

Universidade Federal de Santa Catarina

Programa de Pós-Graduação em Física

**Estudo da Dinâmica de um Modelo de Ising
Antiferromagnético**

Dissertação

Submetida ao Curso de Pós-Graduação em Física

da Universidade Federal de Santa Catarina

para obtenção do grau de

MESTRE EM FÍSICA

Gilberto Luiz Hoenicke

Florianópolis, Fevereiro 1995

Estudo da Dinâmica de um Modelo de Ising Antiferromagnético

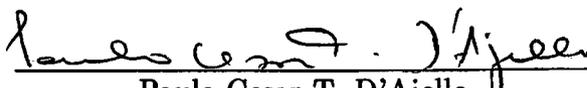
Gilberto Luiz Hoenicke

Esta dissertação foi julgada adequada para obtenção do título de

MESTRE EM FÍSICA

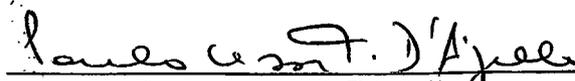
especialidade Mecânica Estatística e aprovada em sua forma final pelo Programa de

Pós-Graduação.

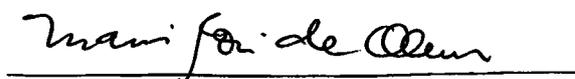

Paulo Cesar T. D'Ajello
(Orientador)


Jürgen F. Stilck
(Coordenador)

Banca examinadora


Paulo Cesar T. D'Ajello


Wagner Figueiredo


Mário José de Oliveira

à minha esposa, Nilzete

ÍNDICE

Agradecimentos	vi
Resumo	vii
Abstract	viii
1 Introdução	1
2 Sistemas fora do Equilíbrio	4
2.1 Introdução	4
2.2 Sistemas Abertos	4
2.3 Termodinâmica de Não Equilíbrio	7
2.4 Mecânica Estatística de Não Equilíbrio	8
2.5 Equação Mestra	12
3 Dinâmica do Antiferromagneto de Ising	15
3.1 Introdução	15
3.2 Características do Modelo	16

3.3	Probabilidade de Transição	18
3.4	Equações Dinâmicas	21
3.5	Equações Dinâmicas Usando o Método de Aproximação de Pares	23
4	Procedimento Numérico e Resultados	32
4.1	Introdução	32
4.2	Métodos Numéricos	33
4.3	Resultados Obtidos	36
4.3.1	Antiferromagneto a Campo Nulo	36
4.3.2	Antiferromagneto em Campo Constante	39
4.3.3	Antiferromagneto em um Campo $H(t) = H_0 \cos(\omega t)$	40
4.4	Discussões	61
5	Conclusões	67
	Referências Bibliográficas	70

Agradecimentos

Ao nosso Deus pertence o poder, a força, a sabedoria ...

a ele devo a maior gratidão por ter sido luz e guia no meu caminho.

Muitas pessoas contribuíram para o bom êxito deste trabalho. Agradeço em especial aos meus pais, que acreditaram em mim, dando-me todo o apoio e carinho necessários, apesar da distância, assim como a toda minha família. À família Farias, sou grato pelo incentivo recebido, inclusive ao amigo que partiu, mas que muito se orgulharia comigo. Sou grato também a todos os meus colegas da física pela colaboração, destacando o apoio de meus orientadores Paulo Cesar e Wagner.

Resumo

Neste trabalho estudamos o comportamento dinâmico de um modelo de Ising antiferromagnético numa rede quadrada. A dinâmica é simulada através da aplicação de um campo magnético externo oscilante ao sistema. A evolução temporal do sistema é descrita pela equação *Mestra*, e a taxa de transição dos spins segue o processo de *Glauber*. Utilizando a aproximação de pares, determinamos o diagrama de fases dinâmico do sistema em função da competição entre a frequência do campo e a frequência de inversão dos spins. A magnetização, a magnetização alternante e a função de correlação entre subredes foram determinadas para diversos valores da temperatura, da amplitude do campo e da razão entre as frequências do campo e de inversão dos spins.

Abstract

In this work we study the dynamical behavior of an antiferromagnetic Ising model in a square lattice. We simulate the dynamics through the application of an oscillating external magnetic field to the system. The system evolves in time according to the *Master* equation, and the rate of transition of spins follows the *Glauber* process. By employing the pair approximation, we find the dynamical phase transition of the system as a function of the competition between the frequency of the field and the frequency of the spin flipping. The magnetization, the staggered magnetization and the correlation function between sublattices are found for different values of temperature, field amplitude and the rate of frequencies of the field and the spin flipping.

CAPÍTULO 1

Introdução

A possibilidade de auto-organização ou o surgimento de estruturas espacialmente bem definidas ou ainda o aparecimento de estruturas organizadas em intervalos *espaço-temporais* são algumas das mais fascinantes questões associadas ao estudo de sistemas abertos ou de não-equilíbrio. Independentemente do surgimento das estruturas em sistemas fora do equilíbrio brotarem do caos, ou de processos irreversíveis que se desenvolvam à partir de conjuntos de reações bem determinadas, o que vem interessando aos cientistas é a possibilidade de poder descrever e entender os sistemas biológicos ou naturais, enfrentando questões desafiadoras que surgem no tratamento dos mesmos.

A motivação para a realização deste trabalho, surgiu de nosso interesse em estudar os métodos e procedimentos desenvolvidos nos últimos anos, para tratar sistemas complexos. Como uma forma de introdução a uma área tão intrigante quanto desconhecida, procuramos por um problema, distante das questões biológicas e químicas inerentes aos

sistemas vivos. Restringimo-nos neste trabalho a considerar sistemas magnéticos. Escolhemos um sistema antiferromagnético de Ising submetido à ação de um fluxo de energia, característica dos sistemas dinâmicos. O modelo por nós estudado é o equivalente antiferromagnético daquele proposto por *Tomé e de Oliveira*[1]. Assumimos que o sistema fosse submetido a ação de um campo magnético externo oscilante e que obedecesse à dinâmica estocástica proposta por *Glauber*[2] e *Tomé e de Oliveira*[3]. Deveríamos verificar o surgimento de estruturas dissipativas, relacionar o processo de formação dessas estruturas com a dinâmica e a interação entre os parâmetros pertinentes, na definição dos estados estacionários do mesmo. Devíamos também diferenciar os mecanismos desenvolvidos pelo sistema na transição de fases *antiferromagnética-paramagnética*, quando os processos são dinâmicos ou estáticos.

O trabalho foi efetivamente realizado e nós o desenvolvemos da seguinte maneira: no *capítulo 2*, apresentamos um panorama geral sobre os métodos da mecânica estatística de não equilíbrio. É um capítulo que não afeta o desenvolvimento do trabalho podendo ser excluído da leitura da dissertação sem qualquer prejuízo. Nós o apresentamos por interesse didático. Embora esquemático e pouco específico, serve para definir a área em que o trabalho se desenvolve e indicar como as técnicas nele utilizadas se inserem no esboço de uma teoria mais geral; no *capítulo 3*, definimos claramente o problema que nos propusemos a tratar. Desenvolvemos o formalismo matemático, calculando e mostrando, em detalhes, como obter as probabilidades de transição, e calculamos os valores médios das quantidades pertinentes utilizando a equação *Mestra*. Apresentamos a aproximação de pares que simplifica o problema matemático, garantindo-lhe tratabilidade. O capítulo

termina com a apresentação do sistema de equações diferenciais acopladas, dependentes do tempo, cujas soluções fornecem a dinâmica do sistema. Essas equações que descrevem a evolução temporal dos valores médios das magnetizações das sub-redes do sistema antiferromagnético e da correlação de pares de spins, são resolvidas numericamente. Os procedimentos numéricos adotados e os resultados dos cálculos são apresentados no *capítulo 4* onde uma grande abundância de gráficos é apresentada de forma sistemática permitindo-nos mostrar o que ocorre no sistema ao variarmos os parâmetros $\frac{k_B T}{J}$ (*temperatura*), $\frac{\Omega}{2\pi}$ (*razão entre a frequência do campo externo e a frequência de inversão dos spins*) e $\frac{H_0}{J}$ (*amplitude da intensidade do campo magnético oscilante*). Ao final realizamos algumas discussões, tentando explicar por que o sistema manifesta o comportamento apresentado; no último capítulo, estão as nossas conclusões.

CAPÍTULO 2

Sistemas fora do Equilíbrio

2.1 Introdução

Neste capítulo¹ mencionaremos, com brevidade, algumas características dos sistemas abertos. Procuraremos distinguir o tratamento termodinâmico do tratamento estatístico para esses sistemas. Perseguiamos a apresentação de um panorama geral mas compacto do esquema da mecânica estatística de não equilíbrio. Em particular nos interessa discutir a origem e as propriedades da equação *Mestra*, uma vez que essa equação desempenha papel central no desenvolvimento do problema que nos propusemos a tratar.

2.2 Sistemas Abertos

¹Este capítulo foi escrito baseado em leituras das obras citadas nas referências [4], [5] e [6]

Em termodinâmica, chamamos de sistemas abertos, aqueles que estão definidos por uma interação contínua com a vizinhança, ou seja, um sistema que se caracteriza por manter um fluxo de energia e/ou matéria com o meio externo. Essa interação permanente com a vizinhança, estabelece a diferença básica com relação aos sistemas ditos fechados, que constituem objeto de estudo da termodinâmica de equilíbrio. Neste último caso, as condições de contorno são fixas e impedem fluxos ou efeitos de campos provenientes do exterior. No equilíbrio, os processos se desenvolvem através de pequenas perturbações, de tal forma que, isolado, o sistema procura por estados que minimizem sua energia interna e maximize sua entropia. A tendência ao equilíbrio desenvolve-se pela exploração das possibilidades do sistema, que satisfazem os princípios extremos, sob as condições estáticas ditadas pela situação. Se, num processo quase-estático, novas estruturas surgirem no interior do sistema (transição de fases do equilíbrio), será em decorrência da satisfação dos critérios extremantes para as novas e definidas condições impostas ao mesmo. Assim, na transição de fases em sistemas fechados, o balanço de energia dá-se sem a intromissão de fluxos externos dependentes do tempo.

Quando os sistemas são abertos e interagem com a vizinhança, a termodinâmica se caracteriza pelo desenvolvimento de processos irreversíveis que podemos classificar como pertencentes a um dos ramos da termodinâmica de não equilíbrio, o linear ou não linear. Termodinâmica de não equilíbrio linear, é aquela em que os fluxos relacionam-se com as *forças generalizadas* através de uma relação linear, que não acontece no outro caso. Embora a presença permanente de fluxos e gradientes de temperatura e matéria, sejam

características dos processos termodinâmicos afastados do equilíbrio, os sistemas podem desenvolver processos que originem a formação de novas estruturas representativas de ordem, ainda que os processos não sejam estacionários. Um exemplo esclarecedor é apresentado por *Prigogine*[6] ao discutir um caso de difusão térmica numa situação onde a termodinâmica de não equilíbrio linear é aplicável. *Prigogine* lembra que é possível mostrar que a aplicação de um gradiente de temperatura a uma mistura de dois gases diferentes, permite observar o enriquecimento de um dos componentes nas proximidades da parede mais quente, enquanto o outro componente se acumula próximo à parede mais fria. Portanto, a situação final implica numa diminuição de entropia com relação à situação de mistura. Como baixamento de entropia associa-se ao ordenamento, e aumento de entropia relaciona-se com a desordem, este exemplo se constitui numa demonstração simples, de como situações de não equilíbrio podem evoluir numa direção que conduz ao aparecimento de estruturas ordenadas em um sistema aberto. Mesmo em situações distantes do equilíbrio, os sistemas podem se auto-organizar, embora devemos destacar aqui que só é possível verificar auto-organização quando a termodinâmica for não linear.

As novas estruturas que aparecem num processo de não equilíbrio, são radicalmente diferentes daquelas *estruturas de equilíbrio* estudadas pela termodinâmica clássica. Essas estruturas ditas *estruturas dissipativas*, são mantidas em condições afastadas do equilíbrio, somente através de necessários fluxos de energia e/ou matéria. Essa simples menção é suficiente para esclarecer que os mecanismos para a formação das estruturas dissipativas, são fundamentalmente diferentes daqueles que conduzem às estruturas de equilíbrio.

Não é nosso interesse neste trabalho, discutir os diferentes métodos utilizados pela termodinâmica de não equilíbrio, mas, parece-nos instrutivo considerar brevemente, a conexão entre estados macroscópicos e microscópicos associados a uma situação fora do equilíbrio. Para isso, deveremos mencionar os procedimentos termodinâmicos e estatísticos aplicados aos sistemas abertos.

2.3 Termodinâmica de Não Equilíbrio

A termodinâmica de não equilíbrio é uma teoria fenomenológica que trata da descrição dos estados e processos em sistemas fora do equilíbrio. O desenvolvimento matemático da teoria, pressupõe que os processos irreversíveis estudados se desenvolvam em sistemas macroscópicos muito grandes quando comparados a um livre percurso médio ou a um comprimento microscópico característico. Assim, podem ser considerados como formados por um meio contínuo em que cada pequena porção do mesmo apresenta-se localmente em um estado de equilíbrio. Portanto, é possível dividir o sistema em pequenas células. Estas, são suficientemente pequenas, para que se possa garantir que as variáveis termodinâmicas não mudem de um extremo ao outro da célula, embora se admita uma discreta variação de célula para célula. Embora muito pequena, comparada ao sistema, cada célula deve ser suficientemente grande para poder ser tratada como subsistema termodinâmico macroscópico em contato com sua vizinhança. Com esse pressuposto, básico para a tratabilidade da teoria, é possível derivarmos um conjunto de equações diferenciais de balanço para a densidade

de massa, velocidade, energia interna, temperatura e entropia, de tal maneira que essas quantidades sejam funções dependentes da posição e do tempo.

O desenvolvimento da termodinâmica fora do equilíbrio não se limita a derivação das equações de balanço. Prosegue através dos estudos das leis fenomenológicas lineares (forças generalizadas proporcionais aos fluxos), da estabilidade e das flutuações nos estados de não equilíbrio, do estudo da termodinâmica não linear, através de diferentes aproximações e, como uma extensão, considera os princípios microscópicos que fundamentam a teoria. A partir daí, desenvolve-se a mecânica estatística, cujo esquema geral tentaremos delinear no próximo parágrafo.

2.4 Mecânica Estatística de Não Equilíbrio

Já na segunda metade do século dezanove, *Maxwell* e *Boltzmann* enfatizavam que as leis macroscópicas da física poderiam ser deduzidas à partir de uma dinâmica microscópica para os sistemas se considerações estatísticas fossem utilizadas. Assim, o propósito da mecânica estatística de sistemas fora do equilíbrio, é determinar as propriedades termodinâmicas e a evolução temporal dos observáveis macroscópicos desses sistemas em termos das leis dinâmicas que governam o movimento de suas partículas constituintes. Consequência dessa proposição, são os objetivos principais da teoria, que podem ser listados da seguinte maneira: *a)* derivar equações de transporte e entender suas estruturas, *b)* compreender como a tendência ao equilíbrio ocorre em sistemas naturais, *c)* estudar as propriedades

dos estados estacionários, e *d*) calcular os valores instantâneos e a evolução temporal das quantidades físicas que especificam o estado macroscópico do sistema.

Atualmente, existem diversas teorias e métodos para estudar a evolução macroscópica dos sistemas fora do equilíbrio. Isto reflete o estado da arte, que não sendo acabada, não apresenta um esquema geral único para encaminhar a solução dos problemas.

Pode-se pensar que as dificuldades estão associadas à noção de irreversibilidade e à dependência temporal que afetam as variáveis pertinentes, tornando difícil, até agora, o tratamento dos sistemas abertos. A utilidade dos métodos conhecidos, que relacionaremos abaixo, só pode ser assegurada pela comparação dos resultados obtidos, pela aplicação da teoria, com os resultados experimentais. Entretanto, as razões pelas quais esses métodos funcionam bem dentro de seus domínios de aplicabilidade, não podem ser adequadamente entendidas até que se obtenha um profundo conhecimento dos problemas conceituais básicos associados aos processos irreversíveis.

Os métodos de descrição da estatística de não equilíbrio, enfrentam problemas inerentes a essa falta de conhecimento e que são tipicamente: a dificuldade de introduzir procedimentos mesoscópicos, a questão da irreversibilidade e a definição de condições iniciais e de contorno. Em qualquer um de seus procedimentos, uma das questões cruciais que se enfrenta é como propor a derivação das equações de transporte não lineares que sejam capazes de descrever a evolução temporal dos sistemas.

É sabido que em qualquer experiência é impossível de se ter acesso ao conhecimento completo do estado microscópico dinâmico de um sistema de muitos corpos. É por essa razão que utiliza-se a mecânica estatística para se obter uma descrição do estado

macroscópico do sistema, em termos de um pequeno conjunto de quantidades dinâmicas, $P_1, P_2, P_3, \dots, P_n$, onde n é muito menor que o número de graus de liberdade do sistema sob observação. Essas quantidades P_j são funções definidas no espaço de fase, quando se considera o limite clássico, ou são operadores hermitianos atuando no espaço de *Hilbert* quando se trata o caso quântico. Um dos problemas básicos da mecânica estatística de não equilíbrio, é a escolha dessas quantidades e a derivação de equações de evolução para as variáveis macroscópicas $Q_j(t)$, $j = 1, 2, 3, \dots, n$ que são as médias, $\langle P_j \rangle$, que devem corresponder às medidas em um dado experimento. Por exemplo, o conjunto $\{P_j\}$ pode ser constituído pela densidade de massa, densidade de momentum e densidade de energia quando consideramos a hidrodinâmica de um fluido. Essas quantidades P_j variam no tempo com a evolução dinâmica do sistema; entretanto, o experimento não acompanha a evolução microscópica, acompanha os valores numéricos $Q_j(t)$ das P_j . O resultado desses experimentos são descritos por equações de transporte da forma:

$$\frac{d}{dt}Q_j(t) = \Phi_j \{Q_1(t), Q_2(t), \dots, Q_n(t); t\}, \quad (2.1)$$

onde Φ_j é uma funcional das macrovariáveis Q_j que, em geral, é não linear, não local e possui memória, isto é, depende da história passada da variável Q_j até o tempo t em que se realiza a medida. Dentro desse esquema algumas questões se impõem: *i*) Como escolher as variáveis $Q_j(t)$? *ii*) Como definir as condições iniciais para a equação geral de transporte? *iii*) Como obter as funcionais Φ_j ?

Com relação à escolha das variáveis $Q_j(t)$, alguns autores sugerem que esse conjunto de variáveis deva ser constituído por quantidades *quase invariantes*, que se

transformam muito lentamente na escala de tempo molecular. Outro argumento diz que deve-se incluir suficientes variáveis, na descrição do processo, de forma a tornar as funcionais Φ_j quase markoffianas, ou quase instantâneas. Outra possibilidade, consiste em incluir somente aquelas variáveis que sejam mensuráveis no experimento sob consideração.

Com relação à condição inicial que devemos satisfazer para obter uma solução única para as equações de transporte, notamos que estas equações são de primeira ordem com relação à derivada temporal, na maioria dos casos. A definição das $Q_j(t_1)$ num dado tempo t_1 , é feita utilizando-se condições que pareçam razoáveis e bem adequadas à análise teórica. Evidentemente que o grau de sensibilidade do modelo às condições iniciais deve ser observado.

Para responder a última das questões formuladas acima, ou seja, como definir a forma das equações de transporte Φ_j , devemos relacionar os diversos procedimentos que são adotados comumente. De acordo com Zwanzig[7], essas alternativas podem ser classificadas da seguinte maneira:

- 1) técnicas intuitivas;
- 2) técnicas baseadas em generalizações da teoria cinética dos gases;
- 3) técnicas baseadas na teoria dos processos estocásticos;
- 4) expansões à partir de um ensemble de equilíbrio inicial;
- 5) generalizações do algoritmo do ensemble de Gibbs.

Não vamos nos dedicar aqui a comentar e/ou ilustrar cada uma dessas técnicas. No próximo parágrafo, trataremos de descrever algumas propriedades da equação *Mestra* que, junto com o formalismo de Langevin, pode ser identificado como uma técnica

baseada na teoria dos processos estocásticos correspondendo ao item 3) da classificação acima.

2.5 Equação Mestra

A equação *Mestra* representa um método estocástico, aplicável em um processo, que permite obter uma distribuição de probabilidade (associada aos estados desse processo) cuja medida varia com o tempo.

A seguir, vamos obter de forma rápida e geral, a equação *Mestra* para um sistema descrito por variáveis discretas, que podem ser representadas por um vetor \vec{m} . Em continuação, discutimos algumas propriedades dessa equação.

