $\mathcal{E}_i$  são os valores assumidos pelo observável  $\mathcal{O}$  e pela energia adimensional e extensiva  $\mathcal{E}$  nos  $n$  estados estatisticamente independentes gerados durante a simulação de Monte Carlo do sistema na temperatura  $T_0$ . A expressão (4.7) é conhecida como a equação fundamental do método do histograma e nos permite obter uma estimativa do valor médio de um observável a uma temperatura  $T$  próxima da temperatura  $T_0$ , onde a simulação foi realizada [44]. É importante ressaltar que a equação (4.7) é uma aproximação e o valor obtido para  $\langle \mathcal{O} \rangle_K$  é uma estimativa cuja precisão pode ser muito boa, mas tem suas limitações dependendo da qualidade dos dados da simulação e principalmente do quanto nos afastamos da temperatura onde realizamos a simulação, ou seja, da diferença  $\Delta T = T - T_0$ .

Podemos ainda escrever a soma em (4.7) em termos do número  $\mathcal{N}(\mathcal{E}, \mathcal{O})$  de vezes que obtivemos um estado com energia  $\mathcal{E}$  e o valor  $\mathcal{O}$  para o nosso observável em nossa simulação:

$$\langle \mathcal{O} \rangle_K = \frac{\sum_{\{\mathcal{E}, \mathcal{O}\}} \mathcal{O} \mathcal{N}(\mathcal{E}, \mathcal{O}) e^{-\Delta K \mathcal{E}}}{\sum_{\{\mathcal{E}, \mathcal{O}\}} \mathcal{N}(\mathcal{E}, \mathcal{O}) e^{-\Delta K \mathcal{E}}}. \quad (4.8)$$

Este conjunto de números  $\mathcal{N}(\mathcal{E}, \mathcal{O})$  é o próprio histograma bidimensional do nosso sistema e, da mesma forma que temos

$$\langle \mathcal{O} \rangle_{K_0} = \sum_{\{\mathcal{E}, \mathcal{O}\}} \mathcal{O} P_{K_0}(\mathcal{E}, \mathcal{O}), \quad (4.9)$$

na qual  $P_{K_0}(\mathcal{E}, \mathcal{O})$  é a probabilidade de encontrar o sistema com energia  $\mathcal{E}$  e valor  $\mathcal{O}$  para o nosso

observável na temperatura  $T_0$ , a equação (4.8) pode ser escrita como

$$\langle \mathcal{O} \rangle_K = \sum_{\{\mathcal{E}, \mathcal{O}\}} \mathcal{O} W_K(\mathcal{E}, \mathcal{O}), \quad (4.10)$$

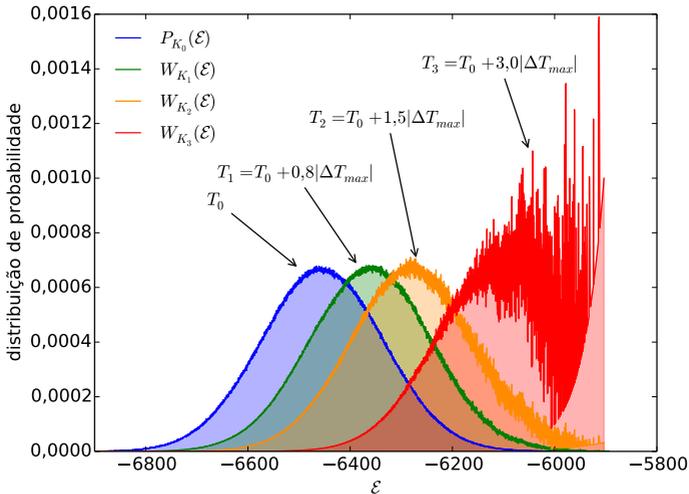
de modo que

$$W_K(\mathcal{E}, \mathcal{O}) = \frac{\mathcal{N}(\mathcal{E}, \mathcal{O}) e^{-\Delta K \mathcal{E}}}{\sum_{\{\mathcal{E}, \mathcal{O}\}} \mathcal{N}(\mathcal{E}, \mathcal{O}) e^{-\Delta K \mathcal{E}}} \quad (4.11)$$

é a nossa estimativa da probabilidade  $P_K(\mathcal{E}, \mathcal{O})$  na temperatura  $T$ .

Apesar da praticidade da utilização da equação (4.8) para sistemas com energias discretas como o modelo de Ising sem desordem, em sistemas com um espectro contínuo ou quase contínuo de energias o cálculo deste histograma se torna impraticável. Nestes casos, como é o do modelo tratado neste trabalho, podemos simplesmente utilizar a equação (4.7). Mesmo assim, a (4.8) terá sua utilidade, principalmente com  $\mathcal{O} = \mathcal{E}$ , caso em que o nosso histograma deixa de ser bidimensional, tornando o seu cálculo mais direto. Este histograma de  $\mathcal{E}$  pode ser usado para estimar a distância  $\Delta T$  que podemos nos afastar de  $T_0$  e ainda obter um resultado confiável com a repesagem.

**Figura 4.1:** Distribuição de probabilidade da energia em função de  $\mathcal{E}$ .  $P_{K_0}$  é o histograma de  $\mathcal{E}$  na temperatura  $T_0$  onde a simulação foi feita e os  $W_{K_i}$  são as estimativas da distribuição de probabilidade de  $\mathcal{E}$  feitas através do método do histograma em temperaturas  $T_1$ ,  $T_2$  e  $T_3$  na vizinhança de  $T_0$ . A simulação foi feita com um sistema bicamada de  $L = 100$  para os valores  $p = 0,7$ ,  $J_{AA}/J_{BB} = 0,3$  e  $J_{AB}/J_{BB} = -0,1$  na temperatura tal que  $k_B T_0/J_{BB} = 2,0$ .



A figura 4.1 ilustra a ideia por trás do método do histograma e de que forma ele eventualmente falha para  $\Delta T$  muito grande. A curva em preto corresponde ao histograma normalizado de  $\mathcal{E}$  feito a partir dos dados obtidos com a simulação na temperatura  $T_0 = 2,0 J_{BB}/k_B$ . É possível notar que

os histogramas obtidos para as outras temperaturas vão ficando menos suaves. Esse efeito é uma indicação de que os erros estatísticos estão sendo amplificados conforme nos afastamos de  $T_0$ , pois passamos a obter nossos histogramas a partir da repesagem de uma porção do histograma original com estatística cada vez mais pobre [44, 60]. Uma boa estimativa para o limite superior para a distância  $\Delta T$  pode ser obtida supondo que o resultado do método é bom enquanto o histograma em  $T$  obtido a partir de  $T_0$  esteja em uma região do histograma original com  $\mathcal{N}(\mathcal{E})$  suficientemente maior do que 1, ou seja, na região correspondente a  $\mathcal{E} = \langle \mathcal{E} \rangle \pm \sigma_{\mathcal{E}}$ , sendo que  $\sigma_{\mathcal{E}}$  é o desvio padrão da distribuição de probabilidade de  $\mathcal{E}$ . Podemos escrever este critério como:

$$|\langle \mathcal{E} \rangle_K - \langle \mathcal{E} \rangle_{K_0}| \leq \sigma_{\mathcal{E}}, \quad (4.12)$$

sendo que o lado esquerdo desta equação pode ser aproximado por

$$\langle \mathcal{E} \rangle_K - \langle \mathcal{E} \rangle_{K_0} \approx \frac{d\langle \mathcal{E} \rangle_K}{dT} \Big|_{K_0} \Delta T = \left[ \frac{d\langle \mathcal{E} \rangle_K}{dK} \frac{dK}{dT} \right] \Big|_{K_0} \Delta T, \quad (4.13)$$

sendo que

$$\frac{dK}{dT} = \frac{d}{dT} \left( \frac{J}{k_B T} \right) = -\frac{J}{k_B T^2} \quad (4.14)$$

e, usando a equação (1.16) para o caso particular de  $\mathcal{O} = \mathcal{E}$  e  $K = K_0$ , obtemos

$$\frac{d\langle \mathcal{E} \rangle_K}{dK} \Big|_{K=K_0} = \langle \mathcal{E} \rangle_{K_0}^2 - \langle \mathcal{E}^2 \rangle_{K_0} = -\sigma_{\mathcal{E}}^2. \quad (4.15)$$

Assim, combinando as equações (4.12), (4.13), (4.14) e (4.15), obtemos

$$|\Delta T| \leq \frac{k_B T_0^2}{J \sigma_{\mathcal{E}}},$$

ou seja, em termos de uma temperatura adimensional  $\bar{T} \equiv 1/K = k_B T/J$ , o critério (4.12) se reduz a

$$|\Delta \bar{T}| \leq \frac{\bar{T}_0^2}{\sigma_{\mathcal{E}}}. \quad (4.16)$$

Um aspecto importante de (4.16) é que  $|\Delta T_{\max}|$  é inversamente proporcional à raiz quadrada da capacidade térmica do sistema em  $T_0$ , já que a capacidade térmica é dada por

$$C(T_0) = K_0^2 \left( \langle \mathcal{E}^2 \rangle_{K_0} - \langle \mathcal{E} \rangle_{K_0}^2 \right) = K_0^2 \sigma_{\mathcal{E}}^2, \quad (4.17)$$

ou seja, substituindo (4.17) em (4.16) obtemos

$$|\Delta \bar{T}| \leq \frac{\bar{T}_0}{\sqrt{C(T_0)}}. \quad (4.18)$$

Isto indica que o intervalo onde podemos utilizar o método do histograma será reduzido se estivermos perto da temperatura crítica, onde a capacidade térmica do sistema de volume infinito diverge, ou se o tamanho linear da rede  $L$  for muito grande, tendo em vista que a capacidade térmica é extensiva.

Infelizmente, em geral é justamente próximo de  $T_c$  que está a nossa região de interesse, bem como são justamente os grandes valores de  $L$  que nos interessam para que possamos estimar o comportamento do sistema no limite termodinâmico.

Obtivemos, a partir de (4.16) ou (4.18),  $|\Delta T_{\max}| = 0,033443 J_{BB}/k_B$  para  $L = 100$ ,  $p = 0,7$ ,  $J_{AA}/J_{BB} = 0,3$  e  $J_{AB}/J_{BB} = -0,1$ . A comparação desta estimativa com a figura 4.1 sugere que apenas a curva verde ( $k_B T_1/J_{BB} = 2,026754$ ;  $\Delta T = 0,8|\Delta T_{\max}|$ ) está dentro do limite seguro de extrapolação. A curva laranja ( $k_B T_2/J_{BB} = 2,050164$ ;  $\Delta T = 1,5|\Delta T_{\max}|$ ), apenas um pouco além de  $T_0 + \Delta T_{\max}$ , já tem um aspecto mais ruidoso na região  $\mathcal{E} > -6300$ . A curva vermelha ( $k_B T_3/J_{BB} = 2,100328$ ;  $\Delta T = 3,0|\Delta T_{\max}|$ ), com  $T_3$  apenas 5% maior do que  $T_0$ , já parece apresentar erros estatísticos enormes. Esta análise indica que tanto o critério gráfico quanto (4.16) dão estimativas consistentes para  $\Delta T_{\max}$ .

#### 4.1.2 Método dos múltiplos histogramas

Neste trabalho, utilizamos o método explicado na seção anterior como um guia para sabermos a localização aproximada dos máximos de grandezas termodinâmicas e, portanto, indicar em que temperaturas deveríamos realizar novas simulações. Entretanto, nos casos onde os valores dos máximos ocorreram ao longo de um intervalo muito grande de temperaturas, de forma que não pudéssemos partir da repesagem de uma simulação em uma única temperatura, utilizamos o método dos múltiplos histogramas [41].

O método consiste em uma forma de combinar as estimativas da densidade de estados obtidas a partir de vários histogramas em várias temperaturas para obter uma estimativa melhor da densidade de estados do sistema. Suponhamos que foram realizadas  $N_s$  simulações em diferentes temperaturas  $T_i$  correspondentes às  $K_i$  constantes de acoplamento. Para cada simulação  $i$ , obtemos uma estimativa diferente para a densidade de estados a partir do método do histograma:

$$\rho_i(\mathcal{E}) = \frac{N_i(\mathcal{E})}{n_i} \frac{Z_i}{e^{-K_i \mathcal{E}}}, \quad (4.19)$$

na qual  $n_i$  é o número de estados estatisticamente independentes gerados na  $i$ -ésima simulação. Cada uma das estimativas  $\rho_i(\mathcal{E})$  pode ser considerada uma medida independente de  $\rho(\mathcal{E})$  e cada estimativa possui um erro estatístico  $\sigma_i(\mathcal{E})$  associado. A fim de obter uma estimativa mais precisa para a densidade de estados, podemos combinar as diferentes medidas através de uma média ponderada

$$\overline{\rho(\mathcal{E})} = \frac{\sum_i \rho_i(\mathcal{E}) w_i(\mathcal{E})}{\sum_j w_j(\mathcal{E})}. \quad (4.20)$$

na qual faz sentido que a escolha dos  $w_i(\mathcal{E})$  dê mais peso para os valores de  $\rho_i(\mathcal{E})$  nas regiões com o menor erro  $\sigma_i(\mathcal{E})$  e menos peso para valores nas regiões com maior erro. De fato, se supusermos que os valores de  $\rho_i(\mathcal{E})$  são normalmente distribuídos em torno de  $\rho(\mathcal{E})$ , é possível mostrar que o valor de  $w_i(\mathcal{E})$  que minimiza o desvio de  $\overline{\rho(\mathcal{E})}$  em relação a  $\rho(\mathcal{E})$  é justamente o inverso da variância da

distribuição dos  $\rho_i(\mathcal{E})$ , ou seja,  $w_i(\mathcal{E}) = 1/[\sigma_i(\mathcal{E})]^2$  [44]. A nossa melhor estimativa para a densidade de estados do sistema é então dada por

$$\overline{\rho(\mathcal{E})} = \frac{\sum_i \rho_i(\mathcal{E})/[\sigma_i(\mathcal{E})]^2}{\sum_j 1/[\sigma_j(\mathcal{E})]^2}. \quad (4.21)$$

Para calcular as variâncias  $[\sigma_i(\mathcal{E})]^2$ , devemos supor que a única fonte de erro para  $\overline{\rho(\mathcal{E})}$  é o erro no número de entradas para cada valor de energia  $\mathcal{N}_i(\mathcal{E})$  obtido nas simulações. Obtemos

$$\sigma_i(\mathcal{E}) = \Delta\rho_i(\mathcal{E}) = \frac{\Delta\mathcal{N}_i(\mathcal{E})}{n_i} \frac{\mathcal{Z}_i}{e^{-K_i\mathcal{E}}}, \quad (4.22)$$

sendo que, para encontrar  $\Delta\mathcal{N}_i(\mathcal{E})$ , devemos supor novamente que este erro é gaussiano [44], ou seja,

$$\Delta\mathcal{N}_i(\mathcal{E}) = \sqrt{\overline{\mathcal{N}_i(\mathcal{E})}}, \quad (4.23)$$

na qual  $\overline{\mathcal{N}_i(\mathcal{E})}$  é um histograma ideal obtido para  $K_i$  através da média sobre infinitas simulações ou através de uma única simulação infinita. Se fosse possível realizar uma simulação infinita, poderíamos obter a densidade de estados real do sistema a partir desta simulação da seguinte forma:

$$\rho(\mathcal{E}) = \frac{\overline{\mathcal{N}_i(\mathcal{E})}}{n_i} \frac{\mathcal{Z}_i}{e^{-K_i\mathcal{E}}}. \quad (4.24)$$

Assim, podemos escrever

$$\sigma_i(\mathcal{E}) = \frac{\sqrt{\overline{\mathcal{N}_i(\mathcal{E})}}}{n_i} \frac{\mathcal{Z}_i}{e^{-K_i\mathcal{E}}}, \quad (4.25)$$

ou seja,

$$[\sigma_i(\mathcal{E})]^2 = \frac{\overline{\mathcal{N}_i(\mathcal{E})}}{n_i^2} \left[ \frac{\mathcal{Z}_i}{e^{-K_i\mathcal{E}}} \right]^2 = \rho(\mathcal{E}) \frac{\mathcal{Z}_i}{n_i e^{-K_i\mathcal{E}}} = \frac{\rho^2(\mathcal{E})}{\overline{\mathcal{N}_i(\mathcal{E})}} \quad (4.26)$$

e, substituindo (4.26) em (4.21), obtemos

$$\overline{\rho(\mathcal{E})} = \frac{\sum_i \rho_i(\mathcal{E})[\rho(\mathcal{E})\mathcal{Z}_i]^{-1} n_i e^{-K_i\mathcal{E}}}{\sum_j [\rho(\mathcal{E})\mathcal{Z}_j]^{-1} n_j e^{-K_j\mathcal{E}}} = \frac{\sum_i \rho_i(\mathcal{E})\mathcal{Z}_i^{-1} n_i e^{-K_i\mathcal{E}}}{\sum_j \mathcal{Z}_j^{-1} n_j e^{-K_j\mathcal{E}}}. \quad (4.27)$$

Recordando a equação (4.19), podemos reescrever (4.27) como

$$\overline{\rho(\mathcal{E})} = \frac{\sum_i \mathcal{N}_i(\mathcal{E})}{\sum_j \mathcal{Z}_j^{-1} n_j e^{-K_j\mathcal{E}}}. \quad (4.28)$$

A equação (4.28) ainda depende dos valores das funções de partição em  $K_j$ , que desconhecemos. No entanto, podemos escrever as funções de partição em função da densidade de estados como

$$\mathcal{Z}_k = \sum_{\{\mathcal{E}\}} e^{-K_k\mathcal{E}} = \sum_{\mathcal{E}} \rho(\mathcal{E}) e^{-K_k\mathcal{E}}, \quad (4.29)$$

que podemos aproximar por

$$\mathcal{Z}_k \approx \sum_{\mathcal{E}} \overline{\rho(\mathcal{E})} e^{-K_k \mathcal{E}} = \sum_{\mathcal{E}} \frac{\sum_i \mathcal{N}_i(\mathcal{E})}{\sum_j \mathcal{Z}_j^{-1} n_j e^{(K_k - K_j) \mathcal{E}}}. \quad (4.30)$$

É conveniente explicitar em (4.30) os valores de  $\mathcal{E}_{is}$ , que são os valores obtidos para a energia do sistema no  $s$ -ésimo estado gerado na  $i$ -ésima simulação. Fazemos isto escrevendo a soma  $\sum_{\mathcal{E}} \sum_i \mathcal{N}_i(\mathcal{E})$  como  $\sum_{i,s}(1)$  e podemos escrever

$$\mathcal{Z}_k = \sum_{i,s} \frac{1}{\sum_j \mathcal{Z}_j^{-1} n_j e^{(K_k - K_j) \mathcal{E}_{is}}}, \quad (4.31)$$

que assim como (4.30), é auto-consistente em  $\mathcal{Z}_j$ . Ambas as equações (4.30) e (4.31) são conhecidas como equações fundamentais do método dos múltiplos histogramas. A forma de proceder daqui em diante é resolver (4.31) iterativamente, atribuindo um valor inicial para as funções de partição e calculando novos valores. Repetimos este processo várias vezes até que os valores de  $\mathcal{Z}_j$  convirjam.

A princípio, não há garantia alguma de que (4.31) possa ser resolvida de forma iterativa e nada sabemos sobre a convergência destas iterações. Na prática, entretanto, observamos que a convergência é muito rápida. De fato, observamos que os  $\mathcal{Z}_k$  se aproximam exponencialmente de seu ponto fixo [44]. Para analisar a convergência das iterações de (4.31), calculamos a soma dos quadrados das variações fracionais por iteração das funções de partição

$$\Delta^2 = \sum_k \left[ \frac{\mathcal{Z}_k^{(m)} - \mathcal{Z}_k^{(m-1)}}{\mathcal{Z}_k^{(m)}} \right]^2, \quad (4.32)$$

na qual o índice  $m$  se refere à  $m$ -ésima iteração [44]. Adotamos o critério  $\Delta \leq 10^{-7}$  para parar as iterações.

Depois de termos valores para as funções de partição  $\mathcal{Z}_j$  para os valores  $K_j$  das constantes de acoplamento, podemos obter o valor da função de partição e, conseqüentemente, da média de um observável qualquer para valores arbitrários de  $K$  através de

$$\mathcal{Z}(K) = \sum_{i,s} \frac{1}{\sum_j \mathcal{Z}_j^{-1} n_j e^{(K - K_j) \mathcal{E}_{is}}} \quad (4.33)$$

e

$$\langle \mathcal{O} \rangle_K = \frac{1}{\mathcal{Z}(K)} \sum_{i,s} \frac{\mathcal{O}_{is}}{\sum_j \mathcal{Z}_j^{-1} n_j e^{(K - K_j) \mathcal{E}_{is}}} \quad (4.34)$$

respectivamente, onde  $\mathcal{O}_{is}$  é o valor do observável  $\mathcal{O}$  no  $s$ -ésimo estado gerado na  $i$ -ésima simulação [44]. É importante ressaltar que, mesmo que seja possível utilizar a equação (4.34) para valores arbitrários de  $K$ , a precisão da estimativa de  $\langle \mathcal{O} \rangle_K$  depende do valor de  $K$ . Assim como para o método do histograma simples, os erros estatísticos crescem nas regiões onde o número de contagens do histograma fica muito pequeno, ou seja, para que a estimativa dada por (4.34) seja boa, é necessário que os histogramas obtidos com os dados das simulações nas diferentes temperaturas  $T_i$  se superpo-

nham e que  $K$  esteja no intervalo em que a combinação desses histogramas resulte em um número suficientemente grande de contagens. Desta forma, podemos usar o critério (4.16) para estimar um  $|\Delta T_{\max,i}|$  para cada simulação e, para que haja superposição dos histogramas correspondentes a cada par de temperaturas  $T_i$  e  $T_{i+1}$ , devemos garantir que

$$T_{i+1} - T_i < |\Delta T_{\max,i}| + |\Delta T_{\max,i+1}|,$$

sendo que  $T_1 < T_2 < \dots < T_N$ . Além disso, o critério (4.16) também nos permite determinar o intervalo “seguro” para a utilização da equação (4.34), que corresponde a

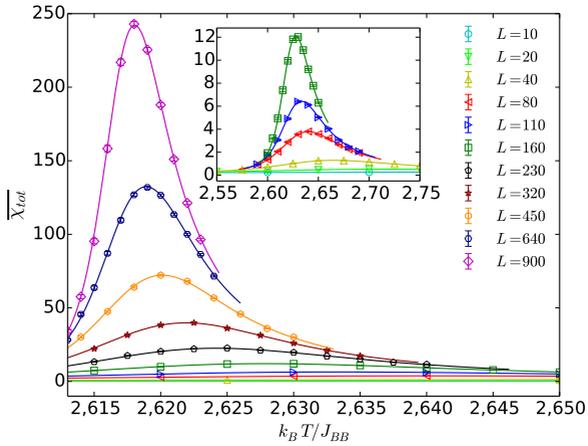
$$T_1 - |\Delta T_{\max,1}| < T < T_N + |\Delta T_{\max,N}|.$$

Outro critério para analisar a convergência das iterações e verificar os resultados obtidos com este método consiste em escolher uma ou mais grandezas, como calor específico, susceptibilidade etc, calcular seus valores utilizando (4.34) nas temperaturas onde foram realizadas as simulações e comparar com os valores obtidos através de cálculo direto como exposto na seção 3.2. As figuras 4.2 e 4.3 mostram esta comparação entre os valores obtidos diretamente das simulações e com o método para a susceptibilidade magnética de um sistema bicamada e para a magnetização total de um sistema multicamadas, respectivamente. Em geral, adotando  $\Delta \leq 10^{-7}$ , estas diferenças não passaram de 1% para o calor específico e susceptibilidades.

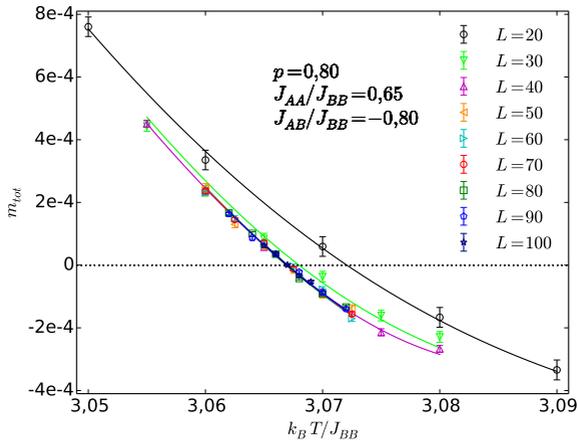
Para cada conjunto de valores dos parâmetros ( $J_{AA}/J_{BB}$ ,  $J_{AB}/J_{BB}$ ,  $p$ ,  $L$ ), nós escolhemos um intervalo de temperaturas de interesse e dividimos este intervalo em um número de temperaturas igualmente espaçadas para rodar as simulações. Então, usamos o método dos múltiplos histogramas para calcular observáveis  $\mathcal{O}$  para qualquer temperatura dentro do intervalo. O número de temperaturas e os observáveis calculados variam de acordo com o que queremos obter. Para determinar as temperaturas críticas, determinamos os picos das susceptibilidades magnéticas, conforme discutiremos na seção 4.2, usando entre 8 e 17 temperaturas (ver figura 4.2). Já para determinar a temperatura de compensação, calculamos a magnetização total usando entre 5 e 10 temperaturas (ver figura 4.3).

O erro associado à média térmica desses observáveis é estimado através do método de blocos [44], no qual dividimos os dados de cada simulação em blocos e repetimos o procedimento dos múltiplos histogramas para cada bloco. Os erros são o desvio padrão da média dos valores obtidos de um observável nos diferentes blocos. Para cada temperatura nós repetimos o processo para  $N_s$  diferentes configurações de desordem para obter nossa estimativa final de  $\langle \mathcal{O} \rangle$ . Nós escolhemos  $10 \leq N_s \leq 50$ , de tal forma que o erro devido à desordem seja aproximadamente o mesmo que o erro térmico obtido para cada configuração de desordem. Finalmente, nós somamos ambos os erros acima para obter a estimativa do erro total.

