

Josué Lima Lopes

**Simulações de teorias de campo para sistemas
magnéticos**

Universidade Federal de Santa Catarina

Orientador: Lucas Nicolao

Florianópolis, SC-Brasil
2017

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

Lopes, Josué
Simulações de teorias de campo para sistemas magnéticos
/ Josué Lopes ; orientador, Lucas Nicolao, 2017.
73 p.

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

Inclui referências.

1. Física. 2. Teorias de campo médio, sistemas
magnéticos, simulações de Lan-gevin, transições de fase..
I. Nicolao, Lucas. II. Universidade Federal de Santa
Catarina. Programa de Pós-Graduação em Física. III. Título.

AGRADECIMENTOS

A minha família por me apoiar nessa carreira científica.

Ao prof. Lucas Nicolao, pela paciência e por compartilhar comigo parte valiosa de seu conhecimento, sem o qual este trabalho não teria sido desenvolvido.

Ao prof. Wagner Figueiredo, pelo incentivo durante as aulas de Mecânica Estatística.

Aos membros da banca, por terem aceito o convite para fazer a leitura deste trabalho.

Ao prof. Ulysses Camara, por ter me ajudado a dar os primeiros passos no “mundo” da física teórica.

Aos colegas do grupo de Física da Matéria Condensada e Mecânica Estatística da UFSC por compartilharem informações que me ajudaram superar algumas dificuldades encontradas pelo caminho.

“Nenhuma grande descoberta foi feita jamais sem um palpite ousado. ”
(Isaac Newton)

RESUMO

A aproximação de campo médio para o modelo de Ising que descreve a transição ferromagnética, conhecida como aproximação de Bragg-Williams, bem como a teoria de Landau associada, podem ser tomadas como modelos efetivos *coarse-grained* para descrever a transição ferromagnética em largas escalas. Ao invés de um spin, agora a variável de estado relevante do sistema é o parâmetro de ordem, que representa a magnetização local $\Phi(\vec{x})$. Enquanto na teoria de Landau Φ pode tomar valores no intervalo $-\infty < \Phi < \infty$, no caso de Bragg-Williams Φ está restrito ao intervalo $-1 \leq \Phi \leq 1$. Em geral, nesses modelos os parâmetros dependem explicitamente da temperatura. No entanto, em contextos do grupo de renormalização e aplicação da teoria de Landau a transformações de fase em materiais, muitas vezes os parâmetros do modelo são tomados com valores constantes. Sendo assim distinguimos três modelos efetivos para a transição ferromagnética: a teoria de Bragg-Williams; a teoria de Landau, tomada como uma versão da teoria anterior truncada na quarta potência na expansão em série de Taylor do parâmetro de ordem; e a mesma teoria de Landau, porém com parâmetros que não dependem explicitamente da temperatura. Para levar em conta novamente as flutuações térmicas e entender como a temperatura induz a transição de fase nesses modelos efetivos, são feitas simulações desses modelos em contato com um banho térmico através da equação de Langevin. Essa equação é uma equação diferencial parcial estocástica, diferente para cada modelo, que pode ser integrada por métodos explícitos e implícitos, tanto no espaço real quanto no espaço de Fourier. No caso mais simples da teoria de Landau, o método semi-implícito no espaço de Fourier se mostrou mais eficiente computacionalmente. As simulações foram feitas em duas dimensões e análises de tamanho finito preliminares parecem indicar que os três modelos preservam a classe de universalidade do modelo de Ising. As propriedades de baixa temperatura são bem descritas apenas pelo modelo efetivo baseado na aproximação de Bragg-Williams, onde a temperatura crítica é mais afetada pelas flutuações térmicas.

Palavras-chaves: Teorias de campo médio, sistemas magnéticos, simulações de Langevin, transições de fase.

ABSTRACT

The mean field approximation for the Ising model describing the ferromagnetic transition, known as the Bragg-Williams approximation, well as the associated Landau theory, can be taken as *coarse-grained* effective models to describe the ferromagnetic transition in large scales. Instead of a spin, the relevant system state variable is the order parameter, which represents the local magnetization $\Phi(\vec{x})$. While in Landau's theory Φ can take values in the range $-\infty < \Phi < \infty$, in the case of Bragg-Williams Φ is restricted to the range $-1 \leq \Phi \leq 1$. In general, in these models the parameters explicitly depend on temperature. However, in contexts of the renormalization group and application of Landau's theory to phase transformations in materials, often the parameters of the model are taken with constant values. Thus we distinguish three effective models for the ferromagnetic transition: the Bragg-Williams theory; Landau's theory, taken as a version of the prior theory truncated in the fourth power in the Taylor series expansion of the order parameter; and the same Landau theory, but with parameters that do not depend explicitly on temperature. In order to take into account thermal fluctuations again and to understand how temperature induces the phase transition in these effective models, simulations are made of these models in contact with a thermal bath through the Langevin equation. This equation is a stochastic partial differential equation, different for each model, which can be integrated by explicit and implicit methods, both in real space and in Fourier space. In the simplest case of the Landau theory, the semi-implicit method in the Fourier space proved to be more computationally efficient. The simulations were done in two dimensions and preliminary analyzes of finite size seem to indicate that the three models preserve the universality class of the Ising model. The low temperature properties are well described only by the effective model based on the Bragg-Williams approximation, where the critical temperature is most affected by thermal fluctuations.

Key-words: Mean field theory, magnetic systems, simulations of Langevin, phase transitions.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1	– Domínios magnéticos	18
Figura 2	– Diagrama de fases ferromagnética-Magnetização de um ferromagneto na ausência de campo externo. Próximo à temperatura de transição surge a magnetização espontânea $\pm m(T)$. Para temperaturas maiores que T_c a magnetização é nula [1].	27
Figura 3	– Dinâmica da magnetização para o Hamiltoniano de Bragg-Williams (modelo completo). Numa temperatura $T = 0.5$, a condição inicial $m = 1.0$ gera a curva de magnetização em função do tempo que se encontra com a curva gerada sob condição inicial $m = aleatorio$ que corresponde a $m = 0$. A partir do ponto onde ocorre o encontro das duas curvas (no intervalo entre $t = 800$ e $t = 10000$) assume-se que o sistema esteja em equilíbrio	54
Figura 4	– Autocorrelação para o Hamiltoniano de Bragg-Williams- O tempo de decorrelação é medido quando a reta horizontal (0.367) cruza a curva da função de autocorrelação em função do tempo $C(t, t')$. Neste caso a temperatura do sistema é $T = 0.5$	55
Figura 5	– Nesta figura observa-se as curvas de magnetização em função da temperatura para os três modelos onde a dimensão linear da rede quadrada é $L = 64$. A região de inflexão de cada curva sinaliza onde ocorre a transição de fase.	57
Figura 6	– Gráfico da energia em função da temperatura para os três modelos no caso de $L = 64$	58
Figura 7	– Nestes gráficos estão sendo representados o calor específico em função da temperatura para os três modelos efetivos: acima para todos tamanhos simulados, e abaixo para $L = 64$, onde a linha contínua é um ajuste por uma função logarítmica do tipo $A+B \log(T)$	59

Figura 8 – Suscetibilidade para os diferentes tamanhos de rede ($L = 16$, $L = 32$ e $L = 64$), para os três diferentes modelos efetivos.	60
Figura 9 – Gráfico do cumulante de Binder em função da temperatura dos três modelos efetivos para diferentes tamanhos de redes. Observa-se claramente em cada modelo o cruzamento das curvas dos diferentes tamanhos de rede onde são os prováveis pontos críticos do sistema.	61
Figura 10 – Gráficos dos valores máximos do calor específico dos três modelos efetivos em função do tamanho do sistema. As linhas são ajustes, onde as funções $f(x)$ correspondem a leis de potência e as funções $g(x)$ a logaritmos. As funções designadas por “1” são para o modelo com $r = constante$, “2” para o modelo completo, e “3” para o modelo $r = T - T_c$. Para fins de comparação, o valor do máximo do calor específico do caso do modelo completo foi dividido por 4. . . .	64
Figura 11 – Gráfico dos máximos da suscetibilidade em função do comprimento L , as funções f_1 , f_2 e f_3 são ajustes algébricos para os modelos completo, $r = constante$ e $r = T - T_c$, respectivamente.	64

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	–	Tempos de equilíbrio (τ_{eq}) e tempos de decorrelação (τ_{corr}) para o Hamiltoniano de Bragg-Williams (modelo completo), para o tamanho $L = 90$	56
Tabela 2	–	Tempos de equilíbrio (τ_{eq}) e tempos de decorrelação (τ_{corr}) para o Hamiltoniano de Landau-Ginzburg ($r = (T - T_c)$), para $L = 90$	56
Tabela 3	–	Temperaturas críticas	62
Tabela 4	–	Expoentes críticos	65

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	17
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	23
2.0.1	Transição de fases contínuas em sistemas magnéticos bidimensionais	26
2.1	Teoria de campo médio	34
2.1.1	Aproximação de Bragg-Williams	35
2.1.2	Teoria de Landau	38
2.1.3	Processo de coarse-graining e a teoria de campo Φ^4	40
2.1.4	Reparametrização do modelo	42
3	SIMULAÇÕES DE LANGEVIN	45
3.0.1	A equação de Langevin	45
3.0.2	A equação de Bragg-Williams dependente do tempo	48
3.0.3	A equação de Landau-Ginzburg dependente do tempo	49
3.0.4	Soluções numéricas	50
4	RESULTADOS	53
4.1	Tempo de equilíbrio (τ_{eql}) e tempo de descorrelação (τ_{corr})	54
4.2	Resultados	56
4.3	Análise de tamanho finito	61
5	CONSIDERAÇÕES FINAIS E PERSPECTIVAS	67
	REFERÊNCIAS	71

1 INTRODUÇÃO

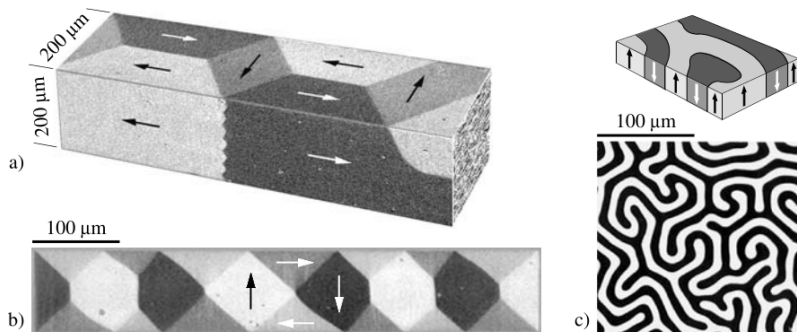
Historicamente, os processos evolutivos pelos quais a humanidade passou ao longo dos tempos, teve em seu contexto elementos marcantes de descobertas de materiais, assim como desenvolvimentos e aprimoramentos de técnicas para manipulá-los com a finalidade de se extrair benefícios de suas propriedades fundamentais. Na linhagem dos materiais magnéticos, que é o principal foco deste trabalho, existe uma rica história que se estende desde tempos em que se faziam atribuições místicas aos fenômenos ligados ao magnetismo até as mais profundas descobertas científicas nos últimos dois séculos [2].

Resultados provenientes de estudos nas áreas de física da matéria condensada e demais áreas de investigações correlacionadas indicam que diversas propriedades físicas dos materiais possuem conexões com suas microestruturas fundamentais. Por exemplo, as estruturas cristalinas do Silício e as impurezas nele contidas determinam sua qualidade de performance em eletrônicos modernos, a combinação de partículas de diferentes metais formam ligas metálicas com propriedades de ductilidades, flexibilidades, condutibilidades elétricas, permeabilidades magnéticas dentre outras incalculáveis propriedades. Muitas destas microestruturas são formadas durante processos de solidificação, precipitação de estados sólidos e processos termodinâmicos, que geralmente são causados devido a ações de campos externos sobre o material. Todos estes processos são guiados pelas leis fundamentais da física da dinâmica dos vínculos do sistema e da cinética de transformação das fases de não-equilíbrio. A cinética da formação de microestruturas geralmente é modelada por um conjunto de relações matemáticas que descrevem o comportamento físico do sistema, tais como processo de difusão de calor, transporte de impurezas sob condições de contorno que controlam a termodinâmica do sistema [3].

Em materiais magnéticos, as principais microestruturas de interesse são agrupamentos de elementos microscópicos conhecidos como momentos de dipolos magnéticos, estes por sua vez são geralmente referenciados como elétrons ou spins eletrônicos. Tais agrupamentos de momentos magnéticos, de acordo com os parâmetros do sistema,

produzem diferentes estruturas que são conhecidas como domínios magnéticos. A Figura (1) ilustra diferentes amostras de microestruturas magnéticas observadas com ajuda de óptica de polarização na ausência de campo magnético externo. Os domínios magnéticos são as regiões uniformemente magnetizadas, ou seja, onde há uma grande concentração de momentos magnéticos orientados numa mesma direção. [4].

Figura 1 – Domínios magnéticos



(a)Imagens de dois lados de uma barra de ferro analisada em um computador para simular uma visão em perspectiva (R.J. Celotta, NIST). (b) Película fina do elemento NiFe (espessura 130 nm) com anisotropia transversal fraca (M. Freitag, Bosch). (c) imagem de efeito de domínios único de Faraday em um filme Cristal de granada com anisotropia perpendicular, em conjunto com uma representação esquemática da magnetização [4].

A busca por descrições teóricas que atendessem de forma sistemática as diversas manifestações fenomenológicas para sistemas magnéticos marcou gerações inteiras de cientistas. Neste contexto alguns nomes ficaram bastante conhecidos devido as amplitudes de suas formulações teórica para além dos domínios da física da matéria condensada. Possivelmente, o modelo de Ising para o ferromagneto segue como o mais citado dentre os modelos de spins de sistemas ferromagnéticos. Esse modelo, como será melhor explicado no capítulo seguinte, estabelece uma relação simples entre os spins de uma rede, de forma tal que pode-

se reconstruir processos de transição de fases em situações específicas destes sistemas. Outros modelos mais elaborados, como o modelo de Heisenberg, pode reconstruir processos ainda mais realísticos, como a precessão do spin em torno de seu eixo de rotação, produzindo assim um conjunto de efeitos sobre o sistema, como por exemplo ondas de spins. Também foram desenvolvidas versões *coarse-grained* desses modelos microscópicos, de forma que serão melhormente detalhados mais adiante. Estas versões *coarse-grained* marcam um ponto de partida para modelagem de materiais magnéticos através de campos contínuos.

