UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA CENTRO DE CIÊNCIAS FÍSICAS E MATEMÁTICAS CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Modelos de Ising Dinâmicos

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA À UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE "MESTRE EM CIÊNCIAS"

Gilberto Luiz de Souza Paula

FLORIANÓPOLIS SANTA CATARINA - BRASIL FEVEREIRO DE 1994

MODELOS DE ISING DINÂMICOS

GILBERTO LUIZ DE SOUZA PAULA

Esta dissertação foi julgada adequada para obtenção do título de MESTRE EM CIÊNCIAS

especialidade Física e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós-Graduação.

Nee

Prof. Dr. Wagner Figueiredo - Orientador

Prof. Dr. Wagner Figueiredo - Coordenador do Curso

Banca Examinadora



Prof. Dr. Wagner Figueiredo (DF-UFSC) - Presidente

(.E.J. Camino Prof. Dr. Carlos Eugênio I. Carneiro (IF-USP)

Prof. Dr. Jürgen Fritz Stilck (DF-UFSC)

Cintia

... não és sequer a razão de meu viver, pois que tu és já toda a minha vida. (Sonetos - Florbela Espanca)

Agradecimentos

Ao prof. Wagner Figueiredo por sua dedicação, e seu exemplo.

À Cintia minha esposa, e a minha filha Gabriele por tudo.

Aos meus Pais e irmãos pelo apoio e incentivo.

Aos amigos do Curso de Pós Graduação em Física.

Ao CNPQ por seu auxílio financeiro.

À secretária do Curso de Pòs-Graduação.

Enfim, a todos que de uma forma direta ou indireta viabilizaram meus sonhos.

ÍNDICE

ÍNDICE DE TABELAS	vii
ÍNDICE DE FIGURAS	viii
RESUMO	x
ABSTRACT	xi

CAPÍTULO I			
INTRODUÇÃO	 •••••	 	1

CAPÍTULO II

MC	DDELO DE ISING EM UM GRADIENTE DE TEMPERATURA	6
	2.1 Sistema Unidimensional Sem Correlações 1	.0
	2.2 Sistema Unidimensional Com Correlações 2	22
	2.3 Sistema Bidimensional Sem Correlações 2	24
	2.4 Sistema Bidimensional Com Correlações 3	33
	2.5 Sistema Tridimensional Sem Correlações	36

CAPÍTULO III

DINÂMICA DO MODELO DE ISING EM UM CAMPO ALEATÓRIO	3 8
3.1 O Modelo	3 8
3.2 Resultados	41
CAPÍTULO IV	
CONCLUSÕES	48

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS 50

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 1. Configurações para uma rede unidimensional

sem correlações usando a prescrição de Metropolis 11

Tabela 2. Configurações para uma rede unidimensional

sem correlações usando a prescrição de Glauber 18

Tabela 3. Configurações para uma rede bidimensional

sem correlações, usando a taxa de transição de Metropolis 26,

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 2.1 Magnetização M versus a posição I,

no estado estacionário para cadeia linear.

Figura 2.2 Magnetização M versus a Posição I, no estado

estacionário para a cadeia linear.

Figura 2.3 Magnetização M versus a Posição I, que designa a

i-ésima linha do cristal bidimensional, no estado estacionário

Figura 3.1 Diagrama de Fases para o modelo de Ising

viii

Figura 3.2 Magnetização M versus o Tempo t,

Figura 3.4 Tempo de relaxação t em função da

intensidade do campo aleatório h. 44

Figura 3.5 Magnetização M em função da intensidade do

campo aleatório h no estado estacionário. 46

Figura 3.6 Diagrama de fases para o modelo de Ising dinâmico num campo

Neste diagrama τ é a temperatura, h a intensidade do campo

aleatório e TCP é um ponto tricrítico "dinâmico". 47

ix

Resumo

Nesta dissertação estudamos o comportamento dinâmico de dois modelos ferromagnéticos através da equação mestra. No primeiro deles, consideramos o modelo de Ising em um gradiente de temperatura e determinamos os estados estacionários através das prescrições de Metropolis e Glauber. Mostramos que na ausência de correlações os estados estacionários são diferentes, enquanto que levando-se em conta correlações entre primeiros vizinhos os estados estacionários são os mesmos. No segundo modelo, determinamos o diagrama de fases do modelo de Ising dinâmico em um campo aleatório na situação estacionária. Mostramos que os estados estacionários coincidem com os de equilíbrio para todo o espaço de parâmetros com exceção das vizinhanças das transições de primeira ordem.

Abstract

In this thesis we study the dynamical behavior of two ferromagnetic models through the master equation. In the first, we consider the Ising model in a temperature gradient and we find the stable states through the Metropolis and Glauber prescriptions. we show that in the absence of correlations the stable states found through both prescriptions are different, while taking into account the correlations betwen first neighbors the stable states are the same. In the second model we calculate the phase diagram for the dynamical Ising model in a random field for the stable states. We show that the stable states agree with those determine in equilibrium in all the parameter space with exception of the neighborhood of the first order transitions.

Capítulo I Introdução

Neste trabalho estudamos o comportamento dinâmico de sistemas magnéticos, focalizando, em especial, transições de fases de um estado ordenado para outro desordenado. O modelo mais simples é aquele no qual o sistema é uma rede de spins, onde associamos a cada ponto da rede uma variável σ_i , tal que σ_i pode assumir somente os valores ± 1 , os quais estão relacionados aos estados "up" e "down" dos spins da rede. Assumimos que entre os spins vizinhos mais próximos exista um acoplamento de troca uniforme. Tal modelo matemático é chamado de modelo de Ising, o qual pode ser resolvido exatamente somente em uma e duas dimensões no estado de equilíbrio termodinâmico.

Se colocamos nosso sistema sujeito a um agente externo, devemos esperar transições entre os valores das variáveis, nos diversos pontos da rede. Tais flutuações no tempo nos permite descrever o estado de cada spin como uma função aleatória do tempo, através de uma distribuição de probabilidade dinâmica. Se tornarmos o tempo uma variável discreta nós podemos construir o chamado processo de $Markov^{[1]}$.

Quando consideramos processos nos quais os efeitos de memória podem ser desprezados, ou seja, a probabilidade de cada transição depende unicamente do passo precedente, e não de sua história, e se as transições entre os valores das variáveis ocorrem unicamente em passos pequenos, podemos escrever equações para a evolução da distribuição de pro-babilidade dos processos, que se reduzem aproximadamente a equações diferenciais parciais da densidade de probabilidade.

Uma descrição estatística completa para o modelo de Ising dinâmico consiste no conhecimento da probabilidade $P(\sigma_1, \sigma_2, ..., \sigma_n, t)$, de que no instante t o sistema de spins esteja no estado $\{\sigma_1, \sigma_2, ..., \sigma_n\}$. Se escrevermos que a probabilidade de transição por unidade de tempo, para que o i-ésimo spin troque do estado $+\sigma_i$ para o estado $-\sigma_i$ é $w_i(\sigma_i)$, a equação diferencial apropriada para o modelo de Ising é:

$$\frac{d}{dt}P(\sigma_1,\sigma_2,\ldots,\sigma_n,t)=$$

$$-\sum_{i=1}^{N} w_i(\sigma_i) P(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_n, t) + \sum_{i=1}^{N} w_i(-\sigma_i) P(\sigma_1, \sigma_2, \dots, -\sigma_i, \dots, \sigma_n, t).$$
(1.1)

A equação (1.1) é chamada de equação $mestra^{[2]}$ e descreve a evolução temporal para cada um dos 2^N estados possíveis do sistema. Observe que $w_i(\sigma_i)$ é a probabilidade por unidade de tempo do spin mudar do estado σ_i para $-\sigma_i$, enquanto que $w_i(-\sigma_i)$ é a probabilidade por unidade de tempo do spin mudar do estado $-\sigma_i$ para $+\sigma_i$.

No estado estacionário, quando $\frac{dP}{dt} = 0$ a equação mestra se reduz a:

$$\sum_{i=1}^{N} w_i(\sigma_i) P_{eq}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_n) = \sum_{i=1}^{N} w_i(-\sigma_i) P_{eq}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, -\sigma_i, \dots, \sigma_n).$$
(1.2)

Esta condição, chamada de condição de balanço, apenas em alguns casos pode ter solução. Desta forma nos valemos de uma condição bastante forte, que é o chamado princípio do balanço detalhado^[1]. A condição de balanço detalhado implica na igualdade, termo a termo, da equação acima, ou seja,

$$w_i(\sigma_i)P_{eq}(\sigma_1,\sigma_2,\ldots,\sigma_i,\ldots,\sigma_n) = w_i(-\sigma_i)P_{eq}(\sigma_1,\sigma_2,\ldots,-\sigma_i,\ldots,\sigma_n).$$
(1.3)

Com essa condição, Glauber resolveu exatamente o modelo de Ising em uma dimensão através de uma escolha apropriada para a taxa de transição $w_i(\sigma_i)$.