**Figura 4.2:** Susceptibilidade magnética por sítio,  $\overline{\chi_{\text{tot}}}$ , em função da temperatura adimensional,  $k_B T/J_{BB}$ , para um sistema bicamada com  $J_{AA}/J_{BB} = 0,5$ ;  $J_{AB}/J_{BB} = -1,0$ ;  $p = 1,0$  e tamanhos lineares,  $L$ , variando de 10 a 900. O destaque corresponde simultaneamente a uma ampliação na escala horizontal e uma diminuição na escala vertical, para melhorar a visualização do comportamento de escala dos sistemas pequenos. Os símbolos correspondem às simulações e as linhas sólidas foram obtidas usando o método dos múltiplos histogramas.



**Figura 4.3:** Magnetização total,  $m_{\text{tot}}$ , em função da temperatura adimensional,  $k_B T/J_{BB}$ , para um sistema multicamadas com  $p = 0,80$ ;  $J_{AA}/J_{BB} = 0,65$ ;  $J_{AB}/J_{BB} = -0,80$  e tamanhos lineares,  $L$ , variando de 20 a 100. Os símbolos correspondem às simulações e as linhas sólidas foram obtidas usando o método dos múltiplos histogramas.



## 4.2 Determinação de $T_c$

Para determinar as temperaturas críticas do nosso modelo, analisamos o comportamento de escala de grandezas que divergem no limite termodinâmico, como discutido na seção 2.4. Em particular, localizamos as temperaturas para as quais as susceptibilidades magnéticas são máximas para cada tamanho do sistema  $e$ , com o auxílio da equação (2.29), analisamos a forma como essas temperaturas de pico se aproximam da temperatura crítica do sistema infinito. Para tal, partimos da equação (2.29) e, desprezando os expoentes associados aos campos irrelevantes, obtemos a seguinte lei de escala:

$$T_c(L) = T_c + aL^{-1/\nu}, \quad (4.35)$$

sendo que  $a$  é uma constante,  $T_c$  é a temperatura crítica do sistema infinito e  $\nu$  é o expoente crítico associado ao comprimento de correlação.

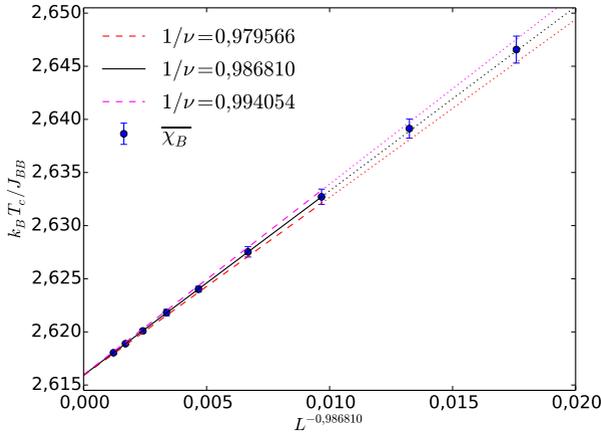
É importante ressaltar que o método de escala de tamanho finito baseado nos picos de diferentes grandezas termodinâmicas deve produzir estimativas consistentes para  $T_c$ , como fomos capazes de verificar em simulações preliminares. Neste trabalho, no entanto, optamos pela análise apenas dos máximos das susceptibilidades magnéticas, definidas na equação (1.13), pois as temperaturas de pico destas grandezas ocorrem razoavelmente próximas umas das outras, além do fato destes picos serem os mais agudos dentre todas as grandezas inicialmente consideradas.

Para localizar as temperaturas de pico, nós usamos o método dos múltiplos histogramas. O método também é automatizado e o máximo é encontrado usando o algoritmo de Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) [72]. A figura 4.2 exemplifica o uso do método dos múltiplos histogramas para obter a susceptibilidade magnética,  $\overline{\chi_{\text{tot}}}$ , como uma função contínua da temperatura e então localizar a temperatura na qual o máximo ocorre.

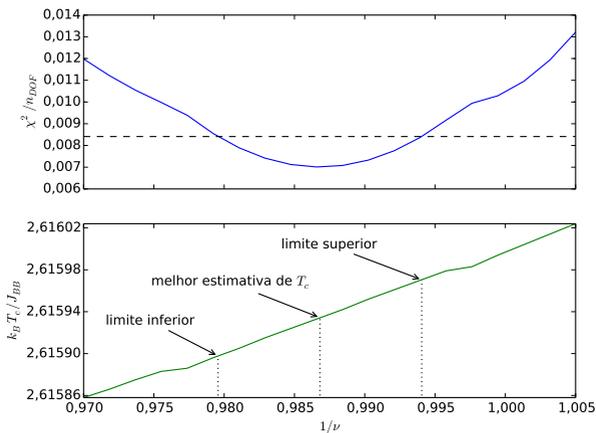
Depois de obter as estimativas de  $T_c(L)$ , nós ajustamos estes dados à equação (4.35). Esta equação tem três parâmetros livres para serem encontrados no processo de ajuste e requer grande resolução estatística para que possamos obter estimativas estáveis e confiáveis destes parâmetros. Também é possível obter uma estimativa independente de  $\nu$  através do comportamento de escala de outras grandezas e usar este valor na equação (4.35), efetivamente reduzindo o número de parâmetros livres do ajuste para dois. Entretanto, esta abordagem tem a desvantagem de necessitar do cálculo dos máximos de mais observáveis e estes máximos em geral não ocorrem próximos uns aos outros. Além disso, costuma ser necessário realizar simulações de sistemas realmente grandes para que estas estimativas de expoentes críticos sejam confiáveis. Isto significa que teríamos de rodar mais simulações para sistemas maiores e para mais temperaturas  $e$ , consequentemente, mais trabalho computacional.

Uma vez que estamos mais interessados em obter a temperatura crítica do que em determinar um valor preciso para o expoente  $\nu$ , nós usamos um procedimento similar ao apresentado nas referências 60 e 73, no qual fixamos o valor do expoente  $\nu$  e fazemos os ajustes com dois parâmetros livres, ao invés de três. Para cada valor de  $\nu$ , nós realizamos ajustes para sistemas de tamanhos  $L \geq L_{\min}$  e

**Figura 4.4:** Temperatura pseudo-crítica adimensional,  $k_B T_c(L)/J_{BB}$ , em função de  $L^{-1/\nu}$  para o sistema bicamada com  $J_{AA}/J_{BB} = 0,5$ ;  $J_{AB}/J_{BB} = -1,0$ ;  $p = 1,0$  e  $1/\nu = 0,986810$ . Os símbolos são estimativas de  $T_c(L)$  feitas através da localização do máximo da susceptibilidade magnética no plano  $\mathbf{B}$ ,  $\chi_B$  para  $60 \leq L \leq 900$ . As linhas sólidas e tracejadas são ajustes feitos com a equação (4.35) para  $L_{\min} \leq L \leq 900$  e diferentes valores de  $1/\nu$ . As linhas pontilhadas são extrapolações dos ajustes para  $L < L_{\min}$ . Neste caso particular,  $L_{\min} = 110$  e  $1/\nu = 0,986810$  são os valores que minimizam  $\chi^2/n_{DOF}$  e, portanto, dão o melhor ajuste. Onde as barras de erro não são visíveis, elas são menores do que os símbolos.



**Figura 4.5:** Soma ponderada reduzida dos quadrados dos erros,  $\chi^2/n_{DOF}$ , em função de  $1/\nu$  (acima) e estimativa de  $k_B T_c/J_{BB}$  em função de  $1/\nu$  (abaixo) obtidos com ajustes usando a equação (4.35). As estimativas de  $T_c(L)$  usadas nos ajustes correspondem aos máximos da susceptibilidade magnética no plano  $\mathbf{B}$ ,  $\overline{\chi_B}$ , para o sistema bicamada com  $J_{AA}/J_{BB} = 0,5$ ;  $J_{AB}/J_{BB} = -1,0$  e  $p = 1,0$ . O valor mínimo de  $\chi^2/n_{DOF}$  corresponde à melhor estimativa de  $T_c$ . A linha tracejada corresponde ao valor 20% acima do mínimo de  $\chi^2/n_{DOF}$ .



localizamos o valor de  $L_{\min}$  que resulta no melhor ajuste, i. e., aquele que minimiza a soma ponderada reduzida dos quadrados dos erros,  $\chi^2/n_{DOF}$ , sendo que  $n_{DOF}$  é o número de graus de liberdade do ajuste. A seguir, alteramos o valor de  $\nu$  e  $L_{\min}$  de forma iterativa até localizarmos o par de valores que minimiza globalmente o valor de  $\chi^2/n_{DOF}$ . Exemplos destes ajustes são apresentados na figura 4.4. Este procedimento efetivamente lineariza o ajuste, no entanto não nos permite obter uma estimativa independente para o erro associado ao expoente  $\nu$ . Os valores de  $L_{\min}$  e  $\nu$  que minimizam  $\chi^2/n_{DOF}$  são então usados para determinar nossa melhor estimativa de  $T_c$ . Notamos que os erros estatísticos das  $T_c$  obtidas através deste método são muito pequenos, chegando a ser desprezíveis em alguns casos; entretanto, é importante ressaltar que este erro é subestimado se comparado com o erro real, obtido através de um ajuste não-linear.

A fim de obter uma barra de erro mais realista (conservadora), nós analisamos o comportamento de ambos  $\chi^2/n_{DOF}$  e  $T_c$  como funções do parâmetro  $1/\nu$ , como pode ser visto na figura 4.5. Primeiramente notamos que todos os valores de  $T_c$  nesta figura são consistentes e aproximadamente iguais até a terceira casa decimal. Notamos que um aumento de quase 100% no valor de  $\chi^2/n_{DOF}$  corresponde a uma flutuação de apenas 4% no valor do expoente  $1/\nu$ , que por sua vez produz uma variação de apenas 1% na estimativa de  $T_c$ . Isso significa que o valor final de  $T_c$  não é tão sensível ao valor do parâmetro fixo durante o processo de ajuste, desde que este valor fique perto o suficiente daquele que minimiza  $\chi^2/n_{DOF}$ . Então, como um critério para determinar os limites inferior e superior para  $T_c$ , nós consideramos os valores obtidos nos ajustes que dão um  $\chi^2/n_{DOF}$  até 20% maior do que o mínimo. Vale a pena ressaltar que não é o objetivo deste trabalho obter uma descrição precisa do comportamento crítico do modelo. Portanto, o valor de  $1/\nu$  é usado apenas para obter uma estimativa boa de  $T_c$ .

**Tabela 4.1:** Estimativas de  $k_B T_c / J_{BB}$  obtidas através de ajustes usando a equação (4.35) com  $L \leq L_{\max}$  para diferentes valores de  $L_{\max}$ . Assim como na figura 4.4, as estimativas de  $T_c(L)$  usadas nos ajustes correspondem aos máximos da susceptibilidade magnética no plano  $\mathbf{B}$ ,  $\bar{\chi}_B$ , para o sistema bicamada com  $J_{AA}/J_{BB} = 0,5$ ;  $J_{AB}/J_{BB} = -1,0$  e  $p = 1,0$ .

$L_{\max}$	$k_B T_c / J_{BB}$	
	$p = 0,6$	$p = 1,0$
60	1,573(4)	2,6156(7)
80	1,577(2)	2,6164(5)
110	1,578(5)	2,6163(4)
160	1,574(2)	2,6163(2)
230	1,571(2)	2,6162(1)
320	1,572(1)	2,6161(2)
450	1,575(1)	2,6160(2)
640	1,573(1)	2,61596(7)
900	1,575(1)	2,61593(4)

É intuitivo que realizar simulações para sistemas maiores aumenta a precisão dos nossos re-

sultados. No entanto, para uma quantidade fixa de esforço computacional, aumentar o tamanho do sistema invariavelmente diminui o tamanho e a quantidade de simulações que podemos realizar. Em simulações teste nós conseguimos chegar até  $L = 900$ ; todavia, uma vez que as simulações para os sistemas maiores consomem mais tempo, foi possível cobrir apenas uma fração mínima do espaço de parâmetros do sistema desta forma. Se desejamos explorar o espaço de parâmetros a fundo, é necessário chegar a um meio-termo, de forma que buscamos manter  $L$  tão pequeno quanto possível ao mesmo tempo que obtemos um resultado razoavelmente preciso.

Os dados da tabela 4.1 referem-se às simulações teste para  $L = 10, 20, 30, 40, 60, 80, 110, 160, 230, 320, 450, 640$  e  $900$ . A tabela mostra estimativas de  $T_c$  obtidas através de ajustes considerando tamanhos apenas até  $L_{\max}$ . Aplicando o mesmo critério do  $\chi^2/n_{DOF}$  discutido acima, nós chegamos a estimativas muito consistentes de  $T_c$  para todos os valores de  $L_{\max}$ . É evidente que a precisão aumenta se consideramos sistemas maiores, no entanto as estimativas finais são as mesmas considerando as barras de erro. Isso significa que podemos obter uma estimativa razoável de  $T_c$  sem tanto esforço computacional. Então, nos resultados apresentados no capítulo 5, a determinação dos valores de  $T_c$  para os sistemas bicamada (seção 5.1.1) e multicamadas (seção 5.1.2) foi feita com simulações para  $L = 10, 20, 30, 40, 50, 60, 80$  e  $100$ .

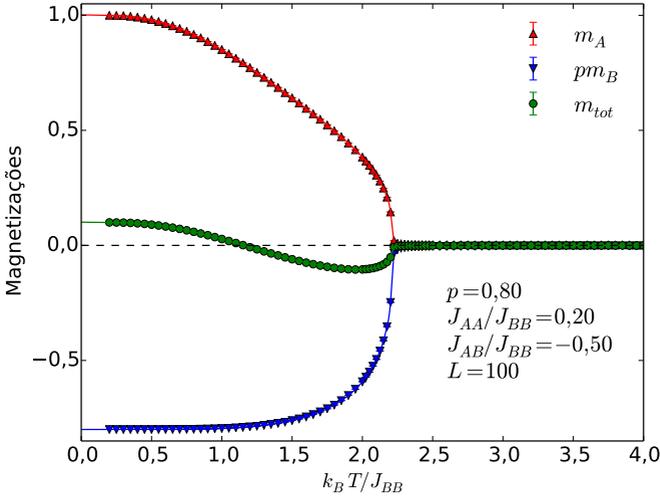
### 4.3 Determinação de $T_{comp}$

O ponto de compensação é determinado localizando-se a temperatura,  $T_{comp}$ , para a qual a magnetização total é zero enquanto as magnetizações dos planos,  $m_A$  e  $m_B$ , permanecem não nulas. As figuras 4.6 e 4.7 mostram o comportamento das magnetizações do sistema multicamadas em função da temperatura para  $p = 0,80$  e  $J_{AB}/J_{BB} = -0,50$ , sendo que as figuras 4.6a e 4.7a correspondem ao caso com  $J_{AA}/J_{BB} = 0,20$  para o qual há compensação, enquanto as figuras 4.6b e 4.7b correspondem ao caso com  $J_{AA}/J_{BB} = 0,80$ , para o qual não há compensação. Os símbolos correspondem aos dados das simulações e as linhas sólidas são interpolações feitas com *splines*<sup>1</sup> cúbicas apenas para auxiliar a visualização.

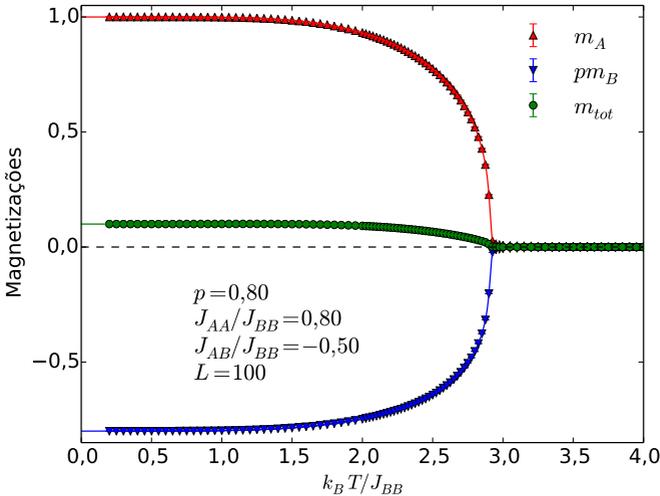
Para estimar  $T_{comp}$ , para cada configuração de desordem, nós realizamos simulações para várias temperaturas em torno da região onde  $\langle \mathcal{M}_{\text{tot}} \rangle = 0$  para obter os valores de  $\langle \mathcal{M}_{\text{tot}} \rangle$  como uma função contínua de  $T$  usando o método dos múltiplos histogramas, como podemos ver na figura 4.3 para a magnetização total de um sistema multicamadas com  $p = 0,80$ ;  $J_{AA}/J_{BB} = 0,65$ ;  $J_{AB}/J_{BB} = -0,80$  para vários tamanhos  $L$  de 20 a 100. Nós então encontramos a raiz da função  $\langle \mathcal{M}_{\text{tot}}(T) \rangle$  usando o método de Brent [74]. O processo é repetido para  $N_s$  configurações de desordem para

<sup>1</sup> A palavra *spline* é o termo em inglês para a “curva francesa”, que é uma régua flexível usada para traçar linhas não retas sobre pontos em um gráfico. O método de interpolação por *splines* consiste em passar uma função contínua sobre um conjunto de pontos, sendo que esta função é formada pela união de polinômios de grau  $n$ . Além de contínua, esta função deve ter derivadas contínuas até ordem  $n - 1$  nos pontos onde os diferentes polinômios se conectam. O caso particular de ligar os pontos corresponde a  $n = 1$ , ao passo que *splines* cúbicas correspondem a  $n = 3$  [62, 70]. Na falta de uma tradução adequada e, como a palavra *spline* é comumente usada em textos de computação em português, evitamos propor uma tradução que possa acabar confundindo o leitor e optamos pelo uso do termo em inglês neste trabalho.

**Figura 4.6:** Magnetizações dos planos,  $m_A$  e  $pm_B$  e magnetização total,  $m_{tot}$ , em função da temperatura adimensional,  $k_B T/J_{BB}$ , para um sistema multicamadas com  $p = 0,80$ ,  $J_{AB}/J_{BB} = -0,50$  e  $L = 100$ . A figura (a), para  $J_{AA}/J_{BB} = 0,20$ , mostra a existência de uma temperatura de compensação,  $T_{comp}$ , tal que  $m_{tot} = 0$  e  $0 < T_{comp} < T_c$  enquanto a figura (b), para  $J_{AA}/J_{BB} = 0,80$ , corresponde a um caso sem compensação. Os símbolos correspondem aos dados das simulações e as linhas sólidas são interpolações feitas com *splines* cúbicas e extrapolações lineares apenas para auxiliar a visualização. As barras de erro são menores do que os símbolos.

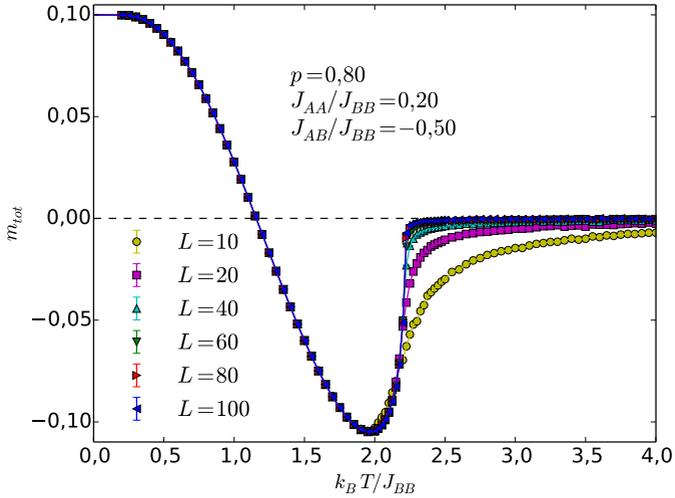


(a) Com compensação.

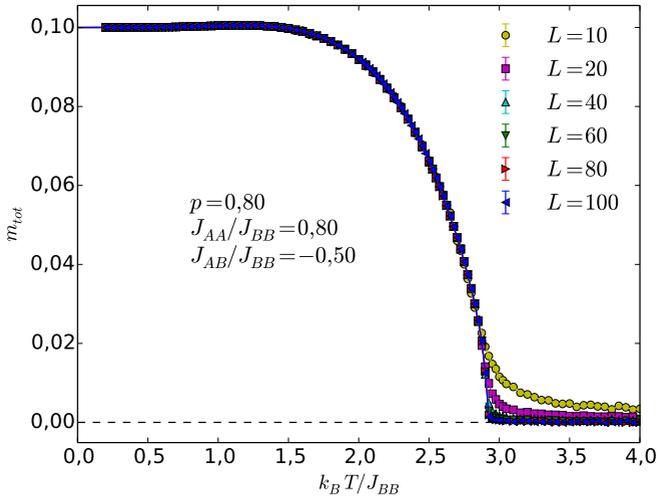


(b) Sem compensação.

**Figura 4.7:** Magnetização total,  $m_{\text{tot}}$ , em função da temperatura adimensional,  $k_B T/J_{BB}$ , para um sistema multicamadas com  $p = 0,80$ ,  $J_{AB}/J_{BB} = -0,50$  e para vários valores do tamanho linear,  $L$ . A figura (a), para  $J_{AA}/J_{BB} = 0,20$ , mostra a existência de uma temperatura de compensação,  $T_{\text{comp}}$ , tal que  $m_{\text{tot}} = 0$  e  $0 < T_{\text{comp}} < T_c$  enquanto a figura (b), para  $J_{AA}/J_{BB} = 0,80$ , corresponde a um caso sem compensação. Os símbolos correspondem aos dados das simulações e as linhas sólidas são interpolações feitas com *splines* cúbicas e extrapolações lineares apenas para auxiliar a visualização. As barras de erro são menores do que os símbolos.



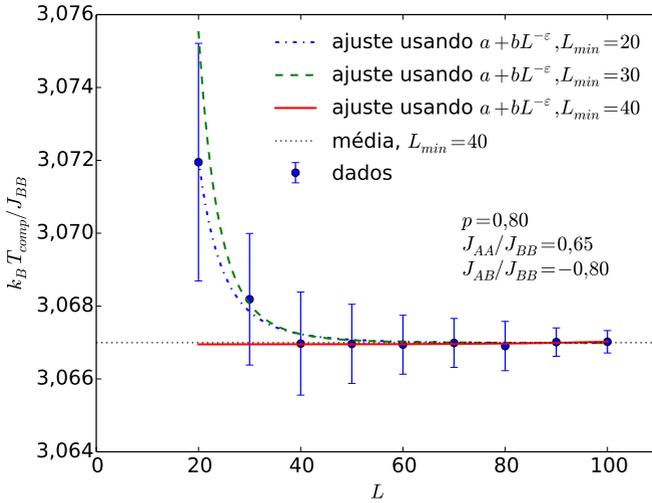
(a) Com compensação.



(b) Sem compensação.

estimar o erro associado à desordem, conforme discutido na na seção 4.1.2.

**Figura 4.8:** Temperatura de compensação adimensional,  $k_B T_{comp}(L)/J_{BB}$ , em função de  $L$  para  $p = 0,80$ ;  $J_{AA}/J_{BB} = 0,65$  e  $J_{AB}/J_{BB} = -0,80$ . Os símbolos são estimativas feitas localizando-se o zero da magnetização total para sistemas de diversos tamanhos. As linhas são ajustes feitos com a equação (4.36) para os valores de  $\varepsilon$  que minimizam o  $\chi^2/n_{DOF}$  em cada caso ou ajustes feitos com a equação (4.37) para  $L_{min} \leq L \leq 100$  com  $L_{min} = 40$ , que é o valor que minimiza  $\chi^2/n_{DOF}$  do ajuste neste caso em particular.



Para obter a estimativa final de  $T_{comp}$ , é ainda necessário combinar as estimativas obtidas para sistemas de diferentes tamanhos. Na figura 4.7a, vemos que os diferentes valores de  $T_{comp}(L)$  são próximos uns dos outros, no entanto, a figura 4.3 mostra claramente que as menores redes dão resultados razoavelmente inconsistentes com os demais. A figura 4.8 mostra a dependência com o tamanho das estimativas para a temperatura de compensação obtidas a partir dos mesmos dados da figura 4.3. Pode-se ver que, conforme  $L$  aumenta, a temperatura de compensação tende a um valor fixo. Tendo em vista que o efeito de compensação não se trata de um fenômeno crítico, não há qualquer razão *a priori* para esperarmos alguma forma funcional particular para a curva  $T_{comp}(L)$ . Baseado na aparência desta curva, entretanto, nós propomos um comportamento tipo lei de potência, análogo ao da temperatura crítica:

$$T_{comp}(L) = a + bL^{-\varepsilon}, \quad (4.36)$$

na qual  $a$ ,  $b$  e  $\varepsilon$  são parâmetros a serem determinados no processo de ajuste. Similarmente ao caso da temperatura crítica, também não temos resolução estatística suficiente para determinar os três parâmetros de forma independente, então recorreremos ao mesmo procedimento descrito na seção 4.2

para determinar  $T_c$ . Nós ainda propomos fazer ajustes usando

$$T_{comp}(L) = a = \text{constante}, \quad (4.37)$$

para  $L > L_{\min}$ , o que corresponde a fazer uma média das diferentes estimativas de  $T_{comp}$  considerando apenas os valores de  $L$  para os quais a curva  $T_{comp}(L)$  está bastante próxima de sua assíntota horizontal. O valor de  $L_{\min}$  também é determinado minimizando o valor de  $\chi^2/n_{DOF}$  do ajuste.

**Tabela 4.2:** Resultados dos ajustes da dependência de  $T_{comp}$  com  $L$  para  $p = 0,80$ ;  $J_{AA}/J_{BB} = 0,65$  e  $J_{AB}/J_{BB} = -0,80$ , usando a equação (4.36) para diferentes valores de  $L_{\min}$  e  $\varepsilon$ . Os números entre parênteses são o erro estatístico dado pelo ajuste não linear. Estes ajustes foram feitos usando os dados apresentados na figura 4.8.