Para visualizar o processo, pensemos em uma partícula movendo-se numa rede tridimensional. A probabilidade de encontrar o sistema num dado ponto \vec{m} no instante t , aumenta devido às transições desde outros pontos \vec{m}' para o ponto considerado. Ao mesmo tempo, essa probabilidade pode decrescer devido às transições que arrancam a partícula desse ponto, assim:

$$\frac{dP(\vec{m}, t)}{dt} = \text{taxa de chegada} - \text{taxa de saída.} \quad (2.2)$$

Uma vez que a taxa de chegada consiste de todas as transições desde pontos iniciais \vec{m}' até \vec{m} , ela é constituída pela soma sobre todos os pontos iniciais. Cada termo dessa taxa é dado pela probabilidade de encontrar a partícula no ponto \vec{m}' , multiplicada pela probabilidade de transição por unidade de tempo de passar de \vec{m}' a \vec{m} . Assim obtemos:

$$\text{taxa de chegada} = \sum_{\vec{m}'} \omega(\vec{m}, \vec{m}') P(\vec{m}', t) \quad (2.3)$$

e de forma similar encontramos para as transições de saída,

$$\text{taxa de saída} = P(\vec{m}, t) \sum_{\vec{m}'} \omega(\vec{m}', \vec{m}). \quad (2.4)$$

Levando as expressões (2.3) e (2.4) a (2.2) temos:

$$\frac{dP(\vec{m}, t)}{dt} = \sum_{\vec{m}'} \omega(\vec{m}, \vec{m}') P(\vec{m}', t) - P(\vec{m}, t) \sum_{\vec{m}'} \omega(\vec{m}', \vec{m}) \quad (2.5)$$

que é a chamada equação *Mestra* para o processo.

A questão fundamental envolvendo a equação *Mestra* é, portanto, a determinação explícita das taxas de transição ω que a compõem. De uma forma geral, admite-se a existência de dois procedimentos para a obtenção das ω : *i*) escrevê-las baseadas em argumentos de plausibilidade e *ii*) derivá-las a partir de primeiros princípios usando, basicamente, métodos estocásticos quânticos. Pode-se, é certo, discutir maneiras de derivar a equação *Mestra*, de forma a explorar questões centrais para a teoria dos sistemas abertos. Essas discussões envolvem a definição do conjunto dos operadores, que refletem os observáveis físicos e o espaço de fase adequado à definição dos mesmos. Neste trabalho, não estamos interessados nessas questões. Achamos instrutivo apresentar alguns teoremas sobre a equação *Mestra*, embora, não estejamos preocupados com suas demonstrações. Vejamos algumas afirmações [5].

a) Se a equação *Mestra* tem solução estacionária única ($\frac{dP}{dt} = 0$) e satisfaz o princípio de balanço detalhado, sua solução pode ser obtida explicitamente por mera soma ou, no caso contínuo, por quadraturas. O princípio de balanço detalhado requer que haja tantas transições por segundo do estado \vec{m} para o estado \vec{m}' , como do estado \vec{m}' para \vec{m} pelo processo inverso. Ou, na forma matemática $P(m)\omega(m', m) = P(m')\omega(m, m')$.

b) Se as ω forem independentes do tempo, existe sempre pelo menos uma solução estacionária

$P^o(\vec{m})$, tal que $\frac{d}{dt}P(\vec{m}) = 0$, quando $t \rightarrow \infty$.

c) Se num instante inicial, $t = 0$

$0 \leq P(\vec{m}, 0) \leq 1$, para todo \vec{m} , e

$\sum_{\vec{m}} P(\vec{m}, 0) = 1$ então também, para todo tempo posterior $t > 0$, $0 \leq P(\vec{m}, t) \leq 1$ e

$\sum_{\vec{m}} P(\vec{m}, t) = 1$.

d) Se a solução estacionária é única, então a solução dependente do tempo $P(\vec{m}, t)$ para qualquer distribuição inicial $P^o(\vec{m})$ (tal que $P(\vec{m}, 0) = P^o(\vec{m})$) tende, para $t \rightarrow \infty$, à solução estacionária.

CAPÍTULO 3

Dinâmica do Antiferromagneto de Ising

3.1 Introdução

Estamos interessados em estudar as propriedades magnéticas, dinâmicas, de um sistema com interações antiferromagnéticas em contato com um banho térmico e sob a influência de um campo magnético externo dependente do tempo. Tratamos de obter uma probabilidade de transição para o sistema aberto a fim de equacionarmos o processo utilizando a equação *Master*.

Assumindo que o sistema apresenta uma evolução temporal que obedece à dinâmica estocástica do tipo desenvolvido por Glauber[2], consideramos um modelo de spins numa rede quadrada, descrito por uma Hamiltoniana de Ising onde os estados do sistema

são determinados por $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_N)$ onde σ_i indica a orientação do spin no sítio i que pode assumir os valores ± 1 .

Neste capítulo determinamos as equações dinâmicas que descrevem o comportamento médio das quantidades físicas de interesse, e aplicamos o método de aproximação de pares para tornar tratável o sistema de equações que resolveremos utilizando técnicas numéricas.

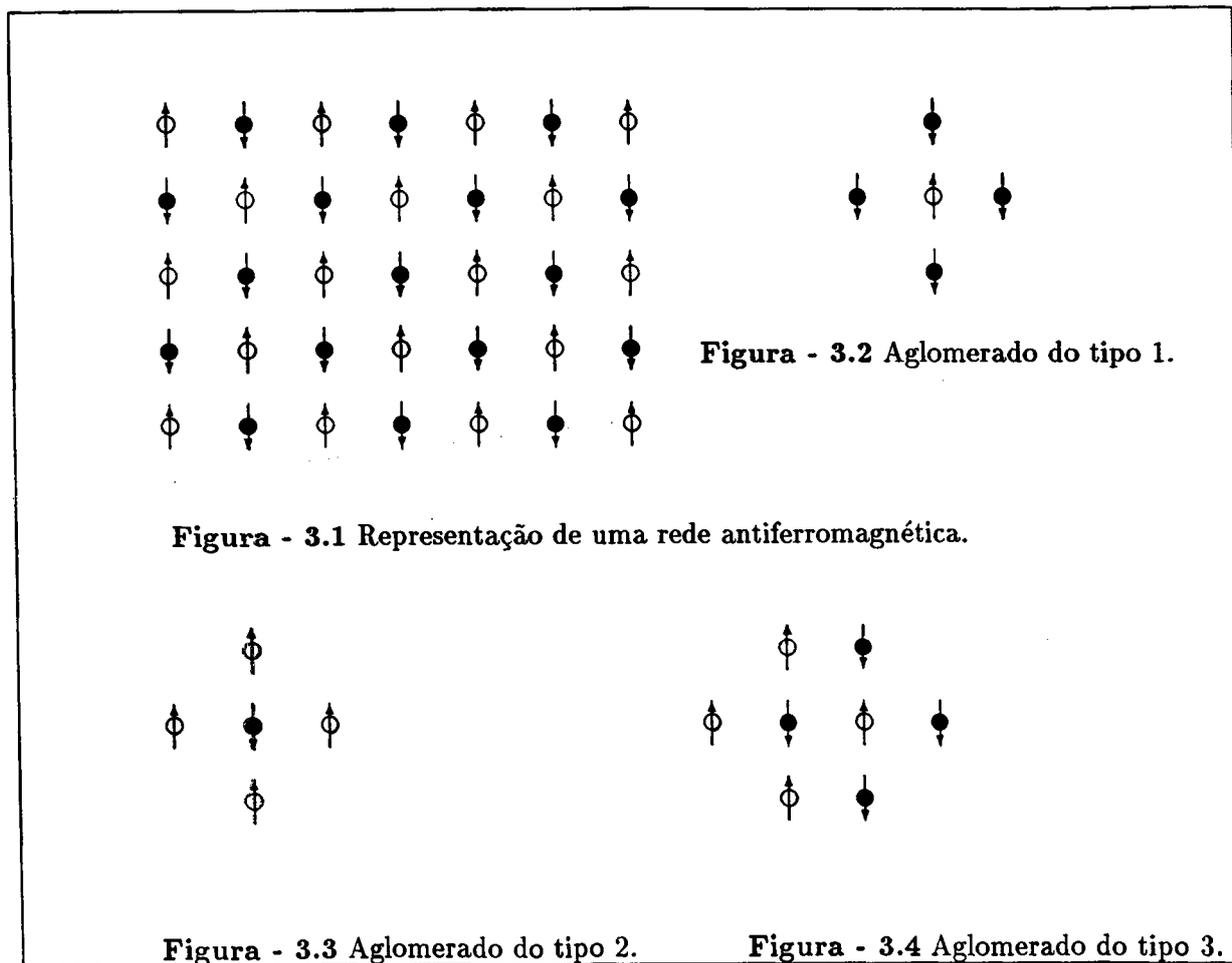
3.2 Características do Modelo

Do ponto de vista teórico podemos conceber nosso sistema como uma rede bidimensional formada por duas redes interpenetrantes. Cada uma delas se caracteriza pela definição de spins orientados em uma direção, oposta à da outra. Esta disposição define uma estrutura geral onde cada spin de uma subrede é cercado por um grupo de spins pertencentes à outra subrede apresentando orientação contrária à do spin considerado. A situação é esquematicamente apresentada na *figura 3.1* onde identifica-se claramente as duas subredes.

Para descrever a dinâmica desse sistema magnético precisamos determinar a evolução temporal da magnetização de cada subrede e das funções de correlação entre dois spins. Neste trabalho, vamos considerar uma aproximação na qual estudamos a evolução dos valores médios da magnetização da subrede e da função de correlação entre spins vizinhos mais próximos. Para isso, consideraremos agregados de spins como aqueles que estão

esquemáticamente representados na *figura 3.2 a 3.4*. O primeiro desses (*figuras 3.2 e 3.3*) trata da interação de um spin com seus primeiros vizinhos. O segundo, representado na *figura 3.4*, indica as interações de um par de spins com seus vizinhos mais próximos.

Como o sistema interage com um banho térmico na presença de um campo magnético externo dependente do tempo, a energia do aglomerado de spins é descrita por uma Hamiltoniana que leva em conta a interação entre spins e a interação dos spins com o campo



externo. Portanto, o estado de mínima energia para cada aglomerado será aquele em que os spins se encontram alinhados antiparalelamente. Esta leitura é efetuada na Hamiltoniana

através da definição do valor da integral de troca (ou parâmetro de troca) representado por J . Se $J < 0$ o sistema terá minimizada sua energia para spins alinhados antiparalelamente, o que caracteriza uma rede antiferromagnética. Se $J > 0$ os spins tenderão a alinhar-se paralelamente de forma a minimizar a energia. Se $J < 0$ caracteriza-se um sistema antiferromagnético representado pela Hamiltoniana

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - H(t) \sum_i \sigma_i \quad , \quad (3.1)$$

que utilizaremos para descrever o sistema.

3.3 Probabilidade de Transição

Definida a função energia pela expressão (3.1) a probabilidade de encontrar o sistema num estado σ no tempo t , $P(\sigma, t)$, obedece a uma evolução temporal determinada pela equação *Master*:

$$\frac{d}{dt} P(\sigma, t) = \sum_{\sigma'} [P(\sigma', t) \omega(\sigma', \sigma) - P(\sigma, t) \omega(\sigma, \sigma')]. \quad (3.2)$$

Para resolver esta equação consideramos o caso particular em que o sistema está num estado estacionário. Embora esse sistema dependente do tempo não satisfaça o princípio do balanço detalhado, vamos supor que a taxa de transição entre estados que é considerada para os estados de equilíbrio. Ou seja, se o campo fosse independente do tempo, poderíamos aplicar o princípio do balanço detalhado e obteríamos uma relação do seguinte

tipo:

$$\frac{P(\sigma')}{P(\sigma)} = \frac{\exp(-\beta\mathcal{H}(\sigma'))}{\exp(-\beta\mathcal{H}(\sigma))} = \frac{\omega(\sigma, \sigma')}{\omega(\sigma', \sigma)}, \quad (3.3)$$

onde supomos que para os estados de equilíbrio, $P(\sigma) \propto \exp(-\beta\mathcal{H})$. É preciso observar que as transições se dão (para esse tipo de sistema) entre estados muito próximos no espaço de energia, pois a dinâmica que será utilizada admite a inversão de um spin de cada vez, permanecendo o restante do sistema inalterado. Ora, a inversão de um spin na rede depende da variação de energia do sistema regulado pelo banho térmico e pelo fluxo de energia proveniente da interação com o campo magnético externo. Assumindo que a equação (3.3) seja válida para os estados estacionários do sistema quando o campo magnético é variável, podemos escrever que:

$$\frac{P(\sigma')}{P(\sigma)} = \frac{\exp -\beta \left[J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j + H(t) \sum_i \sigma_i \right]}{\exp -\beta \left[-J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - H(t) \sum_i \sigma_i \right]}, \quad (3.4)$$

onde o estado σ' é obtido à partir do estado σ , invertendo-se apenas o sinal do spin σ_i . Na equação (3.3), e nas demais equações deste capítulo, não faremos nenhuma referência específica sobre o valor do parâmetro J . As equações que obteremos serão tratadas da maneira mais geral possível, e somente quando passarmos à solução numérica será necessário definir exatamente o sistema magnético a ser trabalhado. Portanto, as considerações anteriores são válidas tanto para sistemas ferromagnéticos como antiferromagnéticos.

O sistema que estamos considerando consiste de uma rede planar onde cada spin mantém interações com os vizinhos mais próximos. Pressupõe também que a cada inversão de um spin, todos os demais permanecem inalterados. Em consequência dessa aproximação, a soma sobre todos os pares $\langle i, j \rangle$ na equação (3.4) pode ser substituída pela soma

sobre um aglomerado, sem perda de generalidade. Definindo o aglomerado pelo conjunto de spins mostrado na *figura 3.2*, a Hamiltoniana pode ser escrita na forma:

$$\mathcal{H}_i = -J \sum_{l=1}^z \sigma_i \sigma_l - \sigma_i H(t), \quad (3.5)$$

onde i indica o spin central (circulo vazio na *figura 3.2*) e l é o índice que identifica os z vizinhos mais próximos do i -ésimo spin. A equação (3.4) é então reescrita como:

$$\frac{P(-\sigma_i)}{P(\sigma_i)} = \frac{\exp -\beta [J \sum_{l=1}^z \sigma_i \sigma_l + H(t) \sigma_i]}{\exp \beta [J \sum_{l=1}^z \sigma_i \sigma_l + H(t) \sigma_i]} = \frac{\omega(\sigma_i, -\sigma_i)}{\omega(-\sigma_i, \sigma_i)}. \quad (3.6)$$

Utilizando a relação $\exp \mp \theta = \cosh \theta \mp \sinh \theta$, e escrevendo que $K = \beta J$,

obtemos:

$$\begin{aligned} \exp \mp \left(K \sum_{l=1}^z \sigma_i \sigma_l + \beta H(t) \sigma_i \right) &= \cosh \sigma_i \left(K \sum_{l=1}^z \sigma_l + \beta H(t) \right) \\ &\times \left[1 \mp \tanh \sigma_i \left(K \sum_{l=1}^z \sigma_l + \beta H(t) \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Finalmente:

$$\frac{\omega(\sigma_i, -\sigma_i)}{\omega(-\sigma_i, \sigma_i)} = \frac{1 - \tanh \sigma_i (K \sum_{l=1}^z \sigma_l + \beta H(t))}{1 + \tanh \sigma_i (K \sum_{l=1}^z \sigma_l + \beta H(t))}. \quad (3.8)$$

Utilizando o fato de que os valores possíveis de σ_i são ± 1 , podemos na equação (3.8) escrever $\tanh(\sigma_i x)$ como $\sigma_i \tanh(x)$ tal que uma escolha adequada para a taxa de transição seja dada por

$$\omega_i(\sigma_i) = \frac{1}{2\tau} \left(1 - \sigma_i \tanh \left[K \sum_{l=1}^z \sigma_l + \beta H(t) \right] \right). \quad (3.9)$$

A expressão (3.9) representa a probabilidade de transição de um estado σ para outro, onde o i -ésimo spin muda de σ_i para $-\sigma_i$. O parâmetro τ que ocorre na probabilidade de transição serve apenas para descrever a escala de tempo na qual as transições ocorrem. Por convenção este i -ésimo spin pertence à subrede 1. De forma semelhante é possível

obter $\omega(\sigma_j, -\sigma_j)$ para o outro aglomerado mostrado na *figura 3.3*, onde o spin do sítio j , por convenção, pertence à subrede 2, e está cercado por vizinhos mais próximos pertencentes à subrede 1, isto é $\sum_{l=1}^z \sigma_l$. A probabilidade de transição é então obtida, substituindo-se $i \longleftrightarrow j$, na expressão (3.9) ficando,

$$\omega_j(\sigma_j) = \frac{1}{2\tau} \left(1 - \sigma_j \tanh \left[K \sum_{l=1}^z \sigma_l + \beta H(t) \right] \right). \quad (3.10)$$

Devemos finalmente observar que equações do tipo (3.9) e (3.10) já foram utilizadas anteriormente no trabalho de *Tomé e de Oliveira*[1].

3.4 Equações Dinâmicas

Iniciaremos por definir o valor esperado de um spin como uma função estocástica do tempo,

$$\langle \sigma_j(t) \rangle = \sum_{\sigma} \sigma_j P(\sigma_1, \dots, \sigma_n, t), \quad (3.11)$$

onde a soma sobre σ é feita sobre os 2^n valores possíveis da série $\sigma_1, \dots, \sigma_n$. De maneira semelhante procedemos para escrever o valor esperado do produto $\sigma_i \sigma_j$, definindo assim o valor médio da correlação entre os spins dos sítios i e j , que escrevemos da seguinte maneira:

$$\langle \sigma_i(t) \sigma_j(t) \rangle = \sum_{\sigma} \sigma_i \sigma_j P(\sigma_1, \dots, \sigma_n, t). \quad (3.12)$$

Trataremos a seguir da obtenção de uma expressão que relacione a probabilidade aos valores esperados. Se denotarmos por σ_j e σ'_j os valores possíveis assumidos pelo j -ésimo spin em duas configurações distintas σ e σ' , verificamos que a função $\frac{1}{2}(1 + \sigma_j \sigma'_j)$

é igual a unidade se $\sigma_j = \sigma'_j$ e igual a zero se $\sigma_j = -\sigma'_j$. Portanto é possível expressar $P(\sigma_1, \dots, \sigma_n, t)$ como uma soma sobre os spins da seguinte maneira:

$$P(\sigma_1, \dots, \sigma_n, t) = \frac{1}{2^n} \sum_{\{\sigma'\}} (1 + \sigma_1 \sigma'_1)(1 + \sigma_2 \sigma'_2)(1 + \sigma_3 \sigma'_3) \times \dots \times (1 + \sigma_n \sigma'_n) P(\sigma'_1, \dots, \sigma'_n, t). \quad (3.13)$$

Se desenvolvermos os produtos apresentados na equação (3.13) e fizermos a soma em σ' , acharemos:

$$\begin{aligned} P(\sigma_1, \dots, \sigma_n, t) = & \frac{1}{2^n} \sum_{\{\sigma'\}} (1 + \sigma_1 \sigma'_1 + \sigma_2 \sigma'_2 + \sigma_3 \sigma'_3 + \sigma_4 \sigma'_4 + \dots + \sigma_1 \sigma'_1 \sigma_2 \sigma'_2 + \sigma_1 \sigma'_1 \sigma_3 \sigma'_3 \\ & + \sigma_1 \sigma'_1 \sigma_4 \sigma'_4 + \sigma_2 \sigma'_2 \sigma_3 \sigma'_3 + \sigma_2 \sigma'_2 \sigma_4 \sigma'_4 + \sigma_3 \sigma'_3 \sigma_4 \sigma'_4 + \dots + \sigma_1 \sigma'_1 \sigma_2 \sigma'_2 \sigma_3 \sigma'_3 \\ & + \sigma_1 \sigma'_1 \sigma_2 \sigma'_2 \sigma_4 \sigma'_4 + \sigma_1 \sigma'_1 \sigma_3 \sigma'_3 \sigma_4 \sigma'_4 + \sigma_2 \sigma'_2 \sigma_3 \sigma'_3 \sigma_4 \sigma'_4 + \dots \\ & + \sigma_1 \sigma'_1 \sigma_2 \sigma'_2 \sigma_3 \sigma'_3 \sigma_4 \sigma'_4 + \dots) \times P(\sigma'_1, \dots, \sigma'_n, t), \end{aligned} \quad (3.14)$$

que podemos reescrever como,

$$\begin{aligned} P(\sigma_1, \dots, \sigma_n, t) = & \frac{1}{2^n} \left\{ \sum_j \sigma_j \sum_{\{\sigma'\}} \sigma'_j P(\sigma'_1, \dots, \sigma'_n, t) \right. \\ & + \sum_{j \neq k} \sigma_j \sigma_k \sum_{\{\sigma'\}} \sigma'_j \sigma'_k P(\sigma'_1, \dots, \sigma'_n, t) \\ & + \left. \sum_{i \neq j \neq k} \sigma_i \sigma_j \sigma_k \sum_{\{\sigma'\}} \sigma'_i \sigma'_j \sigma'_k P(\sigma'_1, \dots, \sigma'_n, t) + \dots \right\} \quad \text{ou ainda,} \\ P(\sigma_1, \dots, \sigma_n, t) = & \frac{1}{2^n} \left\{ 1 + \sum_j \sigma_j \langle \sigma_j(t) \rangle + \sum_{j \neq k} \sigma_j \sigma_k \langle \sigma_j(t) \sigma_k(t) \rangle \right. \\ & \left. + \sum_{i \neq j \neq k} \sigma_i \sigma_j \sigma_k \langle \sigma_i \sigma_j \sigma_k \rangle + \dots \right\}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

A equação (3.15) acima é a expansão mais geral possível para a probabilidade do sistema; ela é escrita em função de todos os momentos possíveis da distribuição. Em geral, estamos interessados no cálculo do primeiro e segundo momentos da distribuição

para um sistema. Por isso, nesse caso apenas os três primeiros termos da equação (3.15) são levados em consideração.