Discutiremos no segundo capítulo o modelo de Ising sujeito a um gradiente de temperatura^[3]. Como este é um sistema genuínamente fora do equilíbrio, estaremos interessados em determinar os estados estacionários desse sistema, onde cada spin está em contato com um banho térmico diferente. Esse modelo de alguma forma é semelhante ao estudado por *Tomé e de Oliveira*^[4], onde o gradiente de temperatura é simulado por um processo de Kawasaki. Calculamos os perfis de magnetização e, em particular, quando o gradiente de temperaturas é nulo, determinaremos a temperatura crítica do sistema em uma, duas e três dimensões, utilizando distribuições de probabilidades para um único spin e para pares de spins. Comparamos os resultados obtidos, escolhendo-se duas taxas de transição diferentes. Uma delas, é a prescrição de *Metropolis*^[5], muito utilizada em simulações de Monte Carlo. A outra será a prescrição proposta por *Glauber*^[2]. Se apenas o

4

spin σ_i sofre uma transição do estado $\sigma_i \to -\sigma_i$, a variação na energia do sistema é dada por

$$\Delta E_i = +2J\sigma_i(\sum_{j\neq i}\sigma_j) \tag{1.4}$$

A prescrição de Metropolis é expressa por

$$w_{i}(\sigma_{i}) = \begin{cases} 1 & \text{se } \Delta E_{i} \leq 0, \\ e^{-\frac{\Delta E_{i}}{K_{B}T}} & \text{para } \Delta E_{i} > 0 \end{cases}$$
(1.5)

Podemos também escrever uma taxa de transição, semelhante à anterior, porém normalizada, isto é,

$$w_i(\sigma_i) = \frac{e^{-\frac{\Delta E_i}{K_B T}}}{1 + e^{-\frac{\Delta E_i}{K_B T}}}$$
(1.6)

Como podemos observar essa taxa de transição é na realidade a própria prescrição de Glauber.

A equação (1.6) pode ser escrita como

$$w(\sigma_i) = \frac{cosh(s_i) - \sigma_i senh(s_i)}{2cosh(\sigma_i s_i)}$$

onde

$$s_i \equiv \frac{J}{K_B T} \sum_{j \neq i} \sigma_j$$

 Como

$$cosh(\sigma_i s_i) = cosh(s_i)$$

vemos que

$$w_i(\sigma_i) = \frac{1}{2} \left[1 - \sigma_i tanh(\frac{J}{K_B T} \sum_{j \neq i} \sigma_j) \right] \quad , \tag{1.7}$$

que é a própria expressão utilizada por Glauber no seu estudo da dinâmica do modelo de Ising unidimensional.

No terceiro capítulo, discutiremos a dinâmica do modelo de Ising sujeito a um campo magnético aleatório, na aproximação de campo médio. Mostraremos que a transição de fases contínua desse modelo coincide com os resultados obtidos por *Aharony*^[6] na situação de equilíbrio termodinâmico. Entretanto, o método que utilizamos só permite determinar o limite de estabilidade da fase ferromagnética, neste caso nossos resultados são diferentes daqueles determinados no equilíbrio termodinâmico.

Capítulo II

O Modelo de Ising em um Gradiente de Temperatura

Considere uma rede com N spins de Ising com interações ferromagnéticas entre primeiros vizinhos, em uma rede quadrada. Na direção y introduzimos condições periódicas de contorno, o que também será considerado para uma direção z se a rede for cúbica. Na direção x, nós consideramos a condição de contorno de que todos os spins são fixos para i=0, ou seja, não se alteram devido ao contato direto com o banho térmico. Assim, os spins na fila i=1, comportam-se como se interagissem com o campo magnético externo, imposto na fronteira i=0, sujeitos a um gradiente de temperatura linear na direção x. Vamos supor que a temperatura em uma extremidade seja T_A , enquanto na outra T_B , sendo $T_A > T_B$. Assim, a temperatura em um dado ponto i (cadeia linear), ou numa dada coluna i (rede quadrada), ou ainda num dado plano i (rede cúbica) pode ser escrita como :

$$T_i = T_B + i\delta , \qquad (2.1)$$

onde

$$\delta = \frac{T_A - T_B}{N} , \qquad (2.2)$$

é o gradiente de temperatura. O Hamiltoniano considerado é dado pela seguinte expressão:

$$H = -J \sum_{\substack{(i,j)\\i \neq j}} \sigma_i \sigma_j \qquad , \qquad (2.3)$$

7

onde a soma é sobre todos os pares de spins primeiros vizinhos e J > 0, sendo J a magnitude da interação de troca ferromagnética.

O estado do sistema é representado por $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$, onde σ_i é a variável de spin no ponto i e pode assumir os valores ±1. O estado do sistema evolue no tempo de acordo com o processo descrito pela dinâmica de $Glauber^{[2]}$. Seja $P(\sigma, t)$ a probabilidade do estado σ no tempo t. A evolução de $P(\sigma, t)$ é dada pela Equação $Mestra^{[4]}$:

$$\tau \frac{d}{dt} P(\sigma, t) = \sum_{\sigma'} [P(\sigma', t) w(\sigma', \sigma) - P(\sigma, t) w(\sigma, \sigma')], \qquad (2.4)$$

sendo $w(\sigma', \sigma)/\tau$ a probabilidade, por unidade de tempo, da transição do estado σ' para o estado σ , se o sistema está no estado σ' .

O processo é descrito pela dinâmica de Glauber, onde:

$$w(\sigma',\sigma) = \sum_{i} \delta_{\sigma_0 \sigma'_0} \cdot \delta_{\sigma_1 \sigma'_1} \cdot \dots \cdot \delta_{\sigma_i - \sigma'_i} \cdot \dots \cdot \delta_{\sigma_N \sigma'_N} \cdot w_i(\sigma) , \qquad (2.5)$$

sendo que $w_i(\sigma)$ é a probabilidade do spin i mudar seu estado de σ_i para $-\sigma_i$.

O contato local com o banho térmico à temperatura T_i , pode ser simulado usando-se a prescrição de $Metropolis^{[5]}$:

$$w_i(\sigma) = \begin{cases} 1 & \text{para } \Delta E_i \leq 0 \\ e^{\frac{-\Delta E_i}{K_B T_i}} & \text{para } \Delta E_i > 0 \ , \end{cases}$$

ou a prescrição de Glauber^[2],

$$w_i(\sigma) = \frac{e^{-\frac{\Delta E_i}{K_B T_i}}}{1 + e^{-\frac{\Delta E_i}{K_B T_i}}}, \qquad (2.6)$$

onde ΔE_i é a variação na energia obtida depois do spin i trocar de estado. Seja $E_i(\sigma_i)$ a energia do sistema antes da mudança de estado, e $E_f(-\sigma_i)$ após a mudança. Assim, por exemplo, em uma dimensão:

$$E_{i}(\sigma_{i}) = A - J\sigma_{i}(\sigma_{i+1} + \sigma_{i-1}),$$

$$E_{f}(-\sigma_{i}) = A + J\sigma_{i}(\sigma_{i+1} + \sigma_{i-1}),$$

$$\Delta E_{i} = 2J\sigma_{i}(\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}),$$
(2.7)

sendo A uma constante.

Seja < $f(\sigma)$ > a média da função de estado $f(\sigma)$, então

$$\langle f(\sigma) \rangle = \sum_{\{\sigma\}} f(\sigma) P(\sigma, t) ,$$
 (2.8)

onde a soma é realizada sobre todos os estados possíveis do sistema no instante t.

A equação para a evolução temporal da magnetização $\langle \sigma_i \rangle$ do spin situado no ponto i, e para a função de correlação $\langle \sigma_i \sigma_k \rangle$ dos spins primeiros vizinhos i e k, pode ser derivada a partir da Equação Mestra. Assim temos:

$$\tau \frac{d}{dt} < \sigma_i(t) > = -2 < \sigma_i(t) w_i(\sigma_i(t)) > , \qquad (2.9)$$

$$\tau \frac{d}{dt} < \sigma_i(t)\sigma_k(t) > = < -2\sigma_i\sigma_k w_i(\sigma_i) > + < -2\sigma_i\sigma_k w_k(\sigma_k) > , \qquad (2.10)$$

onde as probabilidades para um par de spins $P_{12}(\sigma_1, \sigma_2)$ e para um único spin $P_1(\sigma_1)$ são dadas por

$$P_{1}(\sigma_{1}) = \frac{1}{2}(1 + m_{1}\sigma_{1}) , \qquad (2.11)$$

$$P_{12}(\sigma_{1}, \sigma_{2}) = \frac{1}{4}(1 + m_{1}\sigma_{1} + m_{2}\sigma_{2} + r\sigma_{1}\sigma_{2}) ,$$

onde
$$m_{1,2} = <\sigma_{1,2} > e r = <\sigma_1 \sigma_2 > .$$

Assim, examinaremos dois tipos de clusters , cujas probabilidades são dadas aproximadamente $por^{[7]}$:

$$P_1(\sigma_1). \prod_{\substack{j \\ (prim.vizin.de1)}} \frac{P_{12}(\sigma_1, \sigma_j)}{P_1(\sigma_1)} \quad , \tag{2.12}$$

no caso de um único spin σ_1 , e

$$P_{12}(\sigma_1, \sigma_2) \prod_{\substack{j \neq 2 \\ (prim.vizin.de1)}} \frac{P_{12}(\sigma_1, \sigma_j)}{P_1(\sigma_1)} \prod_{\substack{i \neq 1 \\ (prim.vizin.de2)}} \frac{P_{12}(\sigma_i, \sigma_2)}{P_2(\sigma_2)} \quad , \qquad (2.13)$$

para um par de spins vizinhos mais próximos $\sigma_1 \; {\rm e}^- \sigma_2$.