$L_{\min}$	$a$	$b$	$\varepsilon$	$\chi^2/n_{DOF}$
20	3,0669825087(7)	$2(3) \times 10^3$	4,35258009946	$1,8 \times 10^{-2}$
30	3,0669845581(6)	$4(6) \times 10^4$	5,11999990708	$1,5 \times 10^{-2}$
40	3,0669505972(5)	$1,60381821004(5) \times 10^{-15}$	-5,32766666961	$3,1 \times 10^{-3}$
50	3,0669457156(7)	$2,057928392(1) \times 10^{-14}$	-4,78753257781	$3,8 \times 10^{-3}$
60	3,066935560(1)	$1,10365686(4) \times 10^{-12}$	-3,94933526946	$4,9 \times 10^{-3}$
70	3,066944621(3)	$5,11588460(2) \times 10^{-14}$	-4,59247329163	$7,4 \times 10^{-3}$

**Tabela 4.3:** Resultados dos ajustes da dependência de  $T_{comp}$  com  $L$  para  $p = 0,80$ ;  $J_{AA}/J_{BB} = 0,65$  e  $J_{AB}/J_{BB} = -0,80$  usando a equação (4.37) para valores diferentes de  $L_{\min}$ . Os números entre parênteses são o erro estatístico dado pelo ajuste não linear. Estes ajustes foram feitos usando os dados apresentados na figura 4.8.

$L_{\min}$	$a$	$\chi^2/n_{DOF}$
20	3,06702996(1)	$3,4 \times 10^{-1}$
30	3,067011268(3)	$6,6 \times 10^{-2}$
40	3,0669965247(2)	$5,4 \times 10^{-3}$
50	3,0669970562(3)	$6,4 \times 10^{-3}$
60	3,0669983378(3)	$7,7 \times 10^{-3}$
70	3,0670022149(4)	$8,6 \times 10^{-3}$

A tabela 4.2 mostra os resultados de ajustes feitos para diferentes valores de  $L_{\min}$  com os dados apresentados na figura 4.8 usando a equação (4.36) enquanto a tabela 4.3 mostra os resultados de ajustes feitos com os mesmos dados, usando a equação (4.37), também para diferentes valores de  $L_{\min}$ . Vemos que os valores de  $a$  obtidos a partir de ambos os métodos são todos consistentes, independentemente dos valores de  $\varepsilon$  ou  $L_{\min}$ . À primeira vista, poderíamos ser tentados a escolher o resultado obtido usando a equação (4.36) com  $L_{\min} = 40$ , baseado no valor de  $\chi^2/n_{DOF}$ , e usá-lo para obter a estimativa final de  $T_{comp}$ . No entanto, notamos que o ajuste a equação (4.36) não pode ser usado para determinar  $T_{comp}$  para os casos da 4.2 com  $L_{\min} \geq 40$ , tendo em vista que  $\varepsilon < 0$  contradiz nossa suposição inicial de que  $T_{comp}(L)$  se aproxima assintoticamente de  $T_{comp}$  e, nesses casos, o limite usado na determinação do ponto de compensação, i. e.,  $T_{comp} = \lim_{L \rightarrow \infty} T_{comp}(L)$ , não existe.

O fato de estes valores de  $a$  serem tão próximos das demais estimativas de  $T_{comp}$  é consequência dos valores pequenos obtidos para o parâmetro  $b$ . De fato, nestes casos, o termo  $bL^{-\varepsilon}$  é menor do que  $10^{-4}$ , pelo menos para  $L \leq 100$ . Isto significa que a dependência com  $L$  na equação (4.36) se torna irrelevante para o processo de ajuste, ou seja, estes resultados se tornam equivalentes a ajustes usando a equação (4.37). Por outro lado, se impusermos  $\varepsilon > 0$ , obtemos os melhores ajustes com  $\varepsilon$  muito próximo de zero ( $\varepsilon \approx 10^{-6}$ ) para  $L_{\min} \geq 40$ , o que é consistente com o ajuste usando a equação (4.37). No entanto, ajustes com valores tão pequenos de  $\varepsilon$  produzem estimativas muito imprecisas para  $a$  e  $b$ . De fato, os erros estatísticos de  $a$  e  $b$  nestes casos chegam a ser três ordens de grandeza maiores do que os próprios parâmetros.

Estes resultados são consistentes com o fato de que o fenômeno de compensação não tem qualquer relação com criticalidade. Logo, não temos razão para esperar que os observáveis próximos ao ponto de compensação apresentem comportamento de escala tipo lei de potência. Consequentemente, optamos pelo método usando a equação (4.37) para determinar  $T_{comp}$ , tendo em vista que, além de ser o mais adequado, é também o método mais simples e robusto. Para estimar as barras de erro, combinamos os erros estatísticos dado pelo processo de ajuste com o erro obtido para  $N_s$  amostras e para uma única amostra através do método de blocos.

#### 4.4 Determinação dos expoentes críticos

A determinação dos expoentes críticos do modelo é feita através de métodos de análise de escala de tamanho finito, conforme discutido na seção 2.4. Nesta abordagem, analisamos a dependência com o tamanho do sistema do valor de certas grandezas termodinâmicas (e. g., susceptibilidades magnéticas, calor específico), avaliadas nas proximidades do ponto crítico. Nossa primeira aproximação consiste em desprezar todos os termos proporcionais a  $L^{-\omega_i}$  nas equações (2.23), (2.24), (2.25) e (2.36). Desta forma, podemos reescrever estas equações como

$$G(L) = aL^\lambda, \quad (4.38)$$

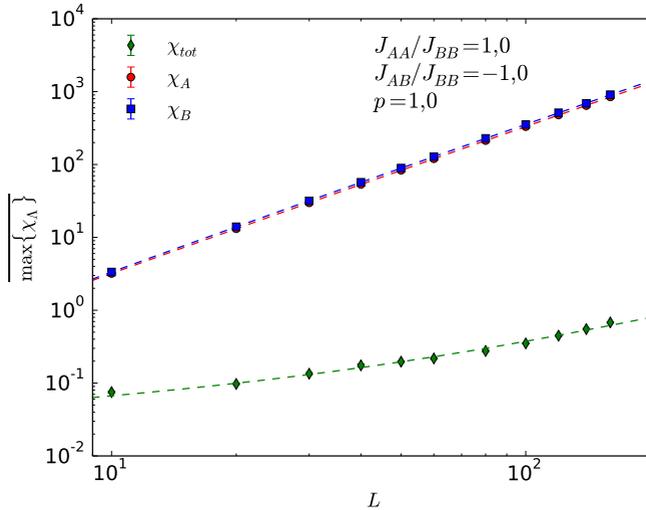
na qual  $a$  é uma constante e  $\lambda$  é o expoente associado à grandeza em questão, i. e.,  $\lambda = \alpha/\nu$  para o calor específico,  $\bar{c}$ ,  $\lambda = \beta/\nu$  para as magnetizações,  $m_\Lambda$ ,  $\lambda = \gamma/\nu$  para as susceptibilidades magnéticas,  $\overline{\chi}_\Lambda$ , e  $\lambda = 1/\nu$  para  $G = \overline{\partial}_K U_4^\Lambda$  ou  $G = \overline{\partial}_K \ln \langle |\mathcal{M}_\Lambda|^n \rangle$ .

Se necessário, podemos incluir o termo associado ao principal dos campos irrelevantes, ou seja, o termo proporcional a  $L^{-\omega} \equiv L^{-\omega_1}$ , obtendo assim

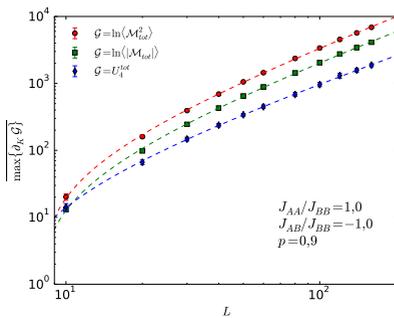
$$G(L) = aL^\lambda \{1 + bL^{-\omega}\}, \quad (4.39)$$

na qual  $a$  e  $b$  são constantes. Da mesma forma, poderíamos continuar adicionando termos associados aos demais campos irrelevantes. Entretanto, cada expoente adicional acrescenta dois parâmetros livres que devem ser determinados através de ajustes não lineares e, conforme discutido nas seções 4.2 e 4.3,

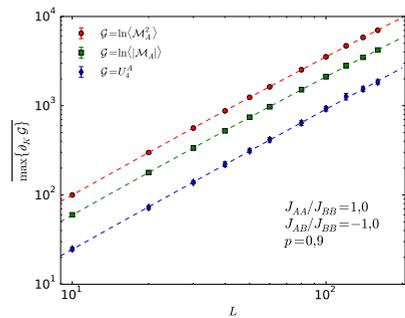
**Figura 4.9:** Gráfico em escala log-log dos máximos das susceptibilidades magnéticas em função do tamanho linear do sistema para  $J_{AA}/J_{BB} = 1,0$ ;  $J_{AB}/J_{BB} = -1,0$  e  $p = 1,0$ . Os símbolos são os resultados das simulações e as linhas tracejadas são ajustes feitos com a equação (4.39) para  $10 \leq L \leq 160$ .



**Figura 4.10:** Gráfico em escala log-log dos máximos das derivadas  $\partial_K \mathcal{G}$  em função do tamanho linear do sistema para  $J_{AA}/J_{BB} = 1,0$ ;  $J_{AB}/J_{BB} = -1,0$ ;  $p = 0,9$  e diferentes grandezas  $\mathcal{G}$ . Os símbolos são os resultados das simulações e as linhas tracejadas são ajustes feitos com a equação (4.39) para  $10 \leq L \leq 160$ .



(a)  $\Lambda = \text{tot}$



(b)  $\Lambda = A$

a precisão na determinação destes parâmetros diminui conforme o número de parâmetros aumenta. Na prática, um ajuste com quatro ou mais parâmetros livres já é inviável com os nossos dados. Assim, para realizar os ajustes com a equação (4.39), como não temos interesse em determinar o expoente  $\omega$ , usamos um procedimento análogo ao descrito nas seções 4.2 e 4.3, no qual fixamos o valor de  $\omega$  e determinamos os demais parâmetros. O procedimento é repetido iterativamente até que seja localizado o valor mínimo de  $\chi^2/n_{DOF}$ , que nos dá o melhor ajuste.

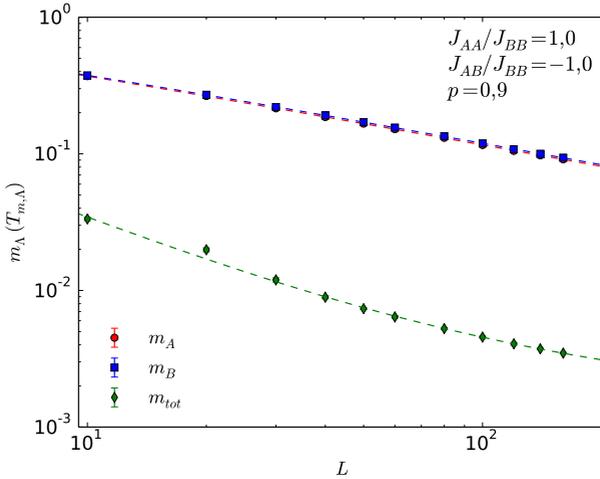
Como as equações (4.38) e (4.39) são válidas apenas nas proximidades do ponto crítico, uma estratégia comum para a análise de escala de tamanho finito através destas equações consiste em obter os valores da grandeza  $G(L)$  exatamente na temperatura crítica para realizar os ajustes destes valores em função do tamanho  $L$  do sistema. No entanto, esta abordagem pode introduzir erros sistemáticos se a determinação de  $T_c$  não for feita com muita precisão. A fim de evitar este problema, optamos pela mesma estratégia adotada nas referências 60 e 73, a qual consiste em avaliar os valores de  $G(L)$  na temperatura pseudo-crítica  $T_c(L)$ , conforme discutido na seção 4.2. Desta forma, para determinar os expoentes  $\alpha/\nu$ ,  $\gamma/\nu$  e  $\nu$ , usamos as equações (4.38) e (4.39) nas quais  $G(L)$  corresponde aos valores de pico da grandeza em questão.

Por exemplo, na figura 4.9 temos o comportamento de escala dos máximos das susceptibilidades para  $J_{AA}/J_{BB} = 1,0$ ;  $J_{AB}/J_{BB} = -1,0$  e  $p = 1,0$ . Na figura 4.10 temos o comportamento de escala dos máximos das derivadas  $\partial_K \mathcal{G}$  para  $J_{AA}/J_{BB} = 1,0$ ;  $J_{AB}/J_{BB} = -1,0$ ;  $p = 0,9$  e diferentes grandezas  $\mathcal{G}$ . Em todos os casos, os símbolos são máximos das grandezas determinados através do método dos múltiplos histogramas, conforme discutido na seção 4.1.2. As linhas tracejadas são ajustes feitos com a equação (4.39) no intervalo  $10 \leq L \leq 160$  para auxiliar na visualização.

Já para determinar o expoente  $\beta/\nu$ , cada magnetização  $m_\Lambda(L)$  ( $\Lambda = \text{tot}, A, B$ ) é avaliada na temperatura  $T_{m,\Lambda}(L)$ , definida como a temperatura para a qual a susceptibilidade  $\chi_\Lambda(L)$  é máxima. Na figura 4.11 apresentamos um exemplo do comportamento de escala das magnetizações obtidas desta forma para  $J_{AA}/J_{BB} = 1,0$ ;  $J_{AB}/J_{BB} = -1,0$  e  $p = 0,9$ . As temperaturas  $T_{m,\Lambda}(L)$  também são determinadas através do método dos múltiplos histogramas, analogamente ao procedimento discutido na seção 4.2. As linhas tracejadas são ajustes feitos com a equação (4.39) no intervalo  $10 \leq L \leq 160$  para auxiliar na visualização.

É importante notar que se o comportamento das grandezas nas figuras 4.9, 4.10 e 4.11 for uma lei de potência, ou seja, dado pela equação (4.38), os gráficos em escala log-log devem ser muito próximos de linhas retas. Isto aparentemente é satisfeito para as susceptibilidades  $\chi_A$  e  $\chi_B$  na figura 4.9, para todas as grandezas na figura 4.10b e para as magnetizações  $m_A$  e  $m_B$  na figura 4.11. No entanto, no caso das grandezas  $\chi_{\text{tot}}$ ,  $m_{\text{tot}}$  e todas apresentadas na figura 4.10a, o desvio do comportamento de lei de potência é claramente visível nos gráficos. Esta curvatura mais pronunciada aparece consistentemente em todos os gráficos envolvendo grandezas com sub-índice  $\Lambda = \text{tot}$ , portanto, em nossas análises para obter os expoentes críticos, levamos em consideração apenas as grandezas de sub-índice  $\Lambda = A, B$ , que aparentemente apresentam um comportamento mais próximo de uma lei de

**Figura 4.11:** Gráfico em escala log-log das magnetizações em função do tamanho linear do sistema para  $J_{AA}/J_{BB} = 1,0$ ;  $J_{AB}/J_{BB} = -1,0$  e  $p = 0,9$ . O valor da magnetização  $m_\Lambda$  ( $\Lambda = \text{tot}, A, B$ ) é obtido na temperatura  $T_{m,\Lambda}$ , que corresponde ao ponto de máximo da susceptibilidade  $\overline{\chi}_\Lambda$ . Os símbolos são os resultados das simulações e as linhas tracejadas são ajustes feitos com a equação (4.39) para  $10 \leq L \leq 160$ .



potência.

Ainda assim, devemos verificar se uma lei de potência é suficiente para descrever o comportamento de escala de cada grandeza ou se é necessário incluir os campos irrelevantes na análise. Para isso, realizamos ajustes com a equação (4.38) usando dados de diferentes intervalos  $L_{\min} \leq L \leq L_{\max}$  a fim de verificar se há alguma diferença nos valores obtidos para o expoente crítico em questão para cada intervalo, analogamente ao que foi feito nas seções 4.2 e 4.3. A tabela 4.4, por exemplo, mostra os valores de  $\gamma/\nu$  obtidos através de ajustes com os dados da figura 4.9 usando a equação (4.38) com  $G(L) = \overline{\max\{\chi_B(L)\}}$  para  $L_{\max} = 160$  e diferentes valores de  $L_{\min}$ .

Mesmo que o comportamento dos máximos das susceptibilidades **A** e **B** em função de  $L$  pareça bem próximo do linear (em escala log-log), como mostra a figura 4.9, os resultados numéricos da tabela 4.4 indicam que há uma tendência nos valores do coeficiente angular  $\gamma/\nu$  de diminuir conforme o valor de  $L_{\min}$  aumenta. Isto significa que a dependência de  $\ln\{G(L)\}$  com  $\ln\{L\}$  não pode ser linear: há uma curvatura. A existência dessa curvatura, por sua vez, indica que é necessário incluir pelo menos um dos expoentes associados aos campos irrelevantes, ou seja, devemos usar a equação (4.39).

A tabela 4.5 mostra os valores de  $\gamma/\nu$  e  $\omega$  obtidos através de ajustes com os mesmos dados usados para fazer a tabela 4.4, porém usando a equação (4.39) para diferentes valores de  $L_{\min}$ . Se usarmos o critério de mínimo  $\chi^2/n_{DOF}$ , obtemos o melhor ajuste com a equação (4.38) para  $L_{\min} =$

**Tabela 4.4:** Resultados dos ajustes da dependência de  $\overline{\{\chi_B\}}$  com  $L$  para  $p = 1, 0$ ;  $J_{AA}/J_{BB} = 1, 0$  e  $J_{AB}/J_{BB} = -1, 0$  usando a equação (4.38) com  $L_{\min} \leq L \leq 160$  para diversos valores de  $L_{\min}$ . Os números entre parênteses são o erro estatístico dado pelo ajuste não linear. Estes ajustes foram feitos usando os dados apresentados na figura 4.9.

$L_{\min}$	$\gamma/\nu$	$\chi^2/n_{DOF}$
10	2,01669(3)	$7,590419 \times 10^{-1}$
20	2,00535(1)	$1,702051 \times 10^{-1}$
30	1,999071(8)	$7,430297 \times 10^{-2}$
40	1,993521(5)	$2,490238 \times 10^{-2}$
50	1,991916(6)	$2,338850 \times 10^{-2}$
60	1,99013(2)	$2,774476 \times 10^{-2}$
80	1,99016(5)	$3,699222 \times 10^{-2}$
100	1,9952(1)	$4,471856 \times 10^{-2}$
120	1,991(1)	$8,798249 \times 10^{-2}$

**Tabela 4.5:** Resultados dos ajustes da dependência de  $\overline{\{\chi_B\}}$  com  $L$  para  $p = 1, 0$ ;  $J_{AA}/J_{BB} = 1, 0$  e  $J_{AB}/J_{BB} = -1, 0$  usando a equação (4.39) para valores diferentes de  $L_{\min}$  e  $\omega$ . Os números entre parênteses são o erro estatístico dado pelo ajuste não linear. Estes ajustes foram feitos usando os dados apresentados na figura 4.9.

$L_{\min}$	$\gamma/\nu$	$\omega$	$\chi^2/n_{DOF}$
10	1,961073(9)	0,594898	$2,081448 \times 10^{-2}$
20	1,97053(2)	0,793509	$2,355469 \times 10^{-2}$
30	1,989302(7)	3,385920	$1,921862 \times 10^{-2}$
40	1,99028(1)	5,519911	$2,254112 \times 10^{-2}$
50	1,98986(3)	5,676096	$2,809418 \times 10^{-2}$

50, o que nos dá  $\gamma/\nu = 1,991916 \pm 0,000006$ . Já o melhor ajuste com a equação (4.39) nos dá  $\gamma/\nu = 1,989302 \pm 0,000007$  para  $L_{\min} = 30$ . Note que a diferença entre estes ajustes está na segunda casa decimal enquanto os erros de ambos os ajustes estão na sexta. Logo, os ajustes não são consistentes um com o outro. É importante ressaltar, é claro, que a barra de erro obtida através do segundo ajuste é subestimada pela mesma razão já discutida na seção 4.2.

Podemos comparar estes resultados com o valor  $\gamma/\nu = 1,9828 \pm 0,0057$  reportado na referência 60 para o modelo de Ising em três dimensões. Como podemos ver, ambos os nossos melhores ajustes dão resultados diferentes deste, mesmo considerando as barras de erro. No entanto, nosso segundo ajuste está mais próximo do valor aceito na literatura, o que está de acordo com o fato de que o primeiro ajuste não leva em consideração a curvatura que os dados da tabela 4.4 nos mostram que existe.

Devemos ainda apontar o fato de que ambos os nossos melhores ajustes dão valores consistentemente maiores para o expoente  $\gamma/\nu$  do que o valor apresentado na referência 60. Isto, aliado ao fato de os valores de  $\gamma/\nu$  da tabela 4.4 diminuírem conforme os menores sistemas são excluídos da análise, indica que devemos incluir mais expoentes associados aos campos irrelevantes na análise

de escala de tamanho finito, se quisermos melhorar nossos resultados com os dados que já temos. Ou, se quisermos continuar usando os métodos apresentados até então, seremos obrigados a realizar simulações para sistemas maiores.

Aumentar o número de expoentes nos ajustes é inviável com a resolução estatística que temos, conforme já mencionamos no início desta seção. Realizar simulações para tamanhos maiores pode se tornar muito custoso computacionalmente, tendo em vista que as simulações com  $L = 160$  já são bastante demoradas. A fim de evitar estas duas rotas indesejadas, propomos um método para tentar extrair mais informações dos dados, analisando o comportamento no valor dos expoentes obtidos através do ajuste com a equação (4.38) em função do tamanho dos sistemas considerados no ajuste. Ou seja, a tendência nos valores de  $\gamma/\nu$  apresentados na tabela 4.4, de diminuir conforme os sistemas menores são removidos da análise, pode ser usada para nos dar informações sobre a forma que o comportamento da susceptibilidade se desvia de uma lei de potência.

Para tal, partimos da seguinte relação de escala para uma dada grandeza  $G$ , associada a um expoente  $\lambda$ :

$$G(L) = aL^\lambda f(L), \quad (4.40)$$

de tal forma que  $f(L) \sim 1$  no limite termodinâmico. O comportamento descrito em (4.40) é absolutamente geral, de forma que é fácil ver que, a partir desta equação, obtemos o comportamento de lei de potência da equação (4.38) para  $f(L) = 1$ , ou a equação (4.39) para  $f(L) = 1 + bL^{-\omega}$  ou ainda as relações apresentadas na seção 2.4 para  $f(L) = 1 + \sum_i b_i L^{-\omega_i}$ .

Fica claro da equação (4.40) que a função  $f(L)$  é responsável pelo desvio que a grandeza  $G(L)$  tem do comportamento de lei de potência. Assim, se  $f(L)$  for uma constante, o gráfico de  $\ln\{G(L)\}$  em função de  $\ln L$  é uma reta de coeficiente angular  $\lambda$  e, para as demais formas da função  $f(L)$ , este gráfico passará a ter uma curvatura que deve depender de  $f(L)$ . Este desvio do comportamento linear pode ser quantificado a partir da derivada logarítmica:

$$D(L) \equiv \frac{\partial \ln\{G(L)\}}{\partial \ln L} = \lambda + \frac{\partial \ln\{f(L)\}}{\partial \ln L}. \quad (4.41)$$

No caso particular da equação (4.39), temos  $f(L) = 1 + bL^{-\omega}$ , ou  $\ln\{f(L)\} = \ln\{1 + bL^{-\omega}\} \approx bL^{-\omega}$ , sendo que o uso da aproximação  $\ln(1+x) \approx x$  é justificável, já que esperamos que a contribuição dos campos irrelevantes seja pequena e diminua conforme  $L$  aumenta. Então, a expressão para o coeficiente angular da reta tangente ao gráfico de  $\ln\{G(L)\}$  em função de  $\ln L$  se reduz a

$$D(L) \approx \lambda + b' L^{-\omega}. \quad (4.42)$$

Para usar a equação (4.42), devemos ter alguma forma de estimar a derivada logarítmica  $D(L)$  (definida em (4.41)). Uma possibilidade é usar as seguintes derivadas numéricas

$$D_2(L_m) = \frac{\ln\{G(L_{i+1})\} - \ln\{G(L_i)\}}{\ln L_{i+1} - \ln L_i} \quad (4.43)$$

e

$$D_3(L_m) = \frac{\ln\{G(L_{i+1})\} - \ln\{G(L_{i-1})\}}{\ln L_{i+1} - \ln L_{i-1}}, \quad (4.44)$$

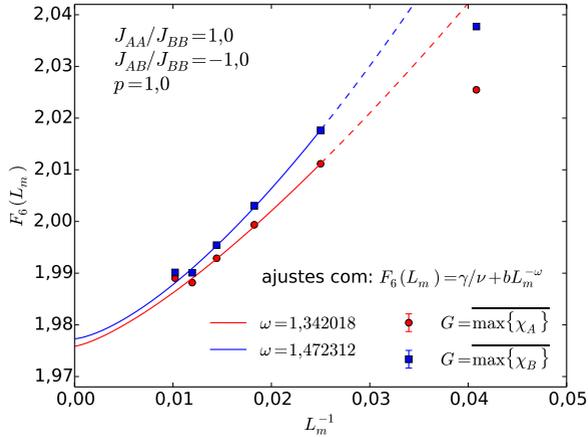
que correspondem a aproximações da derivada  $D(L)$  no ponto  $L = L_m$ , sendo que  $L_m$  é a média geométrica do intervalo  $\Delta L$  considerado, ou seja, respectivamente,  $L_m = \sqrt{L_i L_{i+1}}$  e  $L_m = \sqrt{L_{i-1} L_{i+1}}$ . Outra forma de obter estimativas da derivada  $D(L)$  é através de ajustes feitos com a equação (4.38) e usando o conjunto de  $n$  pontos consecutivos de  $L_i$  até  $L_{i+n-1}$ . Chamamos o valor do coeficiente angular obtido através de um destes ajustes com  $n$  pontos de  $F_n(L_m)$ , que é uma aproximação da derivada  $D(L)$  no ponto  $L = L_m$ , sendo que  $L_m = \sqrt{L_i L_{i+n}}$ . Neste trabalho avaliamos o comportamento de  $F_n(L_m)$  para  $n = 3, 4, 5$  e  $6$ .