A modelagem de materiais através de campos contínuos representando um tipo de ordem de uma região mesoscópica nasceu com o próprio conceito de parâmetro de ordem proposto por Landau. Esse parâmetro é construído de tal maneira a ter valores distintos em uma fase simétrica (p. ex. , fase líquida, que possui simetrias orientacional e translacional) e em uma fase que possui uma simetria quebrada (ex. fase cristalina). As simetrias do parâmetro de ordem refletem a ordem da fase ordenada. Esse tipo de modelagem é a base para a descrição teórica de transições de fase em materiais através de teorias de campo, bem como todo o tratamento técnico que isso permite [5]. Nos casos em que as escalas de relevância são as de grandes comprimentos de onda e o equilíbrio térmico corresponde a uma configuração heterogênea do campo (como em fases moduladas), esse tipo de modelagem é a única opção para investigações através de simulações numéricas [6]. Além disso, em certas situações uma formulação variacional permite simplificar a descrição de processos dinâmicos como transformações de fase, quando o parâmetro de ordem distingue apenas dois tipos de fase, e não a ordem de cada uma formando um conjunto de modelos chamados de *phase-field models* [7]. Em cada fase os *phase fields* assumem valores constantes na maior parte do domínio, interpolando continuamente entre os domínios através de uma fina camada que é usada para descrever as fronteiras entre as fases. Do ponto de vista da física da matéria condensada os campos de fases descrevem graus de cristalização ou fases de ordem e desordem em sistemas atômicos [3].

No segundo capítulo será discutido o processo de transição de fases contínuas em sistemas magnéticos bidimensionais e as quantidades macroscópicas relevantes do sistema como energia, magnetização, suscetibilidade, calor específico e cumulante de Binder. Em seguida

serão introduzidas a teoria de campo médio via aproximações de Bragg-Williams bem como sua expansão até quarta ordem no parâmetro de ordem, correspondendo à teoria fenomenológica de Landau. Por fim, apresentaremos uma formulação da teoria de Landau via expansão em série de Taylor da energia livre para o mesmo problema.

O sistema magnético estudado neste trabalho é descrito por modelos efetivos de energia livre $H[\Phi(\vec{x})]$, onde $\Phi(\vec{x})$ é o parâmetro de ordem do sistema. A escolha natural da dinâmica para estes modelos para emular a minimização da energia frustrada pelo contato com um banho térmico, como veremos no capítulo três, é a dinâmica de Langevin:

$$\frac{\partial \Phi(\vec{x})}{\partial t} = -\Gamma \frac{\delta H[\Phi(\vec{x})]}{\delta \Phi(\vec{x})} + \eta(\vec{x}, t) \quad (1.1)$$

onde η é um ruído branco Gaussiano com média zero ($\langle \eta(\vec{x}, t) \rangle = 0$) e variância diferente de zero ($\langle \eta(\vec{x}', t') \eta(\vec{x}, t) \rangle = 2T\delta(t - t')\delta(\vec{x} - \vec{x}')$), Γ é chamado de mobilidade. Essa equação é utilizada por exemplo para investigações de fenômenos críticos dinâmicos [8] - no caso do ferromagneto da equação de Landau-Ginzburg corresponde ao modelo A, segundo a classificação de Hohenberg e Halperin (1977). Para o mesmo caso da equação de Landau-Ginzburg, essa dinâmica também é utilizada para estudar o processo de ordenamento de fases, correspondendo ao modelo de Allen-Cahn [9]. No âmbito de materiais magnéticos, a equação de Langevin é a versão de magnetização em apenas uma direção (simetria de Ising) da equação micromagnética de Landau-Lifshitz-Gilbert [4, 10]. Ainda no capítulo três serão descritas as técnicas computacionais para integrar a equação de Langevin para os modelos efetivos apresentados no capítulo dois, via métodos numéricos de diferenças finitas implícitos e explícitos, no espaço real e no espaço de Fourier.

No quarto capítulo serão apresentados os resultados das simulações. Todo o processo de resfriamento será dado em detalhes. Através de representações gráficas de cada quantidade medida seguidas das interpretações físicas pertinentes a cada situação, foi possível observar o comportamento de cada modelo separadamente assim como também sugerir de forma consistente os pontos em comuns e divergentes entre os modelos. Por meio de análise de tamanho finito foi possível, de forma

consistentemente, sugerir que todos os modelos simulados pertencem a mesma classe de universalidade do modelo de Ising.

No capítulo cinco serão feitas as considerações finais deste trabalho. Com base nos resultados obtidos apresentamos a relevância de se estudar sistemas magnéticos via simulações de teorias de campo, bem como a abrangência destes estudos em trabalhos futuros.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Neste capítulo será feito um breve estudo e revisão de sistemas magnéticos numa rede regular hipercúbica d -dimensional, onde d indica dimensão espacial do sistema. Cada sítio da rede está permanentemente ocupado por um domínio magnético que, de forma conveniente pode ser representado por um único spin eletrônico ou momento de dipolo magnético de um elétron, que por sua vez possui liberdade para se reorientar em determinadas direções dos eixos coordenados da rede. Cada momento magnético $\vec{\mu}$ é uma quantidade elementar de estado sólido em materiais magnéticos. As contribuições coletivas destes objetos elementares são significativos para efeitos de fenômenos magnéticos estudados neste trabalho. Pode-se definir uma quantidade macroscópica $\vec{m} = \sum \vec{\mu}$ para representar a magnetização e, quando levado em consideração todos os spins da rede a magnetização permite a identificação e caracterização das propriedades físicas do material [11].

Existem diversas maneiras de se obter informações a respeito de um sistema magnético. Experimentalmente, o espalhamento magnético de nêutrons tem sido um dos processos mais utilizados para estudar redes de elétrons. O espalhamento ocorre devido as interações dos momentos de dipolos magnéticos dos nêutrons com os spins eletrônicos, tornando factíveis as resoluções espaciais das medidas de ordens magnéticas do sistema [12]. Com base em resultados teóricos e experimentais, simulações computacionais de modelos fenomenológicos vêm ganhando cada vez mais destaque no cenário das investigações científicas, não só de sistemas magnéticos mas em diversos contextos onde a natureza se manifesta de formas distintas [13].

A evolução dinâmica do ferromagneto simulada nesta dissertação é consistente com um processo de resfriamento, ou seja, dado que inicialmente o sistema esteja num estado de equilíbrio termodinâmico numa temperatura inicial T_0 , varia-se a temperatura e espera-se por um intervalo de tempo suficiente até que novos estados de equilíbrio numa temperatura final T_F sejam acessíveis. Ao longo deste processo o material passa por um conjunto de transformações de suas propriedades físicas.

A temperatura de Curie T_c , sendo esta assim chamada em homenagem a Piere Curie pelo seu trabalho sobre transição ferromagnética, é o ponto onde a magnetização sofre sua transformação mais radical na ausência de um campo magnético externo \vec{B} [1]. Quando se observa um material ferromagnético imediatamente acima ou exatamente na temperatura T_c de Curie e de alguma forma tenta-se medir sua magnetização, o valor que será encontrado para esta grandeza em tal condição será sempre igual a zero e o ferromagneto é dito estar numa fase paramagnética ou fase desordenada. Abaixo de T_c , mesmo que não haja influências de campos externos, surge uma magnetização que pode ser medida e seu valor líquido é sempre diferente de zero, esta é a fase ordenada ou fase ferromagnética do material [14].

O conceito subentendido nos termos “fases paramagnética ou fase desordenada” e “fase ferromagnética ou fase ordenada” tem suas motivações fundamentadas na teoria de domínios magnéticos. No cenário das interações magnéticas, o físico francês Pierre Weiss foi quem fez a primeira contribuição teórica sistemática num trabalho que foi publicado no ano 1907 [1]. Segundo Weiss, em média cada spin está sujeito a um campo efetivo que é proporcional à magnetização, possibilitando assim o efeito de ordenamento cooperativo. No equilíbrio termodinâmico, em regiões de temperatura acima de T_c , a entropia, ou melhor, a desordem causada por ruídos térmicos vence a energia interna de ordenamento do sistema, impedindo assim a formação de domínios magnéticos devido a máxima aleatoriedade dos spins. Neste caso, no equilíbrio térmico, uma quantidade conhecida como energia livre de Helmholtz é minimizada como resposta à maximização da entropia. Abaixo de T_c , onde a energia interna é dominante, os spins se alinham para minimizar a energia livre do sistema e dessa maneira são formados os domínios magnéticos responsáveis pelo aparecimento da magnetização espontânea. Num processo de resfriamento, a passagem da fase paramagnética para a fase ferromagnética é uma manifestação da quebra espontânea de simetria [14].

Boa parte dos modelos fenomenológicos na Mecânica Estatística consistem em fazer previsões das relações básicas entre propriedades de quantidades macroscópicas, dado um conjunto de regras fundamentais que regem as forças de interações elementares dos componentes microscópicos do sistema estudado. Em primeiras aproximações e em

contato com campos externos relativamente fracos, podemos classificar os modelos de sistemas magnéticos em virtude de suas interações magnéticas em dois tipos: A interação do campo magnético externo com cada momento magnético da rede e a interação mútua entre os momentos magnéticos desta mesma rede. Em termos de intensidade, as interações que pertencem ao primeiro tipo são relativamente fracas, enquanto aquelas que pertencem ao segundo tipo podem ser muito fortes e a física do sistema deve ser entendida quando se leva em consideração o comportamento coletivo de muitos momentos magnéticos [15].

Simultaneamente a revolução atômica e ao advento da teoria quântica nas primeiras décadas do século *XX*, foram propostos diversos modelos fenomenológicos para explicar alguns comportamentos macroscópicos da matéria como respostas às interações entre entes microscópicos, isto é, elétrons, átomos e moléculas e das interações destes elementos microscópicos com campos externos. [12]. No ano de 1920 W. Lenz propôs um modelo para um ferromagneto que foi solucionado por E. Ising para o caso $d = 1$ em 1925. Para temperaturas $T > 0$ o modelo de Ising unidimensional não possui transição de fase, este fato levou Lenz e Ising a concluírem erroneamente que para dimensões $d > 1$ em temperaturas diferentes de zero o modelo não descreveria um sistema magnético real. A solução exata para o caso $d = 2$ na ausência de campo externo foi apresentada por Onsager no ano de 1944 [16]. Esta solução marcou o início de uma nova era na física de fenômenos críticos e transição de fase contínua, inspirando desenvolvimentos teóricos em diversas áreas da física [17].

O modelo de Ising, como ficou conhecido, pode ser visto como um caso especial do modelo de Heisenberg proposto no ano de 1928 [18], que por sua vez também é um modelo para ferromagneto porém suas variáveis são vetoriais e não escalares. Transições de fases ferromagnéticas em sistemas com fortes anisotropias axiais podem ser descritas por estes modelos, onde o campo de ordem associado tem apenas um componente $S(x)$ para o caso de Ising e três componentes $\{S_x, S_y, S_z\}$ para o modelo de Heisenberg.

O modelo de Ising é tido como o mais simples possível para se descrever um sistema ferromagnético com anisotropia axial. Toda essa simplicidade se deve ao fato dos spins serem variáveis que tomam dois valores possíveis em cada sítio de configuração da rede, a saber, se

$S = +1$ convencionam-se que o spin aponta para cima e se $S = -1$ o spin aponta para baixo. O Hamiltoniano de Ising com o campo magnético externo B ligado é representado pela seguinte expressão:

$$H(S) = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i \cdot S_j - B \sum_i S_i \quad (2.1)$$

onde $J > 0$ é a interação de troca entre vizinhos. O fato de J ser positivo indica que se trata de um ferromagneto, ou seja, os spins precisam se alinhar paralelamente uns aos outros para minimizar a energia do sistema, o termo $\langle ij \rangle$ no somatório indica que as interações ocorrem entre pares de vizinhos próximos.

Nesta seção foram expostos alguns conceitos gerais sobre sistemas magnéticos. Na seção seguinte serão pontuadas algumas grandezas termodinâmicas que permitem a especificação das regiões onde ocorrem as transições de fases contínuas num ferromagneto bidimensional.

2.0.1 Transição de fases contínuas em sistemas magnéticos bidimensionais

O magnetismo observado em materiais magnéticos como Ferro, Nickel e Cobalto resulta do alinhamento cooperativo dos momentos magnéticos microscópicos ou spins eletrônicos nestes materiais. A interação de troca, que por sua vez tem suas origens nos domínios da Mecânica Quântica, é reponsável por produzir a força que faz com que os spins se alinhem. A intensidade desta força determina a temperatura na qual ocorre a saturação da magnetização m , ou seja, onde o material passa a ter uma magnetização permanente.

O conceito de transição de fase contínua em sistemas magnéticos pode ser entendido através do comportamento da magnetização em função da temperatura: na ausência de campo magnético externo, dado que inicialmente o sistema esteja abaixo de T_c , a magnetização decresce continuamente conforme a temperatura é aumentada se aproximando de T_c , tornando assim completamente nula em T_c e também para valores maiores que T_c . Vale reforçar que o desaparecimento da magnetização em T_c não quer dizer que os spins foram destruídos, mas que houve uma redução do seu alinhamento efetivo [15]. Se fizermos o caminho inverso abaixando a temperatura de uma temperatura inicial $T > T_c$ para uma

temperatura final $T < T_c$, a magnetização reaparece espontaneamente para valores de $T < T_c$. Na figura 2 é apresentado esquema ilustrativo do diagrama de fases ferromagnética para um sistema bidimensional:

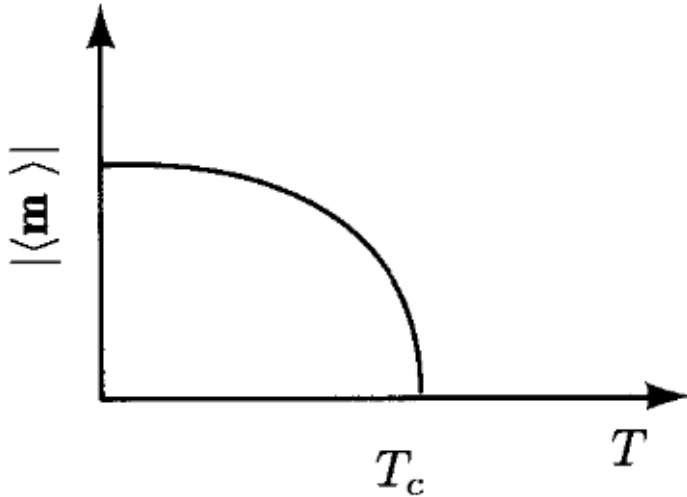


Figura 2 – Diagrama de fases ferromagnética-Magnetização de um ferromagneto na ausência de campo externo. Próximo à temperatura de transição surge a magnetização espontânea $\pm m(T)$. Para temperaturas maiores que T_c a magnetização é nula [1].

