

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

## Comportamento Dinâmico de Modelos de Spins Mistos

Tese apresentada ao curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Santa Catarina para obtenção do título de Doutor em Física.

Maurício Godoy

Orientador: Prof. Dr. Wagner Figueiredo

FLORIANÓPOLIS

Março de 2004

*À Rose*

# Agradecimentos

- Ao Prof. Dr. Wagner Figueiredo pela orientação e formação científica.
- Aos colegas do curso de Pós-Graduação em Física da UFSC, principalmente ao Mauricio, Édio e Vanessa pelo ótimo convívio e apoio durante estes anos.
- Aos amigos Renê, Rosélia, Piu, William, Rafael, Paulo, Alexandre, Miro e Marcel, por todo apoio, companheirismo e amizade nos momentos difíceis e alegres durante todos estes anos.
- À CAPES pelo apoio financeiro.

# Resumo

Estudamos um modelo de Ising de spins mistos numa rede quadrada sob a influência de dois processos dinâmicos competitivos. Os processos envolvem mudança de um spin e de um par de spins vizinhos mais próximos, respectivamente, com pesos  $p$  e  $(1 - p)$ . Inicialmente, consideramos o modelo com interação ferromagnética entre spins primeiros vizinhos. Determinamos o diagrama de fases no plano temperatura  $T$  versus o parâmetro de competição  $p$  entre os dois processos estocásticos, na aproximação de pares e através de simulações de Monte Carlo. Os diagramas de fases obtidos nessas duas abordagens são qualitativamente semelhantes, apresentando três fases distintas (ferromagnética, paramagnética e antiferromagnética) separadas por duas linhas de transições de fase contínuas. Uma versão antiferromagnética do mesmo modelo é também considerada e comparamos o seu diagrama de fases com o do caso ferromagnético. Mostramos que os diagramas de fases apresentam a mesma topologia. Mudar o sinal do acoplamento magnético é equivalente a trocar no diagrama de fases as posições das fases ferro- e antiferromagnética. Através dos resultados obtidos nas simulações de Monte Carlo, tanto no caso ferro- quanto no caso antiferromagnético, mostramos que o modelo está na mesma classe de universalidade do modelo de Ising bidimensional. Estudamos ainda um modelo de Ising de spins mistos fora do equilíbrio, incluindo a contribuição de um campo cristalino  $D$ , e observamos a existência de pontos tricríticos dependentes do parâmetro de competição. Na aproximação de pares, o diagrama de fases  $D \times p$ , em baixas temperaturas, apresenta três fases separadas por duas linhas de transições: uma linha de transição que exibe um ponto tricrítico entre as fases ferro- e paramagnética, e uma linha de transições

de primeira ordem entre as fases para- e antiferromagnética. Entretanto, as simulações de Monte Carlo mostram que todas as linhas de transições de fases são contínuas. Finalmente, determinamos as propriedades termodinâmicas de um modelo de Ising de spins mistos com uma distribuição aleatória dos spins na rede. Mostramos que o comportamento de escala da variância relativa de algumas dessas propriedades é afetado pela sua distância ao ponto crítico.

# Abstract

We study a mixed-spin Ising model on a square lattice subject to two competing dynamic processes. We consider single spin-flip and two nearest neighbor spin-flips, respectively, with weights  $p$  and  $(1 - p)$ . Firstly, we take a ferromagnetic exchange coupling between neighboring spins. We find the phase diagram of the model in the plane temperature  $T$  versus competition parameter  $p$  through the pair approximation calculations and by Monte Carlo simulations. The phase diagram we find in these two approaches are similar, exhibiting three different phases (ferromagnetic, paramagnetic and antiferromagnetic) separated by two continuous phase transition lines. An antiferromagnetic version of the model is also considered and we compare its phase diagram with that of the ferromagnetic case. We show that the phase diagrams exhibit the same topology. Changing the magnetic coupling sign is equivalent to exchange the place of the ferro- and antiferromagnetic phases in the phase diagram. Based on Monte Carlo simulations, for both ferro- and antiferromagnetic couplings, we show that the model is in the same universality class of the two dimensional equilibrium Ising model. We also investigate a nonequilibrium mixed-spin Ising model including a crystal-field contribution, and we observe the presence of tricritical points depending on the values of the competition parameter. In the pair approximation, the  $D$  versus  $p$  phase diagram, at low temperatures, displays three phases separated by two transition lines: one transition line between the ferro- and paramagnetic phases exhibiting a tricritical point, and the other, a first-order transition line between the para- and antiferromagnetic phases. However, Monte Carlo simulations show that all the transition lines are continuous. Finally, we determine the thermodynamic properties of

a quenched mixed-spin Ising model, with a random distribution of the spin magnitudes on the lattice. We show that the scaling behavior of the relative variances of some of these properties depends on the distance from the critical point.