2.1 Sistema Unidimensional Sem Correlações

Consideremos inicialmente a prescrição de Metropolis. Sendo $P_i(\sigma_i)$ a probabilidade do spin no ponto i assumir o valor σ_i , teremos :

$$P_i(\sigma_i) = \frac{1}{2}(1 + m_i\sigma_i) ,$$

$$\sum_{\sigma_i=\pm 1} P_i(\sigma_i) = \frac{1}{2}(1+m_i) + \frac{1}{2}(1-m_i) = 1$$

Também

$$m_i = <\sigma_i> = \sum_{\sigma_i=\pm 1} \sigma_i P_i(\sigma_i)$$

A equação para a evolução temporal da magnetização no ponto da rede i é dada por

$$\tau \frac{d}{dt}m_i = < -2\sigma_i(t)w(\sigma_i(t)) >$$

sendo que

$$<\sigma_i(t)w_i(\sigma_i(t))>=\sum_{\sigma_i,\sigma_{i-1},\sigma_{i+1}}\sigma_iw_i(\sigma_i)P(\sigma_i).$$
(2.14)

Como estamos desprezando correlações, podemos escrever que

$$P(\sigma_{i-1}, \sigma_i, \sigma_{i+1}) = P(\sigma_{i-1}) \cdot P(\sigma_i) \cdot P(\sigma_{i+1}).$$

$$(2.15)$$

Portanto temos a seguinte tabela para as configurações do cluster considerado:

•							
σ_{i-1}	σ_i	σ_{i+1}	ΔE_i	$w_i(\sigma_i)$	$P(\sigma_i)$	$P(\sigma_{i-1})$	$P(\sigma_{i+1})$
, +	÷	+	+4J	$e^{\frac{-4J}{K_BT_i}}$	$\frac{1}{2}(1+m_i)$	$\frac{1}{2}(1+m_i)$	$\frac{1}{2}(1+m_i)$
+	+	-	0	1	$\frac{1}{2}(1+m_i)$	$\frac{1}{2}(1+m_i)$	$rac{1}{2}(1-m_i)$
+	-	+	-4J	1	$rac{1}{2}(1-m_i)$	$\frac{1}{2}(1+m_i)$	$rac{1}{2}(1+m_i)$
+	-		0	1	$\frac{1}{2}(1-m_i)$	$\frac{1}{2}(1+m_i)$	$\frac{1}{2}(1-m_i)$
,	+	+	0	1	$\frac{1}{2}(1+m_i)$	$\frac{1}{2}(1-m_i)$	$\frac{1}{2}(1+m_i)$
_	+	-	-4J	1	$\frac{1}{2}(1+m_i)$	$\frac{1}{2}(1-m_i)$	$\frac{1}{2}(1-m_i)$
-	_	+	0	1	$rac{1}{2}(1-m_i)$	$\frac{1}{2}(1-m_i)$	$\frac{1}{2}(1+m_i)$
	_ ·	_	+4J	$e^{\frac{-4J}{K_BT_i}}$	$\frac{1}{2}(1-m_i)$	$\frac{1}{2}(1-m_i)$	$\frac{1}{2}(1-m_i)$

Desta forma, obtemos a seguinte equação para a evolução temporal da magnetização no ponto i da rede:

$$\frac{d}{dt}m_{i} = \alpha_{i}(m_{i-1} + m_{i+1}) + \beta_{i}m_{i} + \gamma_{i}m_{i-1}m_{i}m_{i+1}, \quad (2.16)$$

$$\alpha_{i} = -\frac{1}{2}(e^{-4k_{i}} - 1), \quad \beta_{i} = -\frac{1}{2}(e^{-4k_{i}} + 3), \quad \gamma_{i} = \alpha_{i}, \quad (2.17)$$

sendo que

$$k_i = \frac{J}{K_B T_i} \; .$$

:

Os estados estacionários tendo $\sigma_0 = 1$ como condição de contorno, implicam que

$$0 = \alpha_1(1+m_2) + \beta_1 m_1 + \gamma_1 m_1 m_2 ,$$

$$0 = \alpha_2(m_1+m_3) + \beta_2 m_2 + \gamma_2 m_1 m_2 m_3 ,$$
(2.18)

A solução homogênea, $m_1, m_2, \ldots = 0$ não satisfaz o conjunto de equações acima, a menos que $\alpha_1 = 0$, ou seja, $T_1 \to \infty$. Porém, em nosso caso, considerando a temperatura de σ_0 finita a solução homogênea não é possível para um gradiente finito de temperaturas. Se todos os $k_i = \infty$ ($T_i \to 0$), teríamos

: : :

$$\alpha_i = \frac{1}{2} ,$$

e os estados estacionários nos dariam:

:

$$0 = \frac{1}{2}(1+m_2) - \frac{3}{2}m_1 + \frac{1}{2}m_1m_2 ,$$

$$0 = (1+m_2) - 3m_1 + m_1m_2 , \qquad (2.19)$$

 $\beta_i = -\frac{3}{2}$,

cuja solução é

$$m_1, m_2, \ldots = 1$$
.

Podemos ver claramente que, neste caso, a única solução possível será aquela na qual todos os spins estão com magnetização igual a um. Agora, se $k_i = 0, i = 1, 2, ..., N$ $(T_i \to \infty)$, teremos

$$\alpha = 0, \ \gamma = 0, \ \beta = -2 e$$

$$0 = \alpha(1 + m_2) - 2m_1 + \gamma m_1 m_2 ,$$

$$\alpha = \gamma = 0 \quad \Rightarrow \ m_1 = 0 ,$$

$$0 = \alpha(m_1 + m_3) - 2m_2 + \gamma m_1 m_2 m_3 , \qquad (2.20)$$

$$\alpha = \gamma = 0 \quad \Rightarrow \ m_2 = 0 , \text{ etc} \dots$$

ou seja, mesmo que o primeiro spin esteja fixo, com o valor $m_0 = 1$ e todos os outros em uma temperatura infinita, $m_i = 0$ para i = 1, 2, 3, ... Se não considerarmos nenhuma condição de contorno para σ_0 , e colocarmos $T_0 = 0$, a solução estacionária será

$$\alpha_0 m_0 + \beta_0 m_1 = 0 ,$$

$$\gamma_1(m_0 + m_1) + \beta_1 m_1 + \alpha_1 m_0 m_1 m_2 = 0 , \qquad (2.21)$$

e podemos notar que uma solução possível neste caso é $m_0=m_1=\ldots=m_N=0$.

 $T_0
eq 0 \quad \Rightarrow \ m_1 = cotgh(k_0)m_0 \ ,$

:

Na realidade, essa é a única solução possível. Por exemplo, vamos supor que a magnetização na fronteira seja m_0 diferente de zero. Neste caso,

$$m_1 = \frac{-\alpha_0}{\beta_0} m_0 , \qquad (2.22)$$

$$\frac{\alpha_0}{\beta_0} = \frac{1 + e^{-2k_0}}{e^{-2k_0} - 1} = -\frac{e^{k_0} + e^{-k_0}}{e^{k_0} - e^{-k_0}} = -\cot(k_0) .$$
(2.23)

 \mathbf{Se}

$$T_0 \to 0 \quad \Rightarrow \ \frac{\alpha_0}{\beta_0} = -1 ,$$

$$m_1 = m_0. \tag{2.24}$$

Se

logo

e

 $m_1 > m_0.$ (2.25)

Ainda:

$$\alpha_1(m_0 + m_2) + \beta_1 m_1 + \alpha_1 m_0 m_1 m_2 = 0, \qquad (2.26)$$

$$\alpha_1(m_0m_1+1)m_2 = -\beta_1m_1 - \alpha_1m_0,$$

$$m_2 = -\frac{\beta_1 m_1 + \alpha_1 m_0}{\alpha_1 (1 + m_0 m_1)}, \qquad (2.27)$$

$$m_{2} = -\frac{\beta_{1} + \alpha_{1} tanh(k_{0})}{\alpha_{1}(1 + m_{0}m_{1})}m_{1},$$

$$m_{2} = \frac{1}{(1 + m_{0}m_{1})}[-tgh(k_{0}) + \frac{e^{-4k_{1}} + 3}{(1 - e^{-4k_{1}})}]m_{1},$$

$$m_{2} = \frac{1}{(1 + cotgh(k_{0})m_{0}^{2})}[-tgh(k_{0}) + cotgh(k_{1}) + \frac{2}{(1 - e^{-4k_{1}})}]m_{1}.$$
(2.28),
$$Como - tgh(k_{0}) + cotgh(k_{1}) > 0,$$

$$e - \frac{2}{(1 - e^{-4k_{1}})} > 2,$$
então $m_{2} > m_{1}$ mesmo que $T_{0} = 0$