Tecnicamente, uma transição de fases contínua ou de segunda ordem é marcada por divergências nas variáveis que medem flutuações do sistema, tais como a suscetibilidade, o calor específico e um comprimento característico conhecido como comprimento de correlação tende ao infinito em T_c . Próximo a criticalidade as propriedades físicas são governadas por leis de potências.

Para se estabelecer um entendimento completo e quantitativo de como o sistema magnético passa por diferentes fases conforme a temperatura é variada, precisamos definir algumas quantidades termo-

diâmicas cujas propriedades estatísticas são medidas em termos dos constituintes da rede. O estado de equilíbrio termodinâmico de um sistema é selecionado probabilisticamente pelo fator de Boltzmann

$$P_{\mu} = \frac{1}{Z} \exp(-E_{\mu}/kT) \quad (2.2)$$

onde $Z = \sum_{\mu} \exp(-\beta E_{\mu})$ é a função de partição do sistema no ensemble canônico, $\beta = 1/kT$ é a temperatura absoluta do sistema, E_{μ} é a energia do estado μ , k é a constante de Boltzmann. A seguir serão listadas algumas quantidades termodinâmicas de interesse neste estudo.

Energia

Num estado de equilíbrio termodinâmico, a energia interna é descrita em termos da função de partição da seguinte maneira:

$$U = \langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} E_{\mu} \exp(-\beta E_{\mu}) \quad (2.3)$$

A equação acima pode ser reescrita tomando a derivada da função de partição com relação a β :

$$U = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \quad (2.4)$$

A entropia do sistema é representada pela seguinte expressão:

$$S = -k\beta \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} + k \ln Z \quad (2.5)$$

A evolução cinética do sistema passando por diferentes fases de equilíbrio se deve ao termo de energia livre de Helmholtz

$$F = U - TS = -kT \ln Z \quad (2.6)$$

De forma bem objetiva pode-se dizer que a energia interna U (energia de ordenamento) compete com o termo de entropia TS (favorece a desordem) a fim de minimizar F . No sistema magnético as duas fases onde F é minimizada são a fase paramagnética dominada pelo termo

de entropia TS e a fase ferromagnética dominada pela energia interna U . Para os modelos descritos por Hamiltonianos efetivos $H(S_i)$, o que se mede é a energia média por partícula:

$$E = \frac{1}{N} \langle H(S_i) \rangle. \quad (2.7)$$

Magnetização

A magnetização de um magneto muda em resposta a um campo externo aplicado B , podendo ser calculada a partir da derivada da energia livre F com relação a B :

$$m = -\frac{\partial F}{\partial B} \quad (2.8)$$

Para um sistema definido numa rede de N sítios ocupados por variáveis de spins S_i , a magnetização média é dada por:

$$m = \frac{\sum_i \langle S_i \rangle}{N} \quad (2.9)$$

Onde m é a magnetização média por spin e o somatório indica que a soma é tomada sobre todos os spins da rede.

O parâmetro de ordem de um ferromagneto é a própria magnetização média do sistema. Geralmente, valores do parâmetro de ordem diferentes de zero correspondem a uma quebra de simetria. No exemplo magnético apresentado anteriormente, a simetria quebrada é a simetria de inversão de spins. Abaixo da temperatura de transição T_c o sistema permanece invariante apenas numa dada direção da magnetização espontânea, enquanto em fases de altas temperaturas o sistema permanece invariante para todas as direções possíveis da magnetização [15]. Em geral quando há descontinuidade no parâmetro de ordem no ponto de transição, segundo Landau a transição é de primeira ordem. Por outro lado, se o parâmetro de ordem for contínuo na transição, ocorre então uma transição contínua ou de segunda ordem [19].

Nas proximidades do ponto crítico as quantidades termodinâmicas são governadas por leis de potência cujos expoentes são fundamentais para identificar em qual classe de universalidade as propriedades críticas

estáticas do sistema são classificadas. Para temperaturas $T < T_c$ a magnetização cai com a seguinte lei de potência:

$$m \sim (T_c - T)^\beta \quad (2.10)$$

Onde β é um expoente crítico.

Calor específico

Estatisticamente o calor específico reflete flutuações na energia interna com relação a temperatura, podendo ser escrito da seguinte maneira:

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = k\beta^2 \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} \quad (2.11)$$

Outra maneira de se estimar o valor de C_V é feito mediante o desvio médio quadrático da energia interna $U = \langle E \rangle$

$$\langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2. \quad (2.12)$$

Calculando-se as médias $\langle E^2 \rangle$ e $\langle E \rangle^2$

$$\begin{aligned} \langle E^2 \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{\mu} E_{\mu}^2 \exp\{-\beta E_{\mu}\} = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} \\ \langle E \rangle^2 &= \frac{1}{Z} \sum_{\mu} E_{\mu} \exp\{-\beta E_{\mu}\} = \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \end{aligned} \quad (2.13)$$

chega-se a forma do calor específico :

$$\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = \frac{\partial^2 \log(Z)}{\partial \beta^2} = \frac{C_V}{k\beta^2} \quad (2.14)$$

$$C_V = \frac{k\beta^2}{N} \left(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \right). \quad (2.15)$$

Uma das assinaturas da transição de fase de segunda ordem é a divergência do calor específico na temperatura de Curie T_c [12]. O

comportamento crítico do calor específico é dado pela seguinte expressão:

$$C_V \sim |T_c - T|^{-\alpha} \quad (2.16)$$

Com α sendo um expoente crítico.

Suscetibilidade

A suscetibilidade informa o quanto uma variável do sistema responde linearmente as variações de seus campos conjugados. Este fato é conhecido como teorema de resposta linear [13]. Num magneto, uma das formas de se calcular as amplitudes das flutuações da magnetização com respeito ao campo magético é dado pela suscetibilidade magnética

$$\frac{\partial \langle M \rangle}{\partial B} = \frac{\beta}{N} \left(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \right), \quad (2.17)$$

ou ainda em termos da magnetização por ispin

$$\chi = \frac{\beta}{N} \left(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \right) = \beta \left(\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2 \right). \quad (2.18)$$

No limite termodinâmico a suscetibilidade é marcada por uma divergência na temperatura crítica de transição T_c . Próximo à temperatura de Curie, a suscetibilidade se comporta como a seguinte lei de potência:

$$\chi \sim |T_c - T|^{-\gamma} \quad (2.19)$$

onde γ é um expoente crítico.

Cumulante de Binder

O cumulante de Binder reduzido à quarta ordem fornece uma medida característica da distribuição de magnetização do sistema em função da temperatura T [20]:

$$U_{Binder}(T) = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3 \langle M^2 \rangle^2} \quad (2.20)$$

Para diferentes tamanhos de rede, o cumulante de Binder fornece os mesmos valores no ponto crítico, ou seja, todas as curvas de U_{Binder} se cruzam em T_c . Isto se torna evidente nos resultados das simulações.

Função de correlação

O valor médio de uma variável termodinâmica S_i pode ser calculado da seguinte maneira:

$$\langle S_i \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} S_i^{\mu} \exp(-\beta E_{\mu}) = \frac{1}{\beta} \frac{\partial Z}{\partial B_i}, \quad (2.21)$$

onde S_i^{μ} é o valor de S_i no estado μ e B_i é o campo conjugado a S_i que pode variar de sítio para sítio. Podemos escrever a suscetibilidade generalizada da seguinte maneira:

$$\chi_{ij} = \frac{\partial \langle S_i \rangle}{\partial H_j} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial^2 Z}{\partial B_i \partial B_j} = \beta (\langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle) = \beta G_c^{(2)}(i, j), \quad (2.22)$$

$G_c^{(2)}(i, j)$ é chamada de função de correlação conectada de S entre os sítios i e j .

Para temperaturas muito acima da temperatura crítica, a função de correlação possui um comprimento de escala universal. Para caracterizar este comportamento, é preciso identificar um comprimento de escala que denotaremos por " a ", que normalmente é definido como a distância entre spins do sistema magnético. Apenas para distâncias muito maiores que a descrições do sistema em termos do parâmetro de ordem pode ser pensado [21].

Para $T \simeq T_c$ a função de correlação se comporta da seguinte maneira [21]:

$$G_c^{(2)}(i, j) \sim \frac{1}{r^{D-2+\eta}} g(r/\xi) \quad (2.23)$$

com $r = |x| \gg a$, η é chamado de expoente crítico anômalo, ξ é um comprimento característico chamado de comprimento de correlação do sistema, $g(r/\xi)$ cai exponencialmente quando r se torna muito grande ($r \rightarrow \infty$).

Para $r \ll \xi$, $g(r/\xi)$ se torna independente de r e a função de correlação fica da seguinte forma:

$$G_c^{(2)}(i, j) \sim \frac{1}{r^{D-2+\eta}} \quad (2.24)$$

Próximo a temperatura de Curie o comprimento de correlação diverge com a seguinte lei de potência:

$$\xi \sim |T_c - T|^{-\nu} \quad (2.25)$$

onde ν é um expoente crítico.

Para o sistema que será simulado, dado que $m(t)$ seja a magnetização instantânea no tempo t e $\langle m \rangle$ seu valor médio, $m(t + t')$ é a magnetização num tempo posterior t' , a autocorrelação em função do tempo será descrita pelos termos a seguir:

$$\begin{aligned} G(t, t') &= \int dt' [m(t') - \langle m \rangle] [m(t + t') - \langle m \rangle] \\ &= \int dt' [m(t')m(t + t') - \langle m \rangle^2]. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Na fase ordenada, a função de autocorrelação deve cair de acordo com a exponencial:

$$C(t) \sim e^{-t/\tau} \quad (2.27)$$

τ é chamado de tempo de decorrelação, ou seja, o tempo em que duas medidas de m permanecem correlacionadas, a partir de $t = \tau$ o sistema é dito estar decorrelacionado.

Para um conjunto amostral de magnetizações m , medidas em tempos igualmente espaçados até um tempo máximo t_{max} , a forma correta da função de autorrelação é dada pela expressão abaixo [13]:

$$\begin{aligned} C(t, t') &= \frac{1}{t_{max} - t} \sum_{t'=0}^{t_{max}-t} m(t')m(t' + t) \\ &\quad - \frac{1}{t_{max} - t} \sum_{t'=0}^{t_{max}-t} m(t') \times \frac{1}{t_{max} - t} \sum_{t'=0}^{t_{max}-t} m(t' + t) \end{aligned} \quad (2.28)$$

A equação acima será utilizada na simulação para estimar o tempo entre cada medida do intervalo de temperatura no processo de resfriamento do sistema magnético. As autocorrelações são medidas com o sistema em equilíbrio.

2.1 TEORIA DE CAMPO MÉDIO

O processo de ordenamento de fases em sistemas ferromagnéticos será descrito quantitativamente em termos de um parâmetro de ordem. Também serão desenvolvidos formalismos matemáticos para lidar com a termodinâmica do estado ordenado assim como suas propriedades fenomenológicas. Os estudos das transições de fases e das propriedades das fases ordenadas serão realizados na aproximação de uma teoria de campo médio. Uma teoria de campo médio é uma aproximação para propriedades termodinâmicas de um sistema na qual as possíveis flutuações espaciais são desprezadas, tornando-se uma teoria exata para modelos na qual o alcance das interações é infinito. Mesmo sob o caráter de uma teoria aproximativa, a teoria de campo médio tem feito previsões corretas sobre alguns aspectos das transições de fases em dimensões espaciais altas onde cada partícula possui muitos vizinhos próximos. As vantagens oferecidas pela teoria de campo médio são diversificadas, começando pela simplicidade de sua descrição matemática e por suas boas previsões em primeira aproximação de diagramas de fases para novas investigações experimentais [14].

Algumas teorias de campo médio já vem sendo estudadas desde o final do século XIX em sistemas fluidos. No ano de 1871 Van der Waals modificou a equação de estado descrita pela lei dos gases ideais para se obter uma formulação capaz de prever transições do tipo líquido-gás [1]. Adicionando-se um termo a/V^2 junto a pressão para produzir o efeito de interação intermolecular e substituindo o volume V por $V - b$, tomando em conta o volume excluído das moléculas, chega-se à equação de Van der Waals :

$$\left(P + \frac{a}{V^2}\right)(V - b) = NkT \quad (2.29)$$

dado que N seja o número de moléculas que constituem o sistema.

No âmbito das interações em sistemas magnéticos, a teoria de Weiss(1906) foi a primeira proposta de uma teoria aproximativa de campo médio.

2.1.1 Aproximação de Bragg-Williams

O ferromagneto tem sido alvo de diversas investigações via aproximações teóricas, experimentais e simulacionais ao longo do tempo. Seguindo o mesmo raciocínio de Weiss para campos moleculares em sistema magnéticos, no ano de 1934 W. L. Bragg e E. J. Williams apresentaram uma nova proposta para campos moleculares [22]. Mesmo nas vizinhanças de temperatura zero, a teoria de Bragg-Williams providencia boas descrições para o modelo de Ising [14].

Observa-se que no modelo de Ising a magnetização $m = \langle S_i \rangle$ reflete o parâmetro de ordem e por sua vez é o valor médio dos spins. Uma vez que se sabe o número de spins up (para cima) que será indicado por N_+ e o número de spins down (para baixo), que será indicado por N_- , numa rede magnética, a magnetização pode ser escrita da seguinte maneira [14]:

$$m = \frac{N_+ - N_-}{N}, \quad (2.30)$$

onde $N = N_+ + N_-$ é o número total de spins na rede.