Agora, usando a equação *Mestra* (3.2) com a notação para σ usada no procedimento acima, obtemos a equação para a evolução temporal de $\langle \sigma_i(t) \rangle$ multiplicando a equação *Mestra* por σ_k e somando sobre todas as configurações, assim obtendo:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} P(\sigma_1, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_n, t) &= - \sum_i \omega_i(\sigma_i) P(\sigma_1, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_n, t) \\ &\quad + \sum_i \omega_i(-\sigma_i) P(\sigma_1, \dots, -\sigma_i, \dots, \sigma_n, t), \\ \frac{d}{dt} \sum_{\{\sigma\}} \sigma_k P(\sigma_1, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_n, t) &= - \sum_{\{\sigma\}} \sigma_k \sum_i \omega_i(\sigma_i) P(\sigma_1, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_n, t) \\ &\quad + \sum_{\{\sigma\}} \sigma_k \sum_i \omega_i(-\sigma_i) P(\sigma_1, \dots, -\sigma_i, \dots, \sigma_n, t). \end{aligned} \quad (3.16)$$

Quando somamos sobre todas as configurações os termos com $i \neq k$ se cancelam. Mas, quando $i = k$ devemos fazer a mudança $\sigma_k \rightarrow -\sigma_k$ no segundo termo na equação (3.16), para obter:

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_k(t) \rangle = -2 \langle \sigma_k \omega_k(\sigma_k(t)) \rangle. \quad (3.17)$$

O procedimento para a obtenção da equação da evolução temporal para a correlação obedece o mesmo procedimento anterior, e temos:

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_i(t) \sigma_j(t) \rangle = -2 \langle \sigma_i \sigma_j (\omega_i(\sigma_i(t)) + \omega_j(\sigma_j(t))) \rangle. \quad (3.18)$$

3.5 Equações Dinâmicas Usando o Método de Aproximação de Pares

Com os resultados obtidos até o presente momento iniciaremos os cálculos que nos permitirão chegar às equações do movimento que devem ser satisfeitas pelos valores médios da magnetização, e que fornecerão o diagrama de fases para o sistema.

A probabilidade de transição $w_i(\sigma_i, -\sigma_i)$ obtida pela expressão (3.9) pode ser reescrita na seguinte forma para a rede quadrada com número de coordenação $z = 4$:

$$w_i(\sigma_i) = \frac{1}{2\tau} \left\{ 1 - \sigma_i \tanh[K(\sigma_j^{(1)} + \sigma_j^{(2)} + \sigma_j^{(3)} + \sigma_j^{(4)}) + \beta H] \right\}, \quad (3.19)$$

e, quando substituída na equação (3.17) fornece a equação que descreve a evolução média, $\langle \sigma_1(t) \rangle$, ou seja,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \sigma_1 \rangle &= -2 \langle \sigma_1 w(\sigma_1) \rangle \\ &= -2 \left\langle \frac{\sigma_1}{2\tau} \left\{ 1 - \sigma_1 \tanh[K(\sigma_2^{(1)} + \sigma_2^{(2)} + \sigma_2^{(3)} + \sigma_2^{(4)}) + \beta H] \right\} \right\rangle \\ \tau \frac{d}{dt} \langle \sigma_1 \rangle &= -\langle \sigma_1 \rangle + \left\langle \tanh[K(\sigma_2^{(1)} + \sigma_2^{(2)} + \sigma_2^{(3)} + \sigma_2^{(4)}) + \beta H] \right\rangle. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Chamando $m_1 = \langle \sigma_1 \rangle$ teremos:

$$\tau \frac{d}{dt} m_1 = -m_1 + \left\langle \tanh \left[K(\sigma_2^{(1)} + \sigma_2^{(2)} + \sigma_2^{(3)} + \sigma_2^{(4)}) + \beta H \right] \right\rangle. \quad (3.21)$$

O valor médio da tangente hiperbólica é explicitado em termos da probabilidade do aglomerado, tal que,

$$\left\langle \tanh \left[K \left(\sum_{l=1}^z \sigma_2^{(l)} \right) + \beta H \right] \right\rangle = \sum_C \tanh \left[K(\sigma_2^{(1)} + \sigma_2^{(2)} + \sigma_2^{(3)} + \sigma_2^{(4)}) + \beta H \right] \times P_C, \quad (3.22)$$

onde o somatório incluído no argumento da tangente hiperbólica envolve somente os primeiros vizinhos do spin considerado. A probabilidade do aglomerado, P_C , é obtida utilizando-se a

aproximação de pares [3] e é escrita na seguinte forma:

$$P_C = P_1(\sigma_1) \prod_{l=1}^z \frac{P_{12}(\sigma_1, \sigma_2^{(l)})}{P_1(\sigma_1)} \quad (3.23)$$

quando o spin σ_1 , que pertence à subrede 1, é cercado pelos seus vizinhos mais próximos, $\sigma_2^{(l)}$, que pertencem à subrede 2. Representando o lado esquerdo da expressão (3.22) por $\langle X \rangle$ e utilizando (3.23) ficamos com:

$$\begin{aligned} \langle X \rangle = & \sum_C \tanh \left[K(\sigma_2^{(1)} + \sigma_2^{(2)} + \sigma_2^{(3)} + \sigma_2^{(4)}) + \beta H \right] \\ & \times \frac{P_{12}(\sigma_1, \sigma_2^{(1)}) P_{12}(\sigma_1, \sigma_2^{(2)}) P_{12}(\sigma_1, \sigma_2^{(3)}) P_{12}(\sigma_1, \sigma_2^{(4)})}{P_1^3(\sigma_1)}. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Fazendo a soma sobre todas as configurações possíveis de σ_1 temos:

$$\begin{aligned} \langle X \rangle = & \sum_{\sigma_2^{(l)}} \tanh \left[K(\sigma_2^{(1)} + \sigma_2^{(2)} + \sigma_2^{(3)} + \sigma_2^{(4)}) + \beta H \right] \\ & \times \frac{P_{12}(+, \sigma_2^{(1)}) P_{12}(+, \sigma_2^{(2)}) P_{12}(+, \sigma_2^{(3)}) P_{12}(+, \sigma_2^{(4)})}{P_1^3(+)} \\ & + \sum_{\sigma_2^{(l)}} \tanh \left[K(\sigma_2^{(1)} + \sigma_2^{(2)} + \sigma_2^{(3)} + \sigma_2^{(4)}) + \beta H \right] \\ & \times \frac{P_{12}(-, \sigma_2^{(1)}) P_{12}(-, \sigma_2^{(2)}) P_{12}(-, \sigma_2^{(3)}) P_{12}(-, \sigma_2^{(4)})}{P_1^3(-)}, \end{aligned} \quad (3.25)$$

Resta analisar as configurações possíveis para $\sigma_2^{(l)}$ que apresentam as seguintes alternativas para o aglomerado:

1. a configuração com todos os spins *para cima*, isto é (+), tem uma única possibilidade;
2. a configuração com um dos spins *para baixo* (-), e todos os outros spins *para cima* (+), tem quatro estados possíveis;

3. a configuração com dois dos spins *para baixo* (-), e os outros dois com spins *para cima* (+) tem seis estados possíveis;
4. a configuração com três spins *para baixo* (-), e um dos spins *para cima* (+) tem quatro estados possíveis;
5. a configuração com todos os spins *para baixo* (-) tem uma única possibilidade.

Retomando o cálculo do valor médio $\langle X \rangle$, e realizando a soma sobre todas as configurações possíveis de $\sigma_2^{(l)}$, obtemos:

$$\begin{aligned}
\langle X \rangle = & \frac{P_{12}^4(+,+)}{P_1^3(+)} \tanh(4K + \beta H) + 4 \frac{P_{12}^3(+,+)P_{12}(+,-)}{P_1^3(+)} \tanh(2K + \beta H) \\
& + 6 \frac{P_{12}^2(+,+)P_{12}(+,-)}{P_1^3(+)} \tanh(\beta H) + 4 \frac{P_{12}(+,+)P_{12}^3(+,-)}{P_1^3(+)} \tanh(-2K + \beta H) \\
& + \frac{P_{12}^4(+,-)}{P_1^3(+)} \tanh(-4K + \beta H) + \frac{P_{12}^4(-,+)}{P_1^3(-)} \tanh(4K + \beta H) \\
& + 4 \frac{P_{12}^3(-,+)P_{12}(-,-)}{P_1^3(-)} \tanh(2K + \beta H) + 6 \frac{P_{12}^2(-,+)P_{12}(-,-)}{P_1^3(-)} \tanh(\beta H) \\
& + 4 \frac{P_{12}(-,+)P_{12}^3(-,-)}{P_1^3(-)} \tanh(-2K + \beta H) + \frac{P_{12}^4(-,-)}{P_1^3(-)} \tanh(-4K + \beta H). \quad (3.26)
\end{aligned}$$

Levando-se em conta a equação (3.15) com apenas seus primeiro e segundo momentos, isto é, $m_1 = \langle \sigma_1 \rangle$, $m_2 = \langle \sigma_2 \rangle$ e $r = \langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle$, podemos escrever que:

$$\begin{aligned}
x_1 = P_1(+) &= \frac{1}{2}(1 + m_1), & y_1 = P_1(-) &= \frac{1}{2}(1 - m_1), \\
x_2 = P_2(+) &= \frac{1}{2}(1 + m_2), & y_2 = P_2(-) &= \frac{1}{2}(1 - m_2), \\
z = P_{12}(+,+) &= \frac{1}{4}(1 + m_1 + m_2 + r), & w = P_{12}(-,-) &= \frac{1}{4}(1 - m_1 - m_2 + r), \\
v_1 = P_{12}(+,-) &= \frac{1}{4}(1 + m_1 - m_2 - r), & & \\
v_2 = P_{12}(-,+) &= \frac{1}{4}(1 - m_1 + m_2 - r). & & (3.27)
\end{aligned}$$

Colocando-se as expressões (3.27) na equação (3.26) obtemos então que:

$$\begin{aligned}
\langle X \rangle = & \frac{1}{x_1^3} \{ z^4 \tanh(4K + \beta H) + 4z^3 v_1 \tanh(2K + \beta H) + 6z^2 v_1^2 \tanh(\beta H) \\
& + 4v_1^3 z \tanh(-2K + \beta H) + v_1^4 \tanh(-4K + \beta H) \} \\
& + \frac{1}{y_1^3} \{ v_2^4 \tanh(4K + \beta H) + 4v_2^3 w \tanh(2K + \beta H) + 6v_2^2 w^2 \tanh(\beta H) \\
& + 4v_2 w^3 \tanh(-2K + \beta H) + w^4 \tanh(-4K + \beta H) \}. \tag{3.28}
\end{aligned}$$

Agora, escrevemos a equação diferencial, equação (3.21), para magnetização m_1 na seguinte forma:

$$\begin{aligned}
\tau \frac{d}{dt} m_1 = -m_1 & + \frac{1}{x_1^3} \{ z^4 \tanh(4K + \beta H) + 4z^3 v_1 \tanh(2K + \beta H) + 6z^2 v_1^2 \tanh(\beta H) \\
& + 4v_1^3 z \tanh(-2K + \beta H) + v_1^4 \tanh(-4K + \beta H) \} \\
& + \frac{1}{y_1^3} \{ v_2^4 \tanh(4K + \beta H) + 4v_2^3 w \tanh(2K + \beta H) + 6v_2^2 w^2 \tanh(\beta H) \\
& + 4v_2 w^3 \tanh(-2K + \beta H) + w^4 \tanh(-4K + \beta H) \}. \tag{3.29}
\end{aligned}$$

A determinação da equação que envolve a magnetização m_2 é obtida de forma similar. Neste caso temos o spin σ_2 da subrede 2 cercado pelos spins vizinhos mais próximos da subrede 1, $\sigma_1^{(i)}$. A probabilidade de transição é semelhante àquela dada pela equação (3.23), e a equação diferencial é,

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_2 \rangle = -2 \langle \sigma_2 w(\sigma_2) \rangle. \tag{3.30}$$

Lembrando que $\langle \sigma_2 \rangle = m_2$ tem-se:

$$\tau \frac{d}{dt} m_2 = -m_2 + \langle \tanh [K(\sigma_1^{(1)} + \sigma_1^{(2)} + \sigma_1^{(3)} + \sigma_1^{(4)}) + \beta H] \rangle. \tag{3.31}$$

Utilizando o mesmo procedimento já apresentado no calculo de $\langle X \rangle$ temos:

$$\langle Y \rangle = \sum_C \tanh [K(\sigma_1^{(1)} + \sigma_1^{(3)} + \sigma_1^{(3)} + \sigma_1^{(4)}) + \beta H] \times P_C, \tag{3.32}$$

onde substituímos X por Y para indicar o tratamento da subrede 2. C e P_C como no caso anterior, representam o grupo de spins e sua respectiva probabilidade. Pelo método de aproximação de pares,

$$P_C = P_2(\sigma_2) \prod_{i=1}^z \frac{P_{12}(\sigma_1^{(i)}, \sigma_2)}{P_2(\sigma_2)}. \quad (3.33)$$

Depois das considerações acima, e abrindo o produtório na equação do valor médio $\langle Y \rangle$, chegamos ao seguinte resultado:

$$\begin{aligned} \langle Y \rangle = & \sum_C \tanh [K(\sigma_1^{(1)} + \sigma_1^{(2)} + \sigma_1^{(3)} + \sigma_1^{(4)}) + \beta H] \\ & \times \frac{P_{12}(\sigma_1^{(1)}, \sigma_2) P_{12}(\sigma_1^{(2)}, \sigma_2) P_{12}(\sigma_1^{(3)}, \sigma_2) P_{12}(\sigma_1^{(4)}, \sigma_2)}{P_2^3(\sigma_2)}. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Somando temos:

$$\begin{aligned} \langle Y \rangle = & \sum_{\sigma_1^{(i)}} \tanh [K(\sigma_1^{(1)} + \sigma_1^{(2)} + \sigma_1^{(3)} + \sigma_1^{(4)}) + \beta H] \\ & \times \frac{P_{12}(\sigma_1^{(1)}, +) P_{12}(\sigma_1^{(2)}, +) P_{12}(\sigma_1^{(3)}, +) P_{12}(\sigma_1^{(4)}, +)}{P_2^3(+)} \\ & + \sum_{\sigma_1^{(i)}} \tanh [K(\sigma_1^{(1)} + \sigma_1^{(2)} + \sigma_1^{(3)} + \sigma_1^{(4)}) + \beta H] \\ & \times \frac{P_{12}(\sigma_1^{(1)}, -) P_{12}(\sigma_1^{(2)}, -) P_{12}(\sigma_1^{(3)}, -) P_{12}(\sigma_1^{(4)}, -)}{P_2^3(-)}. \end{aligned} \quad (3.35)$$

Adotando o mesmo procedimento utilizado para obter (3.30) tem-se:

$$\begin{aligned} \langle Y \rangle = & \frac{1}{x_2^3} \{z^4 \tanh(4K + \beta H) + 4z^3 v_2 \tanh(2K + \beta H) + 6z^2 v_2^2 \tanh(\beta H) \\ & + 4z v_2^3 \tanh(-2K + \beta H) + v_2^4 \tanh(-4K + \beta H)\} + \frac{1}{y_2^3} \{v_1^4 \tanh(4K + \beta H) \\ & + 4v_1^3 w \tanh(2K + \beta H) + 6v_1^2 w^2 \tanh(\beta H) + 4v_1 w^3 \tanh(-2K + \beta H) \\ & + w^4 \tanh(-4K + \beta H)\}, \end{aligned} \quad (3.36)$$

onde realizamos a soma sobre todas as configurações possíveis de $\sigma_1^{(l)}$.

A evolução temporal de $m_2 = \langle \sigma_2 \rangle$ é então:

$$\begin{aligned} \tau \frac{d}{dt} m_2 = & -m_2 + \frac{1}{x_2^3} \{ z^4 \tanh(4K + \beta H) + 4z^3 v_2 \tanh(2K + \beta H) + 6z^2 v_2^3 \tanh(\beta H) \\ & + 4z v_2^3 \tanh(-2K + \beta H) + v_2^4 \tanh(-4K + \beta H) \} + \frac{1}{y_2^3} \{ v_1^4 \tanh(4K + \beta H) \\ & + 4v_1^3 w \tanh(2K + \beta H) + 6v_1^2 w^2 \tanh(\beta H) + 4v_1 w^3 \tanh(-2K + \beta H) \\ & + w^4 \tanh(-4K + \beta H) \}. \end{aligned} \quad (3.37)$$

Consideramos a seguir a função de correlação entre dois spins vizinhos mais próximos, $\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle$, que denotaremos por r . O aglomerado a ser considerado envolve agora um número maior de spins como mostrado na *figura 3.4*. Portanto, de acordo com a equação (3.18), podemos escrever que:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle = & -2 \langle \sigma_1 \sigma_2 \omega(\sigma_1) + \sigma_1 \sigma_2 \omega(\sigma_2) \rangle \\ = & -2 \left\langle \sigma_1 \sigma_2 \left[\frac{1}{2\tau} \left(1 - \sigma_1 \tanh \left(K \sum_{l=1}^z \sigma_2^{(l)} + \beta H \right) \right) \right] \right\rangle \\ & -2 \left\langle \sigma_1 \sigma_2 \left[\frac{1}{2\tau} \left(1 - \sigma_2 \tanh \left(K \sum_{l=1}^z \sigma_1^{(l)} + \beta H \right) \right) \right] \right\rangle. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Precisamos essencialmente avaliar os valores médios das tangentes hiperbólicas que aparecem na equação (3.38). Esses valores médios para o primeiro e segundo termos da equação (3.38) são dados respectivamente, por:

$$\langle Z_{1,2} \rangle = \sum_C \sigma_{2,1} \tanh \left[K \left(\sigma_{2,1}^{(1)} + \sigma_{2,1}^{(2)} + \sigma_{2,1}^{(3)} + \sigma_{2,1}^{(4)} \right) + \beta H \right] \times P_C, \quad (3.39)$$

onde identificamos C e P_C como sendo o grupo de spins considerado na *figura 3.4* e sua probabilidade, respectivamente. A probabilidade P_C , pelo método de aproximação de pares,

tem a seguinte forma:

$$P_C = P_{12}(\sigma_1, \sigma_2) \prod_{l=1}^3 \frac{P_{12}(\sigma_1, \sigma_2^{(l)})}{P_1(\sigma_1)} \prod_{l=1}^3 \frac{P_{12}(\sigma_1^{(l)}, \sigma_2)}{P_2(\sigma_2)}. \quad (3.40)$$

Colocando-se essa expressão na equação (3.39), é fácil verificar que a função dentro da soma não depende explicitamente de todos os spins do aglomerado da *figura 3.4*. Assim, por exemplo, no cálculo de Z_1 , podemos somar sobre $\sigma_1^{(1)}$, $\sigma_1^{(2)}$ e $\sigma_1^{(3)}$. Isto equivale a escrever uma distribuição de probabilidade reduzida, ou seja,

$$P_{C'} = \sum_{\sigma_1^{(1)}, \sigma_1^{(2)}, \sigma_1^{(3)}} P_C = P_1(\sigma_1) \prod_{l=1}^4 \frac{P_{12}(\sigma_1, \sigma_2^{(l)})}{P_1(\sigma_1)}, \quad (3.41)$$

onde C' é o aglomerado da *figura 3.4*, retirando-se os spins $\sigma_1^{(1)}$, $\sigma_1^{(2)}$ e $\sigma_1^{(3)}$.

Utilizando estas relações podemos obter a evolução temporal para a correlação como segue. Escrevendo que:

$$\langle Z_1 \rangle = \sum_{C'} \sigma_2 \tanh [K (\sigma_2^{(1)} + \sigma_2^{(2)} + \sigma_2^{(3)} + \sigma_2^{(4)}) + \beta H] \times P_{C'}. \quad (3.42)$$

e explicitando $P_{C'}$,

$$\begin{aligned} \langle Z_1 \rangle &= \sum_{C'} \sigma_2 \tanh [K (\sigma_2^{(1)} + \sigma_2^{(2)} + \sigma_2^{(3)} + \sigma_2^{(4)}) + \beta H] \\ &\times P_1(\sigma_1) \prod_{l=1}^4 \frac{P_{12}(\sigma_1, \sigma_2^{(l)})}{P_1(\sigma_1)}. \end{aligned} \quad (3.43)$$

Seguindo o mesmo procedimento utilizado na obtenção da equação (3.43)

devemos encontrar $\langle Z_2 \rangle$. A expressão é a seguinte:

$$\begin{aligned} \langle Z_2 \rangle &= \sum_{C'} \sigma_1 \tanh [K (\sigma_1^{(1)} + \sigma_1^{(2)} + \sigma_1^{(3)} + \sigma_1^{(4)}) + \beta H] \\ &\times P_2(\sigma_2) \prod_{l=1}^4 \frac{P_{12}(\sigma_1^{(l)}, \sigma_2)}{P_2(\sigma_2)}. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Após algum trabalho algébrico obtemos a expressão final:

$$\begin{aligned}
\tau \frac{d}{dt} \langle R \rangle = & - \langle R \rangle + \left(\frac{z^4}{x_1^3} + \frac{v_2^4}{y_1^3} + \frac{z^4}{x_2^3} + \frac{v_1^4}{y_2^3} \right) \tanh(4K + \beta H) \\
& + 2 \left(\frac{z^3 v_1}{x_1^3} + \frac{v_2^3 w}{y_1^3} + \frac{z^3 v_2}{x_2^3} + \frac{v_1^3 w}{y_2^3} \right) \tanh(2K + \beta H) \\
& - 2 \left(\frac{v_1^3 x}{x_1^3} + \frac{v_2 w^3}{y_1^3} + \frac{v_2^3 z}{x_2^3} + \frac{w^3 v_1}{y_2^3} \right) \tanh(-2K + \beta H) \\
& - \left(\frac{v_1^4}{x_1^3} + \frac{w^4}{y_1^3} + \frac{v_2^4}{x_2^3} + \frac{w^4}{y_2^3} \right) \tanh(-4K + \beta H). \tag{3.45}
\end{aligned}$$

A solução das equações (3.29), (3.37) e (3.45) fornece a dinâmica para o sistema considerado na aproximação de pares. No próximo capítulo, abordaremos as técnicas numéricas e os procedimentos para gerar soluções para esse sistema de equações.