A figura 4.12 mostra o comportamento das estimativas da derivada  $D(L)$  no ponto  $L_m$  em função de  $L_m^{-1}$ . Estas estimativas foram feitas através dos ajustes do tipo  $F_6(L_m)$ , obtidos com os dados das susceptibilidades  $\chi_A$  e  $\chi_B$  para  $J_{AA}/J_{BB} = 1, 0$ ;  $J_{AB}/J_{BB} = -1, 0$  e  $p = 1, 0$  (mesmos dados da figura 4.9). As linhas cheias são os ajustes feitos com a equação (4.42) através do mesmo procedimento descrito na seção 4.2. Os valores de  $\omega$  que minimizam o  $\chi^2/n_{DOF}$  são apresentados na figura e estes melhores ajustes resultam nas seguintes estimativas:  $\gamma/\nu = 1,9758715 \pm 0,0000007$  para  $\chi_A$  e  $\gamma/\nu = 1,9773165 \pm 0,0000007$  para  $\chi_B$ . Note que estes valores são mais baixos do que os obtidos através das equações (4.38) e (4.39), além de estarem mais próximos do valor obtido na referência 60. No entanto, suas barras de erro estão subestimadas devido ao procedimento usado no ajuste, conforme já mencionamos anteriormente.

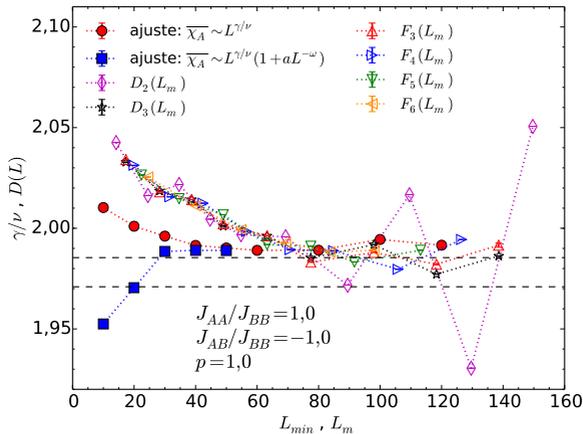
Ainda devemos mencionar que diferentes estimativa de  $D(L)$  podem subestimar ou superestimar o real valor da derivada, ao qual não temos acesso. Então, para obter uma estimativa mais confiável, realizamos o procedimento descrito acima para diversas estimativas de  $D(L)$ , i. e.,  $D_2(L_m)$ ,  $D_3(L_m)$ ,  $F_3(L_m)$ ,  $F_4(L_m)$ ,  $F_5(L_m)$  e  $F_6(L_m)$ . Na figura 4.13, mostramos, para o caso particular de  $\chi_A$ , o comportamento destas diferentes estimativas da derivada  $D(L)$  no ponto  $L = L_m$  em função de  $L_m$ , bem como os resultados de  $\gamma/\nu$  obtidos através de ajustes com as equações (4.38) e (4.39) para diferentes valores de  $L_{\min}$ .

Finalmente, combinamos os resultados para  $\chi_A$  e  $\chi_B$  dos diferentes ajustes com a equação (4.42), de modo que usamos como estimativa final para o expoente da susceptibilidade a média dos valores obtidos pelos diferentes ajustes. O erro é obtido do desvio padrão da média. É importante ressaltar que, devido ao comportamento errático das estimativas obtidas a partir de  $D_2(L_m)$ , como podemos ver na figura 4.13, estas estimativas foram excluídas da análise. Através desse método, nossa estimativa final é  $\gamma/\nu = 1,9782 \pm 0,0072$ . As linhas tracejadas na figura 4.13 marcam os valores máximo e mínimo desta estimativa. Este método usado para determinar  $\gamma/\nu$  também foi aplicado ao cálculo dos demais expoentes do modelo e para outros valores dos parâmetros do hamiltoniano. Os resultados serão apresentados na seção 5.2.

**Figura 4.12:** Estimativas da derivada logarítmica  $D(L)$  obtida a partir das susceptibilidades  $\chi_A$  e  $\chi_B$  para  $J_{AA}/J_{BB} = 1,0$ ;  $J_{AB}/J_{BB} = -1,0$  e  $p = 1,0$  (mesmos dados da figura 4.9). As linhas cheias são os ajustes feitos com a equação (4.42) que minimizam o valor de  $\chi^2/n_{DOF}$ , que em ambos os casos corresponde a  $L_m \geq 40$ . As linhas tracejadas são extrapolações destes ajustes para  $L_m < 40$ .



**Figura 4.13:** Comportamento das estimativas do expoente  $\gamma/\nu$  em função de  $L_{\min}$  e das diferentes estimativas da derivada  $D(L)$  no ponto  $L = L_m$  em função de  $L_m$  a partir da susceptibilidade  $\chi_A$  com  $J_{AA}/J_{BB} = 1,0$ ;  $J_{AB}/J_{BB} = -1,0$  e  $p = 1,0$  (mesmos dados da figura 4.9). As linhas pontilhadas apenas ligam os pontos para auxiliar na visualização. As linhas horizontais tracejadas marcam os valores mínimo e máximo de nossa estimativa final do expoente  $\gamma/\nu$  para estes valores dos parâmetros do hamiltoniano.





## 5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo, apresentaremos nossos resultados de Monte Carlo, campo médio e campo efetivo para o comportamento magnético e termodinâmico dos sistemas bicamada e multicamadas, bem como o comportamento crítico do sistema multicamadas. Os resultados de Monte Carlo para o sistema bicamada que apresentamos na seção 5.1.1 fazem parte de um artigo publicado no periódico *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* [75]. Os resultados de Monte Carlo para o sistema multicamadas que apresentamos na seção 5.1.2 fazem parte de um trabalho também publicado no periódico *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* [76]. O comportamento crítico do sistema multicamadas é apresentado na seção 5.2.

### 5.1 Fenômeno de compensação

Com o objetivo de estudar o comportamento magnético do sistema bicamada, realizamos simulações de Monte Carlo e subsequente análise de dados, a fim de obter as temperaturas crítica e de compensação para diferentes valores dos parâmetros do hamiltoniano  $J_{AA}/J_{BB}$ ,  $J_{AB}/J_{BB}$  e  $p$ . Apresentaremos, então, um relato detalhado das regiões do espaço de parâmetros para as quais o fenômeno de compensação está presente, como pode ser visto nas figuras 4.6a e 4.7a, ou ausente, como se vê nas figuras 4.6b e 4.7b, com o intuito de delinear a contribuição de cada um dos parâmetros para a presença ou ausência do efeito mencionado acima.

Inicialmente, gostaríamos de salientar a importância da assimetria entre as camadas de nosso sistema. No que diz respeito à diluição, é trivial ver que não há efeito de compensação para  $p = 0$ , caso em que temos um sistema ferromagnético bidimensional puro. Já para  $p = 1$ , temos  $|m_A| = |pm_B| = 1$  para  $T = 0$ , logo, neste caso temos duas possibilidades: (i) Se  $J_{AA} \neq J_{BB}$ , temos  $|m_A| > |pm_B|$  para  $0 < T < T_c$  e a única temperatura para a qual as magnetizações nos planos se anulam abaixo de  $T_c$  é  $T_{comp} = 0$ . (ii) Se  $J_{AA} = J_{BB}$ , temos  $|m_A| = |pm_B|$  para qualquer  $T$ , ou seja, a magnetização total do sistema é trivialmente nula.

Para que possamos compreender os papéis dos acoplamentos inter-planar e intra-planares no fenômeno de compensação, no entanto, o raciocínio é um pouco mais trabalhoso. Por exemplo, a figura 4.6 mostra a dependência das magnetizações dos planos e magnetização total com a temperatura para  $L = 640$ ,  $p = 0,7$  e  $J_{AA}/J_{BB} = 0,3$ . Na figura 4.6a, temos  $J_{AB}/J_{BB} = -0,1$  e vemos um ponto de compensação, de modo que  $m_{tot} = 0$  e  $T_{comp} < T_c$ , enquanto que a figura 4.6b, para  $J_{AB}/J_{BB} = -1,0$ , apresenta um caso sem efeito de compensação. Isto indica que a ocorrência da temperatura de compensação é favorecida por acoplamentos inter-planares mais fracos, tendo em vista que neste caso, a única diferença entre um sistema com compensação (figura 4.6a) e sem compensação (figura 4.6b) é o valor de  $J_{AB}/J_{BB}$ .

Vê-se facilmente que, se  $|J_{AB}/J_{BB}| \gg 1$ , os spins de primeiros vizinhos em diferentes planos serão “congelados” em estados diferentes (um  $+1$  e outro  $-1$ ) e, já que  $p < 1$ , teremos  $|m_A| >$

$|pm_B|$  para  $T < T_c$ . Portanto, um acoplamento  $J_{AB}$  forte elimina a possibilidade de haver efeito de compensação. Também é fácil de perceber que a rede diluída precisa ter um acoplamento intra-planar mais forte para que haja efeito de compensação. Considere um caso extremo em que  $J_{AB}/J_{BB} = 0$ , i. e., temos dois sistemas ferromagnéticos independentes, cada com uma transição de fase a uma temperatura crítica diferente, digamos  $T_{c,A}$  e  $T_{c,B}$  para as redes **A** e **B**, respectivamente. Considere também que ainda temos uma maneira, além do acoplamento inter-planar antiferromagnético, para manter as magnetizações dos planos opostas uma à outra. Se ambas as redes não têm diluição e  $J_{AA} > J_{BB}$ , temos  $T_{c,A} > T_{c,B}$ , portanto,  $|m_A| = |pm_B| = 1$  para  $T = 0$  e  $|m_A| > |pm_B|$  para  $0 > T > T_{c,A}$ , isto é, não há temperatura, além de  $T = 0$ , para a qual  $|m_A|$  e  $|pm_B|$  se igualem. O efeito da diluição na rede **B** é abaixar a curva  $|pm_B|$  tal que  $|pm_B| < |m_A|$  para  $T = 0$  e, ao mesmo tempo, diminuir  $T_{c,B}$ , então ainda temos  $|m_A| > |pm_B|$  para  $0 < T < T_{c,A}$  e não há valor de temperatura tal que as curvas  $|m_A|$  e  $|pm_B|$  se cruzem, nem mesmo  $T = 0$ .

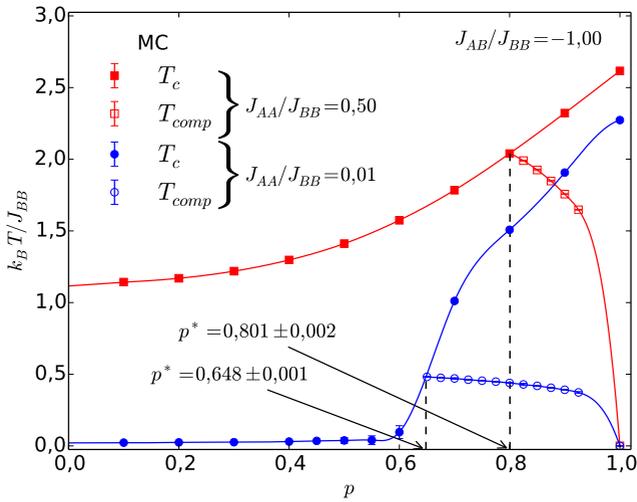
Para o sistema interagente, podemos seguir um raciocínio similar e chegar à mesma conclusão. A presença de um acoplamento intra-planar, independente do quão fraco, obriga ambas as redes a se comportarem como um único sistema e ter uma temperatura de transição única,  $T_c$ , que é maior do que ambas  $T_{c,A}$  e  $T_{c,B}$  dos sistemas não interagentes mencionados acima. Se ambas as redes não têm diluição, nós temos  $|m_A| = |pm_B| = 1$  em  $T = 0$  e, conforme discutido acima, o sistema pode ser um ferrimagneto com  $T_{comp} = 0$  (se  $J_{AA} \neq J_{BB}$ ) ou um antiferromagneto (se  $J_{AA} = J_{BB}$ ). Assim como no caso não interagente, o efeito da diluição ainda é de abaixar a curva  $|pm_B|$  tal que  $|pm_B| < |m_A|$  para  $T = 0$ . Se  $J_{AA} > J_{BB}$ , temos  $|pm_B| < |m_A|$  para  $0 \leq T < T_c$ , portanto, neste caso não temos temperatura de compensação para qualquer  $p > 0$ . Mesmo para  $J_{AA} < J_{BB}$ , o efeito de compensação só estará presente se tanto  $J_{AA}/J_{BB}$  e  $|J_{AB}/J_{BB}|$  permanecem pequenos o suficiente para que a curva  $|m_A|$  caia de forma mais gradual em direção a zero do que  $|pm_B|$ , como pode ser visto nas figuras 1.2a, 1.3a e 4.6a.

### 5.1.1 Compensação no sistema bicamada (2D)

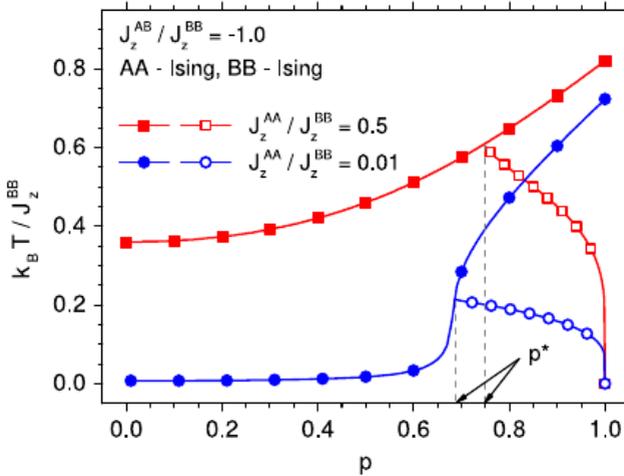
Na figura 5.1, apresentamos os gráficos da temperatura crítica e temperatura de compensação em função da concentração de sítios magnéticos para os casos ( $J_{AB}/J_{BB} = -1, 0; J_{AA}/J_{BB} = 0, 01$ ) e ( $J_{AB}/J_{BB} = -1, 0; J_{AA}/J_{BB} = 0, 5$ ). Os símbolos sólidos são as temperaturas críticas e os símbolos vazios são as temperaturas de compensação e as linhas pontilhadas verticais marcam a concentração característica,  $p^*$ , para a qual as curvas de  $T_c$  e  $T_{comp}$  se encontram. Se  $p < p^*$ , para um determinado conjunto de valores de parâmetros, o fenômeno de compensação não ocorre. Nossos resultados de Monte Carlo estão na figura 5.1a, na qual os símbolos correspondem às simulações e as linhas sólidas são interpolações com *splines* cúbicas apenas para auxiliar na visualização. Para fins de comparação, reproduzimos na figura 5.1b, a figura 2 da referência 20, que corresponde ao resultado de aproximação de pares para os mesmos parâmetros.

Qualitativamente, os comportamentos das temperaturas obtidas por Monte Carlo ou aproxi-

**Figura 5.1:** Temperatura crítica  $T_c$  (símbolos cheios) e temperatura de compensação,  $T_{comp}$  (símbolos vazios), em função da concentração,  $p$ . A linha pontilhada vertical marca a concentração característica,  $p^*$ , para a qual  $T_c = T_{comp}$ . Em (a) apresentamos os resultados de Monte Carlo deste trabalho. Nos casos em que as barras de erro não forem visíveis, elas são menores do que os símbolos. As linhas cheias são interpolações e extrapolações feitas com *splines* cúbicas apenas para auxiliar na visualização. Em (b), reproduzimos a figura 2 da referência 20 para fins de comparação.

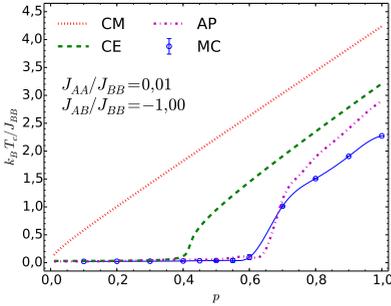


(a) Monte Carlo.

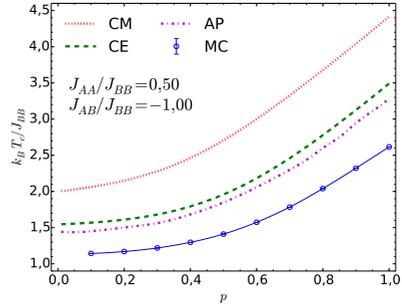


(b) Aproximação de pares (figura 2 da referência 20).

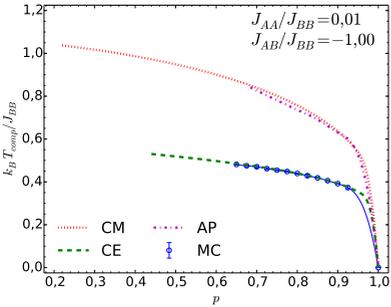
**Figura 5.2:** Comparação entre os resultados de campo médio (CM; vermelho; linha pontilhada), campo efetivo (CE; verde; linha tracejada), aproximação de pares [20] (AP; magenta; linha traço e ponto) e Monte Carlo (MC; azul; círculos vazios) para  $T_c$  e  $T_{comp}$  em função da concentração,  $p$ , para um sistema bicamada com  $J_{AB}/J_{BB} = -0,50$ . Em (a) e (b) temos os valores de  $T_c$  para  $J_{AA}/J_{BB} = 0,01$  e  $J_{AA}/J_{BB} = 0,50$ , respectivamente. Em (c) e (d) temos os valores de  $T_{comp}$  para  $J_{AA}/J_{BB} = 0,01$  e  $J_{AA}/J_{BB} = 0,50$ , respectivamente. Os valores de MC correspondem aos mesmo dados apresentados na figura 5.1a enquanto que os valores de AP são os dados da figura 5.1b (reprodução da figura 2 da referência 20) que foram multiplicados por 4 para que todos os resultados fiquem na mesma escala de energia.



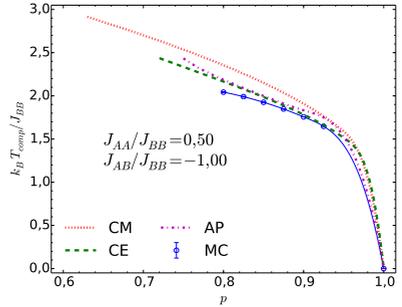
(a)  $T_c$ ;  $J_{AA}/J_{BB} = 0,01$



(b)  $T_c$ ;  $J_{AA}/J_{BB} = 0,50$



(c)  $T_{comp}$ ;  $J_{AA}/J_{BB} = 0,01$



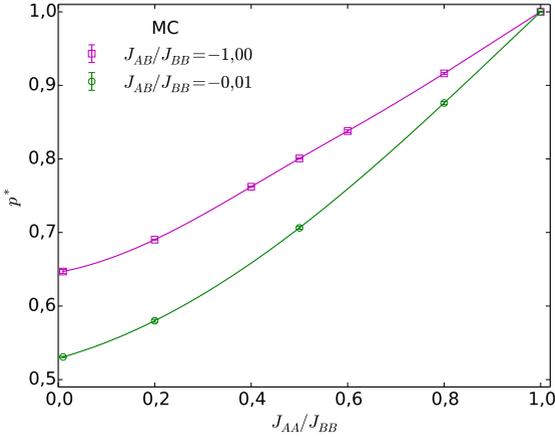
(d)  $T_{comp}$ ;  $J_{AA}/J_{BB} = 0,50$

mação de pares são os mesmos, como podemos ver nas figuras 5.1. O mesmo pode ser dito dos comportamentos previstos através das aproximações de campo médio e campo efetivo (ver figura 5.2). No entanto, se quisermos comparar os valores de  $T_c$  e  $T_{comp}$  apresentados neste trabalho com os reportados na referência 20, é preciso ter em mente o fato de que as variáveis de *spin* desta referência assumem os valores  $s_i = \pm 1/2$ , enquanto que em nossas simulações usamos  $s_i = \pm 1$ . Isso por si só é responsável por uma diferença por um fator de quatro entre as escalas de energia  $e$ , consequentemente, entre as escalas de temperatura, nos dois trabalhos, isto é, todas as temperaturas apresentadas na referência 20 têm de ser multiplicadas por quatro para que possam ser comparadas às temperaturas obtidas neste trabalho nas aproximações de MC, CM e CE. Seguindo este procedimento simples, na figura 5.2 apresentamos as temperaturas críticas e de compensação obtidas através de CM, CE, MC e AP para o mesmo conjunto de parâmetros da figura 5.1.

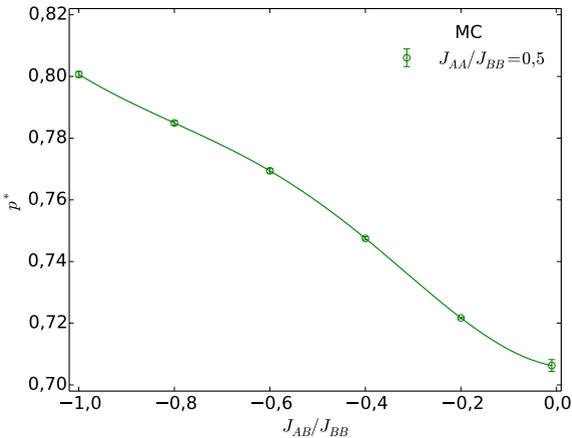
Para  $J_{AA}/J_{BB} = 0,5$  (figura 5.2b), os valores de  $T_c$  obtidos com Monte Carlo para cada valor de  $p$  são consistentemente mais baixos do que para as demais aproximações. Isto está de acordo com o esperado de métodos de campo médio [58], mesmo os mais sofisticados como aproximação de pares, que leva em conta correlações entre primeiros vizinhos. Em ordem decrescente, temos as temperaturas críticas de CM, CE, AP e MC. Esta ordem está de acordo com o nível de sofisticação de cada aproximação, de forma que os resultados de AP e CE são bastante próximos entre si, enquanto CM dá temperaturas entre 30% a 69% maiores do que todas as demais aproximações. Já para  $J_{AA}/J_{BB} = 0,01$  (figura 5.2a), apesar de as temperaturas críticas serem maiores para CM do que para as demais aproximações, a ordem CM, CE, AP e MC só é mantida para concentrações acima de  $p \approx 0,7$ . Abaixo desta concentração, os resultados de AP e MC ficam muito próximos e os valores de  $T_c$  aparentemente chegam a ficar menores para AP do que para MC. A questão se estes valores realmente ficam menores ou não é um tanto delicada, tendo em vista que os símbolos obtidos através das simulações estão abaixo da curva da AP e apenas os valores da interpolação por *splines* ficam acima desta curva. Para responder esta questão, deveríamos realizar mais simulações para  $0,5 < p < 0,7$ , intervalo este que está muito próximo do ponto de percolação para da rede **B** ( $p_c = 0,592\dots$  para a rede quadrada [77, 78]). Infelizmente, esta combinação de fatores, (i) proximidade ao ponto de percolação e (ii) grande assimetria entre os acoplamentos intra-planares (valor pequenos de  $J_{AA}/J_{BB}$ ), torna o comportamento do sistema muito mais difícil de analisar através de simulações de Monte Carlo.

A comparação entre os valores de  $T_{comp}$  (figuras 5.2c e 5.2d) para as diferentes aproximações é ainda mais curiosa. Para  $J_{AA}/J_{BB} = 0,50$ , todas as aproximações resultam em temperaturas de compensação muito próximas, sendo que os valores obtidos por MC ainda são menores do que os obtidos nas demais aproximações. Já para  $J_{AA}/J_{BB} = 0,01$ , as curvas de  $T_{comp} \times p$  obtidas com CE e MC quase se sobrepõem, similarmente ao que ocorre com as curvas obtidas com CM e AP. Mesmo que a concordância seja boa entre os dois pares de métodos, cada um ainda prevê um valor bastante diferente para  $p^*$ . Para  $J_{AA}/J_{BB} = 0,50$ , o menor valor de  $p^*$  é dado por CM, seguido pelos valores de CE, AP e MC. Já para  $J_{AA}/J_{BB} = 0,01$ , as aproximações que dão o valor de  $p^*$  em ordem

**Figura 5.3:** Concentração característica,  $p^*$ , contra a razão  $J_{AA}/J_{BB}$  para  $J_{AB}/J_{BB} = -0,01$  (círculos) e  $J_{AB}/J_{BB} = -1,0$  (quadrados). As linhas cheias são interpolações feitas com *splines* cúbicas apenas para auxiliar na visualização.



**Figura 5.4:** Concentração característica,  $p^*$ , contra a razão  $J_{AB}/J_{BB}$  para  $J_{AA}/J_{BB} = 0,5$ . As linhas cheias são interpolações feitas com *splines* cúbicas apenas para auxiliar na visualização.



crescente são: CM, CE, MC e AP.

Observamos nas figuras 5.1 e 5.2 que, independente da aproximação considerada, o valor de  $p^*$  é maior para  $J_{AA}/J_{BB} = 0,5$  do que para  $J_{AA}/J_{BB} = 0,01$ , indicando que a concentração  $p^*$  aumenta à medida que a interação dentro da camada **A** torna-se mais forte. Esta tendência é confirmada na figura 5.3, na qual temos os valores de Monte Carlo da concentração característica  $p^*$  em função da razão  $J_{AA}/J_{BB}$  para ambos os casos de um acoplamento inter-planar fraco ( $J_{AB}/J_{BB} = -0,01$ ) e um forte ( $J_{AB}/J_{BB} = -1,0$ ), e em ambos os casos  $p^*$  aumenta com uma interação intra-planar mais forte na rede **A**. A figura 5.4 também revela uma tendência semelhante para o comportamento de  $p^*$  como uma função do acoplamento inter-planar: vemos que a concentração  $p^*$  diminui quando  $J_{AB}/J_{BB}$  aumenta (mas devemos observar que, como a interação inter-planar é antiferromagnética, isso também significa que  $p^*$  aumenta à medida que o acoplamento fica mais forte).