Para o caso em que m é espacialmente uniforme, o termo de entropia S pode ser calculado de forma exata. Para quantificá-la é tomado o negativo do logaritmo do número de configurações, adotando a constante de Boltzmann $k = 1$:

$$S = -\ln \binom{N}{N_+} = -\ln \binom{N}{\frac{N(1+m)}{2}} = -\ln \left(\frac{N!}{\left(\frac{N(1+m)}{2}\right)! \left(\frac{N(1-m)}{2}\right)!} \right). \quad (2.31)$$

Aplicando a fórmula de Stirling ($\ln n! = n \ln n - n + O(\ln n)$) à equação acima, chega-se ao seguinte resultado para a entropia por número de moléculas, também conhecida como entropia de mistura (entropy of mixing):

$$\frac{S}{N} = \ln 2 - \frac{(1+m)}{2} \ln(1+m) - \frac{(1-m)}{2} \ln(1-m). \quad (2.32)$$

Relembrando que a energia de equilíbrio é definida pelo fator de Boltzmann $E = \langle H \rangle = 1/Z_m T_r \exp(-\beta H) H$, extrair resultados com exatidão para o modelo de Ising partindo desta formulação pode se

tornar uma tarefa muito exaustiva, se não impossível de se realizar. A teoria de Bragg-Williams veio justamente com uma proposta para contornar este problema. A hipótese fundamental para a aproximação de $\langle H \rangle$ consiste em substituir uma variável de Ising S_i por seu valor médio m , espacialmente independente, e assim se obtém a seguinte expressão aproximada para a energia:

$$E = -J \sum_{\langle ij \rangle} m^2 = -\frac{1}{2} J N z m^2 \quad (2.33)$$

onde z é o número de coordenação da rede - numa rede regular hipercúbica d -dimensional $z = 2d$, com d sendo a dimensão espacial da rede, o índice $\langle ij \rangle$ que aparece na soma indica interação entre pares de vizinhos próximos na rede.

Substituindo E e TS no funcional de energia livre ($F = E - TS$), chegaremos ao funcional de energia livre de Bragg-Williams completo

$$F(T, m) = (E - TS) = -\frac{N}{2} J z m^2 + \frac{N}{2} T [(1 + m) \ln(1 + m)] + \\ + (1 - m) \ln(1 - m)] - NT \ln 2 \quad (2.34)$$

Os valores de equilíbrio do parâmetro de ordem m são os que minimizam $F(T, m)$. Abaixo da temperatura crítica T_c , a energia livre de Bragg-Williams é minimizada por valores de magnetização dada por $+m$ e $-m$ respectivamente. Em altas temperaturas ($T > T_c$) $F(T, m)$ apresenta um mínimo apenas em $m = 0$. A transição de fase é indicada pelo desaparecimento do mínimo em $m = 0$ e o surgimento espontâneo de mínimos em $m \neq 0$, sendo esta uma transição de segunda ordem devido a forma contínua do crescimento desses novos mínimos para zero com aumento da temperatura.

A aproximação de Bragg-Williams pode ser generalizada para os casos em que o parâmetro de ordem não é uniforme no espaço, ou seja, tomando a magnetização local como $\Phi(\vec{x}) = m + \delta m(\vec{x})$ de forma que Φ inclua flutuações, a energia livre pode ser descrita como se segue:

$$\begin{aligned}
F[\Phi(\vec{x})] &= \frac{1}{2} \int d\vec{x} [J(\nabla\Phi(\vec{x}))^2 - T_c\Phi^2(\vec{x})] + \\
&+ \frac{T}{2} \int d\vec{x} \left[(1 + \Phi(\vec{x})) \ln \left(\frac{1 + \Phi(\vec{x})}{2} \right) \right] + \\
&+ \frac{T}{2} \int d\vec{x} \left[(1 - \Phi(\vec{x})) \ln \left(\frac{1 - \Phi(\vec{x})}{2} \right) \right]. \quad (2.35)
\end{aligned}$$

O primeiro termo foi adicionado de maneira que a energia livre seja minimizada caso o perfil de magnetização seja homogêneo. Aqui a magnetização local Φ é limitada entre -1 e $+1$, devido o potencial local com divergências logarítmicas nesses limites (termo entrópico).

Quando o parâmetro de ordem é muito pequeno nas proximidades da temperatura crítica, podemos expandir a equação (2.34) em potências de m . Primeiro tomaremos a expansão da entropia em série de Taylor:

$$\begin{aligned}
S(m) &= S(0) + \frac{1}{2!} \left(\frac{\partial^2 S}{\partial m^2} \right)_{m=0} m^2 + \frac{1}{4!} \left(\frac{\partial^4 S}{\partial m^4} \right)_{m=0} m^4 + \dots \\
&= -\frac{1}{2}m^2 - \frac{1}{12}m^4 + \ln 2 \quad (2.36)
\end{aligned}$$

A energia livre eq.(2.34) aproximada desta maneira é dada pela expressão

$$F(m) = \frac{1}{2}(T - T_c)m^2 + \frac{1}{12}Tm^4 - T \log 2 + \dots \quad (2.37)$$

Aqui nota-se que para $T > T_c$ $F(m)$ tem um mínimo em $m = 0$ e para $T < T_c$ $F(m)$ tem caráter de poço duplo. A temperatura crítica de transição ferromagnética ocorre abaixo da temperatura crítica de campo medio T_c . Sendo assim, temos que a temperatura crítica de campo médio é $T_c = zJ$.

Na presença de campo externo não nulo, temos a seguinte equação de estado para a equação completa de Bragg-Williams (2.34):

$$\frac{\partial F}{\partial m} = -zJm + \frac{1}{2}T \log \left(\frac{1+m}{1-m} \right) = B = -zJm + T \tanh^{-1} m \quad (2.38)$$

Da expressão acima chega-se ao seguinte resultado para a magnetização:

$$m = \tanh[(B + mT_c)/T]. \quad (2.39)$$

A versão expandida da equação 2.35 ate ordem de quarta potência fica:

$$F[\Phi(\vec{x})] = \frac{1}{2} \int d\vec{x} [J[\nabla\Phi(\vec{x})]^2 + r\Phi^2(\vec{x}) + u\Phi^4(\vec{x})] \quad (2.40)$$

Esta expansão pode ser comparada a teoria de Landau, cujos parâmetros dependem explicitamente da temperatura, ou seja, $r = (T - T_c)$ e $u = T/6 \simeq T_c/6$ garantem o favorecimento de magnetizações globais diferentes de zero ($\Phi(\vec{x}) = \pm \sqrt{3(T_c - T)/T_c}$) para $T < T_c$ (potencial de poço duplo).

2.1.2 Teoria de Landau

Uma forma simples porém elegante de se promover especulações acerca de um potencial mais geral possível próximo ao ponto crítico de sistemas moleculares homogêneos foi proposta por Lev Landau, levando em considerações propriedades de simetrias do parâmetro de ordem e analiticidade das soluções do modelo. Landau postulou um funcional de energia livre F que depende do parâmetro de ordem m e de alguns parâmetros fenomenológicos que a priori não dependem explicitamente da temperatura. O conceito de parâmetro de ordem proposto por Landau merece destaque nesse trabalho, pois ele fornece bases para o entendimento de fenomenologias em diversos sistemas físicos, principalmente pelo fato de sua generalização fornecer fundamentos estruturais e conceituais para a construção de modelagens de materiais via teorias de campo contínuo. Os estados de equilíbrio são especificados quando se toma o mínimo global da energia livre Helmholtz F com respeito ao parâmetro de ordem m . Segue abaixo a expressão para F com parâmetro de ordem homogêneo expandida até a ordem de quarta potência [14]:

$$F(m) = \frac{1}{2}rm^2 + \frac{1}{4}um^4 - hm \quad (2.41)$$

sendo r e u parâmetros fenomenológicos que não dependem explicitamente da temperatura, h é o campo externo. Quando há uma não-homogeneidade espacial do parâmetro de ordem, podemos escrevê-lo como função das coordenadas espaciais $m = \Phi(\vec{x})$.

O desenvolvimento da teoria de Landau é em princípio muito semelhante ao que se fez para a aproximação de campo médio de Bragg-Williams. Na proposta de Landau considera-se que o parâmetro de ordem local $\Phi(\vec{x})$ seja muito pequeno e homogêneo nas proximidades da temperatura crítica T_c . Se a forma do potencial termodinâmico de Helmholtz $F[T, \Phi(\vec{x})]$ for conhecido, todas as propriedades termodinâmicas podem ser a partir daí derivadas [23]. O funcional de energia livre de Landau 2.41 é invariante sob grupo de simetrias G , ou seja, no ferromagneto de Ising a transformação $\Phi(\vec{x}) \rightarrow -\Phi(\vec{x})$ não muda a forma do Hamiltoniano. Dado que o parâmetro de ordem seja nulo acima de T_c e, para $T < T_c$ seja diferente de zero, se for levado em consideração as flutuações sobre a solução de campo médio podemos expandir F em potências do parâmetro de ordem analiticamente na região crítica $T - T_c$ onde os termos de menor ordem da expansão são dominantes, e o resultado é uma energia livre de Landau-Ginzburg:

$$H_{LG}[\Phi(\vec{x})] = \frac{1}{2} \int d\vec{x} [J[\nabla\Phi(\vec{x})]^2 + r\Phi^2(\vec{x}) + u\Phi^4(\vec{x})] \quad (2.42)$$

Os termos de ordem ímpares da expansão são descartados por não contribuírem para transições de segunda ordem devido a simetria assumida $\Phi_i \rightarrow -\Phi_i$. Para a transição de fase de segunda ordem do ferromagneto, acima de $D = 4$ denominada dimensão crítica superior, os expoentes críticos são os mesmos da teoria de campo médio (quando não são incluídas flutuações térmicas na magnetização), sob este ponto de vista, resultados de Grupo de Renormalização apontam que potências de ordens maiores que 4 em Φ são irrelevantes no sentido de classes de universalidades [24].

Observação: Esta teoria de Landau e a teoria de campo médio de Bragg-Williams, quando $m \rightarrow \Phi(\vec{x})$, podem ser tomadas como modelos efetivos e novamente levar em conta flutuações antes desprezadas, isto é explicado justamente no âmbito da teoria de Grupo de Renormalização.

2.1.3 Processo de coarse-graining e a teoria de campo Φ^4

O processo de coarse-graining, como discutido por muitos autores [20], consiste em dividir o sistema em células ou blocos de dimensão linear l . Embora o comprimento l à primeira vista, pareça ser arbitrário, deve-se tomar alguns cuidados para que este comprimento exceda comprimentos microscópicos, como alcance das interações e espaçamento da rede, mas que ao mesmo tempo seja menor que o comprimento de coerência ou correlação ξ . Quanto à fenomenologia da transição de fase, a construção de uma teoria de campos só é possível se adequadamente escrita para um sistema que, quando resfriado de uma fase desordenada de altas temperaturas para uma fase ordenada de baixas temperaturas, não se ordena instantaneamente. Ao invés disso, o comprimento de escala das regiões ordenadas cresce com o tempo passando por diferentes fases da simetria quebrada, que competem entre si para selecionar o estado de equilíbrio do sistema.

O funcional coarse-grained da energia livre de Helmholtz para um sistema tipo Ising é também conhecido como hamiltoniano de Ginzburg-Landau-Wilson. A seguir será realizada uma breve apresentação do esquema descritivo do processo de construção do hamiltoniano, que por sinal está muito bem apresentado na referência [20].

Inicia-se escrevendo o hamiltoniano de Ising na ausência de campo externo sobre a rede cúbica original d -dimensional ($d = 2, 3, 4$) e espaçamento da rede a :

$$H_{Ising} = -J \sum_{i \neq j} S_i S_j. \quad (2.43)$$

Dividindo a rede original em blocos de dimensão linear l e definindo assim uma variável $\Phi_l(\vec{x})$, onde \vec{x} é o centro de geométrico do bloco:

$$\Phi_l(\vec{x}) = \left(\frac{1}{l^d} \right) \sum_{i \in \text{celula } r} S_i. \quad (2.44)$$

Podemos dizer que as células Φ_l é um contínuo de sítios $\{\vec{x}\}$, ou ainda via um processo de reescalonamento da rede original cujos espaçamentos da rede são unitários, estes campos passam a ocupar sítios

$\{i\}$ de uma rede regular. Desta maneira o fator de Boltzmann para o hamiltoniano de Ising segue da seguinte maneira:

$$P(\{S_i\}) = \frac{1}{Z} \exp(-H_{Ising}/kT). \quad (2.45)$$

Agora, a probabilidade de que uma configuração de $\{\Phi_l\}$ ocorra no equilíbrio térmico para o caso ferromagnético (J positivo) é determinada pelo seguinte fator de Boltzmann:

$$P(\{\Phi_l(r)\}) = \frac{1}{Z} \exp(-H_{GLW}[\Phi_l(r)]) \quad (2.46)$$

onde H_{GLW} é conhecido como Hamiltoniano de Ginzburg-Landau-Wilson e sua versão discreta em termos dos sítios da rede é dada pela seguinte expressão:

$$\begin{aligned} H_{GLW}[\Phi_l(i)] = & l^d \sum_i \left[\frac{r}{2} \Phi_l(i)^2 + \frac{u}{4} \Phi_l(i)^4 + \frac{v}{6} \Phi_l(i)^6 \right] + \dots \quad (2.47) \\ & \dots + \frac{1}{2} l^d \sum_{\langle ij \rangle} C \left(\frac{(\Phi_l(i) - \Phi_l(j))}{l} \right)^2 + \dots \end{aligned}$$

os índices $\langle ij \rangle$ denotam soma sobre pares de vizinhos próximos na rede. A forma contínua deste mesmo Hamiltoniano fica

$$\begin{aligned} H_{GLW}(\{\Phi_l(\vec{x})\}) = & \int d\vec{x} \left[\frac{r'}{2} \Phi(\vec{x})^2 + \frac{u'}{4} \Phi(\vec{x})^4 + \frac{v'}{6} \Phi(\vec{x})^6 + \dots \right] + \\ & + \int d\vec{x} \left[\frac{1}{2} C' (\nabla \Phi(\vec{x}))^2 + \dots \right]. \quad (2.48) \end{aligned}$$

Na forma que está escrito o hamiltoniano de Ginzburg-Landau-Wilson, a constante ($\beta = 1/kT$) do fator de Boltzmann foi absorvido pelos parâmetros ($r, u, v, \dots, r', u', v'$) da expansão da energia livre de Helmholtz. As propriedades críticas universais do Hamiltoniano de Ginzburg-Landau-Wilson e do modelo de Ising são idênticas, ou seja, esses modelos pertencem a mesma classe de universalidade, exceto para

pequenos comprimentos de ondas, onde comportamentos microscópicos do modelo de Ising são sacrificados pelo processo de coarse-graining da energia livre de Helmholtz.