# Lista de Publicações

1. *Critical behavior of the mixed-spin Ising model with two competing dynamics* - M. Godoy and W. Figueiredo - Physical Review E **65**, 026 111 (2002), Capítulo 3.
2. *Nonequilibrium antiferromagnetic mixed-spin Ising model* - M. Godoy and W. Figueiredo - Physical Review E **66**, 036 131 (2002), Capítulo 4.
3. *Kinetic phase transition in the mixed-spin Ising model* - M. Godoy and W. Figueiredo - Brazilian Journal of Physics, **34** (2) (2004), Capítulo 5.
4. *Competing dynamics on the mixed-spin Ising model with crystal-field interaction* - M. Godoy and W. Figueiredo - Physica A (2004), Capítulo 5.

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>16</b>
1.1	Os modelos . . . . .	16
1.1.1	O modelo de Ising de spins mistos . . . . .	16
1.1.2	Modelos desordenados . . . . .	18
1.2	Sistemas fora do equilíbrio . . . . .	20
1.3	Técnicas e aproximações . . . . .	22
1.3.1	Equação Mestra . . . . .	22
1.3.2	Método de Monte Carlo . . . . .	23
1.3.3	Aproximação de campo médio . . . . .	27
1.3.4	Aproximação de pares . . . . .	27
1.4	Fenômenos críticos . . . . .	28
1.5	Teoria de escala de tamanho finito . . . . .	28
1.6	Universalidade . . . . .	29
<b>2</b>	<b>O modelo de Ising de spins mistos fora do equilíbrio</b>	<b>31</b>
2.1	Introdução . . . . .	31
2.2	O modelo e as equações de movimento . . . . .	32
2.3	Aproximação de pares . . . . .	36
<b>3</b>	<b>Simulações de Monte Carlo no modelo de Ising de spins mistos ferromagnético</b>	<b>40</b>
3.1	Introdução . . . . .	40
3.2	Simulações de Monte Carlo . . . . .	41
3.3	Resultados . . . . .	44

---

<b>4</b>	<b>Modelo de Ising de spins mistos com acoplamento antiferromagnético</b>	<b>53</b>
4.1	Introdução . . . . .	53
4.2	O modelo . . . . .	54
4.3	Diagrama de fases . . . . .	55
<b>5</b>	<b>Modelo de Ising de spins mistos com interação de campo cristalino</b>	<b>61</b>
5.1	Introdução . . . . .	61
5.2	Aproximação de campo médio . . . . .	61
5.3	Aproximação de campo médio dinâmica . . . . .	67
5.4	Aproximação de pares . . . . .	73
5.5	Simulações de Monte Carlo . . . . .	78
<b>6</b>	<b>Modelo de Ising de spins mistos com desordem temperada</b>	<b>84</b>
6.1	Introdução . . . . .	84
6.2	Definição do modelo e alguns observáveis de interesse . . . . .	85
6.3	Procedimentos e resultados . . . . .	87
6.4	Auto-mediação . . . . .	92
6.4.1	Variância relativa longe do ponto crítico . . . . .	94
6.4.2	Variância relativa no ponto crítico . . . . .	95
<b>7</b>	<b>Conclusões e perspectivas</b>	<b>97</b>

# Lista de Figuras

1.1	Representação esquemática de uma rede quadrada com spins mistos.	17
1.2	Representação esquemática de uma rede quadrada com spins mistos, distribuídos de forma aleatória na rede. . . . .	19
2.1	Representação esquemática de aglomerados com um spin central e seus respectivos primeiros vizinhos usados na aproximação de pares dinâmica. . . . .	38
2.2	Representação esquemática de um aglomerado do tipo $C$ , com spins centrais $\sigma_1$ e $S_2$ , e seus respectivos spins primeiros vizinhos. . . . .	39
3.1	Diagrama de fases do modelo de Ising de spins mistos fora do equilíbrio termodinâmico no plano $T - p$ . As letras denotam as fases ordenadas F e AF, e a fase paramagnética P. As linhas com símbolos quadrados são os resultados das simulações, enquanto que as linhas pontilhadas representam os cálculos na aproximação de pares dinâmica.	44
3.2	Comportamento do parâmetro de ordem em função da razão de competição $p$ para vários tamanhos de rede $L$ como indicado nas figuras. (a) Magnetização total $m^F$ para $T = 1.5$ . (b) Magnetização alternada $m^{AF}$ para $T = 2.0$ . . . . .	45
3.3	Magnetização em função de $1/L$ para vários tamanhos de rede $L$ como indicado nas figuras. (a) Para a magnetização total $m^F$ em $T = 1.5$ , a transição aparece no intervalo $0.9810 \leq p \leq 0.9820$ . (b) Para a magnetização alternada $m^{AF}$ em $T = 2.0$ , a transição está localizada no intervalo $0.060 \leq p \leq 0.066$ . . . . .	46