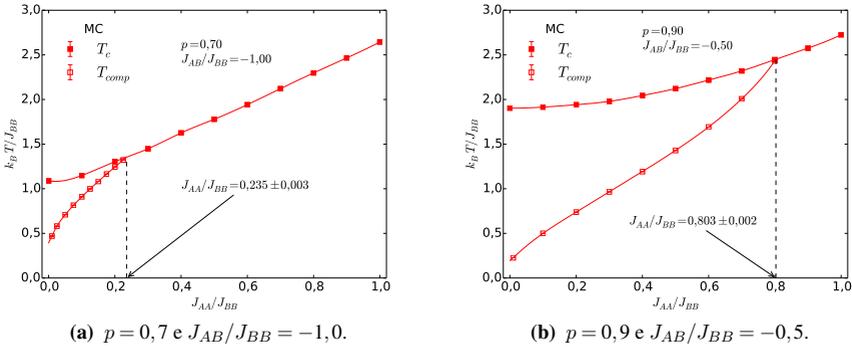
Para um valor fixo de  $p$ , analisamos como os parâmetros  $J_{AA}/J_{BB}$  e  $J_{AB}/J_{BB}$  influenciam a ausência ou a presença do fenômeno de compensação. Nas figuras 5.5 e 5.6, apresentamos gráficos de temperatura crítica,  $T_c$  (símbolos cheios), e temperatura de compensação,  $T_{comp}$  (símbolos vazios), como funções de  $J_{AA}/J_{BB}$  para valores fixos de  $p$  e  $J_{AB}/J_{BB}$ . A figura 5.5 corresponde ao resultado de Monte Carlo obtido neste trabalho enquanto na figura 5.6, para fins de comparação, reproduzimos os resultados de aproximação de pares da referência 20 (desconsidere o resultado referente ao modelo de Heisenberg, não estudado neste trabalho). Assim, as figuras 5.6a e 5.6b correspondem, respectivamente, às figuras 6 e 7 desta referência.

Nas figuras 5.5a e 5.6a, vemos que para  $p = 0,7$  e um acoplamento inter-planar forte só temos compensação para valores pequenos de  $J_{AA}/J_{BB}$ . No entanto, nas figuras 5.5b e 5.6b, o aumento da concentração de sítios magnéticos de  $p = 0,7$  para 0,9 amplia a faixa de  $J_{AA}/J_{BB}$  para a qual temos compensação, mesmo que o valor absoluto da força da interação inter-planar tenha sido reduzido de  $|J_{AB}/J_{BB}| = 1,0$  para  $|J_{AB}/J_{BB}| = 0,5$ . Este comportamento também ocorre nas aproximações de campo médio e campo efetivo, porém, como podemos ver na figura 5.7, o aumento no valor  $J_{AA}/J_{BB}$  para o qual  $T_c = T_{comp}$  é consideravelmente maior para MC do que para as demais aproximações.

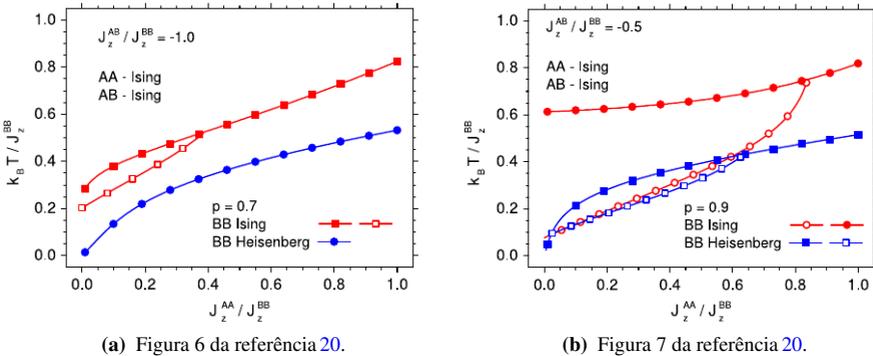
Na figura 5.7 também podemos ver que, assim como no caso das figuras 5.2a (para  $p \gtrsim 0,7$ ) e 5.2b, os valores de  $T_c$  obtidos através de simulações de Monte Carlo são mais baixos do que para as demais aproximações, seguidos pelos valores obtidos com AP, CE e CM, em ordem crescente. A comparação entre as temperaturas de compensação, assim como no caso da figura 5.2, também é um tanto curiosa. Para  $(p; J_{AB}/J_{BB}) = (0,7; -1,0)$  (figura 5.7c), as curvas de  $T_{comp} \times J_{AA}/J_{BB}$  obtidas com CE e MC quase se sobrepõem, similarmente ao que ocorre com as curvas obtidas com CM e AP. Para  $(p; J_{AB}/J_{BB}) = (0,9; -0,5)$  (figura 5.7d), todas as aproximações resultam em temperaturas de compensação muito próximas, sendo que os valores obtidos por CM ainda são maiores do que os obtidos nas demais aproximações.

Na figura 5.8 exploramos a dependência da temperatura crítica,  $T_c$  (símbolos cheios) e da temperatura de compensação,  $T_{comp}$  (símbolos vazios), com a razão  $J_{AB}/J_{BB}$  para valores fixos de  $p$  e

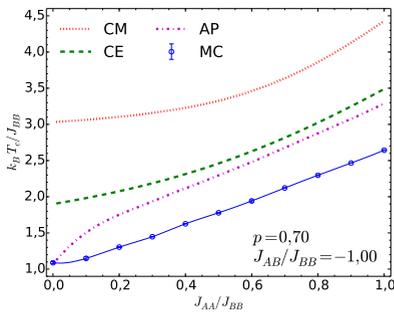
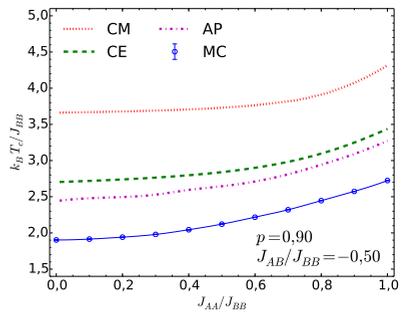
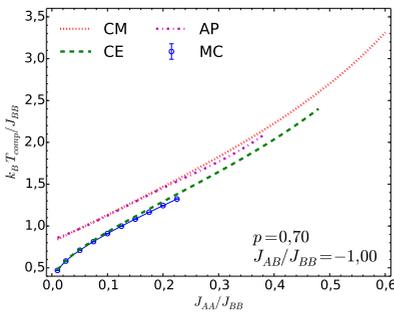
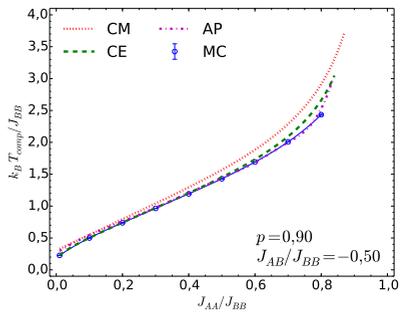
**Figura 5.5:** Resultados de Monte Carlo para a temperatura crítica,  $T_c$  (símbolos cheios), e temperatura de compensação,  $T_{comp}$  (símbolos vazios), em função da razão  $J_{AA}/J_{BB}$  para (a)  $p = 0,7$  e  $J_{AB}/J_{BB} = -1,0$  e (b)  $p = 0,9$  e  $J_{AB}/J_{BB} = -0,5$ . As linhas cheias são interpolações feitas com *splines* cúbicas apenas para auxiliar na visualização. As linhas pontilhadas verticais marcam os valores das razões  $J_{AA}/J_{BB}$  acima dos quais não há compensação. Nos casos em que as barras de erro não são visíveis, elas são menores do que os símbolos.



**Figura 5.6:** Resultado de aproximação de pares para a temperatura crítica,  $T_c$  (símbolos cheios), e temperatura de compensação,  $T_{comp}$  (símbolos vazios), em função da razão  $J_{AA}/J_{BB}$  para (a)  $J_{AB}/J_{BB} = -1,0$  e  $p = 0,7$  e (b)  $J_{AB}/J_{BB} = -0,5$  e  $p = 0,9$ . Estas figuras foram retiradas da referência 20 e são reproduzidas aqui para fins de comparação com a figura 5.5.



**Figura 5.7:** Comparação entre os resultados de campo médio (CM; vermelho; linha pontilhada), campo efetivo (CE; verde; linha tracejada), aproximação de pares [20] (AP; magenta; linha traço e ponto) e Monte Carlo (MC; azul; círculos vazios) para  $T_c$  e  $T_{comp}$  em função da razão  $J_{AA}/J_{BB}$  para o sistema bicamada. Em (a) e (b) temos os valores de  $T_c$  para  $(p; J_{AB}/J_{BB}) = (0,7; -1,0)$  e  $(0,9; -0,5)$ , respectivamente. Em (c) e (d) temos os valores de  $T_{comp}$  para  $(p; J_{AB}/J_{BB}) = (0,7; -1,0)$  e  $(0,9; -0,5)$ , respectivamente. Os resultados de MC correspondem aos mesmos dados apresentados nas figuras 5.5a ((a) e (c)) e 5.5b ((b) e (d)). As temperaturas obtidas a partir da AP correspondem aos valores das figuras 5.6a (reprodução da figura 6 da referência 20) e 5.6b (reprodução da figura 7 da referência 20) multiplicados por 4 para que todos os resultados fiquem na mesma escala de energia.

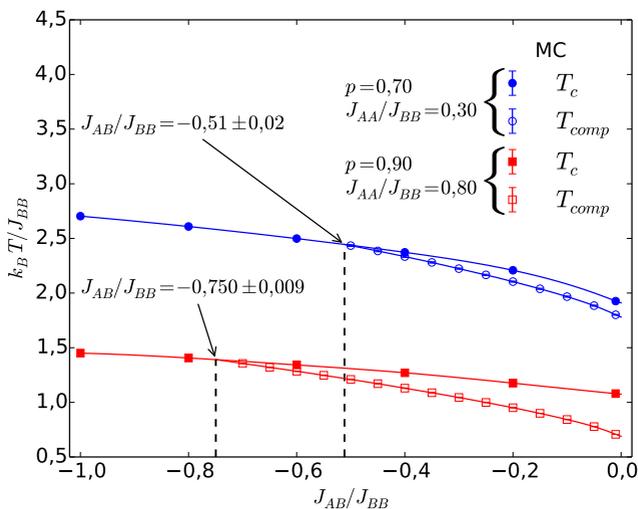
(a)  $T_c$ (b)  $T_c$ (c)  $T_{comp}$ (d)  $T_{comp}$

$J_{AA}/J_{BB}$ . Mais uma vez, as linhas verticais pontilhadas marcam o valor da razão  $J_{AB}/J_{BB}$  para o qual as curvas de  $T_c$  e  $T_{comp}$  se encontram. É interessante salientar que, conforme o acoplamento inter-planar fica mais fraco, tanto a temperatura crítica quanto a temperatura de compensação diminuem. No entanto, a temperatura de compensação diminui a uma taxa maior, de tal forma que a curva de  $T_{comp}$  começa em  $T_{comp} = T_c$  e deste ponto em diante as curvas  $T_c$  e  $T_{comp}$  se afastam conforme  $|J_{AB}/J_{BB}| \rightarrow 0$ . Este efeito está presente também nos resultados de aproximação de pares, como podemos ver na figura 8 da referência 20 (reproduzida na figura 5.9). Esta figura também ajuda a destacar algumas diferenças entre os resultados de AP e MC para ambos os conjuntos de parâmetros,  $(J_{AA}/J_{BB} = 0,2; p = 0,6)$  e  $(J_{AA}/J_{BB} = 0,5; p = 0,7)$ . Os resultados da AP mostram a existência de uma temperatura de compensação acima de um determinado valor da razão  $J_{AB}/J_{BB}$  enquanto, em nossas simulações de MC, para  $p = 0,7$ , não encontramos efeito de compensação para qualquer valor de  $J_{AB}/J_{BB}$  (ver figura 5.10a). A fim de apresentar um diagrama análogo, com a presença de uma fase com compensação, neste trabalho tivemos que escolher conjuntos de parâmetros completamente diferentes, como visto na nossa figura 5.8.

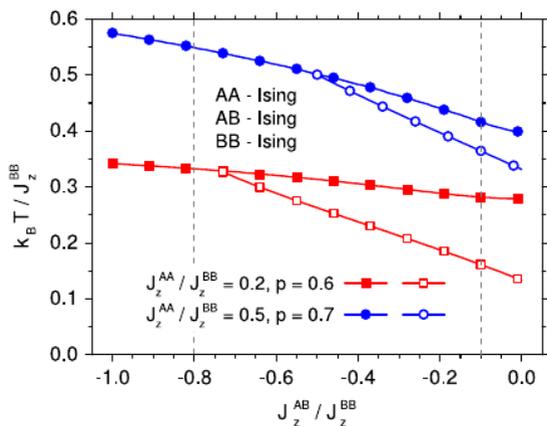
Como decorre dos resultados apresentados acima, podemos dividir o espaço de parâmetros do nosso hamiltoniano em duas regiões de interesse distintas: uma fase ferrimagnética para a qual não há compensação, e uma fase ferrimagnética na qual o fenômeno de compensação ocorre a uma certa temperatura  $T_{comp}$ . Por isso, pode ser útil apresentar alguns diagramas de fase, mostrando as regiões correspondentes à existência de ambas as fases. Para este fim, a figura 5.10 mostra os diagramas de  $J_{AB}/J_{BB}$  em função de  $J_{AA}/J_{BB}$ , obtidos para  $p = 0,7$  (figura 5.10a) e  $p = 0,9$  (figura 5.10b) a partir de nossos resultados numéricos de campo médio, campo efetivo e Monte Carlo, bem como a reprodução dos resultados de aproximação de pares da referência 20. Nestes diagramas temos, para cada linha correspondente a cada aproximação, uma fase ferrimagnética com temperatura de compensação à esquerda da linha e uma fase ferrimagnética sem temperatura de compensação à direita. Estes diagramas confirmam que, para todas as aproximações consideradas, o efeito de compensação é favorecido pela combinação de acoplamentos inter-planares mais fracos e de assimetrias de acoplamentos intra-planares mais pronunciadas, ou seja, para um valor fixo de  $p$ , o intervalo de  $J_{AA}/J_{BB}$  para o qual há compensação diminui com o aumento de  $|J_{AB}/J_{BB}|$ . A comparação entre os diagramas para  $p = 0,7$  e  $p = 0,9$  ainda evidencia que, com o aumento de  $p$ , a região ocupada pela fase ferrimagnética com compensação aumenta bastante, ou seja, a existência de  $T_{comp}$  é favorecida por uma diluição atômica fraca mas não nula. Além disso, à medida que a diluição diminui, o valor de  $J_{AB}/J_{BB}$  para o qual  $T_{comp} = T_c$  passa a depender menos do valor da interação intra-planar na camada **A**, de forma que a linha separando as regiões com e sem compensação se aproxima mais de uma reta vertical.

Em ambas as figuras 5.10a e 5.10b, vemos que, para valores fixos de  $p$  e  $J_{AB}/J_{BB}$ , os valores de  $J_{AA}/J_{BB}$  que caem na linha que separa as fases ferrimagnéticas com e sem compensação (que chamaremos de  $(J_{AA}/J_{BB})^*$ , por praticidade) são mais baixos em Monte Carlo do que nas demais aproximações. Além disso, também em ambos os casos, os valores de  $(J_{AA}/J_{BB})^*$  obtidos através

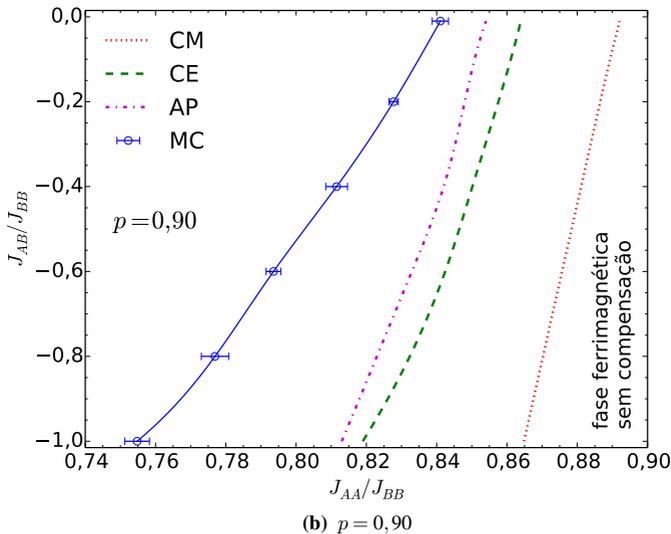
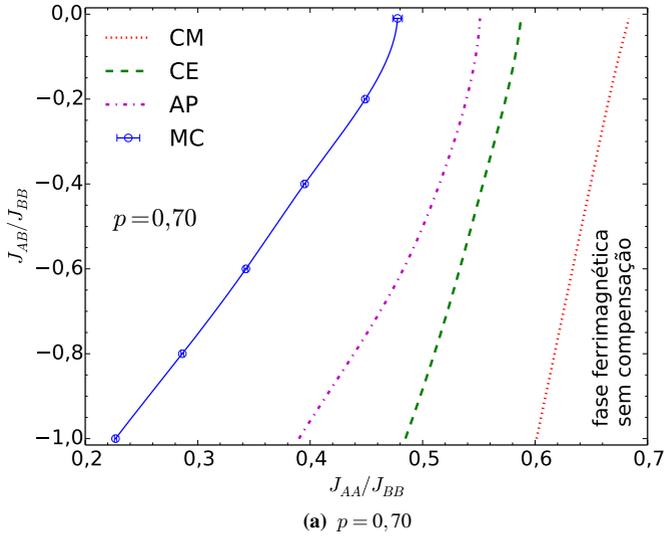
**Figura 5.8:** Temperatura crítica,  $T_c$  (símbolos cheios), e temperatura de compensação,  $T_{comp}$  (símbolos vazios), em função da razão  $J_{AB}/J_{BB}$  para  $p = 0,70$  e  $J_{AA}/J_{BB} = 0,30$  (quadrados) e  $p = 0,90$  e  $J_{AA}/J_{BB} = 0,80$  (círculos). As linhas cheias são interpolações feitas com *splines* cúbicas apenas para auxiliar na visualização. As linhas pontilhadas verticais marcam os valores de  $J_{AB}/J_{BB}$  abaixo dos quais não há compensação para cada conjunto de valores dos parâmetros. As barras de erro, nos casos em que não forem visíveis, são menores do que os símbolos.



**Figura 5.9:** Temperatura crítica,  $T_c$  (símbolos cheios), e temperatura de compensação,  $T_{comp}$  (símbolos vazios), em função da razão  $J_{AB}/J_{BB}$  para  $p = 0,60$  e  $J_{AA}/J_{BB} = 0,20$  (quadrados) e  $p = 0,70$  e  $J_{AA}/J_{BB} = 0,50$  (círculos). Esta figura corresponde aos resultados de aproximação de pares (figura 8 da referência 20) aqui reproduzidos para fins de comparação com a figura 5.8.



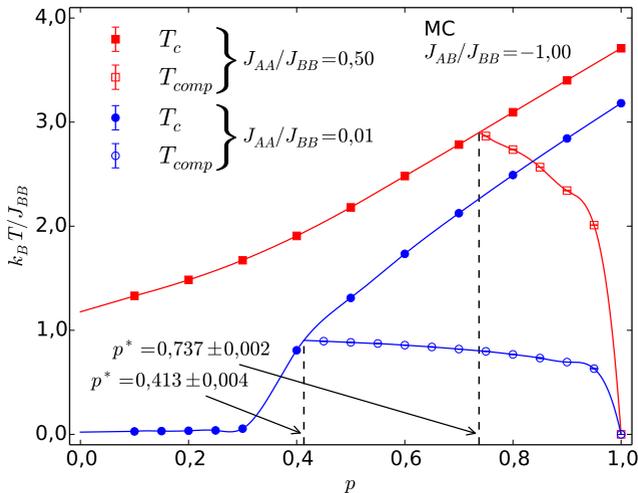
**Figura 5.10:** Diagramas de fase  $J_{AB}/J_{BB} \times J_{AA}/J_{BB}$  para (a)  $p = 0,70$  e (b)  $p = 0,90$ . As linhas marcam a separação entre uma fase ferrimagnética com compensação (à esquerda) e uma fase ferrimagnética sem compensação (à direita). Os resultados de campo médio (CM), campo efetivo (CE) e Monte Carlo (MC) são deste trabalho enquanto os de aproximação de pares (AP) correspondem aos dados apresentados nas figuras 11 ( $p = 0,70$ ) e 12 ( $p = 0,90$ ) da referência 20 e são reproduzidos aqui para fins de comparação. Apenas no caso dos resultados de MC, os símbolos correspondem às simulações e as linhas cheias são interpolações feitas com *splines* cúbicas apenas para auxiliar na visualização.



das três aproximações tipo campo médio (CM, CE e AP) se afastam do valor de Monte Carlo conforme  $|J_{AB}/J_{BB}|$  aumenta. Por exemplo, para  $p = 0,7$ , no ponto  $J_{AB}/J_{BB} = -0,01$ , o valor de AP para  $(J_{AA}/J_{BB})^*$  é aproximadamente 15% maior do que a estimativa de MC, enquanto que em  $J_{AB}/J_{BB} = -1,0$  o valor de AP é cerca de 72% superior. Por outro lado, para  $p = 0,9$ , a discrepância varia de apenas  $\approx 1,5\%$  para  $J_{AB}/J_{BB} = -0,01$  a um valor ainda pequeno de  $\approx 7,7\%$  para  $J_{AB}/J_{BB} = -1,0$ , o que indica que a discrepância é mais pronunciada para as concentrações mais baixas (ou diluições mais elevadas). Para CE e CM este padrão se mantém, como é visível nas figuras, entretanto a discrepância é consideravelmente maior, chegando a 165% entre CM e MC para  $p = 0,7$  e  $J_{AB}/J_{BB} = -1,0$ .

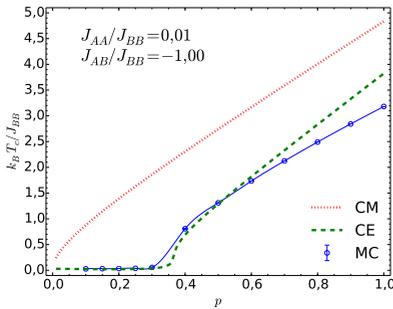
### 5.1.2 Compensação no sistema multicamadas (3D)

**Figura 5.11:** Temperatura crítica,  $T_c$  (símbolos cheios), e temperatura de compensação,  $T_{comp}$  (símbolos vazios), em função da concentração de sítios magnéticos em  $B$ ,  $p$ , para  $J_{AB}/J_{BB} = -1,00$  em ambos os casos:  $J_{AA}/J_{BB} = 0,01$  (círculos) e  $J_{AA}/J_{BB} = 0,50$  (quadrados). As linhas sólidas são interpolações com *splines* cúbicas ou extrapolações lineares para auxiliar na visualização. As linhas tracejadas verticais marcam a concentração característica,  $p^*$ , para a qual  $T_c = T_{comp}$  e abaixo da qual não há compensação. As barras de erro são menores do que os símbolos.

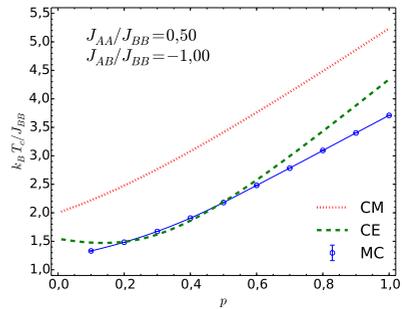


Na figura 5.11, apresentamos o resultado de Monte Carlo para as temperaturas críticas e as temperaturas de compensação em função da concentração de sítios magnéticos de sistemas multicamadas para os casos  $(J_{AB}/J_{BB} = -1,0; J_{AA}/J_{BB} = 0,01)$  e  $(J_{AB}/J_{BB} = -1,0; J_{AA}/J_{BB} = 0,5)$ . Os símbolos correspondem às simulações, sendo que os símbolos sólidos são as temperaturas críticas e os vazios são as temperaturas de compensação. As linhas sólidas são interpolações com *splines* cúbicas apenas para auxiliar na visualização e as linhas pontilhadas verticais marcam a concentração

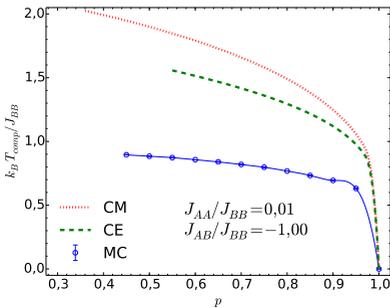
**Figura 5.12:** Comparação entre os resultados de campo médio (CM; vermelho; linha pontilhada), campo efetivo (CE; verde; linha tracejada), e Monte Carlo (MC; azul; círculos vazios) para  $T_c$  e  $T_{comp}$  em função da concentração,  $p$ , para um sistema multicamadas com  $J_{AB}/J_{BB} = -0,50$ . Em (a) e (b) temos os valores de  $T_c$  para  $J_{AA}/J_{BB} = 0,01$  e  $J_{AA}/J_{BB} = 0,50$ , respectivamente. Em (c) e (d) temos os valores de  $T_{comp}$  para  $J_{AA}/J_{BB} = 0,01$  e  $J_{AA}/J_{BB} = 0,50$ , respectivamente. Os resultados de MC correspondem aos mesmo dados apresentados na figura 5.11.



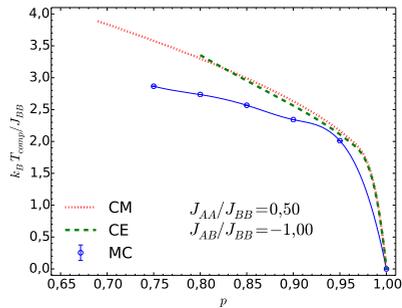
(a)  $T_c$ ;  $J_{AA}/J_{BB} = 0,01$



(b)  $T_c$ ;  $J_{AA}/J_{BB} = 0,50$



(c)  $T_{comp}$ ;  $J_{AA}/J_{BB} = 0,01$



(d)  $T_{comp}$ ;  $J_{AA}/J_{BB} = 0,50$

característica,  $p^*$ , para a qual as curvas de  $T_c$  e  $T_{comp}$  se encontram. Se  $p < p^*$ , para um determinado conjunto de valores de parâmetros, o fenômeno de compensação não ocorre.