A teoria de Landau, como mencionado em seções anteriores, fornece base teórica para modelagem de materiais via teorias de campo contínuo. Neste caso usaremos as aproximações de uma teoria de campos Φ^4 , onde os termos de ordens mais altas nos campos serão omitidos ao se escrever um modelo para uma teoria de campo escalar contínuo de spins $\Phi_i(\vec{x})$ definido no intervalo $-\infty < \Phi_i(\vec{x}) < +\infty$. Para o caso de rede constituída por sítios discretos o modelo Φ^4 é dado pelo seguinte funcional de energia livre:

$$H_{\Phi^4}[\Phi(i)] = \sum_i \left[\frac{r}{2} \Phi^2(i) + \frac{u}{4} \Phi^4(i) + \frac{C}{2} \sum_{j=1}^d [\Phi(j) - \Phi(i)]^2 \right] \quad (2.49)$$

onde o índice j indica os vizinhos mais próximos aos sítios i . A forma contínua deste Hamiltoniano fica da seguinte maneira:

$$H_{\Phi^4}[\Phi(\vec{x})] = \int d\vec{x} \left[\frac{r}{2} \Phi(\vec{x})^2 + \frac{u}{4} \Phi(\vec{x})^4 + \frac{1}{2} C (\nabla \Phi(\vec{x}))^2 \right] \quad (2.50)$$

Neste formalismo que acabamos de mostrar, os parâmetros são mantidos constantes e devem ser sistematicamente ajustados a fim de que esta seja uma teoria condizente com as aproximações de Landau-Ginzburg ou até mesmo permita mapear adequadamente modelos microscópicos, tais como o modelo de Ising, em certos limites da teoria.

Em muitos casos normalmente procura-se explorar um crossover saindo de regiões nas quais o sistema apresenta comportamentos do tipo ordem-desordem, isto é, onde se mantém o parâmetro C fixo porém toma-se $r \rightarrow -\infty$ e $u \rightarrow \infty$. No ferromagneto, isso corresponde ao limite de interações de vizinhos próximos num sistema tipo Ising. Indo para regiões dominadas pelo limite displacivo, ou seja, para $r \rightarrow 0$, mantendo u e C fixos, as transições de fases são depreciadas para zero e o comportamento crítico é caracteristicamente gaussiano [20].

2.1.4 Reparametrização do modelo

A teoria de campos Φ^4 , embora tenha fornecido um dos modelos de campos contínuos comumente usados para se desenvolver estudos

de fenômenos críticos e transição de fase, não deve ser confundido com a versão coarse-grained do sistema de Ising, uma vez que, reparametrizando adequadamente o modelo Φ^4 , suas propriedades críticas podem ser aceitas na mesma classe de universalidade de Ising. No entanto, o mesmo modelo, sob efeito de outras reparametrizações serve como base de estudos teóricos em muitos tipos diferentes de transições de fases [24].

Vamos reescrever o Hamiltoniano (2.56) de forma que o fator β não seja necessariamente absorvido pelos parâmetros:

$$\beta H_{\Phi^4} [\Phi(i)] = \sum_i \left[\frac{r}{2} \Phi^2(i) + \frac{u}{4} \Phi^4(i) \right] + \frac{C}{2} \sum_{\langle ij \rangle} [\Phi(i) - \Phi(j)]^2. \quad (2.51)$$

A fim evitar o uso de parâmetros redundantes, o conveniente é que se faça uma reparametrização do modelo. Segue uma forma consiste de se absorver o parâmetro C numa variável de campo de maneira tal que o campo seja modificado mas as propriedades do Hamiltoniano se mantenham invariantes:

$$\varphi = C^{\frac{1}{2}} \Phi \quad (2.52)$$

$$\theta = r/C \quad (2.53)$$

$$\chi = u/C^2 \quad (2.54)$$

Substituindo estes novos parâmetros na equação (2.51), um novo Hamiltoniano é obtido com apenas dois parâmetros:

$$\beta H_{\varphi^4} \{\varphi(i)\} = \sum_i \left[\frac{\theta}{2} \varphi^2(i) + \frac{\chi}{4} \varphi^4(i) + \frac{1}{2} \sum_j [\varphi(j) - \varphi(i)]^2 \right] \quad (2.55)$$

A forma contínua deste Hamiltoniano é descrita pela expressão abaixo:

$$\beta H_{\varphi^4} [\varphi(\vec{x})] = \int d\vec{x} \left[\frac{\theta}{2} \varphi(\vec{x})^2 + \frac{\chi}{4} \varphi(\vec{x})^4 + \frac{1}{2} (\nabla \varphi(\vec{x}))^2 \right] \quad (2.56)$$

Naturalmente são atribuídos valores pequenos para os parâmetros θ e χ , de forma a garantir perfis de magnetização para o sistema magnético. Como caso inicial estes parâmetros assumem valores unitários.

3 SIMULAÇÕES DE LANGEVIN

Neste capítulo será realizado um estudo sobre as equações que favorecem o mecanismo de crescimento dos domínios magnéticos, quando o sistema magnético é resfriado de um estado desordenado em altas temperaturas para um estado ordenado em baixas temperaturas, via contato de modelos puros (em campo externo nulo) com um banho térmico. A dinâmica natural para este tipo de mecanismo é descrita por uma equação diferencial estocástica de Langevin, onde a relaxação do campo Φ a valores que minimizam a energia é compensada pelo efeito de um ruído térmico Gaussiano. Em seguida são apresentadas as técnicas computacionais que permitem integrar as equações de Langevin numericamente.

3.0.1 A equação de Langevin

O movimento aleatório de partículas livres suspensas em líquidos, também conhecido como movimento Browniano, segundo a interpretação de Einstein deve-se ao fato de cada partícula browniana ser constantemente e incessantemente impactada por colisões de moléculas que constituem o líquido. Por se tratar de um movimento extremamente complicado, sua descrição probabilística em termos de impactos estatisticamente independentes é a única forma viável, culminando assim numa equação de difusão que pode ser escrita da seguinte maneira [25]:

$$\frac{\partial f(\vec{x}, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f(\vec{x}, t)}{\partial x^2} \quad (3.1)$$

onde $f(\vec{x}, t)$ é a função de distribuição de probabilidade do caminho aleatório percorrido pela partícula Browniana, D é o coeficiente de difusão que depende das propriedades físicas do sistema.

Alternativamente a formulação proposta por Einstein, no ano de 1908 o físico francês Paul Langevin propôs uma equação fenomenológica newtoniana com base na hipótese de que existem dois tipos de forças agindo sobre a partícula Browniana [25]:

(i) Uma força estocástica $F(t)$, que representa os constantes e incessantes impactos sobre a partícula Browniana.

(ii) Uma força de viscosidade, também chamada de força friccional (força sistemática) atuando sobre a partícula Browniana em uma escala maior de tempo.

A equação de Langevin para o movimento Browniano pode ser obtida pelo seguinte desenvolvimento partindo de uma equação de Newton:

$$m \frac{dv}{dt} = -\frac{v}{B} + F(t) \quad (3.2)$$

onde B é conhecido como mobilidade, e a razão v/B é a força de viscosidade. Introduzindo uma força conservativa em termos do gradiente do potencial $V(\vec{x})$, obtemos a seguinte expressão:

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{1}{B} \frac{dx}{dt} - \frac{\partial V(\vec{x})}{\partial x} + F(t) \quad (3.3)$$

onde iremos supor que a força de viscosidade seja muito maior que o termo de inércia ($m \frac{d^2x}{dt^2}$), no sentido de que queremos descrever a relaxação de x para mínimos da energia e não oscilações em torno a esse mínimo. Sendo assim segue abaixo a equação de Langevin:

$$\frac{1}{B} \frac{dx}{dt} = -\frac{\partial V(\vec{x})}{\partial x} + F(t). \quad (3.4)$$

Sobre $F(t)$, o termo que representa a força estocástica, Langevin fez duas hipóteses que completam sua teoria sobre movimento Browniano:

(i) Em média a força estocástica é sempre igual a zero:

$$\langle F(t) \rangle = 0 \quad (3.5)$$

(ii) Cada colisão não depende das colisões anteriores sobre a partícula Browniana, ou seja, as colisões são estatisticamente independentes:

$$\langle F(t)F(t') \rangle = C\delta(t - t') \quad (3.6)$$

como será visto mais adiante, C dá intensidade de $F(t)$.

Para determinar as propriedades dinâmicas de Hamiltonianos fenomenológicos, a teoria de Langevin será generalizada para uma teoria de campos contínuos. Uma equação de Langevin quando escrita de forma

apropriada garante a dinâmica do parâmetro de ordem do sistema. No sistema magnético as variações desse parâmetro de ordem se dão de forma lenta no espaço e suas configurações espaciais são governada por uma forma de energia livre. Durante o processo de resfriamento os parâmetros de ordem $\Phi(\vec{x})$ não são conservados, neste caso a equação de Langevin para o Hamiltoniano de Ginzburg-Landau corresponde ao modelo *A* segundo a nomenclatura de Hohenberg e Halperin [24].

Assumindo que no equilíbrío a estatística destes parâmetros de ordem seja governada por um Hamiltoniano efetivo, a equação de Langevin é dada pela seguinte expressão:

$$\frac{\partial \Phi_i}{\partial t} = -\Gamma \frac{\delta H[\Phi]}{\delta \Phi_i} + \eta(\vec{x}, t). \quad (3.7)$$

onde Γ é chamada de mobilidade e define uma escala temporal para a dinâmica. A equação acima é uma equação diferencial estocástica, onde o termo $\eta(\vec{x}, t)$ é um ruído branco gaussiano com média zero e decorrelacionado. Seguem abaixo algumas de suas propriedades:

$$\langle \eta(x, t) \rangle = 0, \quad (3.8)$$

$$\langle \eta(x', t') \eta(x, t) \rangle = C \delta(t - t') \delta(x - x'). \quad (3.9)$$

Em alguns casos, a dinâmica é tratada sem o termo de ruído térmico, no sentido de ser puramente relaxacional e convergindo aos mínimos locais de uma energia livre de campo médio. O intuito de utilizar uma dinâmica não determinística é justamente levar em conta todas as flutuações relevantes.

Ainda no contexto de processos de difusão, associada à equação de Langevin (3.7), uma equação que descreve a evolução da distribuição de probabilidade $W(\Phi_i, t)$ no tempo, também conhecida como equação de Fokker-Planck, é dada pela seguinte expressão [12]:

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \sum_i \left(\Gamma W \frac{\partial H}{\partial \Phi_i} + \frac{1}{2} C \frac{\partial^2 W}{\partial \Phi_i^2} \right). \quad (3.10)$$

Supondo que $W(\Phi_i, t)$ a distribuição de probabilidade de Gibbs

$$W_G(\Phi_i, t) \propto \exp[-\beta H(\Phi_i)] \quad (3.11)$$

seja uma possível solução da equação de Fokker-Planck, substituindo (3.11) em (3.10), obtemos a seguinte equação:

$$\frac{\partial W_G}{\partial t} = \sum_i \frac{\partial}{\partial \Phi_i} \left(\left(\Gamma - \frac{1}{2} \beta C \right) W_G \frac{\partial H}{\partial \Phi_i} \right) \quad (3.12)$$

Para uma solução estacionária ($\partial W/\partial t = 0$), temos que $C = \Gamma kT$. O parâmetro C é escolhido de forma a garantir que o limite assintótico da equação de Langevin corresponda ao estado de equilíbrio dado pela distribuição de Gibbs para qualquer temperatura. O termo de mobilidade Γ pode ser absorvido como unidade da escala de tempo, e as unidades escolhidas tal que a constante de Boltzmann seja $k = 1$.

3.0.2 A equação de Bragg-Williams dependente do tempo

A equação de Langevin para a energia livre de Bragg-Williams é uma equação diferencial parcial estocástica dependente do tempo. Relembrando, a energia livre de Bragg-Williams é dada pela equação abaixo:

$$F[\Phi(\vec{x})] = \frac{1}{2} \int d\vec{x} [J(\nabla\Phi(\vec{x}))^2 - T_c\Phi^2(\vec{x})] + \frac{T}{2} \int dx \left[(1 + \Phi(\vec{x})) \ln \left(\frac{1 + \Phi(\vec{x})}{2} \right) \right] + \quad (3.13)$$

$$+ \frac{T}{2} \int d\vec{x} \left[(1 - \Phi(\vec{x})) \ln \left(\frac{1 - \Phi(\vec{x})}{2} \right) \right] - h\Phi(\vec{x}) \quad (3.14)$$

sua equação de Langevin no espaço real é escrita da seguinte maneira:

$$\frac{\partial \Phi(\vec{x})}{\partial t} = -\frac{T}{2} \ln \frac{1 + \Phi(\vec{x})}{1 - \Phi(\vec{x})} - (J\nabla^2\Phi(\vec{x}) - T_c\Phi(\vec{x})) + h + \eta(\vec{x}, t) \quad (3.15)$$

Esta mesma equação pode ser escrita no espaço de Fourier. Uma das grandes vantagens neste caso é poder escrever o termo de laplaciano de maneira bem simples. Como ponto de partida vamos escrever as transformadas de Fourier dos campos:

$$\hat{\Phi}(\vec{k}) = \int d\vec{x} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \Phi(\vec{x})$$

$$\Phi(\vec{x}) = \frac{1}{V} \int d\vec{k} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \hat{\Phi}(\vec{k}) \quad (3.16)$$

Usando as relações acima, o laplaciano é representado por

$$[\nabla^2\Phi]_k = \int d\vec{x} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \nabla^2\Phi(\vec{x}) = -k^2\Phi(\vec{k}). \quad (3.17)$$

Como será visto nas seções seguintes, as soluções numéricas podem ser realizadas parte delas no espaço real e outra parte no espaço de Fourier, dependendo da relevância dos custos computacionais. Segue abaixo a versão com o termo de laplaciano escrito no espaço de Fourier e os demais termos no espaço real:

$$\frac{\partial\Phi(\vec{x})}{\partial t} = -T \tanh^{-1} \Phi(\vec{x}) - \left[A(\vec{k})\Phi(\vec{k}) \right]_{\vec{x}}^{FT} + h + \eta(\vec{x}, t) \quad (3.18)$$

Com $A(\vec{k}) = -Jk^2 - T_c$. Note que $\lim_{\Phi \rightarrow \pm 1} \tanh^{-1} \Phi = \pm\infty$. A quantidade $\left[A(\vec{k})\Phi(\vec{k}) \right]_{\vec{x}}^{FT}$ indica que os termos entre colchetes serão resolvidos no espaço de Fourier e depois anti-transformados para o espaço real para garantir consistência da solução.