CAPÍTULO 4

Procedimento Numérico e Resultados

4.1 Introdução

O sistema de equações não lineares que apresentamos no *capítulo 3* não permite uma solução analítica. Diante deste fato, necessitamos de ferramentas que possibilitem a obtenção de soluções para as equações diferenciais não lineares acopladas. Essas ferramentas são as técnicas numéricas.

Neste capítulo apresentaremos com brevidade os métodos numéricos utilizados na resolução do problema. A seguir mostraremos graficamente as soluções do sistema de equações para diversos pontos no espaço dos parâmetros. Desenvolveremos discussões a respeito desses resultados e os compararemos com aqueles já conhecidos a fim de verificar a consistência dos resultados.

As equações que manipulamos (equações 3.29, 3.37 e 3.45) devem representar um sistema antiferromagnético, assim, o parâmetro de troca J que nelas comparece assume um valor negativo.

4.2 Métodos Numéricos

Os métodos que melhor se ajustam para solucionar o sistema de equações obtidas no *capítulo 3*, são o Método para Sistemas de Equações Não Lineares de Newton-Raphson [9] e o Método Runge-Kutta de Quarta Ordem conhecido como RK4 [9] e [10].

O método de Newton-Raphson [9] se adapta muito bem na resolução do sistema de equações em duas situações distintas, isto é, quando o campo magnético $H(t) = 0$ e quando $H(t)$ é constante. É, portanto, utilizável quando a Hamiltoniana for independente do tempo, caso em que recai nosso problema quando assumimos campo externo estático. Nessas duas situações o método fornece com boa precisão a temperatura crítica a campo nulo, bem como o digrama de fases no espaço campo versus temperatura. Entretanto, quando o campo é oscilante, $H(t) = H_0 \cos(\omega t)$, a convergência dos resultados é conseguida mais eficientemente através da aplicação do método de Runge-Kutta [10].

As equações, que devem ser resolvidas numericamente, obedecem à forma:

$$\begin{aligned}\tau \frac{dm_1}{dt} &= -m_1 + F_1(m_1, m_2, r), \\ \tau \frac{dm_2}{dt} &= -m_2 + F_2(m_1, m_2, r), \\ \tau \frac{dr}{dt} &= -r + F_3(m_1, m_2, r),\end{aligned}\tag{4.1}$$

onde as funções F_i são obtidas das equações (3.29), (3.37) e (3.45).

Sempre que aplicamos o método Newton-Raphson assumimos que $\frac{dm_i}{dt} = 0$. O sistema de equações transforma-se então num sistema de equações algébricas homogêneas não lineares. A estimativa de erro é feita fornecendo-se parâmetros de comparação externos, e então verificamos o erro nas variáveis e nas funções, por comparação com o valor pré-determinado. A convergência do método é rápida, permitindo que obtenhamos erros pequenos com pouco tempo de trabalho numérico. Este programa se mostra eficiente na obtenção das soluções no caso de campo magnético estático. Entretanto, quando o campo magnético externo é oscilante a utilização do método de Newton-Raphson não é adequada.

Quando $H = 0$ ou H é constante procedemos simplesmente assumindo $\frac{dm_i}{dt}$ e $\frac{dr}{dt}$ iguais a zero nas equações (4.1). Quando $H(t) = H_0 \cos(\omega t)$ o estado estacionário é obtido deixando-se que o sistema evolua no tempo até que a variação de m_i ($i = 1$ ou 2) e r entre dois instantes de tempo sucessivos (período) seja zero. Isto introduz uma ambigüidade na expressão para a derivada temporal de m_i e r quando se utiliza o método de Newton-Raphson. Ao mesmo tempo em que tomar $\frac{dm_i}{dt}$ e $\frac{dr}{dt}$ iguais a zero significa desprezar, desde o instante inicial, a dependência de m_i e r com o tempo. Todas estas questões são mais facilmente tratadas quando utilizamos o método de Runge-Kutta, que presupõe uma discretização das equações diferenciais baseada no método de diferenças finitas. Portanto, as equações (3.29), (3.37) e (3.45) são escritas na forma geral assumindo-se explicitamente a dependência temporal de m_i e r :

$$\Omega \frac{dm_1}{d\xi} = -m_1 + F_1(m_1, m_2, r, \xi),$$

$$\begin{aligned}\Omega \frac{dm_2}{d\xi} &= -m_2 + F_2(m_1, m_2, r, \xi), \\ \Omega \frac{dr}{d\xi} &= -r + F_3(m_1, m_2, r, \xi).\end{aligned}\tag{4.2}$$

Nessas equações definimos que $\xi = \omega t$. Por sua vez a razão entre a frequência de oscilação do campo magnético externo, ν , e a taxa de inversão dos spins devido ao banho térmico, τ^{-1} , é definida como $\frac{\Omega}{2\pi}$. A frequência angular ω está relacionada com a frequência linear ν pela equação $\omega = 2\pi\nu$. Então chamamos $\Omega = \tau\omega = \tau 2\pi\nu$, e tomando $f = \frac{1}{\tau}$, vemos que $\frac{\Omega}{2\pi}$ é a razão entre a frequência de oscilação do campo magnético externo e a frequência de inversão dos spins, f .

O processo de solução das equações (4.2) resume-se em realizar comparações dos resultados m_i para dois tempos sucessivos, $m_i(\xi + \Delta\xi)$ e $m_i(\xi)$, à partir de uma condição inicial $m_i(0)$. Temos portanto que:

$$m_i(\xi + \Delta\xi) = m_i(\xi) + \frac{1}{\Omega} [-m_i(\xi) + F_i(m_1, m_2, r, \xi)] \Delta\xi.\tag{4.3}$$

O erro [10] estimado pelo método de Runge-Kutta de quarta ordem é determinado pela expressão: $E_r = \frac{h^{k+1}}{5!} m_i^{k+1}(\xi)$. Aqui h representa o passo utilizado no cálculo das variáveis e k o grau do último termo da expansão em série de Taylor utilizada pelo método. Utilizamos h igual a $\frac{2\pi}{1000}$, o que garante um erro muito pequeno. Mais detalhes a respeito do procedimento numérico associado a esse método pode ser encontrado nas referências [9] e [10]. O estado estacionário é obtido quando as funções $m_i(\xi)$ e $r(\xi)$ se repetem após um período de oscilação do campo externo. Em geral, a convergência para o estado estacionário foi obtida após 1000 iterações.

4.3 Resultados Obtidos

O procedimento computacional possibilitou a obtenção de uma série de resultados que apresentaremos nesta seção. Para verificar a consistência dos resultados, que serão mostrados a seguir, efetuamos uma comparação com resultados de outros trabalhos. Por exemplo, se colocarmos em nossas equações $m_1 = m_2$ e $J \rightarrow -J$, recaímos no caso ferromagnético, estudado em detalhe por *Tomé e de Oliveira* [1]. As diversas curvas de magnetização que aparecem nesse trabalho foram reproduzidas por nós utilizando a técnica numérica descrita acima.

4.3.1 Antiferromagneto a Campo Nulo

O primeiro caso a ser tratado é aquele em que o sistema está em contato somente com um banho térmico. O sistema está isolado com relação a qualquer outra interação.

Resolvendo o sistema de equações determinamos a temperatura crítica, T_N , desse modelo antiferromagnético em duas dimensões. Na *figura 4.1* mostramos o comportamento da magnetização de cada uma das subredes, m_1 e m_2 , quando a temperatura varia. Verificamos que à medida que nos aproximamos da temperatura crítica, $T_N = 2.885$, em unidades de $\frac{J}{k_B}$, tanto m_1 como m_2 tendem a zero. Em função da temperatura o sistema evolui de uma fase ordenada, antiferromagnética, abaixo de T_N , a uma fase desordenada,

paramagnética, acima de T_N . Em $T = 0$ o sistema apresenta-se permanentemente ordenado.

Para verificar o comportamento do parâmetro de ordem em função da temperatura necessitamos definir esse parâmetro. A forma mais comum de definição do parâmetro de ordem associado à magnetização, $M = \frac{1}{2}(m_1 + m_2)$, não é adequada a sistemas antiferromagnéticos, pois M assume valores nulos tanto abaixo quanto acima da temperatura crítica, T_N . Para evitar ambigüidades, utilizamos como parâmetro de ordem a magnetização alternante, $M_s = \frac{1}{2}(m_1 - m_2)$, que apresenta valores positivos abaixo da temperatura crítica.

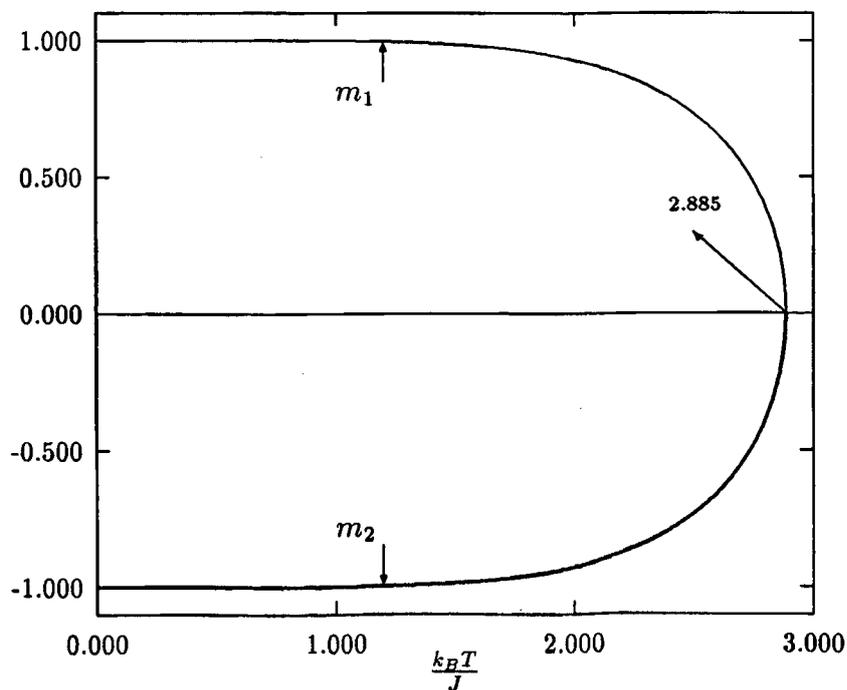


Figura - 4.1 Comportamento da magnetização das subredes, m_1 e m_2 , a campo nulo, em função da temperatura.

A figura 4.2 representa o comportamento do parâmetro de ordem M_s ,

para o sistema estudado. Podemos ver que abaixo da temperatura crítica T_N , o sistema apresenta uma fase ordenada antiferromagnética e, acima de T_N , obtemos uma fase desordenada, paramagnética.

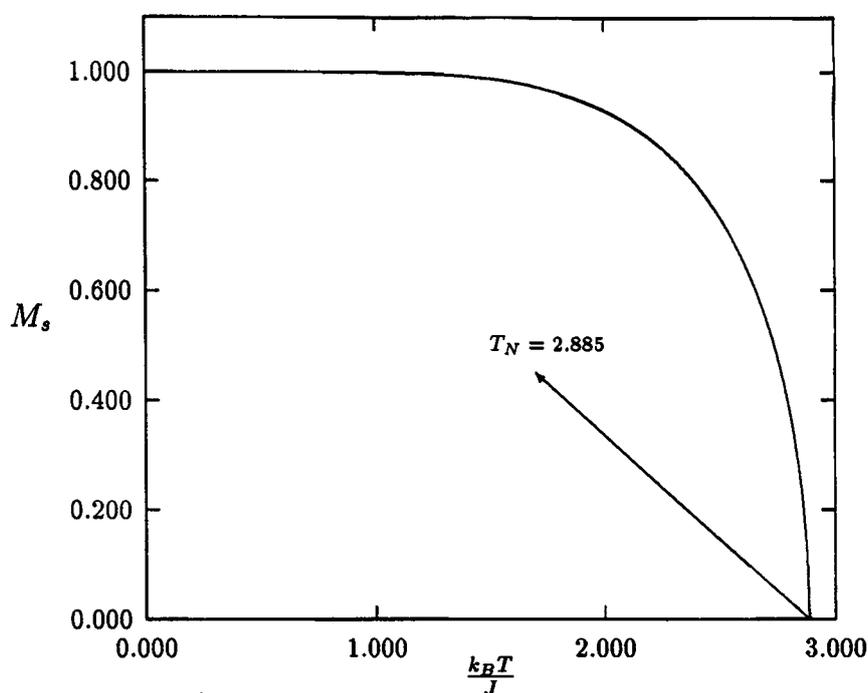


Figura - 4.2 Gráfico do parâmetro de ordem, M_s , para um modelo de Ising antiferromagnético em função da temperatura, a campo nulo.

A *figura 4.2* é útil ao mostrar estar correta a solução numérica obtida pelo método descrito anteriormente. Observe que podemos comparar a temperatura de Néel apresentada na figura, com o resultado equivalente obtido para um modelo ferromagnético na aproximação de pares [8]. Neste caso, a temperatura crítica é dada pela equação $\tanh(\beta_C) = \frac{1}{q-1}$, onde q representa o número de coordenação (igual a 4, neste caso) e $\beta_C = \frac{1}{k_B T_c}$. Assim, para um modelo ferromagnético, com correlação entre primeiros vizinhos, temos que $T_c = 2.885$ que é o mesmo resultado obtido numericamente em nosso sistema antiferromagnético

para a temperatura de Néel.

4.3.2 Antiferromagneto em Campo Constante

Ao considerarmos os efeitos da temperatura e de um campo magnético externo constante, H_0 , sobre o sistema, verificamos que a linha de campo crítico assume a forma que mostramos na *figura 4.3*, onde são representados os valores do campo magnético crítico, H_c , para cada temperatura. Abaixo da linha de transição o sistema está na fase

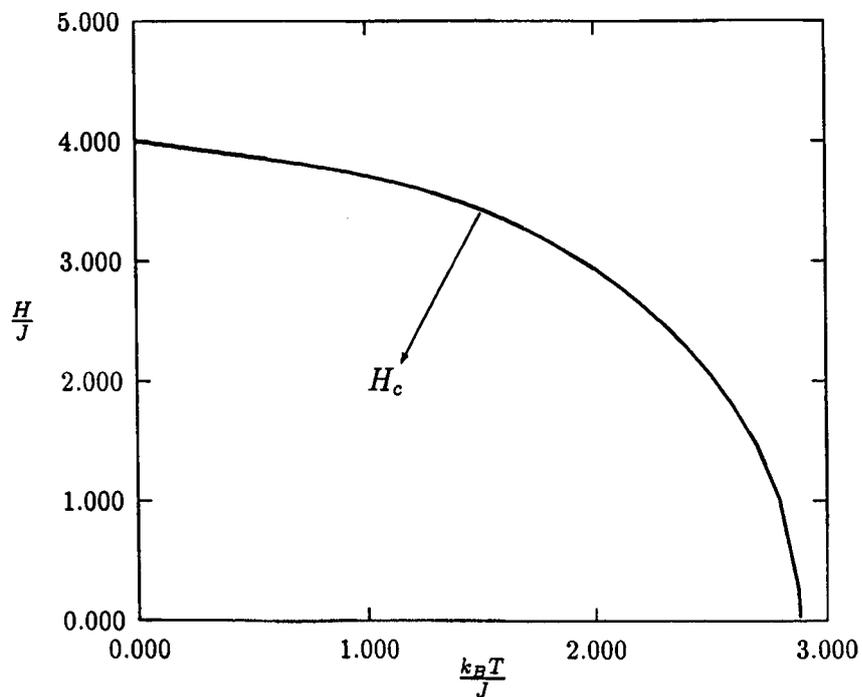


Figura - 4.3 Diagrama de fases de um antiferromagneto de Ising na aproximação de pares.

antiferromagnética e acima na fase paramagnética. A transição se dá de maneira contínua, isto é, o parâmetro de ordem M_s decresce continuamente até atingir a linha de campo crítico,

quando M_s assume o valor nulo.

A transição entre as fases antiferromagnética e paramagnética é contínua.

A linha que obtemos é análoga à obtida por *Bienenstock* [12], para um modelo de Ising em 3 dimensões, através de expansões em séries de altas temperaturas. Esse mesmo diagrama também foi obtido na aproximação do grupo de renormalização de campo médio [13] e, para blocos envolvendo um e dois spins, os resultados são idênticos aos obtidos neste trabalho.

4.3.3 Antiferromagneto em um Campo $H(t) = H_0 \cos(\omega t)$

Neste caso as soluções são dependentes do tempo. Estamos interessados apenas nos resultados que correspondem às soluções estacionárias do sistema para diversos valores dos parâmetros envolvidos. Para garantir esta situação adotamos o seguinte procedimento: deixamos o sistema evoluir durante um intervalo de tempo longo, tal que, após este intervalo, as soluções obtidas em um período de oscilação do campo magnético não difira apreciavelmente das soluções determinadas no período imediatamente anterior e/ou posterior ao período considerado.

As soluções apresentadas dependem dos parâmetros: $\frac{\Omega}{2\pi}$ e ξ . O primeiro é definido como a razão entre a frequência de oscilação do campo magnético externo e a frequência de inversão dos spins, devido ao banho térmico. O segundo está associado às medidas de tempo, uma vez que é definido como $\xi = \omega t$ sendo ω a frequência angular do campo magnético externo.

Para mostrar o comportamento do parâmetro de ordem M_s , para diversos valores da amplitude do campo magnético $\frac{H_0}{J}$, a uma temperatura fixa ($\frac{k_B T}{J} = 1.500$), apresentamos na *figura 4.4* diversas curvas de M_s , para valores de campo que variam desde

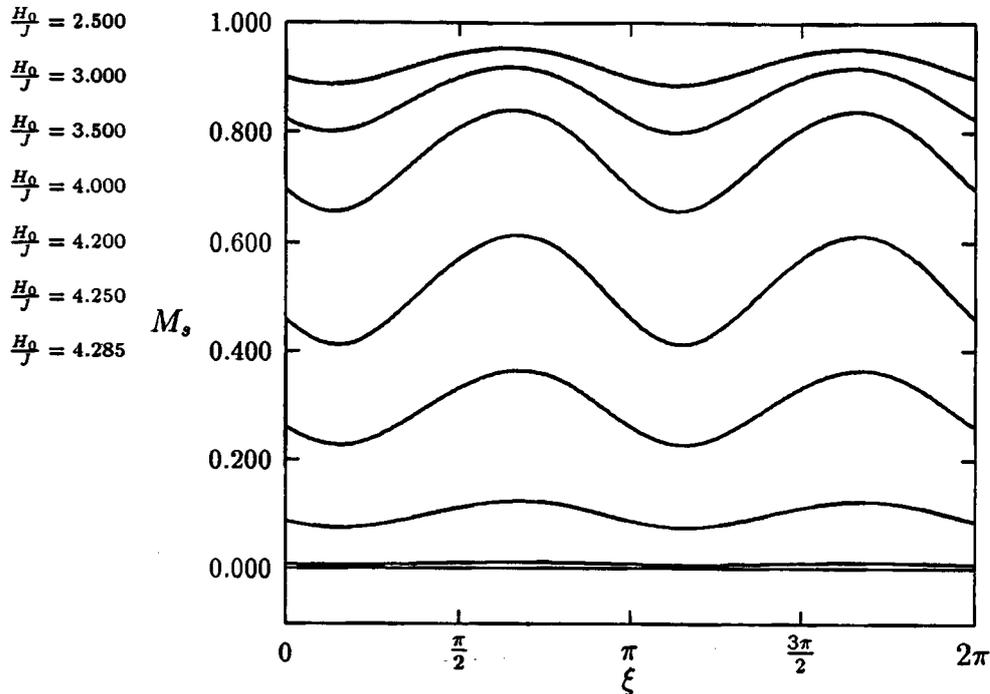


Figura - 4.4 Gráfico do parâmetro de ordem M_s em função de ξ para diversos valores da amplitude do campo magnético. Para cada curva são fixos $\frac{\Omega}{2\pi} = 0.100$ e $\frac{k_B T}{J} = 1.500$. A cada curva corresponde um $\frac{H_0}{J}$ mostrado na mesma ordem ao lado esquerdo da figura.