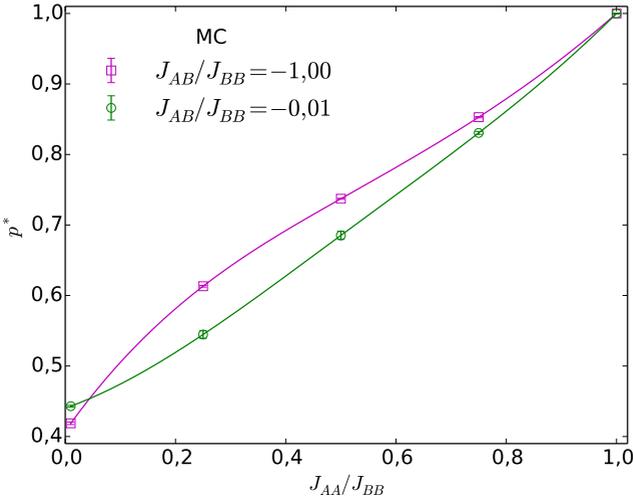
Podemos comparar a figura 5.11 para o sistema multicamadas (3D) com a figura 5.1 para a bicamada (2D), tendo em vista que ambas foram obtidas para os mesmos valores de parâmetros. O comportamento de Monte Carlo do sistema multicamadas é qualitativamente o mesmo que o da bicamada, tanto para Monte Carlo (5.1a) quanto para a aproximação de pares (5.1b). No entanto, como esperado, as temperaturas críticas do sistema 3D são consistentemente mais altas do que as obtidas para o sistema 2D. Encontramos apenas um trabalho aplicando aproximação de pares ao sistema multicamadas na literatura [21] e, infelizmente, este não contém um diagrama de temperaturas em função de  $p$  para que possamos comparar com os nossos resultados de MC.

Ainda assim, podemos comparar os valores de MC com as aproximações de campo médio e campo efetivo. Na figura 5.12, apresentamos as temperaturas críticas e de compensação obtidas através de CM, CE e MC para o mesmo sistema e conjunto de parâmetros da figura 5.11. Para as temperaturas de compensação, tanto na figura 5.12c ( $J_{AA}/J_{BB} = 0,01$ ) quanto na figura 5.12d ( $J_{AA}/J_{BB} = 0,5$ ), vemos que os valores de MC são menores do que os obtidos nas demais aproximações. Também vemos para as temperaturas críticas, tanto para  $J_{AA}/J_{BB} = 0,01$  (figura 5.12a) quanto para  $J_{AA}/J_{BB} = 0,5$  (figura 5.12b), que os valores de CM são maiores do que para CE e MC. No entanto, de forma similar ao que ocorreu para o sistema 2D no caso da comparação entre MC e AP, os valores de  $T_c$  de Monte Carlo só são maiores do que os de CE para concentrações acima de  $p \approx 0,6$ . Abaixo desta concentração, os resultados de CE ficam muito próximos e até menores do que os valores de MC. Assim como no caso da bicamada, não temos uma explicação para encontrarmos uma temperatura crítica mais baixa com uma aproximação de campo médio do que com MC, porém, assim como para o caso da bicamada, isto ocorre para valores de  $p$  muito próximos ao ponto de percolação da rede **B**.

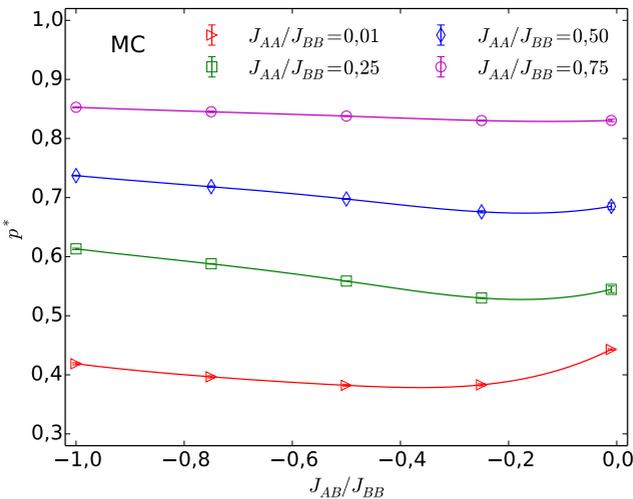
É importante ressaltar que, diferente do caso 2D, conforme  $p$  se aproxima de zero no sistema multicamadas, há um *crossover* entre o comportamento de um sistema em três dimensões e vários sistemas bi-dimensionais independentes. É possível então que, para  $p$  próximo ao ponto de percolação, o comportamento crítico do sistema já seja predominantemente bi-dimensional. É importante ressaltar também que os efeitos deste *crossover* devem se manifestar de forma diferente para cada aproximação. A aproximação de Monte Carlo, por exemplo, leva em consideração detalhes microscópicos que devem representar mais acuradamente a dimensionalidade do sistema do que as aproximações do tipo campo médio. Desconfiamos, portanto, que justamente essas diferenças entre as aproximações estejam relacionadas a esta aparente inconsistência de haver valores de  $T_c$  menores para CE do que para MC.

Em todas as aproximações, como podemos ver nas figuras 5.11 e 5.12, o valor de  $p^*$  é mais alto para  $J_{AA}/J_{BB} = 0,50$  do que para  $J_{AA}/J_{BB} = 0,01$ . Isto indica que  $p^*$  deve aumentar conforme a intensidade do acoplamento intra-planar no plano **A** aumenta. Isto é esperado, já que, para

**Figura 5.13:** Concentração característica,  $p^*$ , abaixo da qual não há compensação, em função da razão  $J_{AA}/J_{BB}$  para  $J_{AB}/J_{BB} = -0,01$  (círculos) e  $J_{AB}/J_{BB} = -1,00$  (quadrados). As linhas sólidas são interpolações com *slines* cúbicas para auxiliar na visualização. As barras de erro são menores do que os símbolos.



**Figura 5.14:** Concentração característica,  $p^*$ , abaixo da qual não há compensação, em função da razão  $J_{AB}/J_{BB}$  para vários valores de  $J_{AA}/J_{BB}$ . As linhas sólidas são interpolações com *slines* cúbicas para auxiliar na visualização. As barras de erro são menores do que os símbolos.



valores grandes de  $J_{AA}/J_{BB}$ , a magnetização dos planos **B** nunca será igual (em valor absoluto) à magnetização dos planos **A** para valores pequenos de  $p$ . Esta tendência é confirmada, tanto para um acoplamento inter-planar forte quanto para um fraco, na figura 5.13, na qual temos os gráficos de  $p^*$  em função da razão  $J_{AA}/J_{BB}$  para  $J_{AB}/J_{BB} = -0,01$  e  $J_{AB}/J_{BB} = -1,00$ . Em ambos os casos, vemos que  $p^*$  cresce monotonicamente conforme  $J_{AA}/J_{BB}$  aumenta.

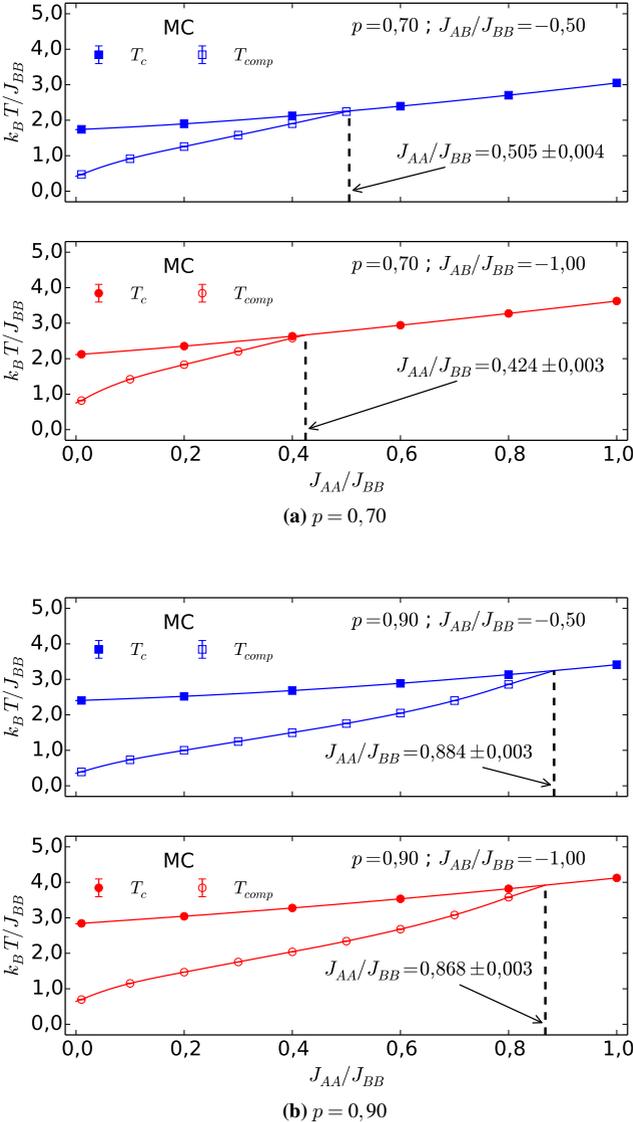
Na figura 5.14, apresentamos o comportamento de  $p^*$  em função da razão  $J_{AB}/J_{BB}$  para vários valores de  $J_{AA}/J_{BB}$ . Curiosamente, para o sistema multicamadas, o comportamento de  $p^*$  não é monotônico como é o caso da bicamada. A figura 5.4 mostra o mesmo diagrama  $p^* \times J_{AB}/J_{BB}$  para o sistema 2D para o caso particular de  $J_{AA}/J_{BB} = 0,50$  e, comparando esta figura com o resultado do sistema multicamadas, vemos que os valores de  $p^*$  para o sistema 3D são consistentemente menores do que para o sistema 2D. No entanto, esta diferença diminui conforme  $|J_{AB}/J_{BB}|$  diminui ( $p^*$  para o sistema multicamadas é  $\approx 8\%$  menor do que o valor para a bicamada para  $J_{AB}/J_{BB} = -1,00$  e  $\approx 3\%$  menor para  $J_{AB}/J_{BB} = -0,01$ ). Isto é consistente com o fato de que, para  $J_{AB}/J_{BB} \rightarrow 0$ , tanto o sistema multicamadas quanto a bicamada passam a se comportar como um conjunto de planos **A** e **B** não interagentes.

Também notamos que a dependência dos valores de  $p^*$  com  $J_{AB}/J_{BB}$  é mais fraca para o sistema 3D do que para o 2D. Para  $J_{AA}/J_{BB} = 0,50$ , por exemplo, a diferença percentual no valor de  $p^*$  quando  $|J_{AB}/J_{BB}|$  aumenta de 0,01 para 1,00 é  $\approx 13\%$  para a bicamada, ao passo que, para o sistema multicamadas esta diferença é de apenas  $\approx 7,6\%$ . Mesmo se considerarmos o maior aumento percentual (que para o sistema 2D continua sendo  $\approx 13\%$ ), temos, para o sistema 3D, no máximo um aumento de  $\approx 10\%$  entre  $J_{AB}/J_{BB} \approx -0,20$  e  $J_{AB}/J_{BB} = -1,00$ .

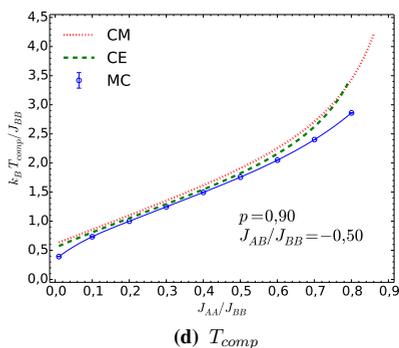
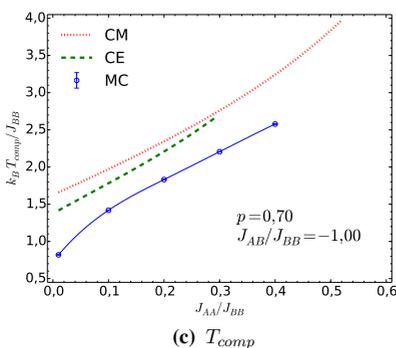
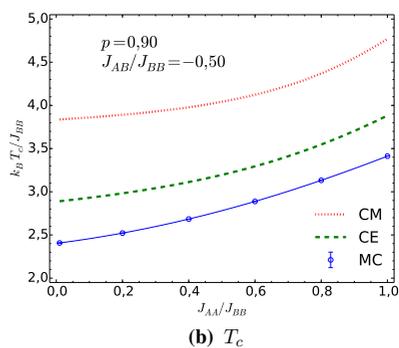
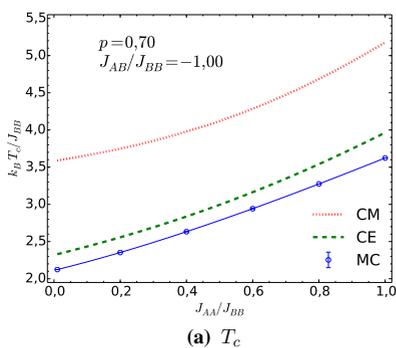
A seguir, para valores fixos de  $p$  e  $J_{AB}/J_{BB}$ , podemos analisar a influência da razão  $J_{AA}/J_{BB}$  no comportamento do sistema multicamadas. Na figura 5.15, apresentamos os gráficos de  $T_c$  e  $T_{comp}$  em função de  $J_{AA}/J_{BB}$  para  $J_{AB}/J_{BB} = -0,50$  e  $J_{AB}/J_{BB} = -1,00$ , em ambos os casos:  $p = 0,70$  (figura 5.15a) e  $p = 0,90$  (figura 5.15b). O comportamento apresentado nesta figura para o sistema 3D é, qualitativamente, o mesmo da bicamada, tanto para Monte Carlo (figura 5.5) quanto aproximação de pares (figura 5.6). Podemos também comparar os comportamentos dos sistemas 2D e 3D quantitativamente, já que estes diagramas apresentados neste trabalho foram obtidos para os mesmos valores dos parâmetros fixos para os dois tipos de sistema. Por exemplo, para  $(p; J_{AB}/J_{BB}) = (0,70; -1,00)$ , o valor de  $J_{AA}/J_{BB}$  para o qual  $T_c = T_{comp}$  é  $\approx 80\%$  maior para o sistema 3D, enquanto, para  $(p; J_{AB}/J_{BB}) = (0,90; -0,50)$ , esta diferença cai para apenas  $\approx 10\%$ . Ainda assim, em ambos os casos a região do diagrama para a qual o sistema apresenta um ponto de compensação é maior no caso do sistema multicamadas.

Também, em ambos os casos as temperaturas críticas obtidas em MC para o sistema 3D são consistentemente maiores do que para o sistema 2D, como é esperado. Para  $(p; J_{AB}/J_{BB}) = (0,70; -1,00)$ , a temperatura crítica do sistema 3D é quase o dobro do valor para o sistema 2D com  $J_{AA}/J_{BB} = 0,0$ . Com  $J_{AA}/J_{BB} = 1,0$  esta diferença é menor, mas o valor para o sistema 3D ainda

**Figura 5.15:** Temperatura crítica,  $T_c$  (símbolos cheios), e temperatura de compensação,  $T_{comp}$  (símbolos vazios), em função da razão  $J_{AA}/J_{BB}$  para  $J_{AB}/J_{BB} = -0,50$  e  $J_{AB}/J_{BB} = -1,00$  e ambos os casos: (a)  $p = 0,70$  e (b)  $p = 0,90$ . As linhas sólidas são interpolações com *splines* cúbicas ou extrapolações lineares para auxiliar na visualização. As linhas verticais tracejadas marcam o valor de  $J_{AA}/J_{BB}$  para o qual  $T_c = T_{comp}$  e acima do qual não há compensação. As barras de erro são menores do que os símbolos.



**Figura 5.16:** Comparação entre os resultados de campo médio (CM; vermelho; linha pontilhada), campo efetivo (CE; verde; linha tracejada), e Monte Carlo (MC; azul; círculos vazios) para  $T_c$  e  $T_{comp}$  em função da razão  $J_{AA}/J_{BB}$  para o sistema multicamadas. Em (a) e (b) temos os valores de  $T_c$  para  $(p; J_{AB}/J_{BB}) = (0,7; -1,0)$  e  $(0,9; -0,5)$ , respectivamente. Em (c) e (d) temos os valores de  $T_{comp}$  para  $(p; J_{AB}/J_{BB}) = (0,7; -1,0)$  e  $(0,9; -0,5)$ , respectivamente. Os resultados de MC em correspondem aos mesmos dados apresentados nas figuras 5.15a e 5.15b.



é 37% maior. Para  $(p; J_{AB}/J_{BB}) = (0, 90; -0, 50)$ , o valor de  $T_c$  do sistema 3D é 26% maior do que no sistema 2D com  $J_{AA}/J_{BB} = 0, 0$  e 25% mais alto com  $J_{AA}/J_{BB} = 1, 0$ .

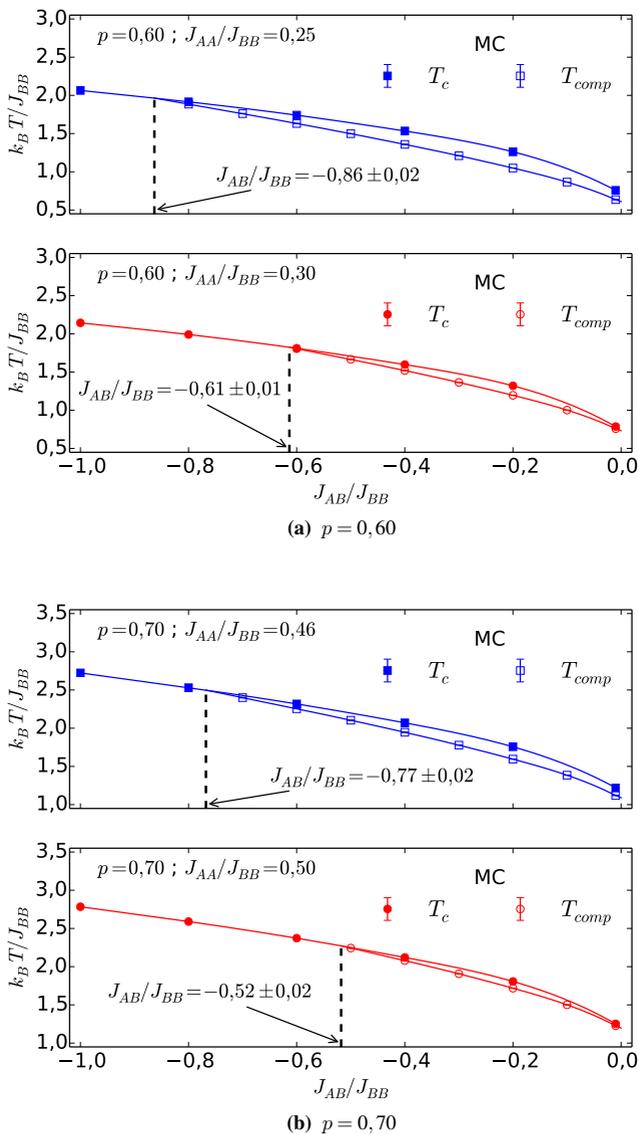
Note que a diferença entre as temperaturas críticas do sistemas multicamadas e bicamada é maior para acoplamentos inter-planares mais fortes, consistente com a existência do *crossover* entre os comportamentos 3D e 2D. No entanto, esta diferença não diminui conforme  $J_{AA}/J_{BB}$  fica menor, o que está de acordo com o fato de não haver *crossover* com  $J_{AA}/J_{BB} \rightarrow 0$ . Na realidade, é perfeitamente viável realizar simulações com  $J_{AA}/J_{BB} = 0$  e ainda obter o comportamento de um sistema multicamadas, contanto que  $p \neq 0$  e  $J_{AB}/J_{BB} \neq 0$ .

Podemos também contrastar os resultados de MC para o sistema 3D com o comportamento do sistema 2D na aproximação de pares apresentado na referência 20. Isto é feito comparando a figura 5.15a com a figura 5.6a, bem como o par de figuras 5.15b e 5.6b. Após a correção feita na escala de temperaturas das figuras obtidas através da AP, conforme discutido na seção 5.1.1, obtemos: para  $(p; J_{AB}/J_{BB}) = (0, 70; -1, 00)$ , uma temperatura crítica de MC para o sistema 3D  $\approx 90\%$  maior do que o valor de AP para o sistema 2D para  $J_{AA}/J_{BB} = 0, 0$  e 12% maior para  $J_{AA}/J_{BB} = 1, 0$ . Para  $(p; J_{AB}/J_{BB}) = (0, 90; -0, 50)$ , o valor de MC de  $T_c$  do sistema 3D é  $\approx 1, 3\%$  menor do que o valor de PA do sistema 2D para  $J_{AA}/J_{BB} = 0, 0$  e 4, 7% mais alto para  $J_{AA}/J_{BB} = 1, 0$ . Novamente vemos que a concordância é melhor para acoplamentos inter-planares mais fracos, o que faz sentido, tendo em vista que o sistema 3D está mais próximo de um comportamento 2D neste caso. Também vale mencionar que os resultados de PA para a bicamada são muito mais próximos dos valores de MC para o sistema multicamadas do que dos resultados de MC para a bicamada. Isto é consistente com o fato de que aproximações do tipo campo médio tendem a ser melhores para sistemas de dimensionalidade maior.

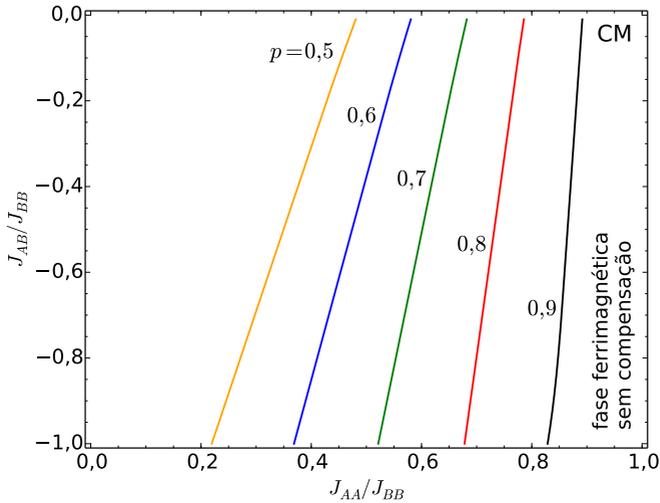
A referência 21 infelizmente também não contém um diagrama de temperaturas em função de  $J_{AA}/J_{BB}$  para que possamos comparar com os nossos resultados de MC. Ainda assim, podemos comparar os valores de MC com as aproximações do tipo campo médio e campo efetivo. Na figura 5.16, vemos que, assim como no caso da figura 5.7 para o sistema 2D e das figuras 5.12a (para  $p \gtrsim 0, 6$ ) e 5.12b para o sistema 3D, os valores de  $T_c$  obtidos através de simulações de Monte Carlo são mais baixos do que para as demais aproximações, seguidos pelos valores obtidos com CE e CM, em ordem crescente. O mesmo ocorre para as temperaturas de compensação, também dadas em ordem crescente pelas aproximações: MC, CE e CM.

Na figura 5.17, apresentamos os valores de  $T_c$  e  $T_{comp}$  em função de  $J_{AB}/J_{BB}$  para  $(p; J_{AA}/J_{BB}) = (0, 60; 0, 25)$ ,  $(0, 60; 0, 30)$  (5.17b) e  $(p; J_{AA}/J_{BB}) = (0, 70; 0, 46)$ ,  $(0, 70; 0, 50)$  (5.17b). As linhas tracejadas verticais marcam o valor de  $J_{AB}/J_{BB}$  abaixo do qual não há compensação em cada caso. Infelizmente, não é possível fazer uma comparação direta entre esta figura e os resultados de MC para a bicamada, tendo em vista que a figura análoga para o sistema 2D (figura 5.8) não foi feita para os mesmos valores de parâmetros. A razão pela qual não usamos os mesmos parâmetros para as duas figuras é que, para os valores usados na figura 5.8,  $((p; J_{AA}/J_{BB}) = (0, 7; 0, 3)$

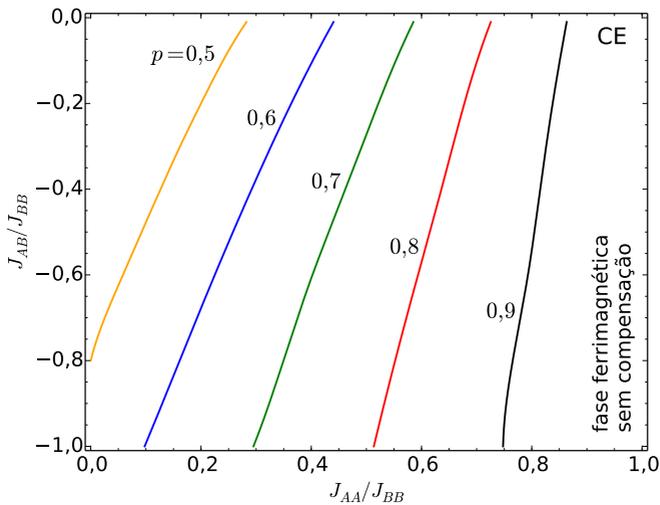
**Figura 5.17:** Temperatura crítica,  $T_c$  (símbolos cheios), e temperatura de compensação,  $T_{comp}$  (símbolos vazios), em função da razão  $J_{AB}/J_{BB}$ . Em (a) temos  $p = 0,60$  para ambos  $J_{AA}/J_{BB} = 0,25$  e  $J_{AA}/J_{BB} = 0,30$ . Em (b) temos  $p = 0,70$  para ambos  $J_{AA}/J_{BB} = 0,46$  e  $J_{AA}/J_{BB} = 0,50$ . As linhas sólidas são interpolações com *splines* cúbicas ou extrapolações lineares para auxiliar na visualização. As linhas verticais tracejadas marcam o valor de  $J_{AB}/J_{BB}$  para o qual  $T_c = T_{comp}$  e abaixo do qual não há compensação. As barras de erro são menores do que os símbolos.



**Figura 5.18:** Diagramas de fase  $J_{AB}/J_{BB} \times J_{AA}/J_{BB}$  do sistema multicamadas para  $p = 0,5; 0,6; 0,7; 0,8$  e  $0,9$ . Para cada concentração, a linha marca a separação entre uma fase ferrimagnética com compensação (à esquerda) e uma fase ferrimagnética sem compensação (à direita). Em (a) apresentamos os resultados de campo médio deste trabalho. Em (b) apresentamos os resultados de campo efetivo deste trabalho.