- 3.4 Cumulante reduzido de quarta ordem para vários tamanhos de rede como indicado nas figuras. (a) O parâmetro de competição crítico é  $p_c = 0.9812 \pm 0.0001$  na transição P-F para  $T = 1.5$ . (b) Na transição AF-P, para  $T = 2.0$ , obtemos  $p_c = 0.065 \pm 0.001$ . . . . . 46
- 3.5 Comportamento da susceptibilidade em função do parâmetro de competição  $p$  para vários tamanhos de rede  $L$  como indicado nas figuras. (a) Susceptibilidade  $\chi^F$  para  $T = 1.5$ . (b) Susceptibilidade  $\chi^{AF}$  para  $T = 2.0$ . . . . . 48
- 3.6 Gráfico log-log da derivada do cumulante  $U'_L(p_c)$  versus  $L$ . A linha reta é o melhor ajuste para os dados obtidos na simulação. (a) Na transição P-F, para  $T = 1.5$ , obtemos  $\nu = 1.01 \pm 0.06$ . (b) Na transição AF-P, para  $T = 2.0$ , obtemos  $\nu = 1.09 \pm 0.05$ . . . . . 48
- 3.7 Gráfico log-log do parâmetro de ordem  $m_L(p_c)$  versus  $L$ . A linha reta é o melhor ajuste para os pontos. (a) Na transição P-F, para  $T = 1.5$ , obtemos  $\beta/\nu = 0.125 \pm 0.009$ . (b) Na transição AF-P, para  $T = 2.0$ , obtemos  $\beta/\nu = 0.13 \pm 0.01$ . . . . . 49
- 3.8 Gráfico log-log da susceptibilidade  $\chi_L(p_c)$  versus  $L$ . A linha reta é o melhor ajuste para os dados da simulação. (a) Na transição P-F, para  $T = 1.5$ , obtemos  $\gamma/\nu = 1.67 \pm 0.08$ . (b) Na transição AF-P, para  $T = 2.0$ , obtemos  $\gamma/\nu = 1.63 \pm 0.04$ . . . . . 50
- 3.9 Magnetização  $m_L$ , para diferentes valores de  $L$  como indicado nas figuras. O parâmetro  $\varepsilon$  é definido por  $\varepsilon = (p - p_c)/p_c$ . As linhas retas representam o comportamento assintótico das funções de escala. (a) Na transição P-F, para  $T = 1.5$ , o melhor ajuste é obtido para  $p_c = 0.9812 \pm 0.0001$ ,  $\nu = 1.02 \pm 0.02$  e  $\beta = 0.123 \pm 0.002$ . (b) Na transição AF-P, para  $T = 2.0$ , o melhor ajuste é obtido para  $p_c = 0.065 \pm 0.001$ ,  $\nu = 1.02 \pm 0.02$  e  $\beta = 0.123 \pm 0.003$ . . . . . 51

- 3.10 Susceptibilidade  $\chi_L$ , para diferentes valores de  $L$  como indicado nas figuras. O parâmetro  $\varepsilon$  é definido por  $\varepsilon = (p - p_c)/p_c$ . As linhas retas representam o comportamento assintótico das funções de escala. (a) Na transição P-F, para  $T = 1.5$ , o melhor ajuste é obtido para  $p_c = 0.9812 \pm 0.0001$ ,  $\nu = 1.02 \pm 0.02$  e  $\gamma = 1.73 \pm 0.02$ . (b) Na transição AF-P, para  $T = 2.0$ , o melhor ajuste é obtido para  $p_c = 0.065 \pm 0.001$ ,  $\nu = 1.02 \pm 0.02$  e  $\gamma = 1.73 \pm 0.03$ . . . . . 51
- 3.11 Expoentes críticos estáticos  $\nu$ ,  $\beta$  e  $\gamma$  em função do parâmetro de competição  $p$ . O lado esquerdo da figura se refere à linha de transição AF-P; já o seu lado direito está relacionado à linha de transição F-P. 52
- 4.1 Diagrama de fases do modelo de Ising de spins mistos antiferromagnético no plano temperatura  $T$  versus parâmetro de competição  $p$ . As letras F e AF denotam fases ordenadas e P a fase paramagnética. As linhas pontilhadas representam os cálculos baseados na aproximação de pares, e as linhas com símbolos quadrados são os dados das simulações de Monte Carlo. As linhas ligando os quadrados servem somente para guiar os olhos. A temperatura é medida em unidades de  $J/k_B$  e  $p$  é adimensional. . . . . 56
- 4.2 Cumulante reduzido de quarta ordem para vários tamanhos de rede como indicado nas figuras. (a)  $U_L^F$  é o cumulante em torno do ponto crítico da transição F-P, e (b)  $U_L^{AF}$  é o cumulante em torno do ponto crítico da transição AF-P. A temperatura é fixada no valor  $T = 1.5$ . . 58
- 4.3 Gráfico log-log (a) do parâmetro de ordem, (b) da derivada do cumulante, e (c) da susceptibilidade em função do tamanho da rede, no ponto crítico da transição AF-P para  $T = 1.5$ . As linhas retas são os melhores ajustes para os dados. Os tamanhos dos círculos são escolhidos de tal forma que as barras de erro fiquem dentro deles. . 59