Ou seja, verificamos que a medida que a temperatura cresce, as respectivas magnetizações também crescem. Assim a única solução que deve ser fisicamente aceitável é $m_i = 0$, $i = 1, 2, \ldots$

Voltando às equações (2.16) e (2.17), podemos particularizar os resultados obtidos tomando-se $\delta = 0$, ou seja, a cadeia unidimensional em contato com um banho térmico a uma dada temperatura T. Se consideramos um ponto no interior do cristal unidimensional, que esteja distante da extremidade da cadeia, podemos considerar que $m_{i-1} = m_i =$ $m_{i+1} = m$, se i >> 1. Neste caso, resulta a seguinte equação para a magnetização no interior do cristal unidimensional:

$$\tau \frac{dm}{dt} = 2\alpha m + \beta m + \alpha m^3(2.29)$$

onde
$$\alpha = \frac{-1}{2}(e^{-4k} - 1),$$

 $\beta = \frac{-1}{2}(e^{-4k} + 3),$

sendo

$$k = rac{J}{K_B T}$$
 .

Próximo à transição de fases, onde m deve ser muito pequeno, podemos escrever que

$$\frac{dm}{dt} = \lambda_F m + o(m^3) \; ,$$

onde

$$\lambda_F = rac{1}{ au}(2lpha+eta) \; ,$$

que pode ser escrito como

$$\lambda_F = -rac{3}{2 au}(e^{-4k}+rac{1}{3}) \; .$$

Notamos que $\lambda_F < 0$, para qualquer valor de temperatura, ou seja, a fase ferromagnética, se existir, é instável. Infelizmente, a prescrição de Metropolis, mostra que a fase ferromagnética é instável mesmo para T=0, o que não é razoável, pois esperamos que a temperatura crítica do sistema unidimensional seja nula. Além disso, como não estamos considerando correlações, deveríamos esperar uma temperatura crítica semelhante àquela dada pela teoria de campo médio, ou seja, $T_c = 2J$ (caso unidimensional). Na figura 2.1 mostramos o comportamento da magnetização na situação estacionária em função da posição na cadeia linear. Consideramos como condição de contorno que $T_0 =$ $0 e m_0 = 1$, para diferentes valores de $\Delta = \frac{J}{K_B \delta}$, que mede a razão entre o acoplamento de intercâmbio entre primeiros vizinhos e o gradiente de temperaturas. Notamos que com a prescrição de Metropolis, a magnetização atinge um valor nulo bem próximo à extremidade da cadeia, dependendo muito fracamente da razão Δ .





no estado estacionário para a cadeia linear.

Curva a ($\Delta = 10.0$); b ($\Delta = 1.0$); c ($\Delta = 0.3$).

Vamos estudar agora a cadeia linear, levando-se em conta a prescrição de Glauber, ainda sem levar em consideração as correlações. Neste caso a probabilidade de transição

tem a seguinte forma :

$$w_i(\sigma_i) = \frac{e^{-\beta \Delta E_i}}{1 + e^{-\beta \Delta E_i}} .$$
 (2.30)

Assim, teremos as seguintes configurações para o cluster:

σ_{i-1}	σ_i	σ_{i+1}	ΔE_i	$w_i(\sigma_i)$	$P(\sigma_i)$	$P(\sigma_{i-1})$	$P(\sigma_{i+1})$
+ ,	+	+	+4J	$e^{\frac{-4J}{K_BT_i}}$	$rac{1}{2}(1+m_i)$	$\frac{1}{2}(1+m_i)$	$rac{1}{2}(1+m_i)$
+	+	-	0	1	$\frac{1}{2}(1+m_i)$	$\frac{1}{2}(1+m_i)$	$\frac{1}{2}(1-m_i)$
+	- .	4	-4J	$e^{\frac{+4J}{K_BT_i}}$	$rac{1}{2}(1-m_i)$	$\frac{1}{2}(1+m_i)$	$\frac{1}{2}(1+m_i)$
+	-		0	1	$\frac{1}{2}(1-m_i)$	$\frac{1}{2}(1+m_i)$	$\frac{1}{2}(1-m_i)$
-	+	+	0	1	$\frac{1}{2}(1+m_i)$	$\frac{1}{2}(1-m_i)$	$\frac{1}{2}(1+m_i)$
	+	_	-4J	$e^{\frac{+4J}{K_BT_i}}$	$\frac{1}{2}(1+m_i)$	$rac{1}{2}(1-m_i)$	$\frac{1}{2}(1-m_i)$
-	·	+	0	1	$rac{1}{2}(1-m_i)$	$\frac{1}{2}(1-m_i)$	$\frac{1}{2}(1+m_i)$
-	-	_	+4J	$e^{\frac{-4J}{K_BT_i}}$	$\frac{1}{2}(1-m_i)$	$\frac{1}{2}(1-m_i)$	$\frac{1}{2}(1-m_i)$

Como:

$$\frac{d}{dt}m_i = <-2\sigma_i(t)w(\sigma_i(t))>,$$

(2.31)

$$\frac{d}{dt}m_i = \sum_{\sigma_i, \sigma_{i-1}, \sigma_{i+1}} \sigma_i w_i(\sigma_i) P(\sigma_{i-1}, \sigma_i, \sigma_{i+1}), \qquad (2.32)$$

$$\frac{d}{dt}m_{i} = \alpha_{i}m_{i} + \beta_{i}(m_{i-1} + m_{i+1}) + \gamma_{i}m_{i-1}m_{i}m_{i+1}, \qquad (2.33)$$

onde

$$\begin{aligned} \alpha_{i} &= -4\left[1 + \frac{e^{\frac{4J}{K_{B}T_{i}}}}{\left(1 + e^{\frac{4J}{K_{B}T_{i}}}\right)} + \frac{e^{-\frac{4J}{K_{B}T_{i}}}}{\left(1 + e^{-\frac{4J}{K_{B}T_{i}}}\right)}\right], \\ \beta_{i} &= 4\left[\frac{e^{\frac{4J}{K_{B}T_{i}}}}{\left(1 + e^{\frac{4J}{K_{B}T_{i}}}\right)} - \frac{e^{-\frac{4J}{K_{B}T_{i}}}}{\left(1 + e^{-\frac{4J}{K_{B}T_{i}}}\right)}\right], \end{aligned}$$

$$(2.34)$$

$$\gamma_{i} &= 4\left[1 - \frac{e^{\frac{4J}{K_{B}T_{i}}}}{\left(1 + e^{\frac{4J}{K_{B}T_{i}}}\right)} - \frac{e^{-\frac{4J}{K_{B}T_{i}}}}{\left(1 + e^{-\frac{4J}{K_{B}T_{i}}}\right)}\right].$$

Então, podemos escrever que

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}m_{i} &= -4m_{i} - 4\frac{e^{\frac{4J}{K_{B}T_{i}}}}{(1+e^{\frac{4J}{K_{B}T_{i}}})}m_{i} \\ &- 4\frac{e^{\frac{-4J}{K_{B}T_{i}}}}{(1+e^{\frac{-4J}{K_{B}T_{i}}})}m_{i} + 4\frac{e^{\frac{4J}{K_{B}T_{i}}}}{(1+e^{\frac{4J}{K_{B}T_{i}}})}m_{i-1} \\ &- 4\frac{e^{\frac{-4J}{K_{B}T_{i}}}}{(1+e^{\frac{-4J}{K_{B}T_{i}}})}m_{i-1} + 4\frac{e^{\frac{4J}{K_{B}T_{i}}}}{(1+e^{\frac{4J}{K_{B}T_{i}}})}m_{i+1} \\ &- 4\frac{e^{\frac{-4J}{K_{B}T_{i}}}}{(1+e^{\frac{-4J}{K_{B}T_{i}}})}m_{i+1} + 4m_{i}m_{i-1}m_{i+1} \end{aligned}$$

$$-4\frac{e^{\frac{-4J}{K_BT_i}}}{(1+e^{\frac{-4J}{K_BT_i}})}m_im_{i-1}m_{i+1}-4\frac{e^{\frac{4J}{K_BT_i}}}{(1+e^{\frac{4J}{K_BT_i}})}m_im_{i-1}m_{i+1} \quad .$$
(2.35)

Se considerarmos o caso no qual a temperatura é uniforme, e tomarmos pontos no interior do cristal suficientemente afastados da extremidade, ou seja, se $m_{i-1} = m_i = m_{i+1} = m$, para i >> 1, podemos escrever que

$$\frac{dm}{dt} = \lambda m + o(m^3) ,$$

onde

$$\lambda = -4 + 4 \frac{e^{\frac{4J}{K_B T}}}{(1 + e^{\frac{4J}{K_B T}})} - 12 \frac{e^{\frac{-4J}{K_B T}}}{(1 + e^{\frac{-4J}{K_B T}})}$$
(2.36)

Neste caso, podemos mostrar que $\lambda = 0$, para T=0. Ou seja, a prescrição de Glauber, mesmo na ausência de correlações, fornece o valor correto da temperatura crítica do sistema unidimensional. Se T > 0, λ é sempre negativo, o que implica que a fase ferromagnética será sempre instável em temperaturas finitas.