$\frac{H_0}{J} = 2.000$, até aproximadamente o valor que corresponde ao campo crítico estacionário para essa mesma temperatura. Observando as *figuras 4.4* e *4.5* verificamos que a transição de fases é contínua. A aproximação ao campo crítico se dá suavemente, o que é característico de uma transição de fases de segunda ordem. Não há nenhuma descontinuidade que possa indicar a possibilidade de uma transição de fases de primeira ordem. Observa-se também como varia a amplitude de oscilação de M_s , à medida que se aumenta $\frac{H_0}{J}$. Para valores pequenos de $\frac{H_0}{J}$ o campo afeta discretamente os valores assumidos por M_s durante um período. À

medida que $\frac{H_0}{J}$ aumenta, nota-se como aumenta a amplitude de oscilação de M_s , que depois tende a desaparecer à medida que o campo se aproxima de seu valor crítico.

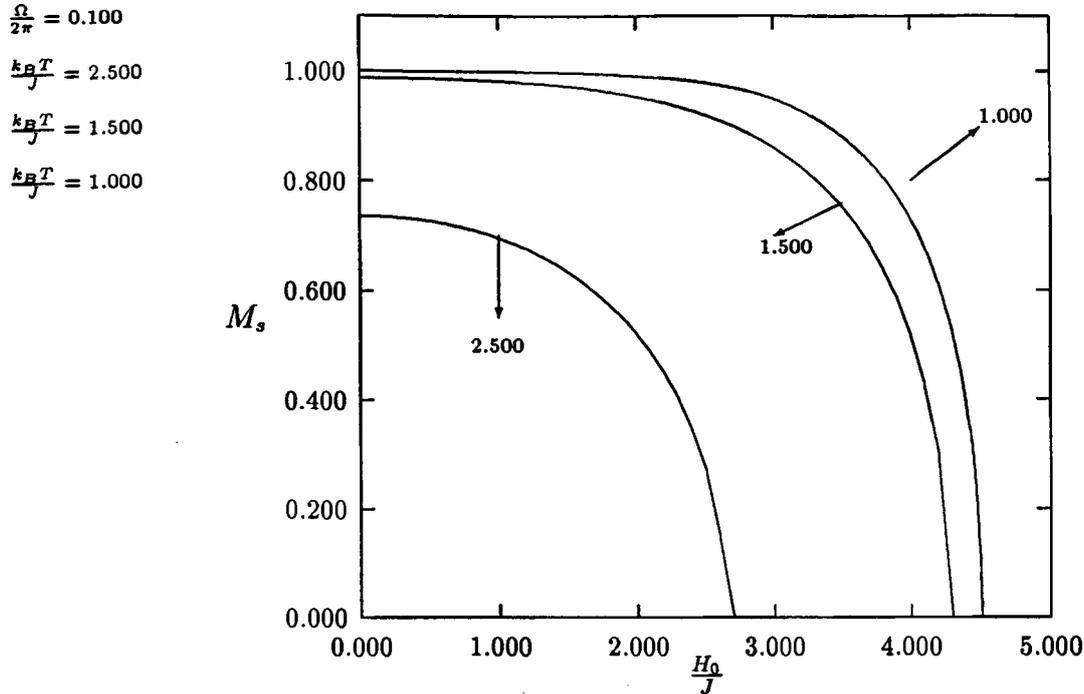


Figura - 4.5 Gráfico do parâmetro de ordem M_s , em função de $\frac{H_0}{J}$, para três temperaturas diferentes.

Efeitos das variações de $\frac{\Omega}{2\pi}$, $\frac{k_B T}{J}$ e $\frac{H_0}{J}$ sobre M , M_s e R .

O comportamento estacionário do parâmetro de ordem M_s , da magnetização M e da correlação R em função de ξ em diferentes temperaturas, $\frac{k_B T}{J}$, e diferentes razões de frequências, $\frac{\Omega}{2\pi}$ são mostrados nas figuras 4.6 a 4.9. Os gráficos são construídos fixando-se os valores de $\frac{\Omega}{2\pi}$, $\frac{k_B T}{J}$ e $\frac{H_0}{J}$ em cada um dos casos e observando-se o comportamento de M_s , M e R durante um ciclo, com o sistema já no estado estacionário.

Apresentamos gráficos onde a escala de temperatura varia desde 0.500

até 2.500, portanto, acima de zero e abaixo da temperatura de Néel. Nos primeiros gráficos, *figuras* 4.6 a 4.8, mantemos fixo o valor de $\frac{\Omega}{2\pi} = 0.100$, significando que a frequência de oscilação do campo externo é igual a um décimo da frequência de inversão dos spins nessas temperaturas. No gráfico que apresentamos na *figura* 4.9 o valor de $\frac{\Omega}{2\pi}$ é fixado em 0.500, o que significa que a frequência de inversão dos spins é o dobro da frequência de oscilação do campo magnético externo.

Para cada figura apresentamos dois gráficos que diferem na amplitude do campo externo aplicado. Em um dos gráficos a amplitude $\frac{H_0}{J}$ assume um valor menor que o campo crítico dinâmico para aquela temperatura; no outro assumimos $\frac{H_0}{J}$ como sendo igual ao valor do campo para o qual M_s vai a zero, ou seja, o campo crítico dinâmico.

Na *figura* 4.6 observamos o caráter oscilante dos parâmetros M , M_s e R , com a magnetização apresentando uma ligeira defasagem em relação ao campo magnético externo. Verifica-se também que o parâmetro de ordem M_s vai efetivamente a zero para o valor de campo igual a $\frac{H_0}{J} = 2.650$. Notamos que esse valor crítico de campo magnético é ligeiramente superior àquele obtido no caso estático. Ou seja, para a razão de frequências que estamos considerando, $\frac{\Omega}{2\pi} = 0.100$, o campo crítico dinâmico é maior que o campo crítico estático. Notamos ainda que o valor absoluto da média (integrada num período) da função de correlação entre spins vizinhos mais próximos diminui à medida que nos aproximamos do campo crítico dinâmico.

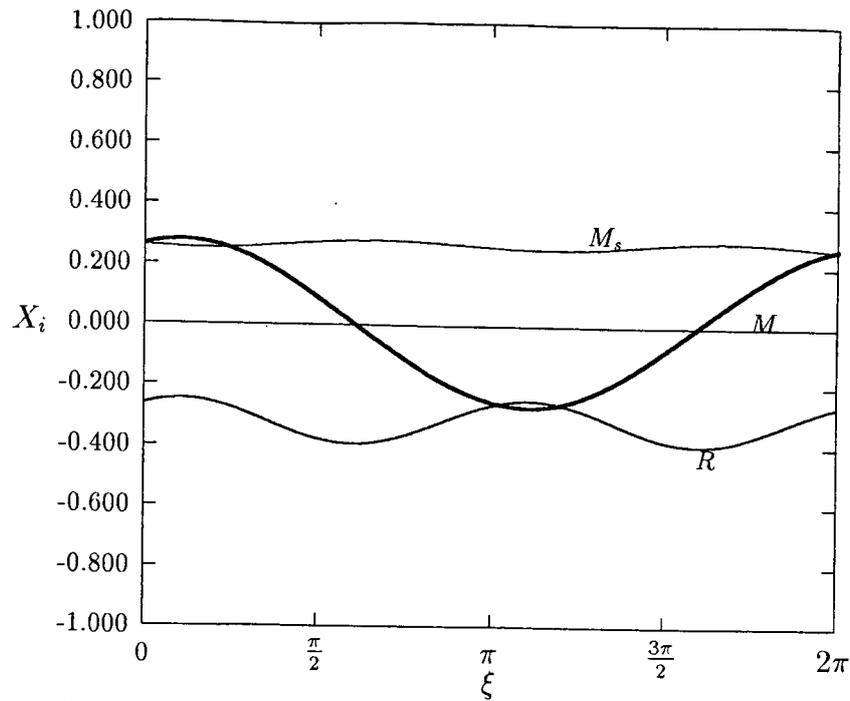
Na *figura* 4.7 notamos novamente o caráter oscilante dos parâmetros, com o mesmo atraso na fase da magnetização M , quando comparada à fase do campo externo.

$a_1)$

$$\frac{H_0}{J} = 2.500$$

$$\frac{\Omega}{2\pi} = 0.100$$

$$\frac{k_B T}{J} = 2.500$$



$a_2)$

$$\frac{H_0}{J} = 2.650$$

$$\frac{\Omega}{2\pi} = 0.100$$

$$\frac{k_B T}{J} = 2.500$$

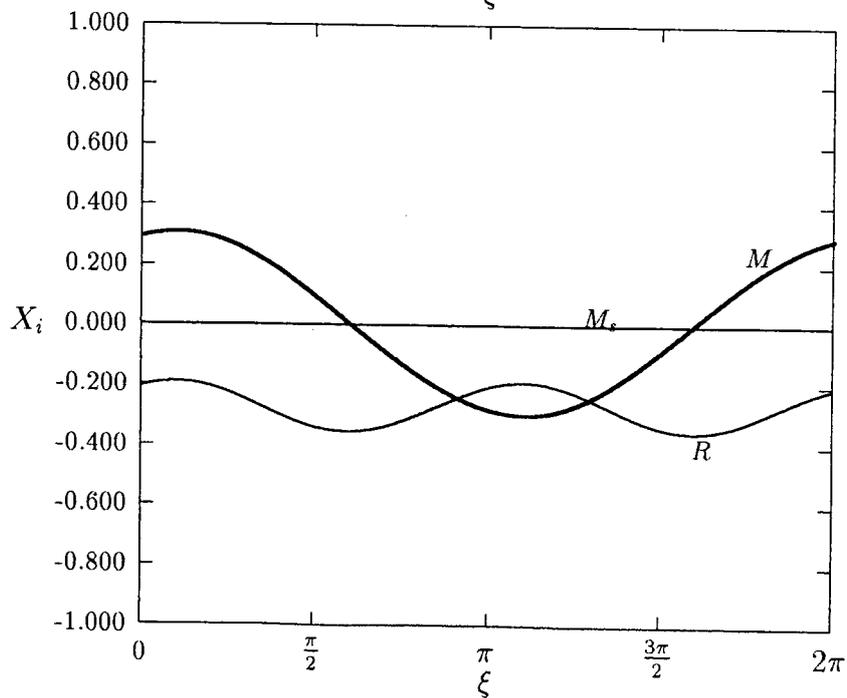


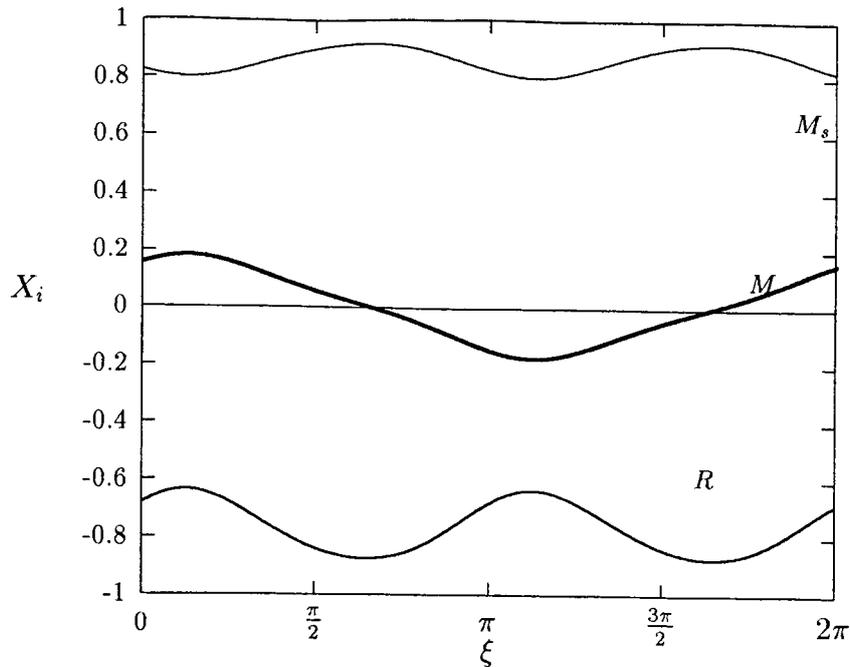
Figura - 4.6 Gráficos do parâmetro de ordem M_s , da magnetização M e da correlação R . Na figura $a_1)$ temos $\frac{H_0}{J} = 2.500$, distante do valor crítico, e em $a_2)$ se tem $\frac{H_0}{J} = 2.650$, igual ao valor crítico.

$b_1)$

$$\frac{H_0}{J} = 3.000$$

$$\frac{\Omega}{2\pi} = 0.100$$

$$\frac{k_B T}{J} = 1.500$$



$b_2)$

$$\frac{H_0}{J} = 4.295$$

$$\frac{\Omega}{2\pi} = 0.100$$

$$\frac{k_B T}{J} = 1.500$$

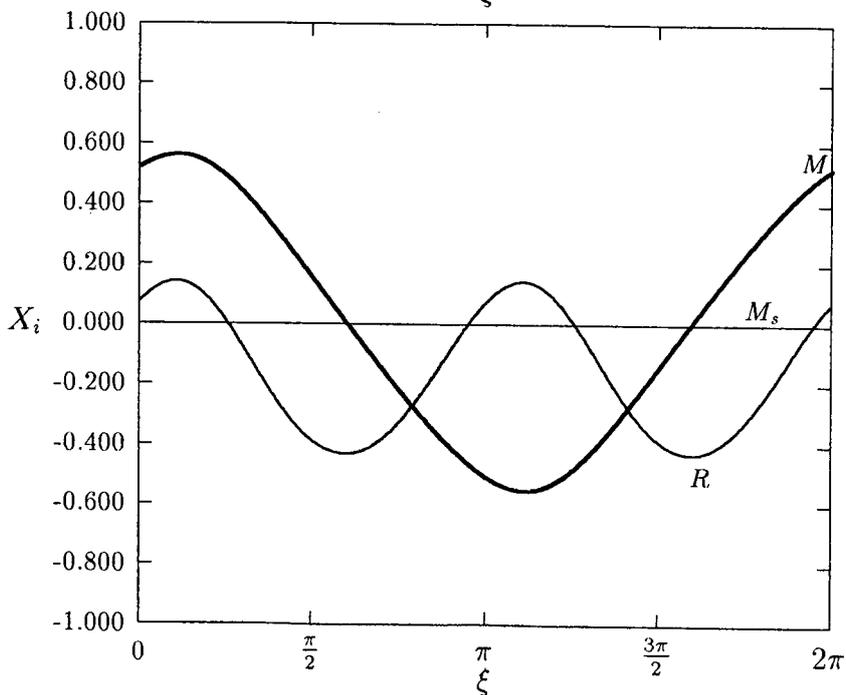


Figura - 4.7 Gráficos do parâmetro de ordem M_s , da magnetização M e da correlação R . Na figura $b_1)$ temos $\frac{H_0}{J} = 3.000$, distante do valor crítico, e em $b_2)$ se tem $\frac{H_0}{J} = 4.295$, que é o campo crítico dinâmico.

Ainda aqui o valor absoluto da média da função de correlação diminui quando nos aproximamos do campo crítico. Da mesma forma que para a temperatura anterior, *figura 4.6*, o campo crítico dinâmico é ligeiramente superior aquele do caso estático.

A *figura 4.8* apresenta as mesmas características que as *figuras 4.6* e *4.7*, apenas a temperatura sendo mais baixa que as anteriores, $\frac{k_B T}{J} = 0.500$. O comportamento oscilante e periódico das quantidades observadas são mantidos, embora se observe que as curvas não são tão suaves como nos casos precedentes. A razão dessas *irregularidades* provavelmente é devido a problemas numéricos que ocorrem em baixas temperaturas.

Nas páginas anteriores vimos como a amplitude do campo magnético afeta a forma das curvas da magnetização, do parâmetro de ordem e da correlação, para valores fixos de Ω e temperatura. A seguir apresentamos o comportamento dessa mesma função quando variamos Ω , mantendo fixos a temperatura e a amplitude do campo. Observamos que a variação do parâmetro Ω a uma temperatura fixa provoca variações na magnitude do campo crítico dinâmico. Podemos verificar essa afirmação pela comparação da *figura 4.6* onde $\frac{\Omega}{2\pi} = 0.100$ com a *figura 4.9* onde $\frac{\Omega}{2\pi} = 0.500$ sendo $\frac{k_B T}{J}$ fixo em 2.500. A amplitude do campo magnético crítico assume os valores de $\frac{H_0}{J} = 2.650$ e $\frac{H_0}{J} = 1.850$, respectivamente, para as frequências 0.100 e 0.500. Ou seja, o campo crítico dinâmico depende fortemente da frequência do campo externo aplicado ao sistema.

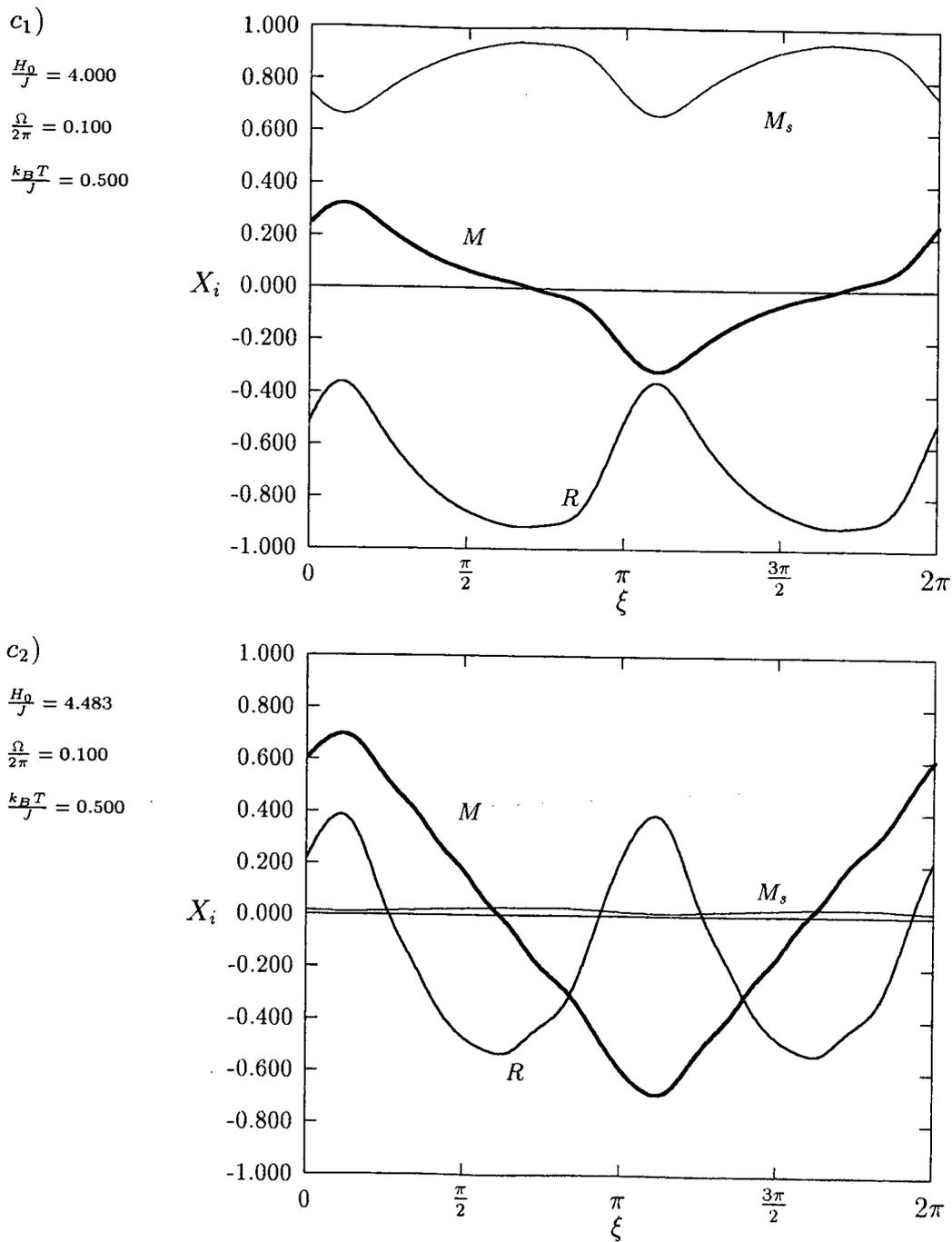


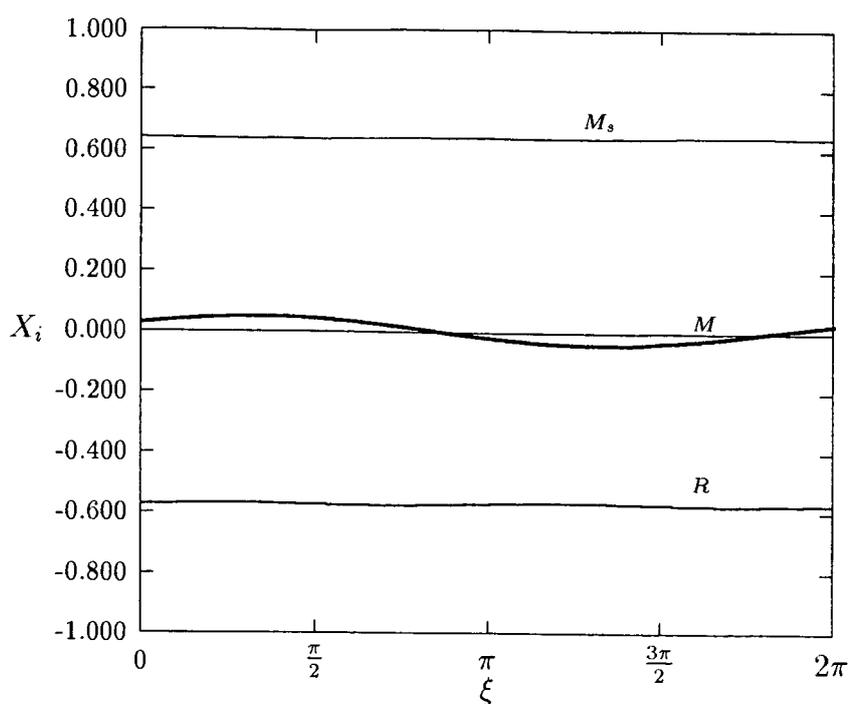
Figura - 4.8 Gráficos do parâmetro de ordem M_s , da magnetização M e da correlação R . Na figura $c_1)$ temos $\frac{H_0}{J} = 4.000$, distante do valor crítico, e em $c_2)$ se tem $\frac{H_0}{J} = 4.483$, próximo ao valor crítico.