3.0.3 A equação de Landau-Ginzburg dependente do tempo

Para a energia livre de Landau-Ginzburg, a equação de Langevin também é uma equação diferencial estocástica dependente do tempo. Suas soluções numéricas serão apresentadas tanto no espaço real quanto no espaço de Fourier. Segue sua representação no espaço real:

$$\frac{\partial\Phi(\vec{x})}{\partial t} = J\nabla^2\Phi(\vec{x}) - r\Phi(\vec{x}) - 2u\Phi^3(\vec{x}) + \eta(\vec{x}, t) \quad (3.19)$$

No espaço de Fourier a mesma equação tem a seguinte estrutura:

$$\frac{\partial\hat{\Phi}(\vec{k})}{\partial t} = -Jk^2\hat{\Phi}(\vec{k}) - r\hat{\Phi}(\vec{k}) + \left[-2u\hat{\Phi}^3(\vec{x}) + \eta(\vec{x}, t) \right]_k^{FT} \quad (3.20)$$

Para o caso em que a teoria de Landau é aproximada por uma teoria de campo médio de Bragg-Williams os parâmetros fenomenológico

são $J = zT_c$, onde z indica o número de coordenação da rede, $r = T - T_c$ e $u = T_c/6$. Para a teoria de Landau escrita em termos da expansão da energia livre com argumentos de simetrias do parâmetro de ordem, os parâmetros foram tomados como sendo $J = 1.0$, $r = -1.0$ e $u = 1.0$.

3.0.4 Soluções numéricas

Integrar uma Equação Diferencial Parcial (EDP) nem sempre é uma das tarefas mais fáceis a serem executadas, ou por motivos de não-linearidade do problema ou pela própria complexidade do sistema estudado. Em casos onde as soluções analíticas se tornam extremamente complicadas ou até mesmo impossíveis, aproximações das soluções via técnicas computacionais fornecem as melhores saídas. Existem uma quantidade consideravelmente grande de técnicas computacionais que, se aplicadas adequadamente ao problema, suas soluções convergem com bastante precisão e acurácia para valores reais das soluções. A seguir serão apresentadas de forma sucinta as versões discretas das equações de Langevin apresentadas nas duas seções anteriores, e um dos métodos de discretização de EDP's bastante usado é o método de diferenças finitas de Euler, onde por motivos de estabilidades numéricas e custos computacionais foram desenvolvidos métodos explícitos e implícitos no tempo, porém no espaço real o método implícito é o que oferece estabilidades numéricas incondicionais, ou seja, independente dos tamanhos dos elementos finitos da discretização do sistema, as soluções sempre convergem para valores reais da solução, este método nem sempre é facilmente aplicado. Neste caso a alternativa será recorrer ao espaço de Fourier, onde os termos de discretização da equação se tornam relativamente fáceis e as técnicas computacionais já são bastante desenvolvidas.

Para se determinar as soluções de uma EDP numericamente é preciso antes de mais nada transformá-la para obter uma representação em termos de operações aritméticas que possam ser executadas pelo computador, ou seja, devemos discretizá-la num conjunto de pontos ou vértices numa rede ou malha. Uma das formas apropriadas para se determinar a solução aproximada das equações de Langevin por diferenças finitas consiste em fatiar o domínio fechado ($\mathbb{R}^2 \times [0, t_{Max}]$), que contém as dimensões lineares do sistema L e o tempo t por um conjunto de linhas paralelas aos eixos x , y e t , com o propósito de formar um grid ou uma

malha. Para cada espaçamento entre duas linhas consecutivas devemos escrever as diferenças referentes a $\Delta x = \Delta y$ e Δt , que são os intervalos entre as linhas paralelas aos eixos coordenados x , y e t , respectivamente. Os pontos da malha são aqueles pontos que ficam no cruzamento destas linhas. Vamos denotá-los por $(x_i = i\Delta x, y_j = j\Delta y, t_n = n\Delta t)$, $i = 0, 1, 2, \dots, I$, $j = 0, 1, 2, \dots, J$ e $n = 0, 1, 2, \dots, t_{Max}$ [26].

O número de sítios da rede é dado pela quantidade $N = L^2$. Os tamanhos dos passos são $\Delta x = 1$, $\Delta y = 1$ e $\Delta t = 0.01$ quando se usa o método explícito e $\Delta t = 0.1$ para o método implícito. Estes valores foram assim escolhidos de tal maneira a conservar a estabilidade numérica da simulação. Quanto aos parâmetros de acoplamento J , r e u , as regiões de interesse são aquelas nas quais as temperaturas mediadas estão abaixo da temperatura crítica. Nessas regiões, os valores desses parâmetros permitem o sistema se equilibrar na fase ordenada. Abaixo serão descritas as versões discretas da equação de Bragg-Williams dependente do tempo e da equação de Landau-Ginzburg dependente do tempo.

Método implícito

O método implícito fornece soluções incondicionalmente estáveis, possibilitando a escolha do tamanho dos elementos finitos Δx , Δy e Δt que melhor atendam a performance da simulação. Abaixo segue a equação de Bragg-Williams é integrada implicitamente, onde a parte que envolve o Laplaciano $\left(\left[A(\vec{k})\Phi(\vec{k}) \right]_{\vec{x}}^{FT} \right)$ foi calculada no espaço de Fourier e em seguida transformada para o espaço real, tal que:

$$\begin{aligned} \Phi(\vec{x}, t + \Delta t) = \tanh \left[-\frac{\Phi(\vec{x}, t + \Delta t)}{T\Delta t} + \frac{1}{T}\Phi(\vec{x}, t) + \right. \\ \left. + \frac{1}{T} \left(h - \left[A(\vec{k})\Phi(\vec{k}, t) \right]_{\vec{x}}^{FT} + \mu(\vec{x}, t) \sqrt{\frac{2T}{\Delta x \Delta y \Delta t}} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.21)$$

onde $\Phi(\vec{x}, t + \Delta t)$ é dado pela solução numérica desta equação, do tipo $\Phi = \tanh(A\Phi + B)$, que foi obtida utilizando o método de Halley com

critério de parada de 10^{-4} para determinar a raiz da equação 3.21 para cada sítio da rede [27].

A equação de Landau-Ginzburg foi escrita de forma totalmente implícita, no sentido da derivada espacial, no espaço de Fourier, como:

$$\begin{aligned} \frac{\hat{\Phi}(\vec{k}, t + \Delta t) - \hat{\Phi}(\vec{k}, t)}{\Delta t} = & -Jk^2 \hat{\Phi}(\vec{k}, t + \Delta t) - r \hat{\Phi}(\vec{k}, t) + \\ & + \left[-2u\Phi^3(\vec{x}, t) + \mu(\vec{x}, t) \sqrt{\frac{2T}{\Delta x \Delta y \Delta t}} \right]_{\vec{k}}^{FT} \end{aligned} \quad (3.22)$$

de maneira que sua solução é dada pela expressão:

$$\begin{aligned} \hat{\Phi}(\vec{k}, t + \Delta t) = & \frac{1}{1 + J\Delta t k^2} \left[(1 - r\Delta t) \hat{\Phi}(\vec{k}, t) \right] + \\ & + \frac{1}{1 + J\Delta t k^2} \left[-2u\Delta t \hat{\Phi}^3(\vec{x}) + \mu(\vec{x}, t) \sqrt{\frac{2T\Delta t}{\Delta x \Delta y}} \right]_{\vec{k}}^{FT} . \end{aligned} \quad (3.23)$$

No capítulo seguinte serão discutidos os resultados das simulações para as equações apresentadas neste capítulo. Para cada processo fez-se necessário fornecer condições iniciais para os campos Φ . Os processos foram iniciados num estado desordenado, as condições iniciais neste caso são atribuídas aos campos por um gerador de números aleatórios gaussianos. Os valores de T_c e J em todos modelos foram tomados como 1. Os tamanhos simulados são de $L = 16, 32$ e 64 . As médias foram realizadas utilizando técnicas de reamostragem [28].

4 RESULTADOS

Neste capítulo serão apresentados os resultados dos processos de resfriamento do sistema magnético. Estes processos tem por objetivo revelar as propriedades críticas do sistema, via transformações das grandezas termodinâmicas, bem como seu comportamento natural em diferentes estados de equilíbrio termodinâmico. Cada processo tem início numa temperatura $T_{inicial}$ acima da temperatura crítica de Curie (T_c) e, após um conjunto de passos de temperatura igualmente espaçados chega-se a uma temperatura final T_{final} igual a zero. Para cada intervalo de temperatura torna-se necessário esperar um tempo suficiente para que o sistema se encontre em equilíbrio térmico. Durante esse processo toma-se medidas do parâmetro de ordem e outras quantidades em função da temperatura. O resfriamento é inicializado com as configurações dos parâmetros de ordem na fase desordenada, atingindo o equilíbrio na fase totalmente ordenada ao final do processo. Necessariamente, esse procedimento deve ser repetido um número consideravelmente grande de vezes e o tempo de simulação deve ser longo, de forma a ser suficiente para se assegurar resultados estatisticamente refinados.

No limite termodinâmico, onde as extensões do sistema são infinitas, as amplitudes das flutuações divergem assintoticamente na temperatura crítica e o comprimento de correlação ξ tende ao infinito em T_c . Neste limite, quantidades como o calor específico, a suscetibilidade e o comprimento de correlação crescem com uma certa lei de potência em função da temperatura, determinando assim um conjunto de expoentes críticos que indicam a classe de universalidade à qual o sistema pertence. Para os modelos estudados nesse trabalho há indicativos de que todos pertencem a mesma classe de universalidade do modelo de Ising $2D$. Como o tamanho do sistema magnético aqui simulado é finito, fez-se necessário o uso de análise de escalonamento de tamanho finito (*Finite Size Scaling*) para estimar os expoentes críticos de cada modelo e determinar as propriedades críticas do sistema.

4.1 TEMPO DE EQUILÍBRIO (τ_{eqt}) E TEMPO DE DESCORRELAÇÃO (τ_{corr})

O tempo que o sistema magnético leva para suas propriedades físicas cessarem de mudar é chamado de tempo de equilíbrio. Para se determinar o tempo de equilíbrio foram desenvolvidos algoritmos que permitem medir a dinâmica do parâmetro de ordem em função do tempo. Também foram selecionados alguns valores de temperatura e para cada um destes valores a dinâmica foi realizada sob dois pontos de partida diferente, um com a condição inicial do parâmetro de ordem tomando valores do estado fundamental, o outro sob a condição inicial do sistema desordenado. Ao visualizar as duas curvas num mesmo gráfico, o local de encontro destas curvas é o ponto que marca o tempo de equilíbrio. Para todos os casos foi escolhido o maior tamanho de rede, a saber $L = 90$. Na figura 3 segue o gráfico ilustrativo da dinâmica da magnetização para a aproximação de Bragg-Williams.

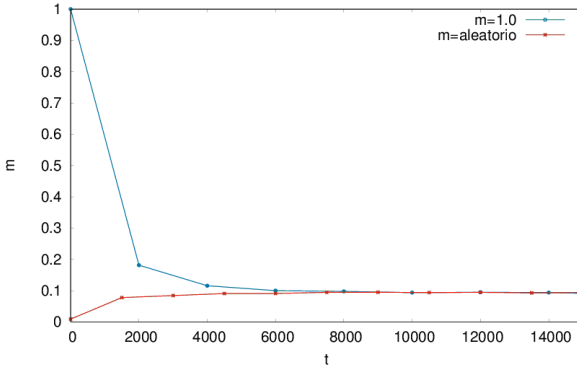


Figura 3 – Dinâmica da magnetização para o Hamiltoniano de Bragg-Williams (modelo completo). Numa temperatura $T = 0.5$, a condição inicial $m = 1.0$ gera a curva de magnetização em função do tempo que se encontra com a curva gerada sob condição inicial $m = aleatorio$ que corresponde a $m = 0$. A partir do ponto onde ocorre o encontro das duas curvas (no intervalo entre $t = 800$ e $t = 10000$) assume-se que o sistema esteja em equilíbrio

Um fato importante em simulações de sistemas de mecânica estatística é a independência estatísticas dos quantidades mensuráveis, neste caso o parâmetro de ordem deve estar decorrelacionado. A função de autocorrelação anunciada no capítulo de fundamentação teórica foi utilizada para produzir a curva de autocorrelação em função do tempo. O tempo de decorrelação pode ser estimado ao se assumir que no tempo $t = \tau_{dcl}$ (tempo de decorrelação) o valor característico exponencial da função de autocorrelação $e^{-t/\tau_{dcl}} = e^{-1}$. Esse tempo garante que o sistema esteja decorrelacionado. Usando a expressão dada pela equação (2.28) para medir a função de autocorrelação, foi construída a figura 4 e as tabelas de valores dos tempos de equilíbrio e tempos de decorrelação tanto para o modelo completo quanto para o caso $r = T - T_c$.

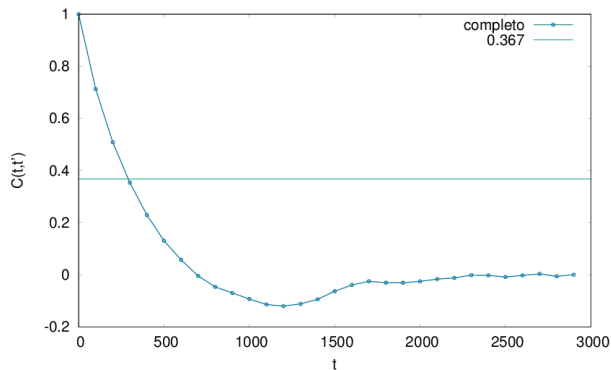


Figura 4 – Autocorrelação para o Hamiltoniano de Bragg-Williams-O tempo de decorrelação é medido quando a reta horizontal (0.367) cruza a curva da função de autocorrelação em função do tempo $C(t, t')$. Neste caso a temperatura do sistema é $T = 0.5$

Tabela 1 – Tempos de equilíbrio (τ_{egl}) e tempos de decorrelação (τ_{corr}) para o Hamiltoniano de Bragg-Williams (modelo completo), para o tamanho $L = 90$

T	τ_{egl}	τ_{corr}
0.7	1730	100
0.6	1860	100
0.5	10000	400
0.4	70000	200
0.3	80000	200
0.2	80000	200
0.1	80000	200
0.0	80000	200

Tabela 2 – Tempos de equilíbrio (τ_{egl}) e tempos de decorrelação (τ_{corr}) para o Hamiltoniano de Landau-Ginzburg ($r = (T - T_c)$), para $L = 90$

T	τ_{egl}	τ_{corr}
0.7	1700	100
0.6	1800	100
0.5	12000	311
0.4	68000	200
0.3	80000	200
0.2	80000	200
0.1	80000	200
0.0	80000	200

O tempo de equilíbrio e tempo de decorrelação do caso $r = T - T_c$ pode ser usado nas simulações do modelo com $r = \text{constante}$, pois foi constatado que estes tempos para o caso $r = T - T_c$ são maiores do que aqueles estimados para o caso $r = \text{constante}$, sendo assim pode-se garantir que todas as medidas foram feitas com o sistema equilibrado e decorrelacionado.