Na figura 2.2 exibimos o comportamento da magnetização na situação estacionária em função do ponto de rede i (note que $T(i) = \delta i$ e $m_0 = 1$), para diferentes valores da razão $\Delta = \frac{J}{K_B \delta}$.





no estado estacionário para a cadeia linear.

Curva a ($\Delta = 10.0$); b ($\Delta = 1.0$); c ($\Delta = 0.3$).

Os gráficos das figuras 2.1 e 2.2 foram construídos tomando-se 22 pontos na cadeia linear e usamos como condição de contorno que a magnetização do 22^{0} ponto fosse igual à do 21^{0} ponto. Essa condição é bastante razoável, visto que quando estamos bastante distantes da extremidade da cadeia, o comportamento é característico do que ocorre no interior do sistema, ou seja, os efeitos de superfície são desprezíveis. Ao contrário da prescrição de Metropolis, o decaimento da magnetização é muito mais suave utilizando-se a distribuição de probabilidade de Glauber.

2.2 Sistema Unidimensional Com Correlações

Levando-se em conta as distribuições de probabilidades dadas pelas equações 2.12 e 2.13 é fácil verificar que se i >> 1, teremos:

$$\tau \frac{d}{dt}m = \frac{m[3+2r-r^2]+4m^3}{1+m^2}\frac{e^{-4k}}{1+e^{-4k}} + m\frac{(1-r)^2}{1+m^2}\frac{e^{4k}}{1+e^{4k}} - 2m(1-r)^2 , \quad (2.36)$$

$$\tau \frac{d}{dt}r = \frac{1}{8}[(1+r)^2 \frac{e^{-4k}}{1+e^{-4k}} - (1-r)^2 \frac{e^{4k}}{1+e^{4k}}].$$
 (2.37)

A solução estacionária nos fornece

$$rac{dr}{dt} = 0
ightarrow (2+r+r^2) lpha_- + (2-r-r^2) lpha_+ = 0 \; ,$$

 ${\rm onde}$

$$\alpha_{-} = \frac{e^{-4k}}{1 + e^{-4k}}, e \alpha_{+} = \frac{e^{4k}}{1 + e^{4k}}.$$

Podemos escrever ainda que:

$$2(\alpha_{-} + \alpha_{+}) + r(\alpha_{-} - \alpha_{+}) + r^{2}(\alpha_{-} - \alpha_{+}) = 0$$
$$\alpha_{-} + \alpha_{+} = \frac{e^{-4k}}{1 + e^{-4k}} + \frac{e^{4k}}{1 + e^{4k}} = 1$$

 como

e

$$\alpha_{-} - \alpha_{+} = \frac{1 - e^{4k}}{1 + e^{4k}} = -tgh(2k)$$

teremos que:

$$2 - tgh(2k)r - tgh(2k)r^2 = 0$$
.

Notamos que a única solução possível desta última equação é r = 1 e T = 0. A equação para a magnetização pode ser escrita como

$$\tau \frac{dm}{dt} = -\lambda m + o(m^3)$$

onde

$$rac{\lambda}{r} = [3+2r-r^2]rac{e^{-4k}}{1+e^{-4k}} + (1-r)^2rac{e^{4k}}{1+e^{4k}} - 2(1-r)^2 \; .$$

Se r = 1 e T = 0, então $\lambda = 0$, ou seja, a temperatura crítica é nula no caso do sistema unidimensional com correlações e taxa de transição do tipo Glauber.

2.3 Sistema Bidimensional Sem Correlações

Vamos agora considerar um sistema bidimensional, onde supomos que todos os spins numa dada fila i, estejam numa mesma temperatura T_i . Seguindo os mesmos procedimentos utilizados para o modelo unidimensional, tomamos inicialmente a taxa de transição de *Metropolis*^[5]:

$$w_i(\sigma_i) = egin{cases} 1 & ext{para } \Delta E_i \leq 0 \; ; \ e^{rac{-\Delta E_i}{K_B T_i}} & ext{para } \Delta E_i > 0 \; . \end{cases}$$

Assim, a energia do sistema será dada por:

$$E_i(\sigma_{ij}) = -J \sum_{(ij,i'j')} \sigma_{ij} \sigma_{i'j}$$

onde a soma é sobre todos os pares de vizinhos mais próximos (i,j) e (i',j') na rede quadrada.

Após invertermos o spin σ_{ij} , teremos

$$E_f(-\sigma_{ij}) = +J\sum_{(ij,i'j')}\sigma_{ij}\sigma_{i'j'} .$$

Explicitando a energia antes e depois da inversão teremos

$$E_i(\sigma_{ij}) = A - J\sigma_{ij}(\sigma_{i-1,j} + \sigma_{i+1,j} + \sigma_{i,j-1} + \sigma_{i,j+1}),$$

$$E_f(-\sigma_{ij}) = A + J\sigma_{ij}(\sigma_{i-1,j} + \sigma_{i+1,j} + \sigma_{i,j-1} + \sigma_{i,j+1}),$$

onde A é uma constante. Assim a variação da energia é dada por

$$\Delta E_{ij} = 2J\sigma_{ij}(\sigma_{i-1,j} + \sigma_{i+1,j} + \sigma_{i,j-1} + \sigma_{i,j+1}) \quad .$$

A probabilidade de se encontrar um determinado spin no estado σ_{ij} é dada por

$$P_{ij}(\sigma_{ij}) = \frac{1}{2}(1 + m_{ij}\sigma_{ij}).$$
(2.38)

Supondo que o gradiente de temperatura, está apenas na direção x, podemos escrever que

$$<\sigma_{ij}>=m_{ij}\equiv m_i,$$

 $aurac{d}{dt}<\sigma_{ij}>=-<2\sigma_{ij}w_{ij}(\sigma)>$
 $aurac{d}{dt}m_i=-2<\sigma_{ij}w_{ij}(\sigma)>$,

onde

$$<\sigma_{ij}w_{ij}(\sigma_{ij})>\equiv\sum_{\sigma_{ij},\sigma_{i-1,j},\sigma_{i+1,j}\atop\sigma_{i,j-1},\sigma_{i,j+1}}\sigma_{ij}w_{ij}(\sigma_{ij})P_c(\sigma) , \qquad (2.39)$$

sendo que na ausência de correlações, podemos escrever que

$$P_{c}(\sigma) = P(\sigma_{ij})P(\sigma_{i-1,j})P(\sigma_{i+1,j})P(\sigma_{i,j-1})P(\sigma_{i,j+1})$$

As configurações possíveis, com as suas respectivas probabilidades de transição são dadas na tabela abaixo:

					-	
$\sigma_{i,j}$	$\sigma_{i,j+1}$	$\sigma_{i,j-1}$	$\sigma_{i+1,j}$	$\sigma_{i-1,j}$	$\Delta E_{i,j}$	$w_{i,j}(\sigma_{i,j})$
+	+	+	+	+	+8J	$e^{\frac{-8J}{K_BT_i}}$
		-	-	-	+8J	$e^{\frac{-8J}{K_BT_i}}$
+	+	+	+	_	+4J	$e^{\frac{-4J}{K_BT_i}}$
+	+	+	-	+	+4J	$e^{\frac{-4J}{K_BT_i}}$
+	+	_	+	+ .	+4J	$e^{\frac{-4J}{K_BT_i}}$
+		+	+	+	+4J	$e^{\frac{-4J}{K_BT_i}}$
	+	. +	+	÷	-8J	1
_	-+	+	+	_	-4J	1
_	+	+ '	_	+	-4J	1
_	+ .	_	+	+	-4J	1
· ,		+	+	+	-4J	1
+ .		+	+		. 0	1
+		+		+	0	1
+	_		+	+	0	1
+	+	- .	+	-	0	1
+	+	-	-	+	0	1
_	-	+	+	-	0	. 1
- · ·	-	+	. –	+	0	1
	_	-	+	+	0	1

-4J 1 + +-4J 1 + +-4J 1 ++ $e^{\frac{-4J}{K_BT_i}}$ +4J+ $e^{\frac{-4J}{K_BT_i}}$ +4J+ $e^{\frac{-4J}{K_BT_i}}$ +4J $e^{\frac{-4J}{K_BT_i}}$ +4J+-8J 1 +0 1 ++0 1 +·+ 0 1 ++-4J 1 ++0 1 +++