$d_1)$

$$\frac{H_0}{J} = 1.000$$

$$\frac{\Omega}{2\pi} = 0.500$$

$$\frac{K_b T}{J} = 2.500$$



$d_2)$

$$\frac{H_0}{J} = 1.850$$

$$\frac{\Omega}{2\pi} = 0.500$$

$$\frac{K_b T}{J} = 2.500$$

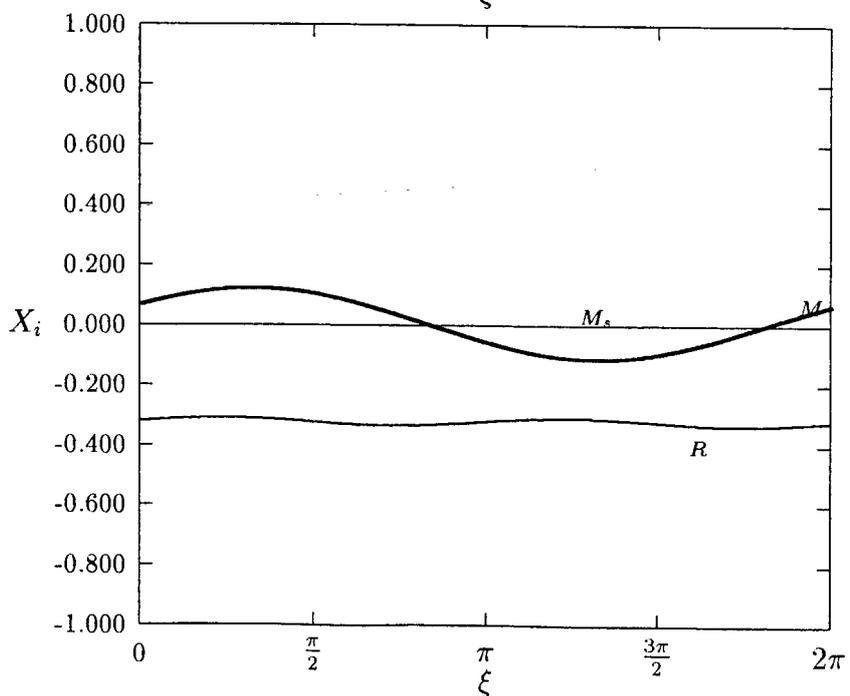


Figura - 4.9 Gráficos do parâmetro de ordem M_s , da magnetização M e da correlação R . Na figura $d_1)$ temos $\frac{H_0}{J} = 1.000$, distante do valor crítico, e em $d_2)$ se tem $\frac{H_0}{J} = 1.850$, próximo ao valor crítico.

Defasagem de M com Relação ao Campo Externo

Nas *figuras* 4.6 a 4.9 foram representados vários aspectos do comportamento do sistema antiferromagnético, tais como o caráter periódico e oscilante de M , M_s e R , próximo da transição de fases. As grandezas envolvidas foram a amplitude do campo magnético externo $\frac{H_0}{J}$, a temperatura $\frac{k_B T}{J}$, e a razão entre as frequências de oscilação do campo e de inversão de spins $\frac{\Omega}{2\pi}$. Vimos então que em todos os resultados apresentados a magnetização M do sistema apresenta-se defasada com relação ao campo magnético externo.

Que fatores determinam essa defasagem? Em princípio a defasagem deverá estar associada aos valores de $\frac{\Omega}{2\pi}$, $\frac{k_B T}{J}$ e/ou $\frac{H_0}{J}$. Para esclarecermos qual dessas quantidades desempenha papel predominante no atraso de M em relação ao campo, apresentamos as *figuras* 4.10 e 4.11.

Na *figura* 4.10 a magnetização M é obtida para $\frac{\Omega}{2\pi} = 0.100$ e $\frac{H_0}{J} = 3.000$, em três temperaturas diferentes. Verifica-se que, embora a variação da temperatura afete a amplitude da magnetização, ela não tem nenhuma influência sobre a defasagem mencionada. Na *figura* 4.11 a) os parâmetros fixos são a temperatura $\frac{k_B T}{J} = 1.500$ e a razão $\frac{\Omega}{2\pi} = 0.100$. Vê-se que uma discreta defasagem (em atraso) acompanha o aumento da intensidade de campo. Na *figura* 4.11 b) fixamos a temperatura $\frac{k_B T}{J} = 1.500$ e a amplitude de campo magnético externo $\frac{H_0}{J} = 3.000$, e tomamos três valores distintos de $\frac{\Omega}{2\pi}$. Neste caso verificamos uma defasagem significativa de M em relação ao campo magnético externo.

As *figuras* 4.10 e 4.11 mostram claramente que o fator mais marcante na dependência da fase da magnetização do sistema antiferromagnético é a razão de frequências

$\frac{\Omega}{2\pi}$. Se a frequência de oscilação do campo magnético é menor do que a frequência de inversão dos spins, a defasagem é menor do que quando esta razão se aproxima da unidade. A fase do sistema depende levemente das variações da amplitude do campo magnético externo. O aumento da amplitude diminui a defasagem levemente, enquanto que o aumento de $\frac{\Omega}{2\pi}$ aumenta essa defasagem.

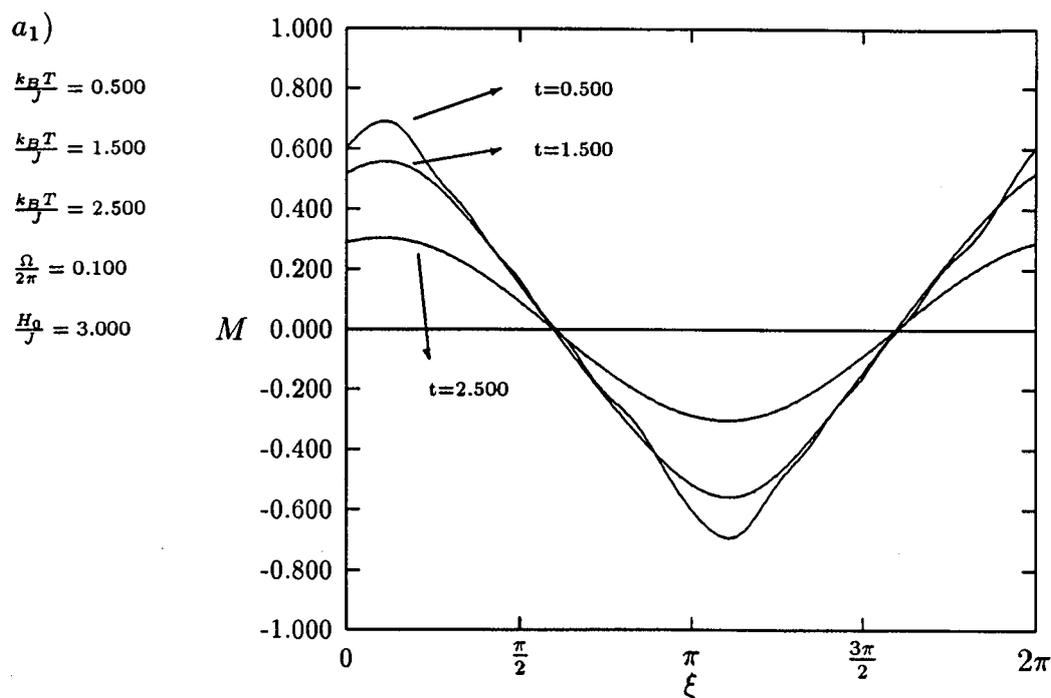


Figura - 4.10 Magnetização, M , para valores fixos de $\frac{\Omega}{2\pi}$ e $\frac{H_0}{J}$ em três temperaturas diferentes.

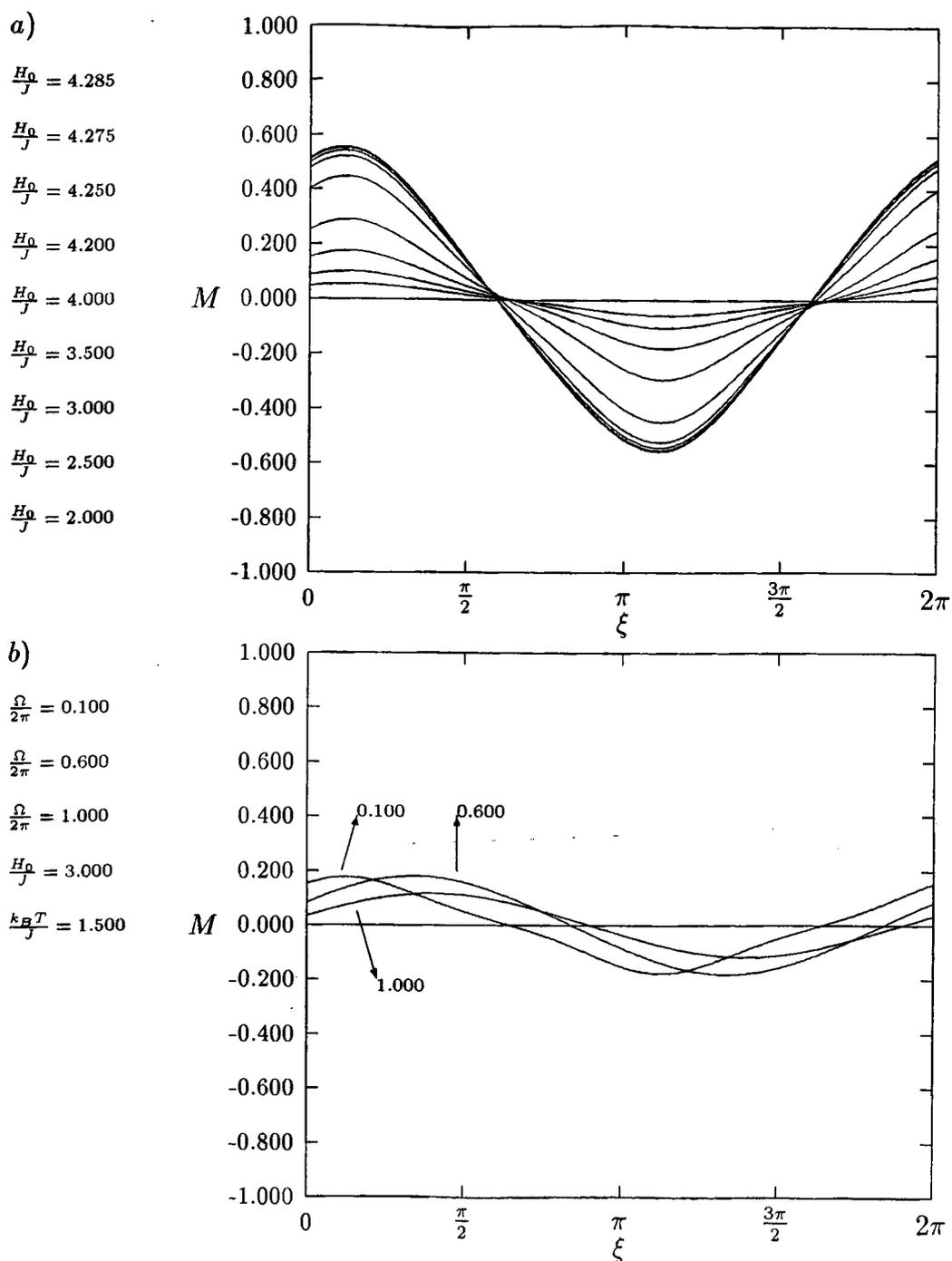


Figura - 4.11 A figura 4.11 a) representa a magnetização M para diversos valores de amplitude de campo magnético $\frac{H_0}{J}$, à temperatura $\frac{k_B T}{J} = 1.500$ e $\frac{\Omega}{2\pi} = 0.100$. A curva com maior amplitude corresponde ao maior valor de $\frac{H_0}{J}$. Na figura 4.13 b) fixamos $\frac{H_0}{J} = 3.000$ e $\frac{k_B T}{J} = 1.500$ e representamos a magnetização M para três valores de $\frac{\Omega}{2\pi}$, com os respectivos valores de $\frac{\Omega}{2\pi}$ indicados na figura.

Efeitos da Oscilação do Campo sobre o Parâmetro de Ordem

Se observarmos as *figuras* 4.6 a 4.9 que mostram como as curvas para M , M_s e R são afetadas por variações em $\frac{\Omega}{2\pi}$, $\frac{H_0}{J}$ e $\frac{k_B T}{J}$, notaremos que as curvas que representam a magnetização M apresentam período igual ao do campo magnético externo, embora se encontre atrasada com relação à fase do mesmo. É possível observar ainda que as curvas que representam o parâmetro de ordem M_s manifestam um período igual à metade daquele que é característico de M e, portanto, M_s tem período igual à metade do período de oscilação do campo magnético externo. Esse fato é perfeitamente natural uma vez que consideramos uma rede antiferromagnética de spins sob a ação de um campo oscilante. Assim, em cada ciclo (que compreende uma variação de 2π) temos um período de reforço em orientação de cada subrede. Para tornar mais claro este argumento, imaginemos que para uma determinada temperatura, amplitude e frequência do campo tenhamos duas magnetizações m_1 e m_2 correspondentes às magnetizações médias de cada subrede separadamente. Assumindo m_1 com o sentido *para cima* e m_2 com sentido *para baixo* podemos pensar que quando $\xi = 0 \rightarrow \frac{H_0}{J} \cos(\xi) = \frac{H_0}{J}$ teremos para m_2 o valor $(m_2 - \delta m)$, significando que o campo orientado na direção de m_1 subtrai de m_2 a quantidade δm . Desta maneira $M_s = \frac{1}{2}(m_1 - m_2)$ ficará $M_s = \frac{1}{2}(m_1 - m_2 + \delta m)$ ou ainda $M_s = \frac{1}{2}(|m_1| + |m_2| - |\delta m|)$. Quando $\xi = \frac{\pi}{2}$ teremos $M_s = \frac{1}{2}(|m_1| + |m_2|)$, quando $\xi = \pi$ teremos o valor $M_s = \frac{1}{2}(|m_1| + |m_2| - |\delta m|)$ pois nesse caso o campo estará reforçando a magnitude de m_2 . No intervalo angular que vai desde π até 2π o efeito do campo será equivalente aquele de 0 a π , de tal forma que M_s repetirá o mesmo tipo de oscilação. Portanto a frequência de variação de M_s é o dobro daquela do campo.

É instrutivo verificarmos como a oscilação do campo afeta o valor do parâmetro de ordem. Nas *figuras* 4.12 a 4.14 observamos essas variações para uma temperatura fixa e a diferentes valores de frequência. Nesses gráficos, chama a atenção a forma simétrica das curvas com relação ao eixo que passa por $\cos(\xi) = 0$. Isso evidencia que a magnetização (integrada num período) de cada subrede tende independentemente a zero com o aumento do módulo do campo externo. Sempre que alcançarmos o valor de campo crítico em cada caso o parâmetro de ordem vai a zero (veja linha horizontal mais baixa em cada figura).

Outro aspecto notável nessas figuras refere-se às variações nas amplitudes de oscilação do parâmetro de ordem. Fica evidente que a razão entre frequências $\frac{\Omega}{2\pi}$ influencia fortemente esta amplitude. Na *figura* 4.14 quando $\frac{\Omega}{2\pi} = 0.100$ (ou seja, a frequência do campo é dez vezes menor que a frequência de inversão dos spins) observamos uma variação maior na amplitude do que nas *figuras* 4.12 e 4.13 quando a razão entre essas frequências é maior. Isto indica que um aumento na taxa de transição dos spins (em relação ao campo) provoca uma variação maior no valor médio das magnetizações das subredes.

$$\begin{aligned} \frac{H_0}{J} &= 1.500 \\ \frac{H_0}{J} &= 2.000 \\ \frac{H_0}{J} &= 2.500 \\ \frac{H_0}{J} &= 2.800 \\ \frac{\Omega}{2\pi} &= 1.000 \\ \frac{k_B T}{J} &= 1.500 \end{aligned}$$

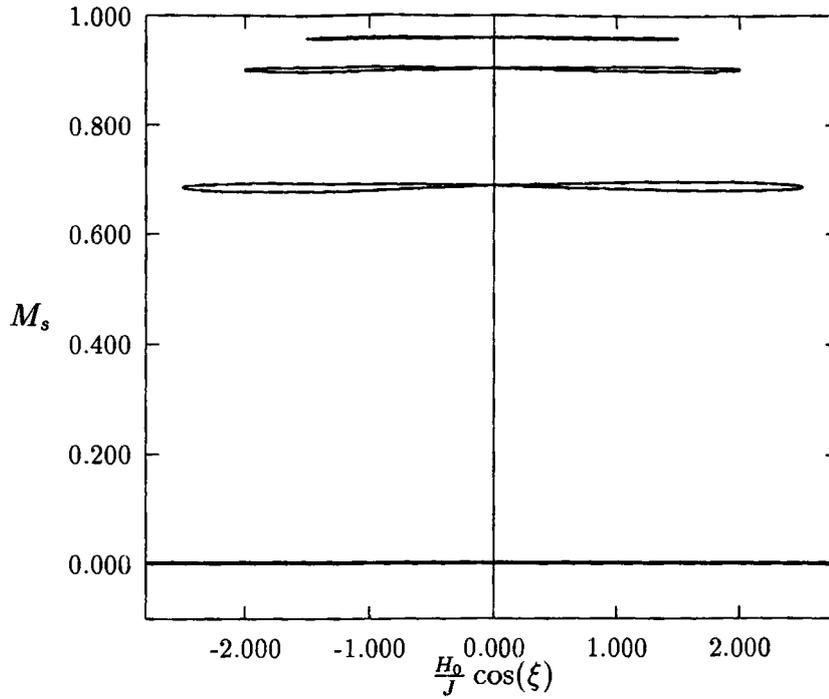


Figura - 4.12 Gráficos do parâmetro de ordem M_s em função de $\frac{H_0}{J} \cos(\xi)$ com os valores de amplitude do campo magnético, temperatura e frequência indicados ao lado da figura. Para a maior amplitude do campo observamos que $M_s = 0$.

$$\begin{aligned} \frac{H_0}{J} &= 2.500 \\ \frac{H_0}{J} &= 3.000 \\ \frac{H_0}{J} &= 3.025 \\ \frac{H_0}{J} &= 3.040 \\ \frac{\Omega}{2\pi} &= 0.500 \\ \frac{k_B T}{J} &= 1.500 \end{aligned}$$

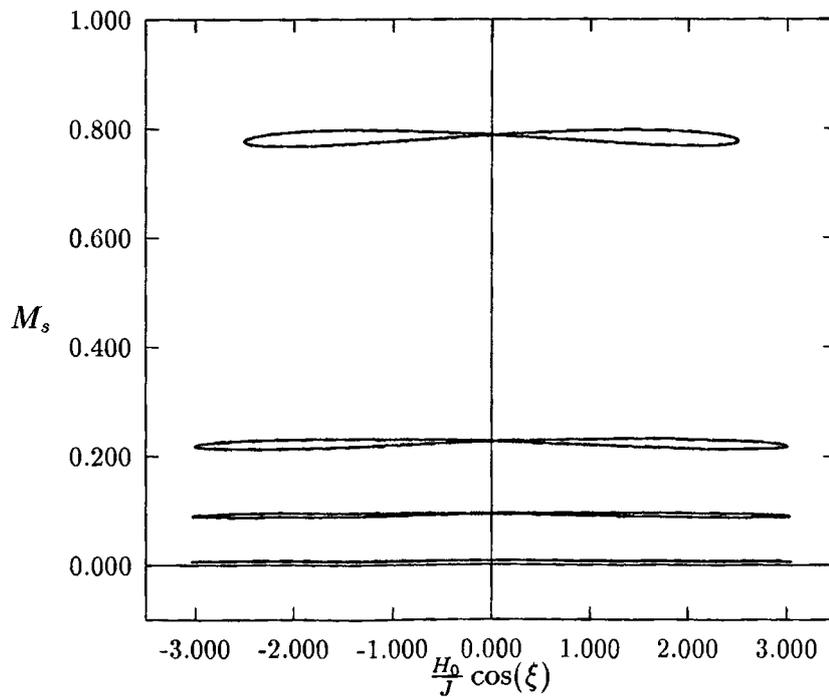


Figura - 4.13 Gráficos do parâmetro de ordem M_s em função de $\frac{H_0}{J} \cos(\xi)$ com os valores de amplitude do campo magnético, temperatura e frequência indicados ao lado da figura. Para a maior amplitude do campo observamos M_s tendendo a zero.