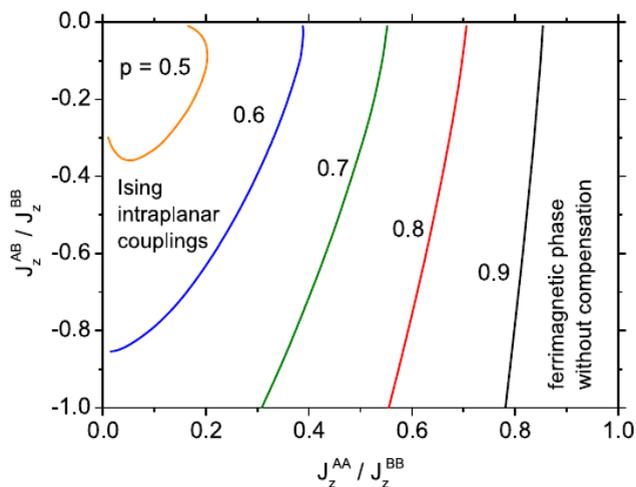


(a) Campo médio.

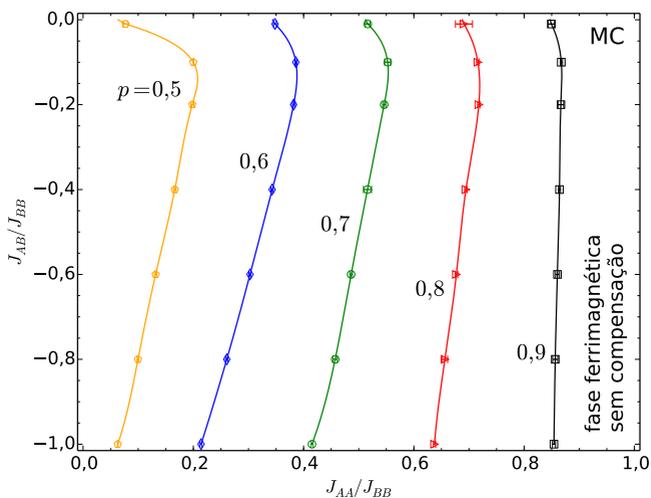


(b) Campo efetivo.

**Figura 5.19:** Diagramas de fase  $J_{AB}/J_{BB} \times J_{AA}/J_{BB}$  do sistema multicamadas para  $p = 0, 5; 0, 6; 0, 7; 0, 8$  e  $0, 9$ . Para cada concentração, a linha marca a separação entre uma fase ferrimagnética com compensação (à esquerda) e uma fase ferrimagnética sem compensação (à direita). Em (a) reproduzimos a figura 2 da referência [21] para fins de comparação com os nossos resultados. Em (b) apresentamos os resultados de Monte Carlo deste trabalho, sendo que os símbolos correspondem às simulações e as linhas cheias são interpolações feitas com *splines* cúbicas apenas para auxiliar na visualização.



(a) Aproximação de pares [21].



(b) Monte Carlo.

e  $(0,9;0,8)$ ), o sistema 3D sempre apresenta compensação para  $-1,0 \leq J_{AB}/J_{BB} < 0,0$ . Qualitativamente, no entanto, as curvas de  $T_c$  e  $T_{comp}$  para o sistema 3D não se afastam conforme  $J_{AB}/J_{BB} \rightarrow 0$ , como ocorre para a bicamada, tanto em MC (ver figura 5.8) quanto AP (ver figura 5.9). De fato, para um valor fixo de  $p$  e  $J_{AA}/J_{BB}$ , os valores de  $T_c$  e  $T_{comp}$  para o sistema 3D permanecem muito próximos um do outro. E, ao contrário do que ocorre no sistema 2D, a diferença  $T_c - T_{comp}$  não aumenta monotonicamente quando  $J_{AB}/J_{BB}$  aumenta, apresentando um máximo para algum valor de  $J_{AB}/J_{BB}$  entre o ponto onde as duas curvas se encontram e  $J_{AB}/J_{BB} = 0,0$ .

Finalmente, da mesma forma que foi feito para o sistema bicamada, podemos dividir o espaço de parâmetros do nosso hamiltoniano em duas regiões de interesse distintas. Uma é uma fase ferrimagnética para a qual não ocorre o fenômeno de compensação para qualquer temperatura e a outra é uma fase ferrimagnética para a qual existe um ponto de compensação em uma temperatura  $T_{comp}$ . Apresentamos este resultado de forma conveniente nas figuras 5.18 e 5.19, as quais contém diagramas  $J_{AB}/J_{BB} \times J_{AA}/J_{BB}$  para as concentrações  $p = 0,5; 0,6; 0,7; 0,8$  e  $0,9$ . Para cada concentração, a linha marca a separação entre a fase ferrimagnética com compensação (à esquerda da linha) e a fase ferrimagnética sem compensação (à direita da linha). As figuras 5.18a, 5.18b e 5.19b, correspondem aos nossos resultados de campo médio, campo efetivo e Monte Carlo, respectivamente. Já na figura 5.19a, reproduzimos os resultados de aproximação de pares correspondentes à figura 2 da referência 21.

Estes diagramas mostram que, em todas as aproximações, o fenômeno de compensação é favorecido para pequenas diluições. Isto fica claro já que, conforme  $p$  se aproxima da unidade (contanto que  $p \neq 1$ ), a área ocupada pela fase ferrimagnética com compensação aumenta bastante. Também é visível que este fenômeno só ocorre se houver assimetria dos acoplamentos intra-planares e, conforme  $p$  diminui, é necessário que esta assimetria aumente para que o fenômeno ainda ocorra. Além disso, notamos que, conforme  $p$  aumenta, a linha separando as fases fica cada vez mais vertical, ou seja, a presença ou ausência de compensação se torna menos sensível ao valor de  $J_{AB}/J_{BB}$ . Isto é especialmente perceptível no diagrama de MC para a linha de  $p = 0,9$ , que se parece mais com uma reta vertical do que nas demais aproximações.

Notamos que a área ocupada pela fase ferrimagnética com compensação (à esquerda da curva) é consistentemente maior para Monte Carlo do que para aproximação de pares. Esta área também é maior para campo médio do que para campo efetivo. Já a comparação entre CE e AP é um tanto delicada, tendo em vista que o próprio comportamento qualitativo das curvas é diferente nas duas aproximações. Nos diagramas para a aproximação de Monte Carlo, vemos que é possível cruzar cada curva com uma reta vertical em dois pontos. Portanto, há casos em que é possível o sistema estar na fase sem compensação, diminuir o valor de  $|J_{AB}/J_{BB}|$  para passar para a fase com compensação, mas se continuarmos diminuindo  $|J_{AB}/J_{BB}|$  o sistema retorna para a fase sem compensação. Este comportamento reentrante, apesar de mais pronunciado para valores pequenos de  $p$ , é visível em todos os casos apresentados na figura 5.19b para MC. Ele também está presente na AP (figura 5.19a), apesar

de visível apenas para  $p = 0,5$ , mas não ocorre nas aproximações de CM e CE. Em contraste, para o sistema bicamada, não verificamos a ocorrência deste efeito em nenhuma aproximação (ver figura 5.10). Outra diferença importante entre as quatro aproximações é que os resultados da AP indicam que não há compensação para  $p = 0,6$  e  $J_{AB}/J_{BB}$  abaixo de  $\approx -0,86$ , bem como para  $p = 0,5$  e  $J_{AB}/J_{BB}$  abaixo de  $\approx -0,36$ . Já os resultados de MC, CM e CE mostram que sempre há uma fase com compensação para  $-1,0 \leq J_{AB}/J_{BB} < 0,0$ , pelo menos para as concentrações consideradas nas figuras 5.18 e 5.19.

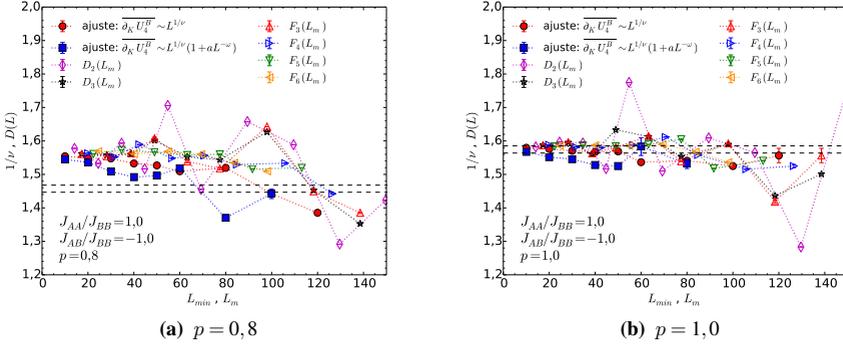
## 5.2 Comportamento crítico do sistema multicamadas

Nesta seção, apresentaremos nossas estimativas para os expoentes críticos do sistema multicamadas obtidos através de simulações de Monte Carlo para  $(J_{AA}/J_{BB}; J_{AB}/J_{BB}) = (1,0; -1,0)$  e para as concentrações  $p = 0,8$ ;  $p = 0,9$  e  $p = 1,0$ . Conforme discutido na introdução, a motivação para este estudo é avaliar a possibilidade da correlação presente no modelo mudar a classe de universalidade, em relação ao modelo de Ising tridimensional com desordem aleatória. Os resultados a seguir foram obtidos através dos métodos de análise de escala de tamanho finito, conforme discutido na seção 4.4. Ao final da seção, comparamos nossas estimativas com resultados encontrados na literatura para a classe de universalidade do modelo de Ising com e sem desordem.

Para determinar o expoente  $\nu$ , seguimos o mesmo procedimento apresentado e discutido na seção 4.4 para o expoente  $\gamma/\nu$ , apenas trocando as susceptibilidade pelas grandezas  $\partial_K \mathcal{G}$  ( $\mathcal{G} = \ln \langle |\mathcal{M}_\Lambda| \rangle$ ,  $\ln \langle \mathcal{M}_\Lambda^2 \rangle$  e  $U_4^\Lambda$ ,  $\Lambda = A, B$ ). A figura 5.20 mostra o comportamento das estimativas do expoente  $1/\nu$ , obtidas a partir de ajustes usando  $\mathcal{G} = U_4^B$  e as equações (4.38) e (4.39), em função do valor de  $L_{\min}$  usado para cada ajuste. A figura também apresenta o comportamento das diferentes estimativas da derivada  $D(L)$  no ponto  $L_m$  em função de  $L_m$ . Com estes valores de  $D(L)$ , realizamos ajustes com a equação (4.42) para obter estimativas de  $1/\nu$ . Neste caso, considerando todas as grandezas  $\mathcal{G}$  e as estimativas de  $D(L)$  exceto  $D_2(L_m)$ , conforme discutido na seção 4.4, nossos resultados finais para este expoente são: para  $p = 0,8$ :  $1/\nu = 1,457 \pm 0,011$  (linhas tracejadas na figura 5.20a), ou  $\nu = 0,6862 \pm 0,0050$ ; para  $p = 0,9$ :  $1/\nu = 1,4647 \pm 0,0092$ , ou  $\nu = 0,6827 \pm 0,0042$  e para  $p = 1,0$ :  $1/\nu = 1,575 \pm 0,011$  (linhas tracejadas na figura 5.20b), ou  $\nu = 0,6351 \pm 0,0043$ .

Nosso valor de  $\nu$  para  $p = 1,0$  está um pouco acima do valor  $\nu = 0,6289 \pm 0,0008$ , obtido através de simulações de Monte Carlo para o modelo de Ising em uma rede cúbica [60], bem como está acima do valor  $\nu = 0,6269 \pm 0,0020$ , obtido através de simulações de Monte Carlo para o modelo de Ising em uma rede cúbica de corpo centrado [73]. Também está levemente acima de  $\nu = 0,6298 \pm 0,0005$ , obtido através de simulações de Monte Carlo para outros modelos da classe de universalidade do modelo de Ising de spin 1/2 em três dimensões [79], como o modelo de Ising de spin 1 e o modelo  $\phi^4$  (Landau-Ginzburg), descrito pelo hamiltoniano  $\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \phi_i \phi_j + D \sum_i \phi_i^2 + \lambda \sum_i (\phi_i^2 - 1)^2$ , no qual  $\phi_i$  assume valores reais (no limite  $\lambda \rightarrow \infty$ , reobtemos o modelo de Ising [80]). Entretanto, dentro

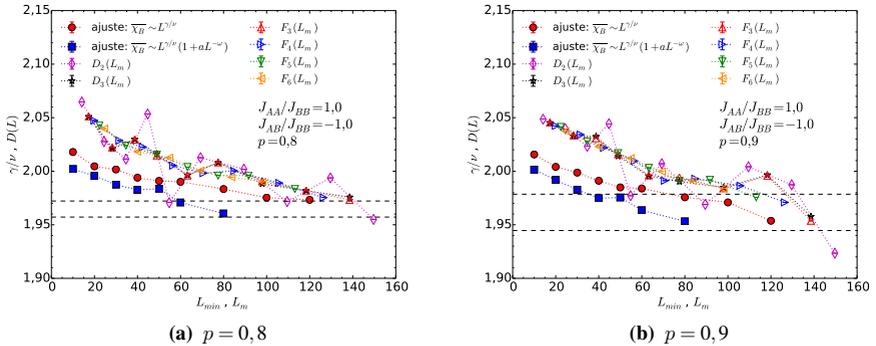
**Figura 5.20:** Comportamento das estimativas do expoente  $1/\nu$  em função de  $L_{\min}$  e das diferentes estimativas da derivada  $D(L)$  no ponto  $L = L_m$  em função de  $L_m$  obtidas a partir das derivadas  $\partial_K U_4^B$  para  $(J_{AA}/J_{BB}; J_{AB}/J_{BB}) = (1, 0; -1, 0)$  e para as concentrações  $p = 0, 8$  e  $p = 1, 0$ . As linhas pontilhadas apenas ligam os pontos para auxiliar na visualização. As linhas horizontais tracejadas marcam os valores mínimo e máximo de nossa estimativa final do expoente  $1/\nu$  para estes valores dos parâmetros do hamiltoniano.



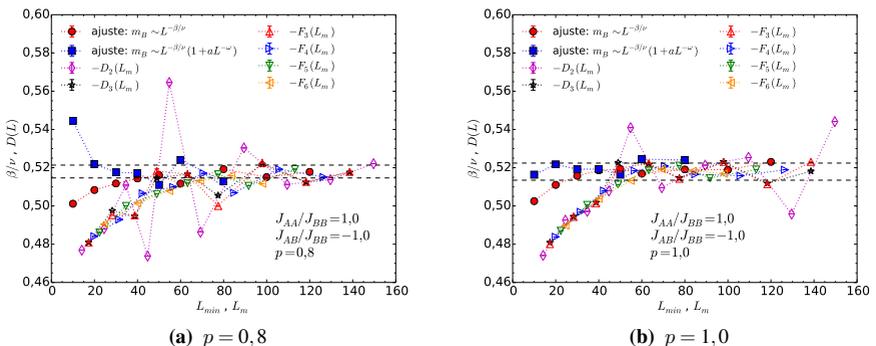
das barras de erro, este valor concorda com o resultado de teoria de campos por Guillou e Zinn-Justin (1980; 1987):  $\nu = 0, 6300 \pm 0, 0015$  e com o resultados de séries obtido por Butera e Comi (2000):  $\nu = 0, 6302 \pm 0, 0004$ . Já nossos resultados para os casos diluídos ( $p = 0, 8$  e  $p = 0, 9$ ), além de concordarem entre si, estão em excelente acordo com  $\nu = 0, 682 \pm 0, 003$  para o modelo de Ising desordenado com ligações  $\pm J$  [48]. Concordam também com  $\nu = 0, 6837 \pm 0, 0053$  [46],  $\nu = 0, 683 \pm 0, 003$  [47],  $\nu = 0, 683 \pm 0, 002$  [43] e  $\nu = 0, 6826 \pm 0, 0046$  [73], dos quais os dois primeiros valores foram encontrados para o modelo de Ising com diluição aleatória de sítios, o terceiro foi encontrado para ambos os modelos de Ising com diluição aleatória de sítios e ligações e o último foi encontrado para um modelo de Ising desordenado com interações ferromagnéticas e antiferromagnéticas, proposto para modelar uma liga binária de ferro e rutênio [81].

Utilizamos a mesma estratégia para determinar os demais expoentes. A figura 5.21 mostra o comportamento das estimativas para  $\gamma/\nu$  e  $D(L)$ , obtidas a partir dos máximos de  $\chi_B$ . Para o caso do expoente  $\beta/\nu$ , a figura 5.22 mostra o comportamento das estimativas para este expoente e para  $D(L)$ , obtidas a partir da magnetização  $m_B$  avaliada na temperatura para a qual a susceptibilidade  $\chi_B$  é máxima. Nossas estimativas finais para o expoente da susceptibilidade, obtidas através dos ajustes com a equação (4.42), são:  $\gamma/\nu = 1, 9647 \pm 0, 0075$  para  $p = 0, 8$ ;  $\gamma/\nu = 1, 962 \pm 0, 017$  para  $p = 0, 9$  e  $\gamma/\nu = 1, 9782 \pm 0, 0072$  para  $p = 1, 0$ . Podemos combinar esses valores com nossas estimativas de  $\nu$ , obtendo assim:  $\gamma = 1, 348 \pm 0, 015$  para  $p = 0, 8$ ;  $\gamma = 1, 339 \pm 0, 020$  para  $p = 0, 9$  e  $\gamma = 1, 256 \pm 0, 013$  para  $p = 1, 0$ . Da mesma forma, para o expoente da magnetização, obtemos:  $\beta/\nu = 0, 5180 \pm 0, 0034$  para  $p = 0, 8$ ;  $\beta/\nu = 0, 5185 \pm 0, 0021$  para  $p = 0, 9$  e  $\beta/\nu = 0, 5179 \pm 0, 0045$  para  $p = 1, 0$ . E, combinando estes valores com nossas estimativas de  $\nu$ , obtemos:  $\beta = 0, 3554 \pm 0, 0049$  para  $p = 0, 8$ ;

**Figura 5.21:** Comportamento das estimativas do expoente  $\gamma/\nu$  em função de  $L_{\min}$  e das diferentes estimativas da derivada  $D(L)$  no ponto  $L = L_m$  em função de  $L_m$  a partir das susceptibilidades  $\chi_B$  para  $(J_{AA}/J_{BB}; J_{AB}/J_{BB}) = (1,0; -1,0)$  e para as concentrações  $p = 0,8$  e  $p = 0,9$ . As linhas pontilhadas apenas ligam os pontos para auxiliar na visualização. As linhas horizontais tracejadas marcam os valores mínimo e máximo de nossa estimativa final do expoente  $\gamma/\nu$  para estes valores dos parâmetros do hamiltoniano.

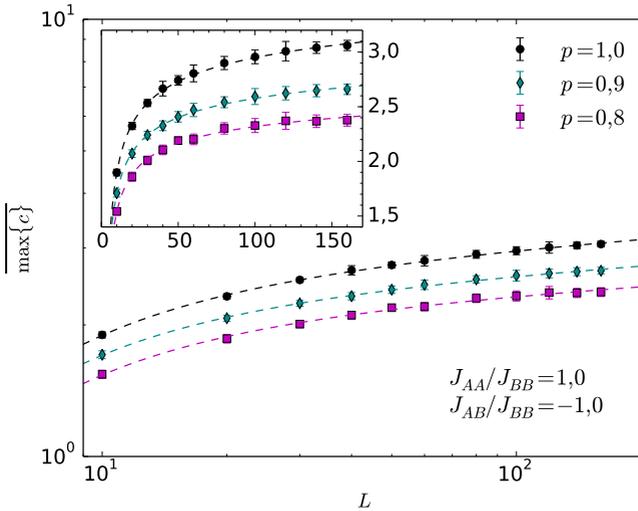


**Figura 5.22:** Comportamento das estimativas do expoente  $\beta/\nu$  em função de  $L_{\min}$  e das diferentes estimativas da derivada  $D(L)$  no ponto  $L = L_m$  em função de  $L_m$  obtidas a partir das magnetizações  $m_B$  para  $(J_{AA}/J_{BB}; J_{AB}/J_{BB}) = (1,0; -1,0)$  e para as concentrações  $p = 0,8$  e  $p = 1,0$ . As linhas pontilhadas apenas ligam os pontos para auxiliar na visualização. As linhas horizontais tracejadas marcam os valores mínimo e máximo de nossa estimativa final do expoente  $\beta/\nu$  para estes valores dos parâmetros do hamiltoniano.



$\beta = 0,3540 \pm 0,0036$  para  $p = 0,9$  e  $\beta = 0,3290 \pm 0,0051$  para  $p = 1,0$ . Estes valores de  $\beta$  e  $\gamma$ , tanto para o caso puro quanto para o diluído, concordam com resultados de outros trabalhos da literatura, apresentados no final deste capítulo na tabela 5.1.

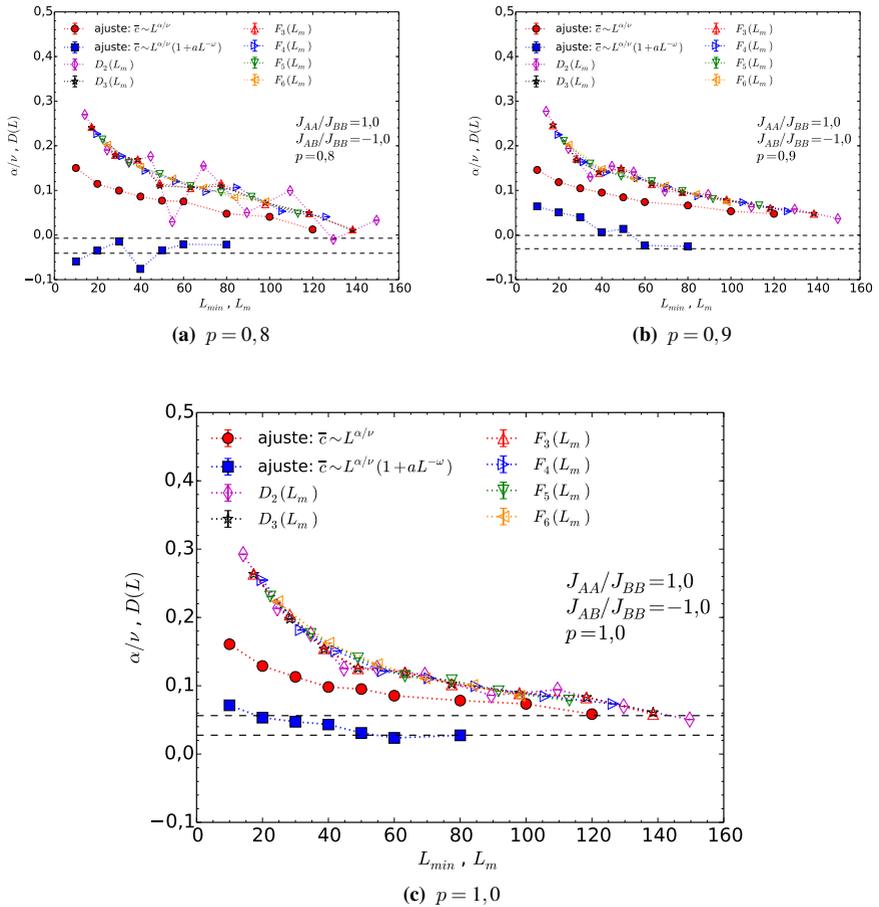
**Figura 5.23:** Gráfico em escala log-log dos máximos do calor específico em função do tamanho linear do sistema para  $J_{AA}/J_{BB} = 1,0$  e  $J_{AB}/J_{BB} = -1,0$ . Os símbolos são os resultados das simulações para  $p = 0,8$  (quadrados),  $p = 0,9$  (diamantes) e  $p = 1,0$  (círculos). As linhas tracejadas são ajustes feitos com a equação (4.39) para  $10 \leq L \leq 160$ . O destaque corresponde aos mesmos dados, porém em escala linear.



A análise de escala para obter o expoente  $\alpha$  foi um tanto mais delicada. Ao contrário do que observamos para as demais grandezas, no gráfico em escala log-log do calor específico em função de  $L$ , os dados não parecem seguir uma reta, como pode ser visto na figura 5.23. Esta curvatura mais acentuada indica que a influência dos campos irrelevantes no comportamento de escala do calor específico é maior. Além disso, é visível nos gráficos que o calor específico cresce lentamente com o tamanho do sistema. Isto é consistente com valores próximos de zero para o expoente  $\alpha$ , o que resulta em estimativas menos precisas para este expoente em relação aos outros.

A figura 5.24 mostra o comportamento das estimativas do expoente  $\alpha/\nu$ , obtidas a partir de ajustes com as equações (4.38) e (4.39) usando os dados dos máximos do calor específico. A figura também apresenta o comportamento das diferentes estimativas da derivada  $D(L)$  no ponto  $L_m$  em função de  $L_m$ . Com estes valores de  $D(L)$ , realizamos ajustes com a equação (4.42) para obter estimativas de  $\alpha/\nu$ . Neste caso, nossos resultados finais para este expoente, já considerando todas as diferentes estimativas de  $D(L)$ , são:  $\alpha/\nu = -0,024 \pm 0,017$  para  $p = 0,8$  (linhas tracejadas na figura 5.24a);  $\alpha/\nu = -0,016 \pm 0,015$  para  $p = 0,9$  (linhas tracejadas na figura 5.24a) e

**Figura 5.24:** Comportamento das estimativas do expoente  $\alpha/\nu$  em função de  $L_{\min}$  e das diferentes estimativas da derivada  $D(L)$  no ponto  $L = L_m$  em função de  $L_m$  obtidas a partir do calor específico para  $(J_{AA}/J_{BB}; J_{AB}/J_{BB}) = (1, 0; -1, 0)$  e para as concentrações  $p = 0, 8$ ;  $p = 0, 9$  e  $p = 1, 0$  (mesmos dados da figura 5.23). As linhas pontilhadas apenas ligam os pontos para auxiliar na visualização. As linhas horizontais tracejadas marcam os valores mínimo e máximo de nossa estimativa final do expoente  $\alpha/\nu$  para estes valores dos parâmetros do hamiltoniano.