A equação de movimento, para a magnetização por spin da i- ésima linha, será dada por:

$$\tau \frac{d}{dt}m_{i} = \frac{-1}{16} \{ \alpha_{i}m_{i} + \beta_{i}(m_{i+1} + m_{i-1} + 2m_{i}) + \gamma_{i}(m_{i}m_{i+1}m_{i-1} + 2m_{i}^{2}m_{i+1} + 2m_{i}^{2}m_{i-1} + m_{i}^{3}) \}$$

+
$$\delta_i(2m_{i+1}m_{i-1}m_i + m_i^2m_{i-1} + m_i^2m_{i+1}) + \xi_i m_i^3m_{i+1}m_{i-1}\},$$
 (2.40)

onde

$$\begin{aligned} \alpha_{i} &= 22 + 8e^{\frac{-4J}{K_{B}T_{i}}} + 2e^{\frac{-8J}{K_{B}T_{i}}}, \\ \beta_{i} &= -6 + 4e^{\frac{-4J}{K_{B}T_{i}}} + 2e^{\frac{-8J}{K_{B}T_{i}}}, \\ \gamma_{i} &= -2 + 2e^{\frac{-8J}{K_{B}T_{i}}}, \\ \delta_{i} &= 2 - 4e^{\frac{-4J}{K_{B}T_{i}}} + 2e^{\frac{-8J}{K_{B}T_{i}}}, \\ \xi_{i} &= 6 - 8e^{\frac{-4J}{K_{B}T_{i}}} + 2e^{\frac{-8J}{K_{B}T_{i}}}. \end{aligned}$$

As soluções estacionárias, neste caso, são obtidas a partir de

$$\frac{d}{dt}m_i=0$$

Se a temperatura é a mesma para qualquer valor de i, podemos determinar as soluções no interior do sistema, fazendo-se

$$m_i = m_{i+1} = m_{i-1} = m. \tag{2.41}$$

Neste caso obtemos

$$0 = (\alpha + 4\beta)m + o(m^3).$$

A temperatura crítica pode ser obtida a partir da condição

$$\alpha = -4\beta$$
,

o que nos dá

$$2 - 24e^{-4k} - 10e^{-8k} = 0$$

A solução desta equação nos fornece

$$e^{-4k} = \frac{-12 + \sqrt{164}}{10}$$
 ,
 $\frac{K_B T_c}{J} = 1.58$. (2.42)

logo

Observamos que este valor, não corresponde ao valor esperado na teoria de campo médio $\frac{K_B T_c}{J} = 4$, embora não estejamos levando em conta as correlações, ou seja, a prescrição de Metropólis, sem correlações, não leva ao estado de equilíbrio esperado na aproximação de campo médio. Esse mesmo resultado, pode ser observado no trabalho de *Tomé e de*Oliveira^[8], se colocamos r=0 (ausência de correlações), e desprezamos o fluxo de energia sobre o sistema.

Consideremos agora o mesmo problema com a dinâmica de *Glauber*^[2], onde tomamos a taxa de transição normalizada,

$$w_i(\sigma_i) = \frac{e^{-\beta \Delta E_i}}{1 + e^{-\beta \Delta E_i}}.$$
(2.43)

Não apresentamos aqui a tabela de configurações, com os seus respectivos pesos.

aij

A equação para a evolução da magnetização é dada pela seguinte expressão:

$$\tau \frac{d}{dt} m_{ij} = \langle -2\sigma_{ij}(t)w(\sigma_{ij}(t)) \rangle, \qquad (2.44)$$

$$\langle \sigma_{ij}w_{ij}(\sigma_{ij}) \rangle = \sum_{\substack{\sigma_{ij},\sigma_{i-1,j},\sigma_{i+1,j}\\\sigma_{i,j-1},\sigma_{i,j+1}}} \sigma_{ij}w(\sigma_{ij})P(\sigma_{ij}).$$
(2.45)

Levando-se em conta que ainda estamos desprezando as correlações, podemos escrever que

$$\tau \frac{d}{dt} m_{ij} = \frac{1}{2^4} \sum_{\sigma_{ij}, \sigma_{i-1,j}, \sigma_{i+1,j} \atop \sigma_{i,j-1}, \sigma_{i,j+1}} (1 + Am_{i,j})(1 + Bm_{i+1,j})(1 + Cm_{i-1,j})$$

$$(1 + Dm_{i,j+1})(1 + Em_{i,j-1})\sigma_{i,j}, \qquad (2.46)$$

onde

$$A = \sigma_{i,j} ,$$

$$B = \sigma_{i+1,j} ,$$

$$C = \sigma_{i-1,j} ,$$

$$D = \sigma_{i,j+1} ,$$

$$E = \sigma_{i,j-1} .$$

$$(2.47)$$

Temos então :

O coeficiente de $m_i \acute{e}$:

$$\frac{3e^{-8k_i}}{1+e^{-8k_i}} - \frac{e^{8k_i}}{1+e^{8k_i}} + 8\frac{e^{-4k_i}}{1+e^{-4k_i}} + 3$$

O coeficiente de $(m_{i+1} + m_{i-1})$ é :

$$\frac{e^{-8k_i}}{1+e^{-8k_i}} - \frac{e^{8k_i}}{1+e^{8k_i}} + 2\frac{e^{-4k_i}}{1+e^{-4k_i}} - 2\frac{e^{4k_i}}{1+e^{4k_i}}$$

O coeficiente de $m_i^2(m_{i+1}+m_{i-1})$ é :

$$\frac{3e^{-8k_i}}{1+e^{-8k_i}} + \frac{e^{8k_i}}{1+e^{8k_i}} - 2\frac{e^{-4k_i}}{1+e^{-4k_i}} + 2\frac{e^{4k_i}}{1+e^{4k_i}} - 1$$

O coeficiente de
$$m_i^3$$
 é :

 $\frac{e^{-8k_i}}{1+e^{-8k_i}}+\frac{e^{8k_i}}{1+e^{8k_i}}-1$

Considerando o caso no qual a temperatura é uniforme, e levando-se em conta que estamos distantes da superfície (i=0), podemos considerar que $m_{i,j} = m_{i+1,j} = m_{i-1,j} =$

 $m_{i,j+1} = m_{i,j-1} = m$ e podemos escrever que próximo à transição de fases,

$$\frac{dm}{dt} = \lambda_F m + o(m^3),$$

 \mathbf{onde}

$$\lambda_F = \frac{3e^{-8k}}{1+e^{-8k}} - \frac{e^{8k}}{1+e^{8k}} + 8\frac{e^{-4k}}{1+e^{-4k}} +$$
(2.48)

$$+3 + \frac{e^{-8k}}{1 + e^{-8k}} - \frac{e^{8k}}{1 + e^{8k}} + 2\frac{e^{-4k}}{1 + e^{-4k}} - 2\frac{e^{4k}}{1 + e^{4k}}$$

Na situação estacionária, a temperatura crítica da transição é dada por $\frac{K_B T_c}{J} = 3.00$. Esse valor difere completamente do obtido usando a prescrição de Metropolis.

Na figura 2.3 apresentamos o gráfico da magnetização em função da linha i de spins, onde i designa a distância à partir da superfície. Na superfície tomamos $m_0 = 1$ e T = 0. Portanto, esse gráfico descreve o comportamento da magnetização dos estados estados estacionários à medida que a temperatura cresce na direção do interior do cristal bidimensional.





que designa a i-ésima linha do cristal bidimensional,

no estado estacionário .

Curva a ($\Delta=7.0$); b ($\Delta=5.0$); c ($\Delta=3.0$).

Biblioteca Universitária U F S C

33

Esses gráficos foram construídos tomando-se 30 linhas da rede, usando-se como condição de contorno que a magnetização da 30^{0} linha é à igual da 29^{0} linha. Podemos avaliar a temperatura crítica, por exemplo, observando em torno de qual plano a magnetização vai a zero. Se tomarmos um determinado valor de $\Delta = \frac{J}{K_{B}\delta}$, a magnetização vai a zero nas vizinhanças da linha i_c , onde $T_c \cong \delta i_c$, ou seja, $T_c \approx \frac{J}{K_{B}\Delta} i_c$. Podemos notar que se $\Delta = 5, i_c = 21$, o que fornece um valor para $K_B T_c = 4, 2J$, que não é muito diferente do valor obtido na aproximação de campo médio se o sistema está em contato com um banho térmico uniforme.