- 4.4 Colapso de dados em torno do ponto crítico da transição AF-P para (a) o parâmetro de ordem  $m_L^{AF}$ , e (b) susceptibilidade  $\chi_L^{AF}$ , para diferentes valores de  $L$  como indicado nas figuras. O parâmetro  $\varepsilon$  é definido por  $\varepsilon = (p - p_c)/p_c$ . A linha reta representa o comportamento assintótico das funções de escala. A temperatura é  $T = 1.5$ , e os melhores valores dos expoentes são  $\nu = 1.01 \pm 0.01$ ,  $\beta = 0.125 \pm 0.001$  e  $\gamma = 1.74 \pm 0.01$ . . . . . 60
- 5.1 Diagrama de fases a campo nulo no plano  $k_B T/J$  contra  $D/J$ , obtido através da aproximação de campo médio. A linha cheia representa transições de segunda ordem, e a linha pontilhada representa transições de primeira ordem. . . . . 67
- 5.2 Função energia livre  $g$  versus o parâmetro de ordem  $m_2$ , para  $k_B T/J = 1.0$ . (a) Fase ordenada ( $D = -3.900J$ ). (b) Na transição de primeira ordem ( $D = -3.983J$ ). (c) Na fase desordenada ( $D = -4.010J$ ). . . 68
- 5.3 Diagrama de fases a campo nulo no plano  $k_B T/J$  contra  $D/J$ , obtido através da aproximação de campo médio dinâmica. A linha cheia representa transições de segunda ordem, enquanto que a linha pontilhada representa transições de primeira ordem. . . . . 73
- 5.4 Diagrama de fases no plano temperatura  $T$  versus campo cristalino  $D$ , para três valores diferentes do parâmetro de competição  $p$  obtidos através da aproximação de pares dinâmica. As linhas cheias representam transições contínuas enquanto que as linhas pontilhadas representam transições de primeira ordem. Os círculos sólidos representam pontos tricríticos. Pontos tricríticos existem apenas no intervalo  $1 \geq p \geq 0.976$ . 75
- 5.5 Diagrama de fases no plano campo cristalino  $D$  versus parâmetro de competição  $p$ , para dois valores selecionados de temperatura, na aproximação de pares dinâmica. As letras F, AF e P, denotam as fases ferromagnética, antiferromagnética e paramagnética, respectivamente. As linhas cheias representam transições de fase contínuas e as linhas pontilhadas representam transições de primeira ordem. As temperaturas estão indicadas na figura. . . . . 77