4.2 RESULTADOS

A transição de fase no ferromagneto é marcada pelo surgimento da magnetização espontânea quando o sistema é resfriado de um estado

desordenado em altas temperaturas para um estado ordenado em baixas temperaturas. A figura 5 mostra o gráfico da curva de magnetização para os três modelos estudados nesse trabalho.

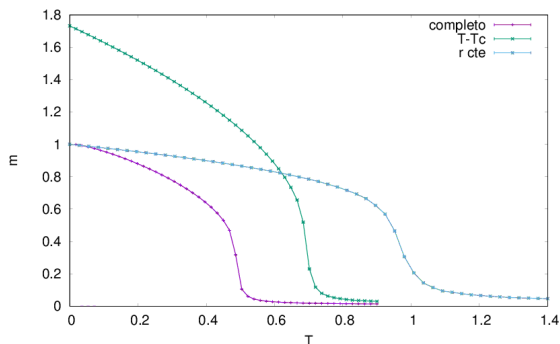


Figura 5 – Nesta figura observa-se as curvas de magnetização em função da temperatura para os três modelos onde a dimensão linear da rede quadrada é $L = 64$. A região de inflexão de cada curva sinaliza onde ocorre a transição de fase.

No modelo completo, o potencial local logarítmico limita a magnetização para que esta seja sempre $|m| \leq 1$, alcançando 1 em $T = 0$. No modelo com $r = T - T_c$ a solução $m = \pm \sqrt{3(T_c - T)/T_c}$ para valores menores que $T_c = 1$ faz com que em $T = 0$ a magnetização assumo o valor $m = \pm \sqrt{3}$. Para o caso com $r = \text{constante}$ a magnetização é igual a 1 na temperatura $T = 0$ devido a solução $m = \pm \sqrt{-r/u}$, como $r = -1$ e $u = 1$, em $T = 0$ a magnetização vale 1.

A seguir, na figura 6 está o gráfico da energia, comparando também os três modelos, no caso de $L = 64$. Observa-se que há a tendência de um crescimento linear da energia com a temperatura, passando por flutuações nas regiões de temperatura crítica. No modelo completo observa-se, conforme aumenta a temperatura, um crescimento até a região de temperatura crítica, que a partir deste ponto ocorre uma saturação e após isso um decréscimo. Uma consequência seria a observação de um calor específico negativo. Em primeiras análises, especula-se que tal fato esteja relacionado a forma na qual foi calculado

o potencial local da equação (2.35):

$$V_{local} = \frac{T}{2} \int d\vec{x} \left[(1 + \Phi(\vec{x})) \ln \left(\frac{1.0000001 + \Phi(\vec{x})}{2} \right) \right] \\ + \frac{T}{2} \int d\vec{x} \left[(1 - \Phi(\vec{x})) \ln \left(\frac{1.0000001 - \Phi(\vec{x})}{2} \right) \right] \quad (4.1)$$

de maneira a evitar que os argumentos dos termos logarítmicos nunca se anulem, mesmo quando o parâmetro de ordem toma valores em $+1$ ou -1 evitando assim divergências no cálculo da energia.

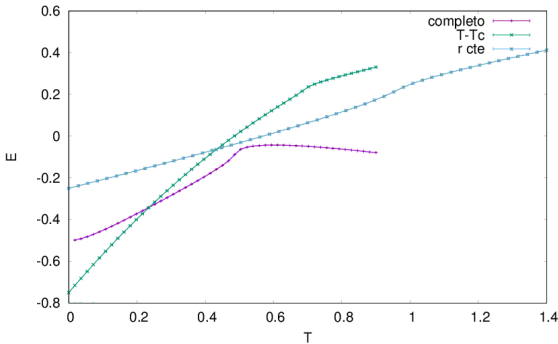


Figura 6 – Gráfico da energia em função da temperatura para os três modelos no caso de $L = 64$.

Mesmo assim, essa aproximação não influencia na dinâmica, e próximo a temperatura crítica o sistema se comporta conforme o esperado.

O calor específico é uma quantidade que mede as flutuações da energia. Somente no limite termodinâmico é possível ver uma divergência desta quantidade no ponto marcado pela temperatura crítica. Como se trata de sistemas finitos, observa-se apenas máximos nas regiões de temperatura crítica. É esperado que para baixas temperaturas ($T < T_c$) o calor específico seja próximo de zero devido ao pequeno valor da energia nesta região, acima da temperatura crítica o calor específico

tende a zero devido ao fato de se comportar com $1/T^2$. O calor específico dos três modelos estão representados graficamente na figura 7. Nota-se que a mudança brusca no comportamento da energia visto no caso do modelo completo na figura 6 resulta em um calor específico mais alto, em relação aos outros modelos.

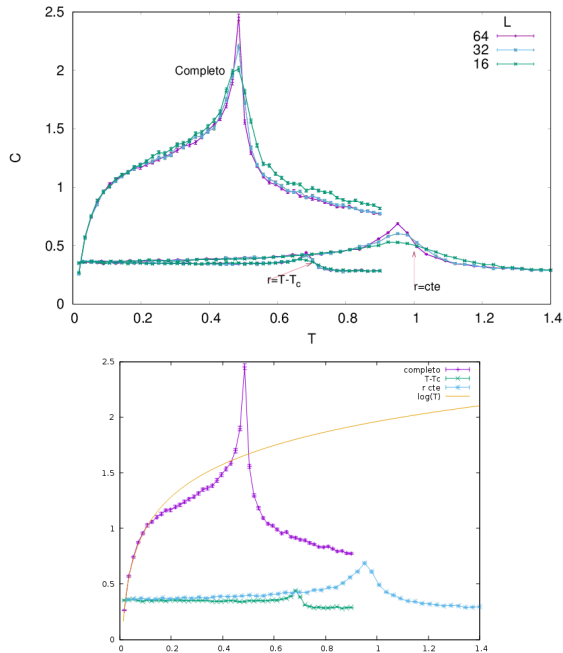


Figura 7 – Nestes gráficos estão sendo representados o calor específico em função da temperatura para os três modelos efetivos: acima para todos tamanhos simulados, e abaixo para $L = 64$, onde a linha contínua é um ajuste por uma função logarítmica do tipo $A + B \log(T)$.

As propriedades de baixa temperatura, o comportamento tipo $\log(T)$, é diferente do comportamento esperado na aproximação de campo médio do modelo de Ising: $C(T) \sim (T_c/T)^2 \exp(-2T_c/T)$ [23].

No entanto este comportamento deve ser analisado com mais cuidado devido ao mesmo argumento usado para explicar os comportamentos da energia visto na figura 6.6. Nos modelos com $r = T - T_c$ e $r = \text{constante}$ onde a temperatura crítica é pouco afetada pelas flutuações térmicas, observa-se apenas uma flutuação constante em baixa temperatura.

A figura 8 mostra a suscetibilidade em função da temperatura que por sua vez apresenta divergência na temperatura crítica em função do tamanho do sistema. Neste caso incluímos três tamanhos diferentes de rede, desta maneira pode-se ter uma noção do crescimento dos máximos com a dimensão linear do sistema. Na próxima seção esse crescimento será analisado em detalhe.

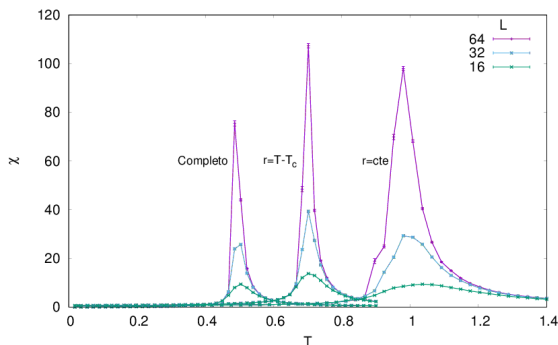


Figura 8 – Suscetibilidade para os diferentes tamanhos de rede ($L = 16$, $L = 32$ e $L = 64$), para os três diferentes modelos efetivos.

4.3 ANÁLISE DE TAMANHO FINITO

Um dos principais objetivos em estudos de fenômenos críticos e transição de fase é estimar o valor da temperatura crítica do sistema. Além de observar os máximos das funções resposta, observa-se que o cumulante de Binder medido em função da temperatura carrega propriedades fundamentais que o torna imprescindível no cálculo de T_c . Para um dado modelo efetivo simulado em diferentes tamanhos de rede, todas as curvas do cumulante de Binder se cruzam num ponto especial, que é o ponto de temperatura crítica (T_c) do sistema. Este fenômeno fica melhor visualizado na figura 9.

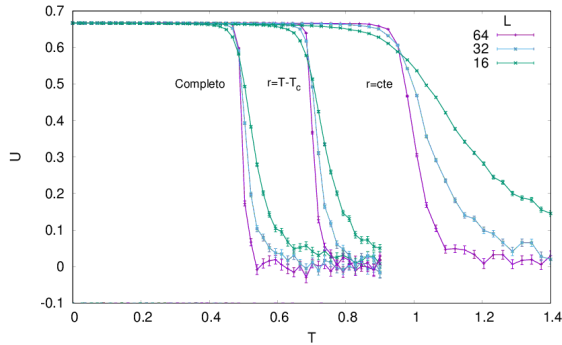


Figura 9 – Gráfico do cumulante de Binder em função da temperatura dos três modelos efetivos para diferentes tamanhos de redes. Observa-se claramente em cada modelo o cruzamento das curvas dos diferentes tamanhos de rede onde são os prováveis pontos críticos do sistema.

Para cada modelo foi feita uma interpolação linear das curvas do cumulante de Binder passando pelo cruzamento destas curvas. Por via destes procedimentos foram obtidos os valores da temperatura crítica que estão na tabela a seguir.

A T_c do modelo completo é menor porque o valor de Φ é limitado por um potencial duro entre ± 1 , concentrando as flutuações entre esses valores, justamente onde estão as paredes de domínio entre magnetiza-

Tabela 3 – Temperaturas críticas

Modelo efetivo	Temperatura crítica (T_c)
Bragg-Williams	0.49 ± 0.02
$r = T - T_c$	0.69 ± 0.01
$r = \text{constante}$	0.95 ± 0.03

ções opostas. No modelo $T - T_c$ o valor de Φ tem liberdade para flutuar para valores maiores que $|\Phi| > \sqrt{3(1 - T)}$, diminuindo a influência das flutuações nas paredes de domínio.

Para uma análise mais refinada das medidas das temperaturas que estão na tabela acima torna-se necessário fazer simulações em tamanhos de redes maiores, mas principalmente uma quantidade maior de temperaturas medidas em cada processo de resfriamento.

A técnica de análise de tamanho finito (FSS) fornece uma maneira de se extrair conhecimentos de quantidades cujas propriedades relevantes só se manifestam no limite termodinâmico, mesmo que na prática as simulações são feitas para sistemas de tamanho finito. É conhecido que no limite termodinâmico o parâmetro de ordem assim como as funções respostas, tais como calor específico e suscetibilidade se comportam como uma lei de potência com o seguinte caráter: $m \sim |t|^\beta$, $\chi \sim |t|^{-\gamma}$ e $c \sim |t|^{-\alpha}$ respectivamente, onde $t = \frac{|T_c - T|}{T_c}$. A hipótese principal para essa teoria de escala é que a razão L/ξ_∞ controla os comportamentos do sistema finito próximo a T_c , onde L é a dimensão linear do sistema e ξ_∞ o comprimento de correlação do sistema infinito. Seja $\xi_\infty \propto |t|^{-\nu}$, podemos reescrever as quantidades que se comportam como leis de potência em função da temperatura agora em termos de uma lei de potência em função do comprimento de correlação ξ (como por exemplo a suscetibilidade em termo do comprimento de correlação: $\chi \sim \xi^{\gamma/\nu}$). Sendo assim, é possível escrever relações de escalas de quantidades como suscetibilidade e calor específico com o tamanho finito do sistema na vizinhança da temperatura crítica T_c . O calor específico, próximo a temperatura crítica, se comporta com [13]:

$$C(T, L) = L^{\alpha/\nu} f_c(L^{1/\nu} t) \quad (4.2)$$

onde α e ν são expoentes críticos relacionados as divergências do calor específico e do comprimento de correlação, respectivamente. A $f_c(x)$ é uma função de escala que é constante para $x \rightarrow 0$ e se anula para $x \gg 1$, e inclui termos de correções. Uma relação semelhante para a suscetibilidade é dada por:

$$\chi(T, L) = L^{\gamma/\nu} f_\chi(L^{1/\nu}t) \quad (4.3)$$

onde γ é o expoente crítico relacionado a divergência da suscetibilidade.

Numericamente, a forma de se obter o comportamento de escala do sistema se dá tomando os valores máximos, em função da temperatura, de cada medida e verificando o crescimento destes valores em função do comprimento linear. Em uma escala log-log, a inclinação da reta fornece a razão dos expoentes críticos. As relações (4.2) e (4.3) são verificadas dessa maneira nas figuras 10 e 11.

No caso do calor específico, os ajustes indicam que a divergência com o tamanho pode ser bem descrita tanto por um logaritmo, quanto por uma lei de potência com valor próximo a zero, como mostra a tabela a seguir. Isso está de acordo com a classe de universalidade do modelo de Ising 2D, onde a divergência é logarítmica. Os resultados para as razões entre expoentes críticos obtidos por essa análise para o caso da suscetibilidade também são compatíveis com a classe de universalidade do modelo de Ising 2D. Isso porque os tamanhos de redes analisadas e a qualidade dos dados não permite fazer uma análise sistemática e mais robusta [29], usando inclusive regiões de temperatura mais distantes da crítica.