2.4 Sistema Bidimensional Com Correlações

Vamos considerar somente o caso de temperatura uniforme, e levar em conta as correlações entre pares de vizinhos mais próximos, cuja distribuição de probabilidades é a mesma do trabalho de Tomé e de $Oliveira^{[4]}$. A equação de movimento para a magnetização é dada por :

$$au rac{d}{dt}m = - < 2w(\sigma_0)\sigma_0 >,$$

onde

$$<\sigma_0 w(\sigma_0) > = \sum_{\sigma_0,...,\sigma_4} \sigma_0 w(\sigma_0) P_1(\sigma_0) \prod_{i=1}^4 \frac{P_{12}(\sigma_0,\sigma_i)}{P_1(\sigma_0)},$$
(2.49)

$$=\sum_{\sigma_0,\ldots,\sigma_4}\sigma_0w(\sigma_0)\frac{1}{P_1^3(\sigma_0)}P_{12}(\sigma_0,\sigma_1)P_{12}(\sigma_0,\sigma_2)P_{12}(\sigma_0,\sigma_3)P_{12}(\sigma_0,\sigma_4),$$

sendo que

$$P_{12}(\sigma_0, \sigma_1) = \frac{1}{4}(1 + m(\sigma_0 + \sigma_1) + r\sigma_0\sigma_1),$$

$$P_1(\sigma_0) = \frac{1}{2}(1 + m\sigma_0).$$

onde

e

Realizando-se essas somas sobre as configurações dos spins do cluster, é fácil de se verificar que :

$$\tau \frac{d}{dt}m = -2 < w(\sigma_0)\sigma_0 > \equiv \lambda_F m + o(m^3)$$
(2.50)
$$\lambda_F = \left[-\frac{1}{16}3(1+r)^3(1-2r)\frac{e^{-8k}}{1+e^{-8k}} - 6(1-r)^4\frac{e^{8k}}{1+e^{8k}} + 24(1-r)^2(1+r)^2\frac{e^{-4k}}{1+e^{-4k}} - 8(1-r)^3(1+3r)\frac{e^{4k}}{1+e^{4k}} - 8(1-r)^3(1+3r)\frac{e^{4k}}{1+e^{4k}} + 6(1-r)^2(1+r)(1-3r)\right] .$$
(2.51)

Podemos igualmente determinar a equação de movimento para a função de correlação, entre os spins vizinhos mais próximos.

$$\tau \frac{d}{dt} < \sigma_1 \sigma_2 > = < -2\sigma_1 \sigma_2 w_1(\sigma_1) > + < -2\sigma_1 \sigma_2 w_2(\sigma_2) >$$

$$< \sigma_1 \sigma_2 w_1(\sigma_1) > = \sum_{con \ fig} \sigma_1 \sigma_2 w_1(\sigma_1) P_{cluster}.$$

Como estamos interessados na transição de fases, entre as fases ferromagnética e paramagnética, podemos colocar m=0, nesta última equação.

Finalmente, obtemos que :

$$\tau \frac{dr}{dt} = f(r,k) \; ,$$

onde

e

 $f(r,k) = A.[(1+r)^4 \frac{e^{-8k}}{1+e^{-8k}} -2(1-r)^4 \frac{e^{8k}}{1+e^{8k}} +4(1+r)^3(1-r)\frac{e^{-4k}}{1+e^{-4k}} -4(1+r)(1-r)^3 \frac{e^{4k}}{1+e^{4k}}],$ (2.52)

$$A = (1+r)^3 + 3(1+r)^2(1-r) + 3(1-r)^2(1+r) + (1-r)^3$$

A temperatura crítica pode ser determinada, na situação estacionária, através da resolução das equações $\lambda_F = 0$ e f(r, k) = 0.

Obtemos o seguinte resultado para a temperatura crítica

$$\frac{K_B T_c}{J} = 2.88$$

$$r = 0.33$$

É interessante observar que esse resultado é exatamente o mesmo que o obtido por Tomé e de Oliveira, usando a prescrição de Metropolis.

2.5 Sistema Tridimensional Sem Correlações

Finalmente, vamos considerar a situação tridimensional, sem correlações através da dinâmica de *Glauber*^[2]

$$w_i(\sigma_i) = \frac{e^{-\beta \Delta E_i}}{1 + e^{-\beta \Delta E_i}} \quad . \tag{2.53}$$

+

A equação de movimento, tem a mesma forma que nos casos anteriores, ou seja,

$$\tau \frac{d}{dt} < \sigma_{ijk} > = -2 < \sigma_{ijk} w(\sigma_{ijk}) > =$$

$$e^{12k} [-6m_i - 2m_{i+1} - 2m_{i-1}] +$$

$$e^{8k} [-20m_i - 8m_{i-1} + 8m_{i+1}] +$$

$$e^{4k} [-10m_i - 10m_{i-1} - 10m_{i+1}] +$$

$$20m_i + e^{-4k} [70m_i + 10m_{i-1} + 10m_{i+1}] +$$

$$e^{-8k}[44m_{i} + 8m_{i-1} + 8m_{i+1}] +$$

$$e^{-12k}[10m_{i} + 2m_{i-1} + 2m_{i+1}] + o(m_{i}^{3})$$

$$(2.55)$$

Se consideramos planos de spin distantes da fronteira, podemos colocar

 $m_{i-1} = m_i = m_{i+1} = m$, e obtemos a seguinte equação:

$$au rac{dm}{dt} = -\lambda m + o(m^3),$$

onde

$$\lambda = -5\frac{e^{12k}}{1+e^{12k}} - 18\frac{e^{8k}}{1+e^{8k}} - 15\frac{e^{4k}}{1+e^{4k}} + 10 + 45\frac{e^{-4k}}{1+e^{-4k}} + 30\frac{e^{-8k}}{1+e^{-8k}} + 7\frac{e^{-12k}}{1+e^{-12k}}$$
(2.56)

É fácil verificar que $\lambda > 0$, se $\frac{K_BT}{J} > 5.073$. Ou seja, a temperatura crítica do sistema neste caso vale $K_BT_c = 5.073$ J, que difere daquela esperada na aproximação de campo médio, $K_BT_c = 6$ J. Não calculamos o efeito das correlações entre primeiros vizinhos, no valor da temperatura crítica. O valor encontrado para a temperatura crítica do modelo de Ising em três dimensões, através de expansões em séries de altas temperaturas^[9] é K_BT_c = 4.511. Certamente, se levássemos em conta as correlações, obteríamos um resultado mais próximo do obtido através de expansões em séries.

Capítulo III

Dinâmica do Modelo de Ising em um Campo Aleatório

3.1 O Modelo

Agora estudaremos a transição de fases dinâmica do modelo de Ising em um campo aleatório. O Hamiltoniano considerado neste problema, é dado pela expressão seguinte:

$$H = -\frac{J}{N} \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j - \sum_i H_i \sigma_i, \qquad (3.1)$$

onde a soma se extende sobre todos os pares de spins, sendo J a magnitude da interação entre os spins do sistema, constituído por N spins. Na equação (3.1) H_i , é o campo aleatório que atua sobre cada ponto da rede, e é dado pela seguinte distribuição de probabilidades:

$$P(H_i) = \frac{1}{2} [\delta(H_i + H) + \delta(H_i - H)] \quad . \tag{3.2}$$

Na situação de equilíbrio termodinâmico, este problema foi estudado através de métodos de grupo de renormalização, bem como, por aproximações de campo $médio^{[6]}$. O diagrama de fases no plano temperatura versus intensidade do campo aleatório, está representado na figura 3.1 :



Figura 3.1 - Diagrama de fases para o modelo de Ising em um campo aleatório. au representa a temperatura, ha intensidade do campo. A linha cheia corresponde às transições de fase contínuas, enquanto a linha pontilhada transições de 1^a ordem.

A linha contínua é uma linha de transições contínuas, enquanto que a linha pontilha da, nos fornece a coexistência entre duas fases, as fases Ferro e Paramagnética. TCP é o denominado ponto tricrítico. As coordenadas do ponto tricrítico, nas variáveis reduzidas

$$au = rac{K_BT}{J}$$
 $h = rac{H}{J}$,

são dadas por

$$au=rac{2}{3}$$
 e $h=0.43$

Então estudamos, na aproximação de campo médio, o comportamento dinâmico deste sistema, quando o sistema evolue no tempo de acordo com o processo descrito pela dinâmica de $Glauber^{[2]}$. Vamos supor que $W_i(\sigma_i)$ seja a probabilidade, por unidade de tempo, para que o i-ésimo spin passe de $\sigma_i \rightarrow -\sigma_i$, onde o estado do sistema é representado por $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, ..., \sigma_N)$, onde σ_i , a variável de spin no sítio i, toma os valores ±1. Sendo $W_i(\sigma_i)$ a probabilidade de transição por unidade de tempo para "virar" o spin i teremos de acordo com Glauber que

$$W_i(\sigma_i) = \frac{1}{2\alpha} (1 - \sigma_i tanh(\beta E_i)), \qquad (3.3)$$

onde:

$$E_i = \frac{J}{N} \sum_{i \neq j} \sigma_j + H_i \qquad (3.4)$$

A equação Mestra, para o valor médio da magnetização, é dada por :

$$\alpha \frac{\partial \langle \sigma_i \rangle}{\partial t} = -\langle \sigma_i \rangle + \langle tanh(\beta E_i) \rangle \quad , \tag{3.5}$$

para uma distribuição fixa de campos aleatórios, em um dado instante de tempo . Se $N \to \infty$, podemos escrever que

$$\frac{1}{N}\sum_{i\neq j}\sigma_i = <\sigma_i> \qquad (3.6)$$

Tomando-se agora a média sobre a distribuição de campos aleatórios, dada pela Eq.(3.2), podemos escrever que

$$m = \langle \sigma_i \rangle \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle \sigma_i \rangle P(H_i) dH_i \quad . \tag{3.7}$$

Desta forma ficamos com a seguinte equação para a evolução temporal de m:

$$\alpha \frac{dm}{dt} = -m + \frac{1}{2} [tgh(\beta Jm + \beta H) + tgh(\beta Jm - \beta H)] \quad . \tag{3.8}$$

3.2 Resultados

Inicialmente, consideraremos as soluções da Eq.(3.8) para um dado valor de tempera tura, variando-se a intensidade do campo aleatório. A situação inicial (t=0), é aquela na qual a magnetização é igual a 1. Por exemplo, na Fig.3.2, para $\tau = 0.75$, mostramos como a magnetização evolue com o tempo até atingir o estado estacionário, para diferentes valores do campo aleatório.