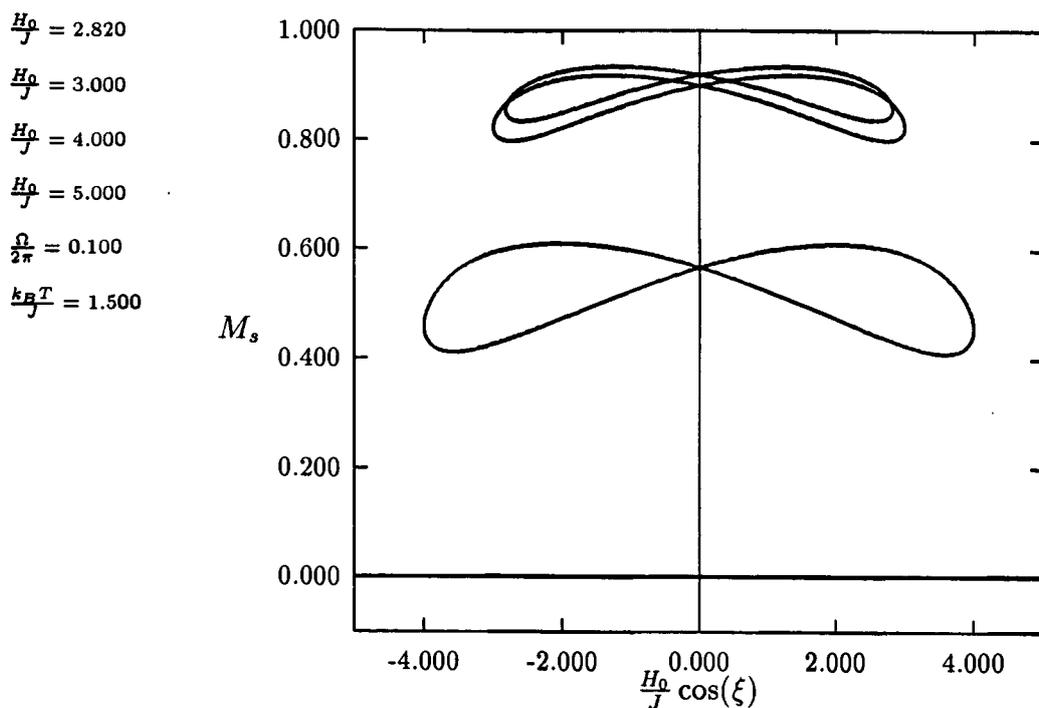


Figura - 4.14 Gráficos do parâmetro de ordem M_s em função de $\frac{H_0}{J} \cos(\xi)$ com os valores de amplitude do campo magnético, temperatura e frequência indicados ao lado da figura. Para a maior amplitude do campo observamos que $M_s = 0$.

Variação da Correlação em Função do Campo Externo

Da mesma forma que observamos a oscilação de M_s nas figuras 4.6 a 4.9, também notamos oscilações na correlação R . Nas figuras 4.15 a 4.17 está evidente que à medida que nos aproximamos do valor de campo crítico, para cada situação, o valor absoluto da correlação entre subredes diminui. Isto mostra que as magnetizações das subredes oscilam em torno de zero à medida que nos aproximamos do campo crítico.

$$\frac{H_0}{J} = 2.800$$

$$\frac{H_0}{J} = 2.500$$

$$\frac{H_0}{J} = 2.000$$

$$\frac{H_0}{J} = 1.500$$

$$\frac{\Omega}{2\pi} = 1.000$$

$$\frac{k_B T}{J} = 1.500$$

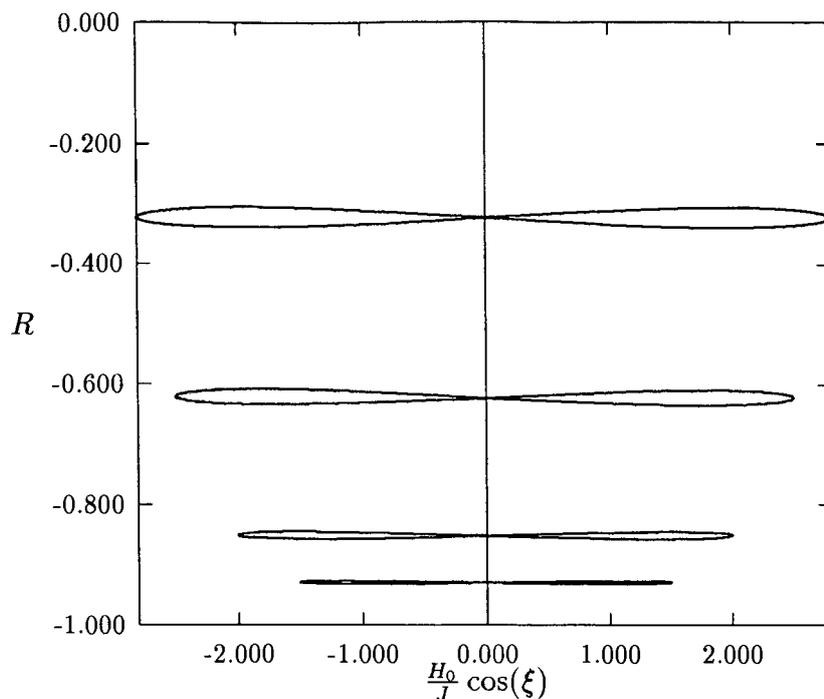


Figura - 4.15 Gráficos da correlação R em função de $\frac{H_0}{J} \cos(\xi)$ com os valores de amplitude de campo magnético, temperatura e frequência indicados ao lado da figura. A curva mais acima corresponde à maior amplitude $\frac{H_0}{J}$.

$$\frac{H_0}{J} = 5.000$$

$$\frac{H_0}{J} = 4.000$$

$$\frac{H_0}{J} = 3.000$$

$$\frac{H_0}{J} = 2.820$$

$$\frac{\Omega}{2\pi} = 0.100$$

$$\frac{k_B T}{J} = 1.500$$

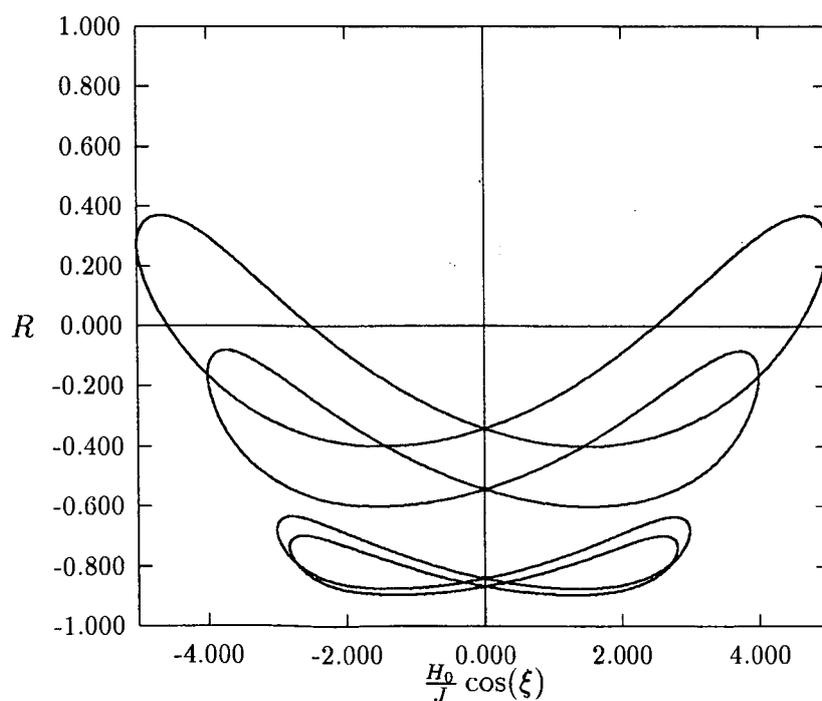


Figura - 4.16 Gráficos da correlação R em função de $\frac{H_0}{J} \cos(\xi)$ com os valores de amplitude de campo magnético, temperatura e frequência indicados ao lado da figura. A curva mais acima corresponde à maior amplitude $\frac{H_0}{J}$.

$$\frac{H_0}{J} = 3.040$$

$$\frac{H_0}{J} = 3.025$$

$$\frac{H_0}{J} = 3.000$$

$$\frac{H_0}{J} = 2.500$$

$$\frac{\Omega}{2\pi} = 0.500$$

$$\frac{k_B T}{J} = 1.500$$

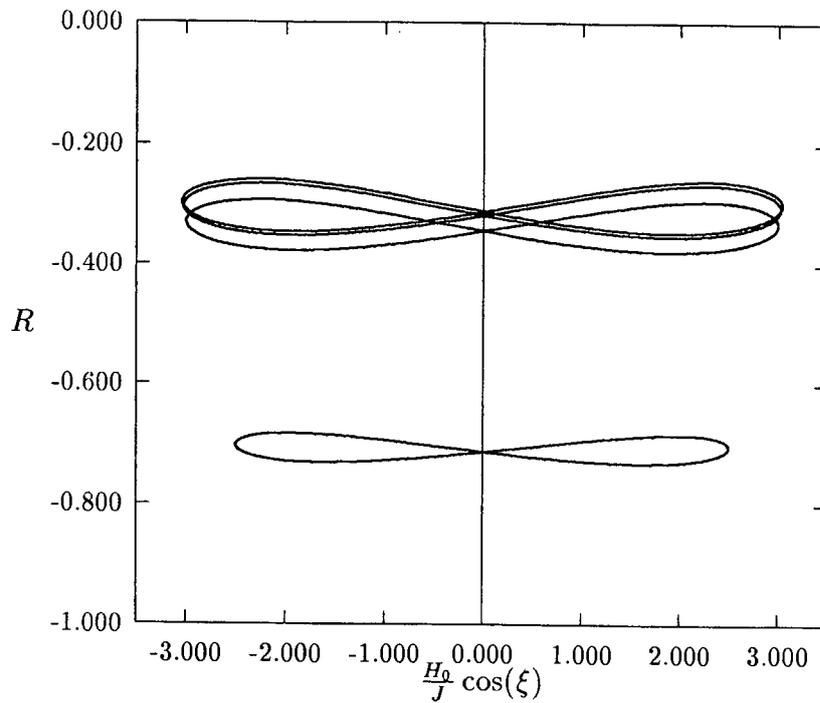


Figura - 4.17 Gráficos da correlação R em função de $\frac{H_0}{J} \cos(\xi)$ com os valores de amplitude de campo magnético, temperatura e frequência indicados ao lado da figura. A curva mais abaixo corresponde à menor amplitude $\frac{H_0}{J}$.

Variação da Magnetização M em Relação ao Campo Externo

Mostramos em páginas anteriores o atraso, em fase, da magnetização em relação ao campo oscilante. Verificamos que para os valores de temperatura e de campo escolhidos a defasagem entre M e $H(t)$ está associada basicamente à magnitude da razão entre frequências Ω . Verificamos também que, para qualquer intervalo de temperatura, campo ou valor de Ω a magnetização sempre oscila em torno do valor zero (veja gráficos apresentados nas *figuras* 4.6 a 4.11). Seguindo o esquema dos últimos parágrafos apresentamos nas *figuras* 4.18, 4.19 e 4.20 o comportamento da magnetização em função de $H(t)$. A magnetização descreve curvas fechadas e simétricas em relação a um determinado eixo que passa pela origem do sistema de coordenadas, ligando os extremos das curvas. Notamos que as curvas mais internas correspondem a valores mais baixos de amplitude do campo magnético. Também observamos que quanto maior o valor de Ω , menores são as amplitudes das magnetizações. Quanto maior o valor de Ω mais próximo fica o semi-eixo maior de cada curva da linha horizontal indicativa de magnetização zero. Essa defasagem da magnetização em relação ao campo já havia sido apontada anteriormente. Na *figura* 4.21 mostramos, separadamente, o comportamento da magnetização das duas subredes em função do tempo, para diversos valores de campo magnético. Observamos que à medida que o campo aumenta em direção ao respectivo campo crítico, as magnetizações das subredes se aproximam o que faz com que as suas respectivas médias num período tornem-se nulas, o mesmo ocorrendo com M_s , que na realidade é nulo em qualquer instante de tempo para valores de campo maiores ou iguais ao valor crítico. Por outro lado, o valor de M é nulo num período de oscilação,

porém sua amplitude cresce quando nos aproximamos do campo crítico.

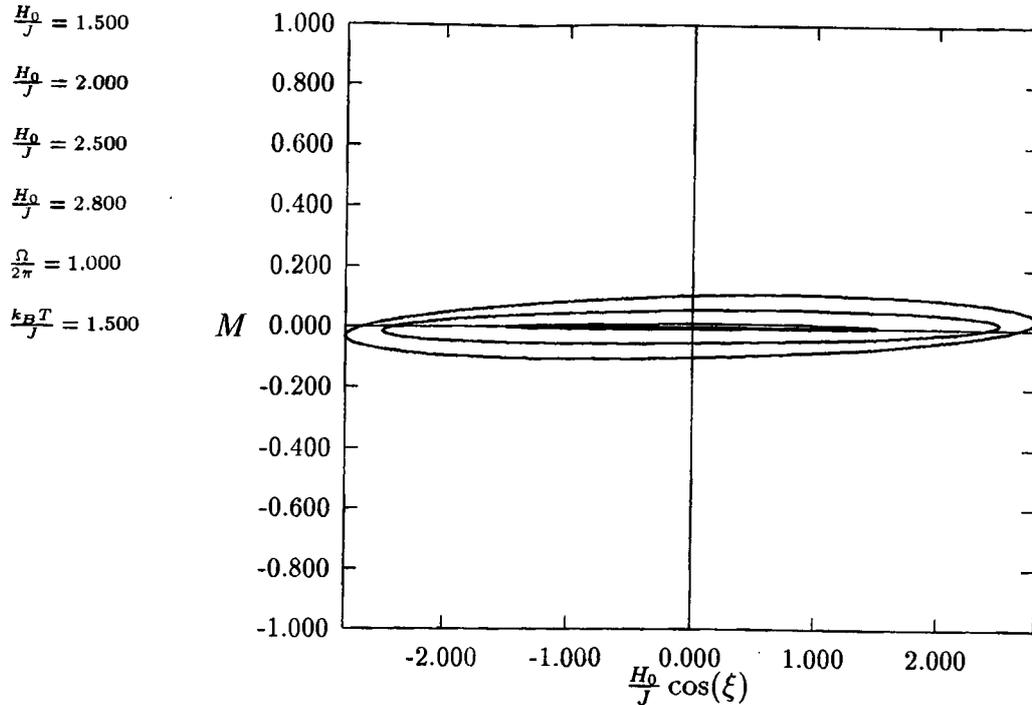


Figura - 4.18 Gráficos da magnetização M em função de $\frac{H_0}{J} \cos(\xi)$ com os valores de amplitude do campo magnético, temperatura e frequência indicados ao lado da figura. A maior amplitude do campo corresponde à curva mais externa.

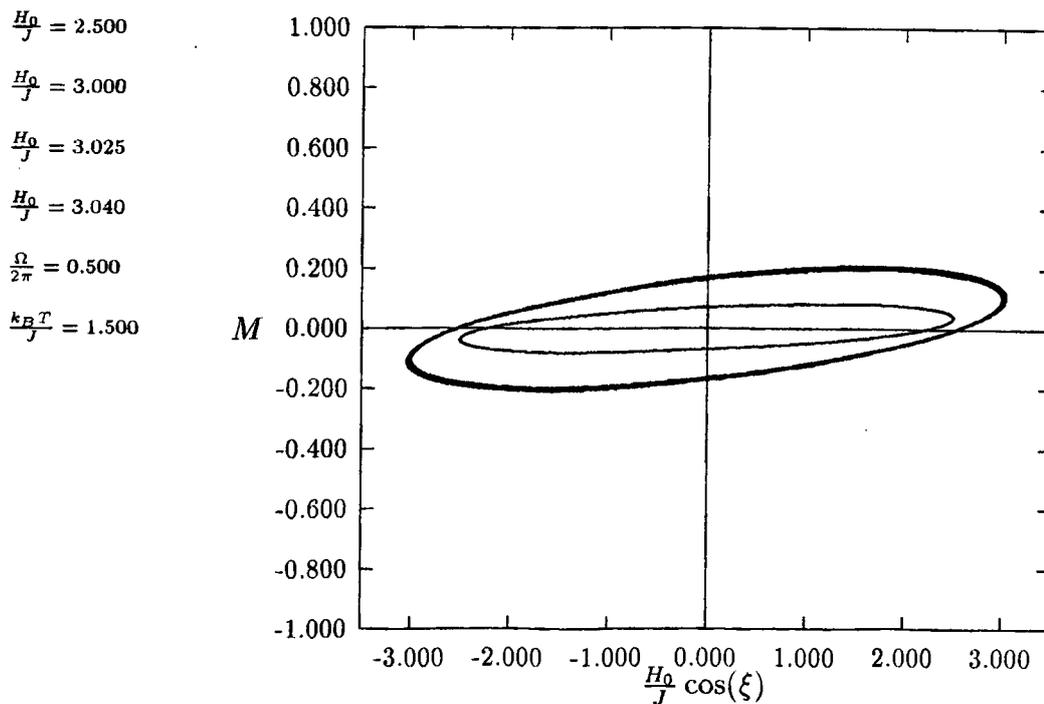


Figura - 4.19 Gráficos da magnetização M em função de $\frac{H_0}{J} \cos(\xi)$ com os valores de amplitude do campo magnético, temperatura e frequência indicados ao lado da figura. A maior amplitude do campo corresponde à curva mais externa.

$$\begin{aligned} \frac{H_0}{J} &= 2.820 \\ \frac{H_0}{J} &= 3.000 \\ \frac{H_0}{J} &= 4.000 \\ \frac{H_0}{J} &= 5.000 \\ \frac{\Omega}{2\pi} &= 0.100 \\ \frac{k_B T}{J} &= 1.500 \end{aligned}$$

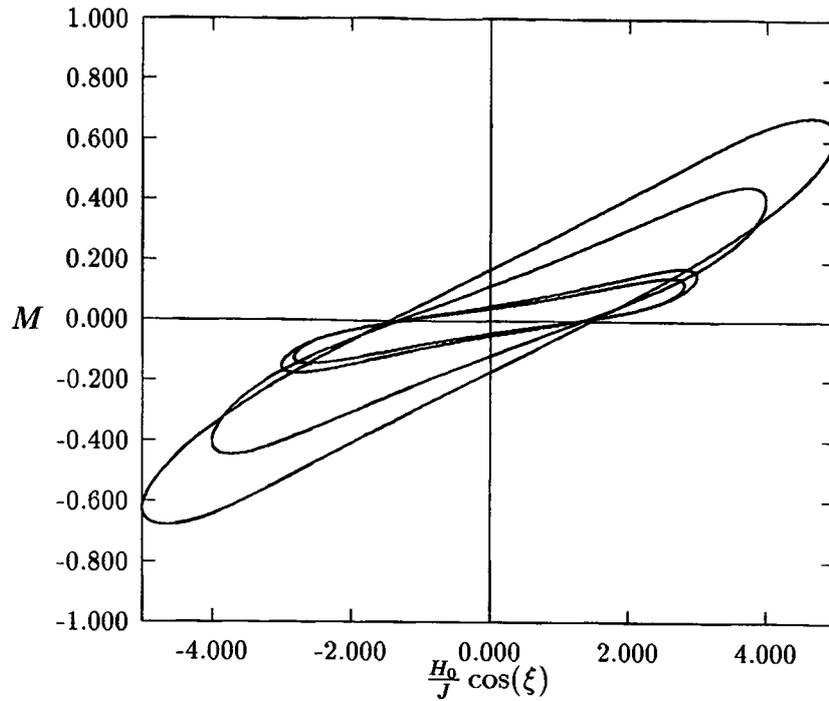


Figura - 4.20 Gráficos da magnetização M em função de $\frac{H_0}{J} \cos(\xi)$ com os valores de amplitude do campo magnético, temperatura e frequência indicados ao lado da figura. A maior amplitude do campo corresponde à curva mais externa.

$$\begin{aligned} \frac{H_0}{J} &= 2.000 \\ \frac{H_0}{J} &= 2.500 \\ \frac{H_0}{J} &= 3.040 \\ \frac{H_0}{J} &= 4.000 \end{aligned}$$

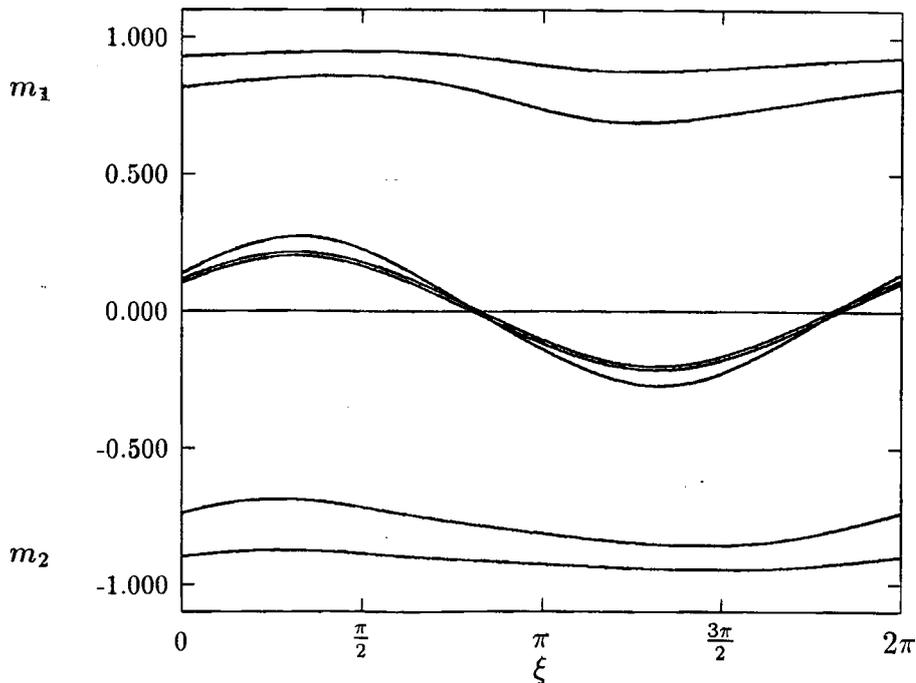


Figura - 4.21 Gráficos das magnetizações, m_1 e m_2 , para cada uma das subredes com $\frac{k_B T}{J} = 1.500$, $\frac{\Omega}{2\pi} = 0.500$ e as amplitudes de campo magnético, $\frac{H_0}{J}$, indicadas ao lado da figura. Os menores valores de $\frac{H_0}{J}$ correspondem à região antiferromagnética. O valor $\frac{H_0}{J} = 3.040$ está ligeiramente abaixo da transição de fases dinâmica.