5.6	Curva de histerese da magnetização de sub-rede correspondente ao ramo inferior da linha de transição de primeira ordem AF-P da figura 5.5. . . . .	78
5.7	Cumulantes de quarta ordem $U_L$ em função da temperatura $T$ para $D = -3.6$ e para dois valores diferentes do parâmetro de competição $p$ , indicando transições de fase contínuas. (a) $p = 1.0$ e (b) $p = 0.99$ . . . . .	80
5.8	Diagrama de fases no plano temperatura $T$ versus campo cristalino $D$ , obtido através de simulações de Monte Carlo. O diagrama apresenta somente linhas de transições contínuas para os diferentes valores do parâmetro $p$ indicados na figura. . . . .	81
5.9	Cumulantes de quarta ordem $U_L$ em função do parâmetro de competição $p$ . (a) $D = 2.0$ e (b) $D = -3.0$ . . . . .	82
5.10	Diagrama de fases no plano campo cristalino $D$ versus parâmetro de competição $p$ , nas simulações de Monte Carlo, para dois valores selecionados de temperatura, como indicado na figura. As letras F, AF e P, denotam as fases ferromagnética, antiferromagnética e paramagnética, respectivamente. As curvas que ligam quadrados e círculos representam transições contínuas. . . . .	82
6.1	Magnetização $m_L$ em função da temperatura $T$ para vários tamanhos de rede $L$ indicados na figura. . . . .	88
6.2	Cumulante de quarta ordem $U_L$ em função da temperatura $T$ para vários tamanhos de rede $L$ indicados na figura. . . . .	88
6.3	Susceptibilidade $\chi_L$ em função da temperatura $T$ para vários tamanhos de rede $L$ indicados na figura. . . . .	89
6.4	Calor específico $c_L$ em função da temperatura $T$ para vários tamanhos de rede $L$ indicados na figura. . . . .	90
6.5	Gráficos log-log (a) do parâmetro de ordem $m_L$ , (b) da susceptibilidade $\chi_L$ e (c) da derivada do cumulante $U_L$ em função do tamanho linear da rede, no ponto crítico. A linha reta representa o melhor ajuste para os dados. Os tamanhos dos círculos são escolhidos de tal forma que as barras de erro fiquem dentro deles. . . . .	91

- 6.6 Gráfico do valor máximo do calor específico em função do tamanho linear do sistema  $L$ , no ponto crítico. A linha reta representa o melhor ajuste para os pontos, usando a Eq. (6.16). As constantes encontradas pelo ajuste são  $c_1 = 2.43 \pm 0.04$  e  $c_2 = 0.45 \pm 0.03$ . . . . . 92
- 6.7 Colapso dos dados em torno do ponto crítico da transição entre as fases ordenada e desordenada do (a) parâmetro de ordem  $m_L$ , e da (b) susceptibilidade  $\chi_L$ , para diferentes valores de  $L$  como indicado nas figuras. O parâmetro  $\varepsilon$  é definido por  $\varepsilon = (T - T_c)/T_c$ . As linhas retas representam o comportamento assintótico das funções de escala. Os melhores valores determinados para os expoentes críticos são  $\nu = 1.01 \pm 0.02$ ,  $\beta = 0.125 \pm 0.001$  e  $\gamma = 1.74 \pm 0.01$ . . . . . 93
- 6.8 Gráficos da variância relativa (longe do ponto crítico, para  $T = 0.4$ ) contra o tamanho linear da rede  $L$ . (a) Variância relativa da magnetização  $m$ , (b) variância relativa da susceptibilidade  $\chi$ . . . . . 93
- 6.9 Gráficos da variância relativa (longe do ponto crítico, para  $T = 0.40$ ) contra o tamanho linear da rede  $L$ . (a) Variância relativa da energia  $E$ , (b) variância relativa do calor específico  $c$ . . . . . 94
- 6.10 Gráficos da variância relativa (no ponto crítico, para  $T = 0.708$ ) contra o tamanho linear da rede  $L$ . (a) Variância relativa da magnetização  $m$ , (b) variância relativa da susceptibilidade  $\chi$ . . . . . 95
- 6.11 Gráficos da variância relativa (no ponto crítico, para  $T = 0.708$ ) contra o tamanho linear da rede  $L$ . (a) Variância relativa da energia  $E$ , (b) variância relativa do calor específico  $c$ . . . . . 96

# Capítulo 1

## Introdução

Este capítulo é dedicado a uma breve introdução sobre alguns tópicos considerados importantes, e que serão constantemente mencionados durante toda esta tese. Definimos os modelos e apresentamos algumas motivações para o estudo dos mesmos. Apresentamos também algumas técnicas que serão empregadas no estudo de tais modelos.

### 1.1 Os modelos

#### 1.1.1 O modelo de Ising de spins mistos

Esta tese tem como objetivo principal estudar modelos de Ising de spins mistos do tipo  $\sigma = 1/2$  e  $S = 1$ , dispostos numa rede quadrada. Essa rede é dividida em duas outras sub-redes interpenetrantes, com os spins  $\sigma$  ocupando os sítios de uma sub-rede, enquanto que os spins  $S$  ocupam os sítios da outra sub-rede, cada uma das sub-redes contendo  $N$  sítios. As variáveis de spin  $\sigma$  podem assumir os valores  $\pm 1$  e as variáveis de spin  $S$  podem assumir os valores  $0, \pm 1$ . Uma representação esquemática dessa rede pode ser vista na figura 1.1.