Figura 3.2 - Magnetização M em função do Tempo t, para diversos valores do campo aleatório, para $\tau = 0.75$. Curva a (h=0.0); b (h=0.29); c(h=0.37); d(h=0.39);

e(h=0.40); f(h=0.41)

Notamos que a magnetização atinge um valor estacionário após um intervalo de tempo que depende da intensidade do campo aleatório. Além disso, a transição entre as fases ferro e paramagnética pode ser determinada, avaliando-se o campo para o qual a magnetização vai a zero, depois de um tempo suficientemente longo. Nossos cálculos mostram que para esta temperatura, a transição é contínua, e o campo crítico que obtemos coincide com o valor obtido na situação de equilíbrio termodinâmico. Para $\tau = 0.75$, o valor crítico é $h_c = 0.41$. Fizemos curvas semelhantes àquelas da figura 3.2 para todos os

valores de temperatura $\tau > \frac{2}{3}$, e os resultados obtidos para o campo crítico coincidem com todos aqueles determinados por *Aharony*^[6] no caso de transições de fases contínuas. Na figura 3.3, mostramos a magnetização estacionária em função do campo, após um tempo suficientemente longo, tal que o estado estacionário pudesse ser atingido para todos os valores de campo considerados.



Figura 3.3 - Magnetização estacionária M versus intensidade do campo aleatório h. Tomamos au=0.75.

Notamos claramente que a magnetização vai continuamente a zero. Os estados estacionários coincidem com aqueles obtidos no equilíbrio termodinâmico.

Na figura 3.4, mostramos como o tempo de relaxação varia em função do campo, para um dado valor de temperatura.



Figura 3.4 - Tempo de relaxação t em função da intensidade do campo aleatório h.

Notamos que o tempo para se atingir o estado estacionário, aumenta abruptamente quando nos aproximamos do campo crítico determinado no equilíbrio termodinâmico. Isso já era esperado, pois próximo às transições de fases contínuas a magnetização é muito pequena, e se expandirmos a equação (3.8) para m, obtemos :

$$\alpha \frac{dm}{dt} = [1 - \operatorname{sech}^2(\beta H)\beta J]m \quad , \tag{3.9}$$

 $m(t)pprox m(0)e^{-rac{t}{\Gamma}}$

onde

$$\Gamma = \frac{\alpha \tau}{\tau - sech^2(\frac{h}{\tau})} \quad . \tag{3.10}$$

Quando estamos nas vizinhanças da transição de fases, o tempo Γ para se atingir o estado estacionário cresce indefinidamente, pois a condição para a transição de fases ocorrer é que $\tau_c = sech^2(\frac{h_c}{\tau_e})$ conforme pode ser verificado no trabalho de Aharony^[6].

Para temperaturas menores que $\tau = \frac{2}{3}$, o comportamento da magnetização, após tempos suficientemente longos, pode ser exemplificado na figura 3.5 para $\tau = 0.30$.





campo aleatório h no estado estacionário.

Notamos que, diferentemente do gráfico da figura 3.3, onde a magnetização vai continuamente a zero, neste caso a magnetização sofre uma descontinuidade para um determinado valor crítico de campo, ou seja, ela passa de um valor finito para zero. Entretanto, o valor do campo crítico é maior que o determinado no equilíbrio termodinâmico, quando as energias livres das fases ferro e paramagnética tornam-se iguais. Na realidade, o que estamos determinando é o limite de estabilidade da fase ferromagnética. Através desse método, não conseguimos determinar o limite de estabilidade da fase paramagnética.

Finalmente, na figura 3.6, mostramos o diagrama de fases completo para todos os valores de temperatura, após tempos suficientemente longos, para que o sistema alcance a situação estacionária, para qualquer valor de campo.



Figura 3.6 - Diagrama de fases para o modelo de Ising dinâmico num campo aleatório. Neste diagrama τ é a temperatura, h a intensidade do campo aleatório e TCP é um ponto tricrítico dinâmico.

Conclusão

Neste trabalho estudamos dois problemas diferentes relativos à transição de fases em sistemas magnéticos. Em ambos os problemas a equação mestra que descreve a evolução temporal da distribuição de probabilidades desde uma situação de não equilíbrio até que seja alcançado um estado estacionário. O primeiro problema tratado foi de um modelo de Ising sujeito a um gradiente de temperatura. Determinamos os estados estacionários desse sistema em uma, duas e três dimensões e mostramos os perfis de magnetização à partir de condições de contorno aproriadas na superfície do sistema. Escolhemos duas taxas de transição diferentes para descrever a evolução em direção ao estado estacionário; a taxa de Metropolis, empregada frequentemente nas simulações de Monte Carlo, e a taxa normalizada, proposta por Glauber.

Mostramos que os estados estacionários são diferentes quando desprezamos correlações dentro do sistema. Por exemplo, em uma dimensão utilizando a prescrição de Metropolis, mostramos que o estado ferromagnético é instável mesmo se T = 0. Ao contrário, a prescrição de Glauber, fornece a temperatura crítica correta em uma dimensão e o estado ferromagnético é instável para temperaturas maiores que zero.

Surpreendentemente, quando levamos em consideração as correlações apenas entre primeiros vizinhos, ambas as prescrições levam ao mesmo estado estacionário. As temperaturas críticas obtidas, levando-se em conta as correlações, foram as mesmas para as duas taxas de transição.

No segundo problema, estudamos o comportamento dinâmico do modelo de Ising em um campo aleatório, através da taxa de transição proposta por Glauber. Determinamos o diagrama de fases no plano temperatura versus intensidade do campo aleatório e mostramos que os estados estacionários coincidem com aqueles do equilíbrio no caso de transições de fases de segunda ordem. Por outro lado, para as transições de fases de primeira ordem nossos resultados não são os mesmos que os obtidos na situação de equilíbrio. Fomos capazes de determinar com este método apenas o limite de estabilidade da fase ferromagnética, cujos campos críticos são superiores àqueles obtidos no equilíbrio, quando as energias livres das fases ferro e paramagnética são iguais. Entretanto, a localização do ponto tricrítico coincide com aquela determinada no equilíbrio termodinâmico.

Referências Bibliográficas

[1] VAN KAMPEN, N.G. . Stochastic Processes in physics and chemistry.

5. ed. Netherlands, Elsevier Science Publishers B.V., 1981.

[2] GLAUBER, R. J. Time-Dependent Statistics of the Ising Model.

Journal of Mathematical Physics, v.4, n.2, p. 294 - 307, Fev. 1963.

- [3] HANSEN, A.; STAUFFER, D. The three-dimensional Ising model in a temperature gradient. Physica A, v.189, p. 611 - 615, Jul. 1992.
- [4] TOMÉ, T.; de OLIVEIRA, M. J.; SANTOS, M. A. Non-equilibrium Ising model with competing dynamics. J. Phys. A, v.24, p. 3677 - 3686, Abr. 1991.
- [5] METROPOLIS,N.; ROSEMBLUTH, A. W.; ROSEMBLUTH, M. N.; TELLER, A.H.;
 TELLER,E. .Equation of State Calculations by Fast Computing Machines.
 Journal of Chemical Physics, v.21, p. 10087 1892, 1953.
- [6] AHARONY, A. Tricritical points in systems with random field.Physical Review B, v.18, n.7, p. 3318 3321, Out. 1978.

[7] MAMADA, H.; TAKANO, F. New Approximate Method for Ising System.

Journal of Physical Society of Japan, v.25, n.1, p. 675 - 686, Set. 1968.

[8] TOMÉ, T.; de OLIVEIRA, M. J. Self-organization in a kinetic Ising model.

Physical Review A, v.40, n.11, p. 6643 - 6646, dez. 1989.

 [9] DOMB,C. . C. Domb & M. S. Green, in Phase Transitions and Critical phenomena: Ising Model, 1.ed. London, Academic Press Inc. (London) Ltd., v. 3, p. 357 - 484, 1974