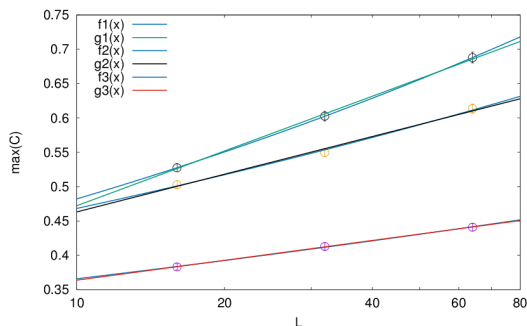


Figura 10 – Gráficos dos valores máximos do calor específico dos três modelos efetivos em função do tamanho do sistema. As linhas são ajustes, onde as funções $f(x)$ correspondem a leis de potência e as funções $g(x)$ a logaritmos. As funções designadas por “1” são para o modelo com $r = \text{constante}$, “2” para o modelo completo, e “3” para o modelo $r = T - T_c$. Para fins de comparação, o valor do máximo do calor específico do caso do modelo completo foi dividido por 4.

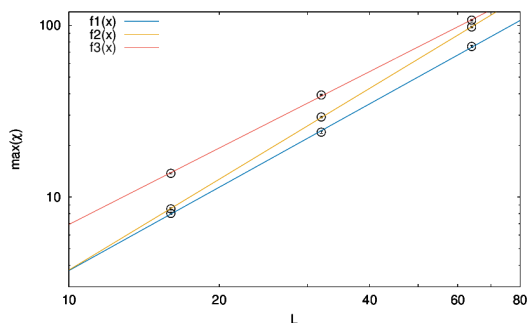


Figura 11 – Gráfico dos máximos da suscetibilidade em função do comprimento L , as funções f_1 , f_2 e f_3 são ajustes algébricos para os modelos completo, $r = \text{constante}$ e $r = T - T_c$, respectivamente.

Tabela 4 – Expoentes críticos

exp.	Ising 2D	B.-Williams	$r = T - T_c$	$r = \text{constante}$
γ/ν	1.75	1.614 ± 0.042	1.481 ± 0.019	1.759 ± 0.010
α/ν	0 (log)	0.014 ± 0.008	0.101 ± 0.0007	0.191 ± 0.0005

Com base nos resultados obtidos, embora haja limitações nas técnicas de análise de tamanho finito (FSS), é possível constatar que todos os modelos são compatíveis entre si próximo a T_c . O comportamento de escala da suscetibilidade para o modelo $r = T - T_c$ fornece descrições mais satisfatórias. Em contrapartida, o comportamento de escala do calor específico fica melhor descrito pelo modelo completo. Quanto aos custos computacionais, estes são todavia menores para os modelos expandidos até a quarta potência do parâmetro de ordem.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS E PERSPECTIVAS

Materiais ferromagnéticos como Ferro (Fe), Cobalto (Co) e Níquel (Ni), à temperatura ambiente possuem uma magnetização espontânea. Estudos destes materiais tem se tornado algo promissor para o desenvolvimento humano, podendo encontrar uma diversidade de aplicações tecnológicas, desde as que se prezam pelo efeito de "ímãs" permanentes até aquelas onde se buscam por efeitos superparamagnéticos, que por sua vez podem vir a ser estudados com os modelos tratados nesta dissertação. Como já foi discutido, esse efeito de ímã permanente é destruído para valores de temperatura muito alta, especificamente acima de uma temperatura crítica que é característica de cada material. Vimos no capítulo introdutório que a origem deste fenômeno se encontra nos constituintes microscópicos dos materiais e suas interações. Tais constituintes são chamados de momentos de dipolos magnéticos que se alinham paralelamente entre si para minimizar a energia do sistema. Para temperatura diferente de zero os momentos de dipolo magnéticos são impedidos de um perfeito alinhamento devido à flutuações térmicas que aumentam a entropia das orientações dos dipolos magnéticos. Aumentando-se ainda mais a temperatura chega-se a um ponto em que o efeito de magnetização espontânea deixa de existir devido a máxima aleatoriedade dos momentos de dipolos que quebram os domínios magnéticos.

Muitos modelos que descrevem o ferromagneto são estudados sob diferentes perspectivas, onde procura-se analisar comportamentos específicos do material, porém em termos de conhecimentos gerais, modelos microscópicos como o modelos de Ising e o modelo de Heisenberg para o ferromagneto é uma base teórica sólida para se estudar transição de fase e fenômenos críticos que vão muito além dos domínios de sistemas magnéticos. Por outro lado, como foi apresentado nesse trabalho, os momentos magnéticos locais numa aproximação contínua dos sistemas magnéticos microscópicos podem ser descritos por um conjunto de campos de parâmetro de ordem $\Phi(\vec{x})$, cujo valor esperado para regiões de baixas temperaturas é diferente de zero, exibindo uma magnetização espontânea, $m = \langle \Phi \rangle$, enquanto acima da temperatura crítica $\langle \Phi \rangle = 0$.

Sendo assim este campo contínuo descreve a magnetização em escalas mesoscópicas do sistema magnético.

No capítulo 2 os campos contínuos foram estudados via aproximação de campo médio para o modelo de Ising que descreve a transição ferromagnética, conhecida como aproximação de Bragg-Williams, bem como a teoria de Landau que pode ser associada a sua expansão em série de potências de Φ , sendo tomadas como modelos efetivos *coarse-grained* para descrever a transição ferromagnética. Ao invés de um spin, agora a variável de estado relevante do sistema é o parâmetro de ordem, que representa a magnetização local $\Phi(\vec{x})$. Enquanto na teoria de Landau Φ pode tomar valores no intervalo $-\infty < \Phi < \infty$, no caso de Bragg-Williams, a partir da equação de estado foi possível demonstrar que Φ está restrito ao intervalo $-1 \leq \Phi \leq 1$. Nesses modelos os parâmetros dependem explicitamente da temperatura. No entanto, em contextos do grupo de renormalização e aplicação da teoria de Landau a transformações de fase em materiais, muitas vezes os parâmetros do modelo são tomados com valores constantes. Assim, temos três modelos efetivos para a transição ferromagnética: a teoria de Bragg-Williams; a teoria de Landau, tomada como uma versão da teoria anterior truncada na quarta potência na expansão em série de Taylor do parâmetro de ordem; e a mesma teoria de Landau, porém com parâmetros que não dependem explicitamente da temperatura.

Para levar em conta novamente as flutuações térmicas e entender como a temperatura induz a transição de fase nesses modelos efetivos, foram feitas simulações desses modelos em contato com um banho térmico através da equação de Langevin. No capítulo 3 vimos que essa equação é uma equação diferencial parcial estocástica, diferente para cada modelo, onde foi integrada por método implícito. No caso mais simples da teoria Landau, o método semi-implícito no espaço de Fourier se mostrou mais eficiente computacionalmente que outros métodos explícitos previamente estudados no espaço real. A implementação de algoritmos de métodos implícitos no espaço real é uma das perspectivas, pois estes métodos, como demonstrado por técnicas de análise de estabilidade numéricas, são incondicionalmente estáveis e possivelmente podem gerar dados com qualidade apreciavelmente superior aos obtidos por métodos de Euler explícitos.

No capítulo 4 foram apresentados os resultados das simulações

em duas dimensões. Primeiramente os sistemas foram equilibrados e decorrelacionados via algoritmos que medem a dinâmica do parâmetro de ordem em função do tempo e dinâmica da função de autocorrelação em função do tempo, respectivamente. A partir destas dinâmicas foram obtidos os tempos de equilíbrio e tempo de decorrelação usados na integração da equação de Langevin. Com os dados obtidos da integração da equação de Langevin, foram medidas quantidades como energia e magnetização, assim como calor específico, suscetibilidade e cumulante de Binder. A partir do calor específico foi possível analisar qual modelo apresenta um comportamento mais adequado em respostas as flutuações da energia para diferentes valores de temperatura, onde constatou-se que propriedades de baixa temperatura são bem descritas apenas pelo modelo efetivo baseado na aproximação de Bragg-Williams, onde a temperatura crítica é mais afetada pelas flutuações térmicas.

Com a análise do cruzamento das curvas do cumulante de Binder para diferentes tamanhos de rede, foi possível estimar a temperatura crítica de cada modelo. Finalmente, foram obtidas as curvas dos máximos do calor específico em função do tamanho linear do sistema e dos máximos da suscetibilidade em função do tamanho linear do sistema, respectivamente. Por via de análises de tamanho finito preliminares foi possível estimar valores para os expoentes críticos, que indicam que os três modelos preservam a classe de universalidade do modelo de Ising, o que já era esperado para o caso dos modelos Φ^4 [30], mas ainda não foi verificado no caso do modelo completo. Para uma análise mais completa dos expoentes críticos, os próximos passos consistem em fazer simulações para tamanhos de redes ainda maiores e com mais temperaturas, com a finalidade de melhorar a precisão dos resultados.

Além disso, isso possibilita estudar os expoentes de correções a escala, relacionados a operadores irrelevantes, que em primeira ordem são iguais entre os modelos, mas podem ter contribuições não-triviais diferentes entre o caso completo e o Φ^4 , e que podem diferir do caso do modelo de Ising [31]. Todos os modelos foram simulados na ausência de campos externos e outras interações, mas que podem ser incluídos com o intuito de se ampliar as possibilidades de aplicações destes modelos.

REFERÊNCIAS

- 1 YEOMANS, J. M. *Statistical mechanics of phase transitions*. [S.l.]: Clarendon Press, 1992.
- 2 BLUNDELL, S. *Magnetism in Condensed Matter*. [S.l.]: OUP Oxford, 2001. (Oxford Master Series in Condensed Matter Physics). ISBN 9780198505914.
- 3 PROVATAS, N.; ELDER, K. *Phase-Field Methods in Materials Science and Engineering*. 1st. ed. [S.l.]: Wiley-VCH, 2010. ISBN 9783527407477.
- 4 Hubert, A.; Schafer, R. *Magnetic Domains*. Berlin: Springer-Verlag, 1998.
- 5 FISHER, M. E. Renormalization group theory: Its basis and formulation in statistical physics. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 70, p. 653–681, Apr 1998.
- 6 NICOLAO, L.; STARIOLO, D. A. Langevin simulations of a model for ultrathin magnetic films. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 76, p. 054453, Aug 2007.
- 7 LANGER, J. S. Models of pattern formation in first-order phase transitions. In: GRINSTEIN, G.; MAZENKO, G. (Ed.). [S.l.]: World Scientific, 1986, (Directions in Condensed Matter Physics, v. 1). cap. 5.
- 8 HOHENBERG, P. C.; HALPERIN, B. I. Theory of dynamic critical phenomena. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 49, n. 3, p. 435–479, Jul 1977.
- 9 BRAY, A. J. Theory of phase-ordering kinetics. *Advances in Physics*, Taylor & Francis, v. 43, n. 3, p. 357, 1994.
- 10 COFFEY, W. T.; KALMYKOV, Y. P. Thermal fluctuations of magnetic nanoparticles: Fifty years after Brown. *Journal of Applied Physics*, v. 112, n. 12, 2012.
- 11 MA, S. *Statistical Mechanics*. [S.l.]: World Scientific, 1985.

- 12 BINNEY, J. et al. *The Theory of Critical Phenomena: An Introduction to the Renormalization Group*. Oxford: Oxford University Press, 1992.
- 13 NEWMAN, M. E. J.; BARKEMA, G. T. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. [S.l.]: Clarendon Press, Oxford, 1999.
- 14 CHAIKIN, P. M.; LUBENSKY, T. C. *Principles of Condensed Matter Physics*. Cambridge: Cambridge University Press, 1995.
- 15 TOULOUSE, G.; PFEUTY, P. *Introduction to the Renormalization Group and to Critical Phenomena*. [S.l.]: Wiley, 1977. (Wiley-Interscience publication). ISBN 9780471994404.
- 16 ONSAGER, L. Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.*, v. 65, n. 3-4, p. 117–149, 1944.
- 17 BHATTACHARJEE, S. M.; KHARE, A. Fifty years of the exact solution of the two-dimensional ising model by onsager. *Current science*, Current Science Association, v. 69, n. 10, p. 816–821, 1995.
- 18 HEISENBERG, W. Zur theorie des ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, v. 49, n. 9, p. 619–636, Sep 1928. ISSN 0044-3328.
- 19 WALLACE, D. J.; ZIA, R. K. P. The renormalisation group approach to scaling in physics. *Reports on Progress in Physics*, v. 41, n. 1, p. 1, 1978. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0034-4885/41/i=1/a=001>>.
- 20 MILCHEV, A.; HEERMANN, D.; BINDER, K. Finite-size scaling analysis of the Φ^4 field theory on the square lattice. *Journal of Statistical Physics*, Kluwer Academic Publishers-Plenum Publishers, v. 44, n. 5-6, p. 749–784, 1986. ISSN 0022-4715.
- 21 MUSSARDO, G. *Statistical field theory*. [S.l.]: Oxford University Press Oxford UK, 2010.
- 22 BRAGG, W. L.; WILLIAMS, E. J. The effect of thermal agitation on atomic arrangement in alloys. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A*, v. 145, n. 855, p. 699–730, 1934.
- 23 PATHRIA, R.; BEALE, P. *Statistical Mechanics*. [S.l.]: Elsevier Science, 1996. ISBN 9780080541716.

- 24 TORAL, R.; CHAKRABARTI, A. Numerical determination of the phase diagram for the ϕ^4 model in two dimensions. *Phys. Rev.*, B42, p. 2445–2454, 1990.
- 25 GARDINER, C. *Handbook of stochastic methods for physics, chemistry, and the natural sciences*. [S.l.]: Springer-Verlag, 1985. (Springer series in synergetics). ISBN 9783540113577.
- 26 FORTUNA, A. de O. *Técnicas computacionais para dinâmica dos fluidos: conceitos básicos e aplicações*. [S.l.]: Edusp, 2000. ISBN 9788531405266.
- 27 PRESS, W. H. et al. *Numerical Recipes 3rd Edition: The Art of Scientific Computing*. 3. ed. [S.l.]: Cambridge University Press, 2007. ISBN 0521880688, 9780521880688.
- 28 YOUNG, P. *Everything you wanted to know about Data Analysis and Fitting but were afraid to ask*. [S.l.]: Springer International Publishing, 2015.
- 29 MOORE, M. A. Field theory, the renormalisation group, and critical phenomena. *Physics Bulletin*, v. 30, n. 9, p. 393, 1979.
- 30 MEHLIG, B.; FORREST, B. M. Universality in the critical two-dimensional ϕ^4 -model. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, v. 89, n. 1, p. 89–96, Feb 1992.
- 31 KAUPUŽS, J.; MELNIK, R. V. N.; RIMŠĀNS, J. Corrections to finite-size scaling in the ϕ^4 model on square lattices. *International Journal of Modern Physics C*, v. 27, n. 09, p. 1650108, 2016.