Nos sistemas ferrimagnéticos, a existência de uma temperatura de compensação abaixo de sua temperatura crítica, onde as magnetizações das diferentes sub-redes envolvidas se cancelam, os torna potencialmente interessantes para diversas aplicações tecnológicas, especialmente aquelas que empregam mé-

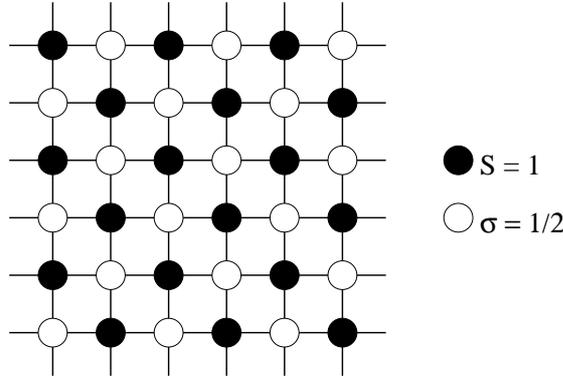


Figura 1.1: Representação esquemática de uma rede quadrada com spins mistos.

todos termo-magnéticos de gravação [1]. Este comportamento surge devido ao fato de que as diferentes magnetizações de sub-rede apresentam diferentes dependências com a temperatura. Um número importante de materiais ferrimagnéticos tem sido sintetizados nos últimos anos, tanto inorgânicos [2] quanto organometálicos [3]. Por exemplo, a liga  $Tb_xFe_{1-x}$  pode apresentar temperaturas de compensação que variam com a concentração ( $0.20 < x < 0.30$ ,  $100K < T_{comp} < 400K$ ) [4]. Um outro exemplo é o *Prussian blue analog* que apresenta duas temperaturas de compensação [5]. A estrutura cristalina dos materiais ferrimagnéticos reais é bastante complexa, e por isso, modelos de Ising de spins mistos, com spins de diferentes magnitudes, foram introduzidos na literatura com o objetivo de compreender o comportamento característico desses sistemas, como por exemplo, o aparecimento da chamada temperatura de compensação [6–10].

A inclusão de um termo de interação de campo cristalino faz com que o modelo de Ising de spins mistos apresente um diagrama de fases muito interessante, como por exemplo, o aparecimento de pontos tricríticos. Muitas técnicas teóricas de análise têm sido empregadas no estudo das propriedades magnéticas desses sistemas mistos, tais como: expansões em séries de altas temperaturas [11, 12], grupo de renormalização [13–15], teorias efetivas de campo médio [6, 16], cálculo da matriz de transferência e simulações de Monte Carlo [8, 17]. Alguns resultados exatos também foram obtidos para

este modelo, numa cadeia simples e em algumas estruturas bidimensionais de coordenação tripla. O modelo numa rede *honeycomb*, pode ser mapeado num modelo de Ising de spin-1/2 numa rede triangular, mas o diagrama de fases não apresenta nenhum ponto tricrítico [18, 19]. Recentemente, o diagrama de fases do modelo de Ising de spins mistos na presença de anisotropia aleatória foi estudado na aproximação de campo médio e através de cálculos autoconsistentes de Bethe-Peierls [20]. Em todos esses estudos, somente os estados de equilíbrio foram investigados.

### 1.1.2 Modelos desordenados

Modelos magnéticos desordenados têm sido muito estudados, tanto do ponto de vista teórico quanto experimental [21]. Dentre os modelos magnéticos desordenados mais estudados com certeza temos os vidros de spins [22] e o modelo de Ising num campo aleatório [23]. Os vidros de spins pertencem a uma classe muito interessante de sistemas desordenados, onde o conceito de frustração tem um papel fundamental; nesta tese vamos nos concentrar no caso mais simples de desordem não-frustrada.

No estudo destes sistemas é importante distinguir a desordem que ocorre nos estados de spin dos átomos, daquela que ocorre na distribuição espacial dos átomos na rede. Outro fato muito importante que devemos observar é se a distribuição dos átomos na rede é independente da temperatura. Tais sistemas são chamados de temperados (*quenched*). Estes sistemas podem representar uma liga binária magnética  $A_xB_{1-x}$ , que é resfriada rapidamente a partir de altas temperaturas, onde há total desordem espacial, para um estado onde os átomos  $A$  e  $B$  permanecem imóveis. Na figura 1.2 ilustramos uma configuração de tal sistema.