4.4 Discussões

As discussões que desenvolveremos neste parágrafo que encerra o *capítulo* 4 estão relacionadas às curvas de campo crítico em função de Ω e temperatura.

A *figura* 4.22 apresenta os valores dos campos críticos para três temperaturas diferentes, em função de Ω . Para cada temperatura, mostramos na mesma figura, o valor correspondente do campo crítico estático.

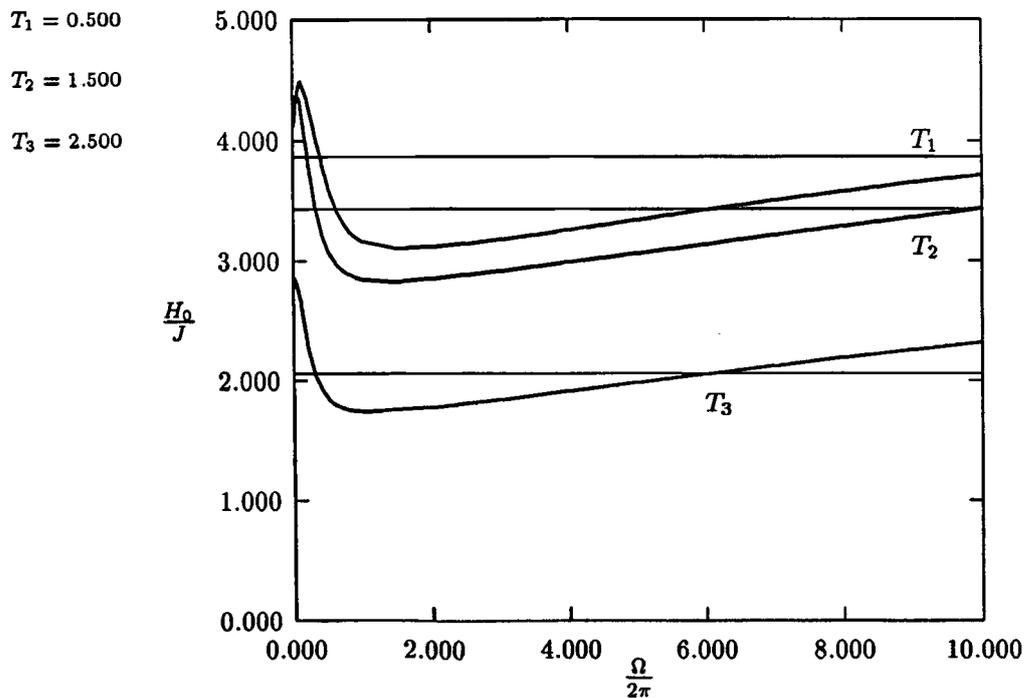


Figura - 4.22 Gráfico representando a dependência da amplitude do campo crítico com a razão entre frequências Ω em três temperaturas distintas T_1 , T_2 e T_3 . As retas paralelas ao eixo Ω correspondem aos valores do campo crítico estático na temperatura considerada.

Para a discussão que se seguirá convém esquematizarmos de forma geral

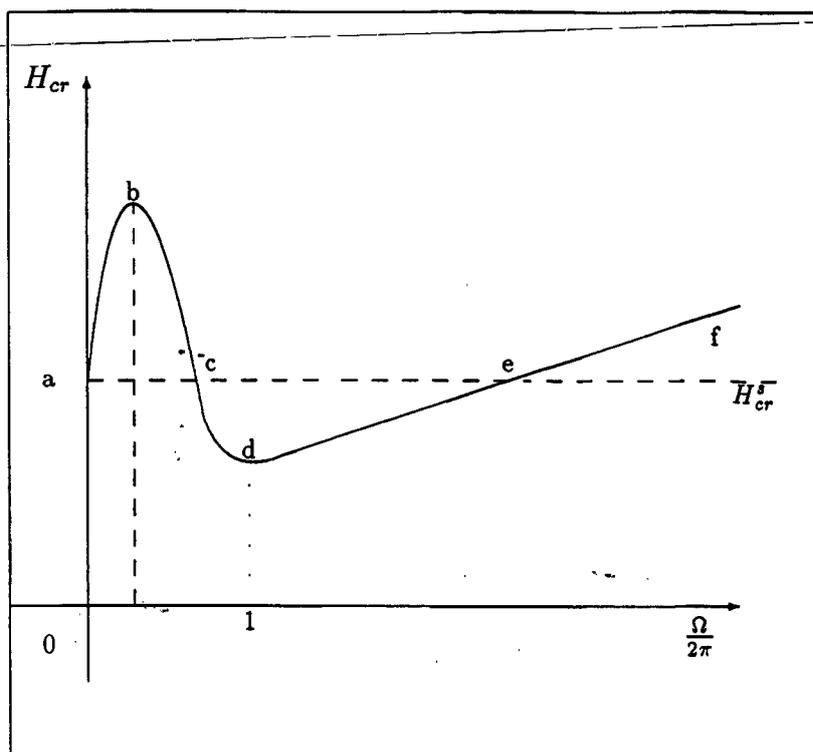


Figura - 4.23 $\frac{\Omega}{2\pi} = \frac{\omega}{\nu} = \frac{\text{Freq. Osc. do Campo Externo}}{\text{Freq. de Inversão dos Spins}}$

essas curvas que, independentemente da temperatura, podem ser desenhadas como mostramos na *figura 4.23*, que obviamente está numa escala arbitrária.

Devemos lembrar que nosso sistema, quando sujeito à influência de um campo magnético estático, apresenta o maior valor de campo crítico na temperatura zero, como pode ser observado na *figura 4.3*. Entretanto, quando o campo é oscilante, o campo crítico dinâmico pode assumir valores maiores ou menores que o correspondente valor estático, dependendo do valor da razão de frequências Ω .

Se tomarmos uma dada temperatura e compararmos os resultados do sistema dinâmico com aqueles obtidos a campo estático verificamos que para os intervalos determinados pelo trecho de curva *abc* e a direita de *e*, representados na *figura 4.23*, o campo crítico dinâmico é maior do que o estático. No intervalo de frequências *cde* o campo

crítico dinâmico é menor. Esse comportamento é devido fundamentalmente à competição existente entre a taxa de inversão dos spins na temperatura considerada e a frequência do campo externo.

Na *figura 4.24* mostramos as linhas de campo crítico em função da temperatura para três valores distintos da frequência do campo externo. O campo crítico é nulo na temperatura de Néel do sistema, independentemente de sua frequência. Notamos que as linhas críticas dinâmicas podem se situar acima ou abaixo da linha crítica estática correspondente.

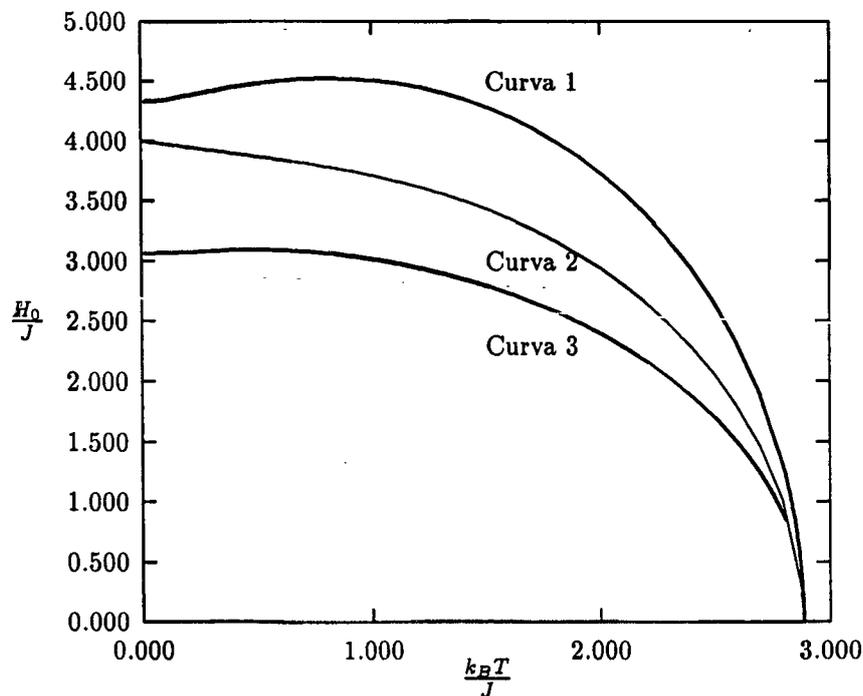


Figura - 4.24 Gráfico representando linhas de transição a campo estático e a campo oscilante. A Curva 2 está representando a linha de transição a campo estático, isto é, $\Omega = 0$. A Curva 1 representa a linha de transição a campo oscilante com $\frac{\Omega}{2\pi} = 0.100$ e a Curva 3 é também obtida com um campo oscilante onde $\frac{\Omega}{2\pi} = 1.000$.

O último resultado que apresentamos está representado na *figura 4.25*,

onde novamente temos a curva de campo crítico para o sistema mantido à temperatura $\frac{k_B T}{J} = 1.500$, mas $\frac{\Omega}{2\pi}$ variando num intervalo que envolve duas ordens de grandeza. É possível verificar que, à medida que a frequência do campo se torna muito maior que a frequência de inversão dos spins, o campo crítico dinâmico tende a crescer muito, tal que, para valores muito elevados de frequência ($\sim \frac{\Omega}{2\pi} = 100$), o sistema parece jamais deixar de ser antiferromagnético, ou seja, parece não mais sofrer transição de fases.

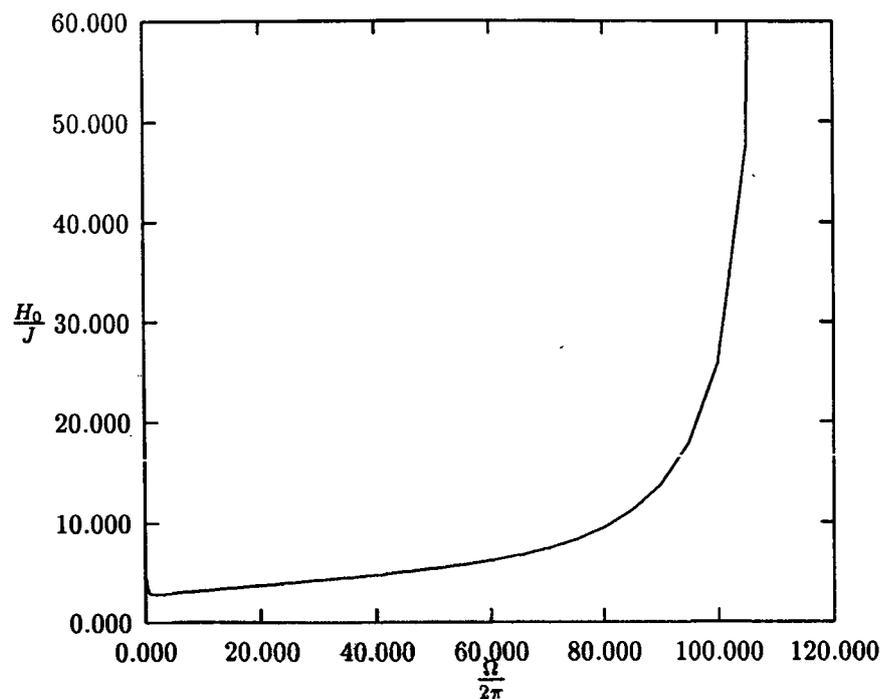


Figura - 4.25 Gráfico representando a dependência da amplitude do campo crítico em Ω . A temperatura é fixada em $\frac{k_B T}{J} = 1.500$.

Dois fatores definem a transição de fases no sistema magnético que estamos considerando: a temperatura e o campo externo aplicado. A temperatura sempre funciona como um fator de desorientação dos momentos magnéticos, tal que, se o sistema estiver inicialmente apresentando um ordenamento antiferromagnético perfeito, à temperatura

zero, necessitamos de um campo externo muito intenso para destruir esse ordenamento. O campo deverá ter intensidade suficiente para alinhar os momentos magnéticos fazendo com que o parâmetro de ordem vá a zero. Em todo o intervalo de temperaturas, a agitação térmica funciona como um mecanismo de redução da orientação dos momentos magnéticos, de tal forma que para temperaturas próximas à temperatura de Néel, um pequeno valor de campo já é suficiente para promover a transição para a fase paramagnética.

Quando o sistema não está em equilíbrio termodinâmico, quando por exemplo, o campo oscila com uma frequência ω , a situação não pode ser descrita de maneira tão trivial, uma vez que, dependendo da razão Ω entre as frequências, o campo crítico pode ser mais ou menos intenso se comparado ao caso estático. Essa situação está representada na *figura 4.24*, e podemos interpretá-la observando a curva esquemática representada na *figura 4.23*. No intervalo *abc* a magnitude do campo crítico é maior que no caso estático, numa mesma temperatura. Em *a* o campo é rigorosamente estático, $\Omega = 0$, e o seu valor é igual ao do campo crítico naquela temperatura.

A competição entre os efeitos da frequência do campo externo e da frequência de inversão dos spins é extremamente acentuada na região $0 < \frac{\Omega}{2\pi} < 1$. Ou seja, quando a frequência do campo é menor que a frequência da dinâmica dos spins, ocorre um máximo local no valor do campo crítico dinâmico para cada temperatura considerada. Mostramos que esse máximo ocorre para valores da frequência do campo cerca de dez vezes menor que a frequência de inversão dos spins. Entretanto, quando a frequência do campo passa a ser maior que a frequência correspondente à taxa de transição dos spins, observamos um crescimento no valor do campo crítico dinâmico. Se a frequência do campo torna-se

extremamente grande, nossos resultados indicam uma supressão da transição de fases. O esquema teórico utilizado neste trabalho não permite que descrevamos os mecanismos microscópicos envolvidos na competição entre o campo variável no tempo e a dinâmica de inversão dos spins, que é baseada na taxa de transição de *Glauber*[2]. Neste trabalho estudamos os estados estacionários desse sistema (magnetização de subredes, correlação entre subredes). Portanto, a compreensão do mecanismo microscópico responsável por esse comportamento, peculiar, do campo crítico em função da competição entre as frequências, está além dos objetivos deste trabalho.

CAPÍTULO 5

Conclusões

Nesta dissertação estudamos um sistema magnético dinâmico constituído por duas subredes interpenetrantes de spins de Ising de forma a caracterizar um antiferromagneto. O sistema admite duas orientações possíveis para os momentos magnéticos, sendo portanto descrito por uma Hamiltoniana de Ising. O sistema mantém-se em contato com um banho térmico, tendo sua dinâmica estocástica determinada pelo processo de Glauber[2]. Um campo externo oscilante atua sobre a rede quadrada de spins que inicialmente encontra-se num estado antiferromagnético.

Para descrever a evolução temporal das magnetizações de subrede e da função de correlação entre subredes, determinamos as probabilidades das transições que conduzem esse sistema desde uma configuração a outra. Assim pudemos escrever as equações que descrevem a evolução temporal das quantidades citadas acima utilizando-nos da equação *Mestra*.

Para obter essas equações na forma mais simplificada possível, sem perder a generalidade atribuída na definição do modelo, utilizamos a aproximação de pares que permite escrever as probabilidades dos estados do sistema levando-se em conta as correlações entre pontos da rede que são vizinhos mais próximos.

A solução numérica do sistema de equações não lineares acopladas, que descrevem m_1 e m_2 (magnetizações das subredes) e r (função de correlação entre as subredes) permitiu-nos obter a magnetização M do sistema e o parâmetro de ordem, a magnetização alternante M_s . Considerando o comportamento de M_s em função da temperatura, da amplitude do campo externo e da razão entre as frequências do campo externo e de inversão dos spins, determinamos o diagrama de fases dinâmico para esse modelo. Colocamos assim uma linha crítica dinâmica que separa as fases antiferromagnética e paramagnética para diversas razões entre as frequências citadas acima.

O sistema efetua uma transição de fases contínua entre as fases antiferromagnética e paramagnética. Entretanto, embora essa transição seja similar àquela que ocorre quando o sistema encontra-se sob a ação de um campo estático (também contínua), os processos e caminhos seguidos pelo sistema no caso dinâmico são muito diversos. A transição de fases neste caso não depende somente da magnitude da temperatura e da intensidade do campo aplicado, mas depende também da razão entre as frequências do campo e de inversão de spins. Mais do que isso, foi possível identificar regiões, no espaço de parâmetros, onde, para uma dada temperatura, o sistema dinâmico efetua transições de fases em campos menores do que no caso estático, e em outras regiões ocorre justamente o contrário. Este fato evidencia a competição que deve ocorrer entre as diferentes escalas de tempo envolvidas

na variação do campo externo e do mecanismo de inversão local dos spins.

Finalmente, embora os resultados obtidos para o diagrama de fases sejam corretos, não pudemos apresentar uma justificativa plausível para o comportamento observado. Acreditamos que isso só será possível com um tratamento microscópico mais detalhado das interações envolvidas.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] T. Tomé e M. J. de Oliveira, *Phys. Rev A* **41**, 4251 (1990).
- [2] R. J. Glauber, *J. Math. Phys.* **4**, 294 (1963).
- [3] T. Tomé e M. J. de Oliveira, *Phys. Rev. A* **40**, 6643 (1989).
- [4] A. C. Algariz, A. R. Vasconcellos, R. Luzzi e A. J. Sampaio, *Rev. Bras. de Física* **15**, 106 (1965).
- [5] H. Haken, *Synergetics - An Introduction*, Springer-Verlag, New York, 1978.
- [6] G. Nicolis e I. Prigogine, *Self-Organization in Nonequilibrium Systems - From Dissipative Structures to Order Through Fluctuation*, capítulo 1, Jonh Wiley e Sons, New York, 1977.
- [7] R. Zwanzig, *Ann. Rev. Phys. Chem* **16**, 67 (1965).
- [8] T. Tomé, M. J. de Oliveira e M. A. Santos, *J. Phys. A: Math. Gen.*, **24**, 3677 (1991).
- [9] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky e W. T. Veterling, *Numerical Recipes - The Art of Scientific Computing*, seção 1.2, pgs 10–119, Press Syndicate of the University of Cambridge, Reading, Massachusetts, segunda edição, 10 Janeiro 1987.

- [10] L. C. Barroso, M. M. A. Barroso, F. F. Campos, M. L. B. de Carvalho e M. L. Maia, *Calculo Numérico (com aplicações)*, capítulo 6, pgs. 285–299. Editora Harbra Ltda, São Paulo, SP, 2ª edição, 1987.
- [11] M. Uchinami, *Phys. Letts.* **127**, 151 (1988).
- [12] A. Bienenstock, *J. Applied Phys.* **37**, 1459 (1966).
- [13] E. E. Reinehr, *Dissertação de Mestrado*, Universidade Federal de Santa Catarina, 1994.