$\alpha/\nu = 0,042 \pm 0,014$  para  $p = 1,0$  (linhas tracejadas na figura 5.24c). Combinando estes valores com nossas estimativas de  $\nu$ , obtemos:  $\alpha = -0,016 \pm 0,011$  para  $p = 0,8$ ;  $\alpha = -0,011 \pm 0,010$  para  $p = 0,9$  e  $\alpha = 0,0267 \pm 0,0093$  para  $p = 1,0$ . Estes valores certamente apresentam uma incerteza bastante grande (de 0,35% para  $p = 1,0$  a 91% para  $p = 0,9$ ). Além disso, nos três casos obtemos resultados diferentes e consistentemente mais próximos de zero do que os demais valores apresentados na literatura (ver tabela 5.1), tanto para o caso puro quanto para os casos diluídos. No entanto, é importante ressaltar que nossos valores de  $\alpha$  para os casos diluídos são consistentes entre si e negativos, além de serem bastante diferentes do valor obtido para o caso puro, que é positivo. Isto é um bom indício de que ambos os sistemas com  $p = 0,8$  e  $p = 0,9$  pertencem à mesma classe de universalidade, enquanto o sistema com  $p = 1,0$  pertence a uma classe diferente desta.

Podemos ainda obter estimativas de  $\alpha$  através das igualdades na tabela 2.2. A igualdade de Rushbrooke nos dá:  $\alpha = -0,059 \pm 0,025$  para  $p = 0,8$ ;  $\alpha = -0,047 \pm 0,027$  para  $p = 0,9$  e  $\alpha = 0,086 \pm 0,023$  para  $p = 1,0$ . Já a desigualdade de Josephson nos dá:  $\alpha = -0,058 \pm 0,015$  para  $p = 0,8$ ;  $\alpha = -0,048 \pm 0,013$  para  $p = 0,9$  e  $\alpha = 0,095 \pm 0,013$  para  $p = 1,0$ . No caso puro, o resultado dado por ambas as desigualdades concorda com os valores da literatura para a classe de universalidade do modelo de Ising puro em três dimensões. Ademais, em ambos os casos diluídos, estas desigualdades nos dão estimativas de  $\alpha$  que concordam com os valores reportados na literatura para a classe de universalidade do modelo de Ising desordenado em três dimensões (ver tabela 5.1).

**Tabela 5.1:** Comparação entre estimativas dos expoentes  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  e  $\nu$  obtidas neste e em outros trabalhos. As linhas que começam com  $p = 0, 8$ ;  $p = 0, 9$  ou  $p = 1, 0$  correspondem às estimativas finais deste trabalho para  $(J_{AA}/J_{BB}; J_{AB}/J_{BB}) = (1, 0; -1, 0)$ . A tabela também contém resultados de Monte Carlo [60, 82], expansão em série para altas temperaturas [83] e de teoria quântica de campos [84, 85] para a classe de universalidade do modelo de Ising puro em três dimensões, bem como resultados de Monte Carlo para o modelo de Ising com diluição de sítios [46], para o modelo de Ising com diluição de ligações [43, 47] e para o modelo de Ising desordenado com ligações  $\pm J$  [48]. A referência 73 apresenta resultados de Monte Carlo tanto para o modelo de Ising 3D puro quanto para um modelo de Ising 3D desordenado com interações ferromagnéticas e antiferromagnéticas. A referência 45 também apresenta resultados experimentais para ambos sistemas puros e desordenados. As linhas nas quais temos  $2 - \alpha - 3\nu \equiv 0$  correspondem aos casos para os quais o expoente  $\alpha$  foi obtido a partir da igualdade de Josephson. Já as linhas que contém  $\alpha + 2\beta + \gamma \equiv 2$  correspondem aos casos para os quais apenas dois expoentes foram obtidos de forma independente e os demais são determinados a partir das igualdades de Josephson e Rushbrook (ver tabela 2.2 na seção 2.2).

Puro						
	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	$\nu$	$\alpha + 2\beta + \gamma$	$2 - \alpha - 3\nu$
$p = 1, 0$	0,0267(93)	0,3290(51)	1,256(13)	0,6351(43)	1,941(33)	0,068(22)
[60]	0,1133(24)	0,3258(44)	1,2390(71)	0,6289(8)	2,020(21)	$\equiv 0$
[73]	0,1093(47)	0,3316(86)	1,2448(70)	0,6269(20)	2,017(29)	0,010(11)
[82]	0,1099(7)	0,32648(18)	1,2371(4)	0,63002(23)	$\equiv 2$	$\equiv 0$
[83]	0,1094(45)	0,3266(10)	1,2375(6)	0,6302(4)	$\equiv 2$	$\equiv 0$
[84, 85]	0,1100(45)	0,3270(15)	1,2390(25)	0,6300(15)	2,003(10)	$\equiv 0$
[45]	0,110(5)	0,325(5)	1,25(2)	0,64(1)	2,01(4)	-0,03(4)
Diluído						
	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	$\nu$	$\alpha + 2\beta + \gamma$	$2 - \alpha - 3\nu$
$p = 0, 8$	-0,016(11)	0,3554(49)	1,348(15)	0,6862(50)	2,043(36)	-0,042(26)
$p = 0, 9$	-0,011(10)	0,3540(36)	1,339(20)	0,6827(42)	2,036(37)	-0,037(23)
[46]	-0,051(16)	0,3546(28)	1,342(10)	0,6837(53)	1,994(32)	0,006(32)
[73]	-0,049(15)	0,359(16)	1,330(18)	0,6826(46)	1,999(65)	$\equiv 0$
[47]	-0,049(9)	0,3535(17)	1,342(6)	0,683(3)	$\equiv 2$	$\equiv 0$
[43]	-0,049(6)	0,354(1)	1,341(4)	0,683(2)	$\equiv 2$	$\equiv 0$
[48]	-0,046(6)	0,329(2)	1,339(7)	0,682(2)	1,951(17)	$\equiv 0$
[45]	-0,10(2)	0,350(9)	1,31(3)	0,69(1)	1,91(7)	0,03(5)



## CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS

Neste trabalho, estudamos um modelo de Ising ferrimagnético composto por dois tipos distintos de camadas, **A** e **B**, dispostas alternadamente. Os acoplamentos intraplanares são ferromagnéticos enquanto os acoplamentos inter-planares são antiferromagnéticos. Apenas as camadas do tipo **B** são diluídas, com sítios escolhidos aleatoriamente para serem magnéticos ou não magnéticos com probabilidades  $p$  ou  $(1 - p)$ , respectivamente. Nosso objetivo principal foi obter as condições para a presença ou ausência de temperaturas de compensação,  $T_{comp}$ . Nessas temperaturas, as magnetizações das duas camadas se cancelam abaixo da temperatura crítica,  $T_c$ .

Estudos anteriores sobre o mesmo modelo usaram uma aproximação de pares, que pode não representar corretamente modelos bidimensionais ou pode falhar na previsão de valores precisos para algumas quantidades físicas. Além disso, uma avaliação precisa das regiões onde o efeito de compensação ocorre é uma informação valiosa para a Física experimental. Com isso em mente, nós empregamos simulações de Monte Carlo, usando os algoritmos de Metropolis e Wolff, acompanhados do método de repesagem dos múltiplos histogramas e do método de análise de escala de tamanho finito. Aplicadas a redes de diferentes tamanhos lineares,  $L$ , estas abordagens permitem uma avaliação muito precisa tanto de  $T_{comp}$  quanto de  $T_c$ .

Inicialmente, nós fornecemos argumentos gerais para apoiar a necessidade tanto de diluição quanto de uma interação intracamada mais forte na camada diluída (quando comparado com a interação dentro da outra camada), a fim de que o efeito de compensação seja possível. Nós, então, estudamos os efeitos de outros parâmetros usando duas categorias de diagramas de fase: (i) a dependência de  $T_c$  e  $T_{comp}$  com os parâmetros do hamiltoniano (ou seja,  $p$ ,  $J_{AA}$  e  $J_{AB}$ ) e (ii) a dependência de  $p^*$  (valor de  $p$  abaixo do qual não há efeito de compensação) com  $J_{AA}$  e  $J_{AB}$ . No caso (ii), mostramos que a região com compensação diminui tanto com o aumento de  $J_{AA}$  quanto de  $|J_{AB}|$ , enquanto no caso (i) pode-se ver que ambas  $T_c$  e  $T_{comp}$  crescem com  $J_{AA}$  ou  $|J_{AB}|$ , de tal forma que, eventualmente,  $T_{comp} = T_c$  e, para valores maiores de  $J_{AA}$  e  $|J_{AB}|$ , o efeito de compensação deixa de ocorrer.

Um resumo dos resultados é então apresentado de uma maneira conveniente em diagramas  $J_{AB} \times J_{AA}$ , que confirmam que o efeito de compensação é favorecido por interações inter-planares mais fracas e por uma assimetria mais pronunciada entre as integrais de troca intraplanares dos planos com e sem diluição. Além das simulações de Monte Carlo, também realizamos cálculos de campo médio e campo efetivo e comparamos nossos resultados com cálculos de aproximação de pares realizados para ambos os sistemas bicamada [20] e multicamadas [21]. Vale a pena ressaltar que esses diagramas mostram comportamentos consideravelmente diferentes para cada aproximação.

Finalmente, estudamos o comportamento crítico do sistema multicamadas através do método de análise de escala de tamanho finito. Nossas estimativas para os expoentes críticos para  $p = 1,0$  são consistentes com a classe de universalidade do modelo de Ising tridimensional. Já para  $p \neq 1$ , nossos

resultados são consistentes com a classe de universalidade do modelo de Ising tridimensional com diluição aleatória de sítios ou ligações. Este resultado indica que a correlação presente no modelo não é relevante, no sentido do grupo de renormalização.

Como perspectivas futuras para este trabalho, devemos estender a análise ao estudo de  $T_{comp}$  e obtenção de diagramas de fases do sistema multicamadas incorporando simetria contínua ao modelo (*spins* de Heisenberg); obter estimativas para os expoentes críticos para o sistema em 3D para mais parâmetros do hamiltoniano e obter estimativas para os expoentes críticos para o sistema bicamada. Também, a fim de discutir o efeito de uma correlação mais forte, queremos estudar o modelo multicamadas com diluição em planos alternados de modo que todos os planos diluídos tenham a mesma configuração.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] CONNELL, G.; ALLEN, R.; MANSURIPUR, M. Magneto-optical properties of amorphous terbium–iron alloys. *Journal of Applied Physics*, AIP, v. 53, n. 11, p. 7759–7761, 1982.
- [2] GRÜNBERG, P. et al. Layered magnetic structures: Evidence for antiferromagnetic coupling of Fe layers across Cr interlayers. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 57, p. 2442–2445, Nov 1986. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.57.2442>>.
- [3] CAMLEY, R. E.; BARNAŚ, J. Theory of giant magnetoresistance effects in magnetic layered structures with antiferromagnetic coupling. *Physical Review Letters*, APS, v. 63, n. 6, p. 664, 1989.
- [4] PHAN, M.-H.; YU, S.-C. Review of the magnetocaloric effect in manganite materials. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Elsevier, v. 308, n. 2, p. 325–340, 2007.
- [5] NÉEL, M. L. Propriétés magnétiques des ferrites; ferrimagnétisme et antiferromagnétisme. In: *Annales de Physique*. [S.l.: s.n.], 1948. v. 12, p. 137–198.
- [6] SYOZI, I.; NAKANO, H. Statistical models of ferrimagnetism. *Progress of Theoretical Physics*, Oxford University Press, v. 13, n. 1, p. 69–78, 1955.
- [7] HATTORI, M. Ising spin models of complex ferrimagnetism. *Progress of Theoretical Physics*, Oxford University Press, v. 35, n. 4, p. 600–614, 1966.
- [8] CULLITY, B. D.; GRAHAM, C. D. *Introduction to magnetic materials*. 2. ed. New Jersey, USA: John Wiley & Sons, 2008.
- [9] SHIEH, H.-P. D.; KRYDER, M. H. Magneto-optic recording materials with direct overwrite capability. *Applied physics letters*, AIP, v. 49, n. 8, p. 473–474, 1986.
- [10] OSTORERO, J. et al. Dy<sub>3</sub>Fe<sub>5</sub>O<sub>12</sub> garnet thin films grown from sputtering of metallic targets. *Journal of Applied Physics*, AIP, v. 75, n. 10, p. 6103–6105, 1994.
- [11] GODOY, M.; FIGUEIREDO, W. Mixed-spin Ising model with one-and two-spin competing dynamics. *Physical Review E*, APS, v. 61, n. 1, p. 218, 2000.
- [12] DAKHAMA, A.; BENAYAD, N. On the existence of compensation temperature in 2d mixed-spin Ising ferrimagnets: an exactly solvable model. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Elsevier, v. 213, n. 1, p. 117–125, 2000.
- [13] NAKAMURA, Y. Existence of a compensation temperature of a mixed spin-2 and spin-5/2 Ising ferrimagnetic system on a layered honeycomb lattice. *Physical Review B*, APS, v. 62, n. 17, p. 11742, 2000.
- [14] ABUBRIG, O. et al. 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*, Elsevier, v. 296, n. 3, p. 437–450, 2001.
- [15] BOECHAT, B. et al. Ferrimagnetism in two-dimensional mixed-spin Ising model. *Modern Physics Letters B*, World Scientific, v. 14, n. 20, p. 749–758, 2000.
- [16] BOECHAT, B. et al. Renormalization-group magnetization of a ferrimagnetic Ising system. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 304, n. 3, p. 429–442, 2002.

- [17] GODOY, M.; LEITE, V. S.; FIGUEIREDO, W. Mixed-spin Ising model and compensation temperature. *Physical Review B*, APS, v. 69, n. 5, p. 054428, 2004.
- [18] EKIZ, C.; ERDEM, R. Effect of crystal-field potential on compensation temperature of a mixed spin-1/2 and spin-1 Ising ferrimagnetic system. *Physics Letters A*, Elsevier, v. 352, n. 4, p. 291–295, 2006.
- [19] EKIZ, C. The possibility of two compensation points in a ferrimagnetic mixed spin-1 and spin-3/2 Ising system using Bethe lattice approach. *Journal of magnetism and magnetic materials*, Elsevier, v. 307, n. 1, p. 139–147, 2006.
- [20] BALCERZAK, T.; SZAŁOWSKI, K. Ferrimagnetism in the Heisenberg–Ising bilayer with magnetically non-equivalent planes. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 395, p. 183–192, 2014.
- [21] SZAŁOWSKI, K.; BALCERZAK, T. Normal and inverse magnetocaloric effect in magnetic multilayers with antiferromagnetic interlayer coupling. *Journal of Physics: Condensed Matter*, IOP Publishing, v. 26, n. 38, p. 386003, 2014.
- [22] STIER, M.; NOLTING, W. Carrier-mediated interlayer exchange, ground-state phase diagrams, and transition temperatures of magnetic thin films. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 84, p. 094417, Sep 2011. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.84-094417>>.
- [23] SMITS, C. et al. Antiferromagnetic interlayer exchange coupling in all-semiconducting EuS/PbS/EuS trilayers. *Physical Review B*, APS, v. 69, n. 22, p. 224410, 2004.
- [24] LEINER, J. et al. Observation of antiferromagnetic interlayer exchange coupling in a  $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}/\text{GaAs}$ :  $\text{Be}/\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$  trilayer structure. *Physical Review B*, APS, v. 82, n. 19, p. 195205, 2010.
- [25] KEPA, H. et al. Antiferromagnetic interlayer coupling in ferromagnetic semiconductor EuS/PbS(001) superlattices. *EPL (Europhysics Letters)*, v. 56, n. 1, p. 54, 2001. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0295-5075/56/i=1/a=054>>.
- [26] CHERN, G. et al. Antiparallel state, compensation point, and magnetic phase diagram of  $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{Mn}_3\text{O}_4$  superlattices. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 63, p. 094421, Feb 2001. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.63.094421>>.
- [27] SANKOWSKI, P.; KACMAN, P. Interlayer exchange coupling in (Ga,Mn)As-based superlattices. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 71, p. 201303, May 2005. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.71.201303>>.
- [28] CHUNG, J.-H. et al. Investigation of weak interlayer exchange coupling in GaMnAs/GaAs superlattices with insulating nonmagnetic spacers. *Journal of Applied Physics*, AIP Publishing, v. 110, n. 1, p. 013912, 2011.
- [29] SAMBURSKAYA, T. et al. Magnetization Studies of Antiferromagnetic Interlayer Coupling in EuS SrS Semiconductor Multilayers. *Acta Physica Polonica A*, Institute of Physics, Polish Academy of Science, v. 124, n. 1, p. 133–136, 2013.
- [30] BAXTER, R. *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*. London, UK: Academic press London, 1982.

- [31] LIPOWSKI, A.; SUZUKI, M. The layered Ising model – mean-field and interfacial approximations. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 198, n. 1, p. 227–244, 1993.
- [32] LIPOWSKI, A. Critical temperature in the two-layered Ising model. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 250, n. 1, p. 373–383, 1998.
- [33] HANSEN, P. L. et al. Two coupled Ising planes: Phase diagram and interplanar force. *Journal of Statistical Physics*, Springer, v. 73, n. 3-4, p. 723–749, 1993.
- [34] LI, Z. et al. Critical exponents of the two-layer Ising model. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, IOP Publishing, v. 34, n. 31, p. 6069, 2001.
- [35] MIRZA, B.; MARDANI, T. Phenomenological renormalization group approach to the anisotropic two-layer Ising model. *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems*, Springer, v. 34, n. 3, p. 321–324, 2003.
- [36] SZAŁOWSKI, K.; BALCERZAK, T. Critical temperature studies of the anisotropic bilayer and multilayer Heisenberg ferromagnets in pair approximation. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 391, n. 6, p. 2197–2208, 2012.
- [37] SZAŁOWSKI, K.; BALCERZAK, T. The influence of interplanar coupling on the entropy and specific heat of the bilayer ferromagnet. *Thin Solid Films*, Elsevier, v. 534, p. 546–552, 2013.
- [38] METROPOLIS, N. et al. Equation of state calculations by fast computing machines. *J. Chem. Phys.*, v. 21, n. 6, p. 1087, 1953.
- [39] WOLFF, U. Collective Monte Carlo updating for spin systems. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 62, p. 361–364, Jan 1989. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.62.361>>.
- [40] FERRENBERG, A. M.; SWENDSEN, R. H. New Monte Carlo technique for studying phase transitions. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 61, p. 2635–2638, Dec 1988. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.61.2635>>.
- [41] FERRENBERG, A. M.; SWENDSEN, R. H. Optimized Monte Carlo data analysis. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 63, p. 1195–1198, Sep 1989. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.63.1195>>.
- [42] CARDY, J. *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 1996.
- [43] HASENBUSCH, M. et al. The universality class of 3D site-diluted and bond-diluted Ising systems. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, Institute of Physics Publishing, v. 2007, p. P02016, 2007.
- [44] NEWMAN, M. E. J.; BARKEMA, G. T. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. New York, USA: Oxford University Press, 1999.
- [45] BELANGER, D. Experimental characterization of the Ising model in disordered antiferromagnets. *Brazilian Journal of Physics*, SciELO Brasil, v. 30, p. 682–692, 2000.
- [46] BALLESTEROS, H. G. et al. Critical exponents of the three-dimensional diluted Ising model. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 58, n. 5, p. 2740–2747, Aug 1998.

- [47] CALABRESE, P. et al. Three-dimensional randomly dilute Ising model: Monte Carlo results. *Physical Review E*, APS, v. 68, n. 3, p. 36136, 2003.
- [48] HASENBUSCH, M. et al. Critical behavior of the three-dimensional  $\pm J$  Ising model at the paramagnetic-ferromagnetic transition line. *Physical Review B*, APS, v. 76, n. 9, p. 94402, 2007.
- [49] BRANCO, N.; QUEIROZ, S. de; SANTOS, R. R. D. Heisenberg and Ising spins in three dimensions with site-bond-correlated dilution. *Physical Review B*, APS, v. 42, n. 1, p. 458, 1990.
- [50] WEINRIB, A. Long-range correlated percolation. *Physical Review B*, APS, v. 29, n. 1, p. 387, 1984.
- [51] ISING, E. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, Springer, v. 31, n. 1, p. 253–258, 1925.
- [52] BRUSH, S. G. History of the Lenz-Ising model. *Reviews of modern physics*, APS, v. 39, n. 4, p. 883, 1967.
- [53] NISS, M. History of the Lenz-Ising model 1920–1950: from ferromagnetic to cooperative phenomena. *Archive for history of exact sciences*, Springer, v. 59, n. 3, p. 267–318, 2005.
- [54] NISS, M. History of the Lenz-Ising model 1950–1965: from irrelevance to relevance. *Archive for history of exact sciences*, Springer, v. 63, n. 3, p. 243–287, 2009.
- [55] NISS, M. History of the Lenz-Ising model 1965–1971: the role of a simple model in understanding critical phenomena. *Archive for history of exact sciences*, Springer, v. 65, n. 6, p. 625–658, 2011.
- [56] CALLEN, H. B. *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*. New York, USA: John Wiley & Sons, 1985.
- [57] HUANG, K. *Statistical Mechanics*. New York, USA: John Wiley & Sons, 1987.
- [58] YEOMANS, J. *Statistical Mechanics of Phase Transitions*. New York, USA: Clarendon Press, 1992.
- [59] BINDER, K. Finite size scaling analysis of Ising model block distribution functions. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, Springer, v. 43, n. 2, p. 119–140, 1981.
- [60] FERRENBURG, A. M.; LANDAU, D. P. Critical behavior of the three-dimensional Ising model: A high-resolution Monte Carlo study. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 44, n. 10, p. 5081–5091, Sep 1991.
- [61] CALLEN, H. A note on Green functions and the Ising model. *Physics Letters*, North-Holland, v. 4, n. 3, p. 161, 1963.
- [62] PRESS, W. et al. *Numerical recipes*. New York, USA: Cambridge University Press, 1986.
- [63] HONMURA, R.; KANEYOSHI, T. Contribution to the new type of effective-field theory of the Ising model. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, IOP Publishing, v. 12, n. 19, p. 3979, 1979.
- [64] AGUIAR, J. A. O. de; MOREIRA, F. B.; ENGELSBURG, M. Site-bond correlated model for disordered magnets: Mean-field theory. *Physical Review B*, APS, v. 33, n. 1, p. 652, 1986.

- [65] STANLEY, H. Scaling, universality, and renormalization: Three pillars of modern critical phenomena. *Reviews of modern physics*, American Physical Society, v. 71, n. 2, p. 358–366, 1999.
- [66] TOMÉ, T.; OLIVEIRA, M. de. *Dinâmica estocástica e irreversibilidade*. São Paulo, Brasil: Edusp, 2001.
- [67] SWENDSEN, R. H.; WANG, J.-S. Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations. *Physical review letters*, APS, v. 58, n. 2, p. 86, 1987.
- [68] MATSUMOTO, M.; NISHIMURA, T. Mersenne twister: a 623-dimensionally equidistributed uniform pseudo-random number generator. *ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation (TOMACS)*, ACM, v. 8, n. 1, p. 3–30, 1998.
- [69] LANDAU, D. P. Computer simulation studies of critical phenomena. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 205, p. 41–64, abr. 1994.
- [70] SCHERER, C. *Métodos computacionais da Física*. [S.l.]: Editora Livraria da Física, 2005.
- [71] VALLEAU, J.; CARD, D. Monte Carlo estimation of the free energy by multistage sampling. *The Journal of Chemical Physics*, AIP, v. 57, p. 5457, 1972.
- [72] BROYDEN, C. G. The convergence of a class of double-rank minimization algorithms 1. general considerations. *IMA Journal of Applied Mathematics*, IMA, v. 6, n. 1, p. 76–90, 1970.
- [73] DIAZ, I. J. L.; BRANCO, N. S. Magnetic properties and critical behavior of disordered  $\text{Fe}_{1-x}\text{Ru}_x$  alloys: A Monte Carlo approach. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 85, p. 021142, Feb 2012. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.85.021142>>.
- [74] BRENT, R. P. Some efficient algorithms for solving systems of nonlinear equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, SIAM, v. 10, n. 2, p. 327–344, 1973.
- [75] DIAZ, I. J. L.; BRANCO, N. S. Monte Carlo simulations of an Ising bilayer with non-equivalent planes. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 468, p. 158–170, 2017. ISSN 0378-4371. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437116307427>>.
- [76] DIAZ, I. J. L.; BRANCO, N. S. Monte Carlo study of an anisotropic Ising multilayer with antiferromagnetic interlayer couplings. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 490, p. 904–917, 2018. ISSN 0378-4371. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S037843711730897X>>.
- [77] GEBELE, T. Site percolation threshold for square lattice. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 17, n. 2, p. L51, 1984. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0305-4470/17-i=2/a=005>>.
- [78] MALARZ, K.; GALAM, S. Square-lattice site percolation at increasing ranges of neighbor bonds. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 71, p. 016125, Jan 2005. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.71.016125>>.
- [79] HASENBUSCH, M.; PINN, K.; VINTI, S. Critical exponents of the three-dimensional Ising universality class from finite-size scaling with standard and improved actions. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 59, n. 17, p. 11471–11483, May 1999.

- [80] HASENBUSCH, M. A Monte Carlo study of leading order scaling corrections of  $\varphi^4$  theory on a three-dimensional lattice. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 32, p. 4851–4865, 1999.
- [81] PADUANI, C.; BRANCO, N. S. Theoretical study of the intrinsic magnetic properties of disordered  $Fe_{1-x}Ru_x$  alloys: a mean-field approach. *Journal of Physics Condensed Matter*, v. 20, n. 21, p. 215201–+, maio 2008.
- [82] CAMPOSTRINI, M. et al. Improved high-temperature expansion and critical equation of state of three-dimensional Ising-like systems. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 60, n. 4, p. 3526–3563, Oct 1999.
- [83] BUTERA, P.; COMI, M. Extension to order  $\beta^{23}$  of the high-temperature expansions for the spin- $\frac{1}{2}$  Ising model on simple cubic and body-centered cubic lattices. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 62, n. 22, p. 14837–14843, Dec 2000.
- [84] Le Guillou, J. C.; ZINN-JUSTIN, J. Critical exponents from field theory. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 21, n. 9, p. 3976–3998, May 1980.
- [85] Le Guillou, J. C.; ZINN-JUSTIN, J. Accurate critical exponents for Ising like systems in non-integer dimensions. *Journal de physique(Paris)*, Société française de physique, v. 48, n. 1, p. 19–24, 1987.