Um aspecto muito interessante observado nestes sistemas é que, apesar de cada realização da desordem diferir de amostra para amostra, medidas termodinâmicas devem ser independentes da amostra estudada. Segundo um argumento de Brout [24] uma determinada amostra de um sistema termodinâmico por ser muito grande, pode ser ainda dividida em um número muito grande de subamostras (o tamanho de cada uma delas sendo muito maior do

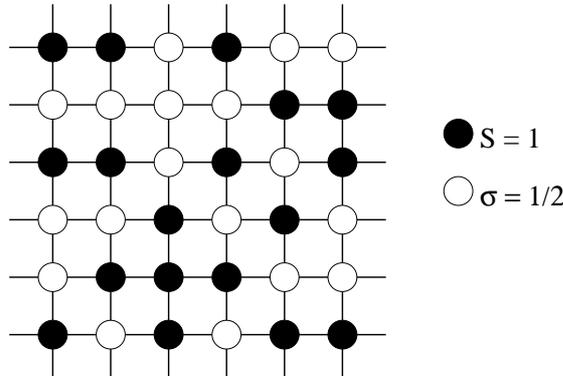


Figura 1.2: Representação esquemática de uma rede quadrada com spins mistos, distribuídos de forma aleatória na rede.

que o comprimento de correlação  $\xi$ ) cada uma delas contendo ainda um número muito grande de partículas. Se assumirmos que a interação entre subamostras mais próximas seja desprezível, então o valor de qualquer densidade de uma quantidade extensiva na amostra, deve ser igual à média dos valores desta mesma quantidade sobre todas as subamostras. Esta propriedade é conhecida como auto-mediação (*self-averaging*). Embora a auto-mediação pareça ser uma propriedade bastante geral de sistemas com desordem temperada, ela pode ser violada, especialmente quando a hipótese de que as subamostras sejam decorrelacionadas deixa de ser válida. Existem alguns sistemas onde isso foi de fato observado: sistemas de vidros de spins em sua fase ordenada [25] e sistemas magnéticos desordenados na criticalidade [26–28].

Um problema ainda bastante atual em mecânica estatística consiste em saber como o comportamento crítico de um sistema é afetado pela introdução de aleatoriedade em seus graus de liberdade. Nesta tese consideramos um modelo particularmente simples para estudar a questão da auto-mediação [29] das flutuações nos valores das quantidades termodinâmicas em um sistema finito, com desordem temperada, no equilíbrio. O problema da auto-mediação é de grande interesse no estudo de sistemas de spins com desordem temperada, porque cada amostra apresenta uma configuração diferente. Um sistema é dito ser auto-mediado se a variância relativa da média térmica das quantidades

termodinâmicas se anula quando o tamanho do sistema torna-se muito grande [28].

## 1.2 Sistemas fora do equilíbrio

Modelos de Ising cinéticos em uma rede têm sido empregados para descrever os estados estacionários fora do equilíbrio termodinâmico de uma grande variedade de problemas [30,31]. Com exceção da solução exata encontrada por Glauber para o modelo de Ising cinético em uma dimensão [32], a maioria dos estudos nesse campo utilizam métodos de simulações computacionais. A razão para isto reside na ausência de uma teoria completa referente aos fenômenos fora do equilíbrio termodinâmico, como temos para o caso de problemas considerados na mecânica estatística de equilíbrio. Uma das maiores dificuldades é o fato de não conhecermos *a priori* a distribuição de probabilidades no estado estacionário, ao contrário dos sistemas de equilíbrio, onde esta é dada pela distribuição de Gibbs.

Recentemente, introduzimos um modelo Ising de spins mistos  $\sigma = 1/2$  e  $S = 1$ , onde investigamos os seus estados estacionários, devido à competição entre dois processos estocásticos dinâmicos [33]. A evolução temporal dos estados do sistema é especificada pela natureza dos processos dinâmicos presentes: um deles, simula o contato do sistema com um banho térmico à temperatura  $T$ , enquanto que o outro está relacionado com a injeção de energia no sistema. A competição entre esses dois processos leva ao estabelecimento de estados estacionários com diferentes simetrias, conforme previsto inicialmente por Tomé e de Oliveira em um sistema de Ising ferromagnético [34]. Em nosso modelo ferromagnético aberto, o contato com o banho térmico é simulado pelo processo estocástico de Glauber [32], onde os spins de ambas as sub-redes relaxam através da mudança de um único spin por vez. Por outro lado, o fluxo de energia para o sistema é simulado por um processo que envolve a mudança simultânea de um par de spins vizinhos mais próximos na rede. Essa dinâmica é diferente da cinética de Kawasaki [35], porque no modelo que estudamos o parâmetro de ordem local não mais se conserva, já que as duas sub-redes não

são equivalentes.

Cada um dos processos dinâmicos em separado que consideramos satisfaz a condição de balanço detalhado, que leva o sistema para o equilíbrio. Entretanto, quando ambos atuam simultaneamente, o balanço detalhado não é mais satisfeito e o sistema é forçado a sair do equilíbrio. Neste modelo, ambas as dinâmicas não conservam o parâmetro de ordem. Tomé e de Oliveira consideraram um sistema de Ising ferromagnético dinâmico introduzindo dois processos dinâmicos competitivos: a dinâmica de Glauber com mudança de um único spin, e a dinâmica de Kawasaki para a troca de dois spins vizinhos mais próximos. Encontraram três tipos diferentes de ordenamento magnético em função do parâmetro de competição entre esses dois processos estocásticos: fases ferromagnética, paramagnética e antiferromagnética aparecem em seu diagrama de fases.

No modelo de Ising de spins mistos que estudamos também surgem três fases diferentes, e isto está relacionado ao fato de que a mudança de dois spins em ambos os modelos aumenta a energia do sistema. Entretanto, no trabalho de Tomé e de Oliveira [34] a dinâmica de Kawasaki, que representa a troca de dois spins vizinhos mais próximos na rede, conserva o parâmetro de ordem. Por outro lado, em nosso caso isto não acontece, porque as duas sub-redes não são equivalentes. O diagrama de fases e as propriedades críticas do modelo de Ising com dinâmicas de Glauber e Kawasaki competindo foram muito estudadas nos últimos anos e uma revisão pode ser encontrada na referência [36].

Através de cálculos de campo médio, a nível da aproximação de pares dinâmica, desacoplamos o conjunto de equações diferenciais gerado pela equação mestra [33]. Atribuímos um peso  $p$  para o processo dinâmico de Glauber, e um peso  $(1 - p)$  para o processo envolvendo a mudança de dois spins simultaneamente, o qual privilegia o aumento de energia do sistema. No caso mais simples de acoplamento ferromagnético entre as sub-redes, determinamos os estados estacionários do modelo em função da temperatura  $T$  e do parâmetro de competição  $p$ .

Construímos o diagrama de fases do modelo no plano temperatura  $T$  versus parâmetro  $p$  e observamos a presença de três fases diferentes: para valores

grandes de  $p$  ( $p \simeq 1$ ), pequeno fluxo de energia no sistema, obtivemos uma fase ordenada em que ambas as magnetizações de sub-rede estão na mesma direção. Aumentando-se o fluxo de energia, que corresponde a diminuir o valor do parâmetro  $p$ , a fase ordenada se torna instável para um dado valor crítico  $p_c$ , e o sistema passa para uma fase paramagnética em que ambas as magnetizações de sub-rede são nulas. Entretanto, quando o fluxo de energia se torna muito grande, que ocorre para valores muito pequenos de  $p$ , o sistema sofre uma nova transição de fase, para um valor crítico diferente de  $p$ . O sistema passa continuamente de uma fase desordenada para uma fase ordenada, em que as magnetizações de sub-rede estão alinhadas em sentidos opostos. De fato, o sistema volta a apresentar ordem de longo alcance, numa nova fase ordenada devido ao fluxo de energia. A fase ordenada que aparece apenas para grandes valores de  $p$  ocupa uma região muito pequena do diagrama de fases na aproximação de pares dinâmica.

## 1.3 Técnicas e aproximações

### 1.3.1 Equação Mestra

A equação mestra [37] governa a evolução temporal da probabilidade dos estados do sistema. Este nome se deve à sua vasta aplicabilidade em várias áreas da física. Sendo  $P(c, t)$  a probabilidade de se encontrar o sistema no estado  $c$  num dado instante de tempo  $t$ , a sua evolução temporal pode ser representada por um termo que descreve o fluxo para o estado  $c$ , e um segundo termo que descreve o fluxo que sai deste mesmo estado, ou seja,

$$\frac{d}{dt}P(c, t) = \sum_{c'} [\omega(c' \rightarrow c)P(c', t) - \omega(c \rightarrow c')P(c, t)] , \quad (1.1)$$

onde  $\omega(c' \rightarrow c)$  é interpretada como uma taxa de transição, ou seja, a probabilidade, por unidade de tempo, de que o sistema mude do estado  $c'$  para o estado  $c$  no intervalo de tempo  $\tau$ . A obtenção dessa taxa a partir de primeiros princípios é praticamente impossível. O estado estacionário é encontrado para

tempos muito longos, isto é,  $\lim_{t \rightarrow \infty} P(c, t) = P_{est.}(c)$ . Se o estado estacionário coincide com o estado de equilíbrio, podemos encontrar a taxa de transição pela imposição da condição de balanço detalhado (condição suficiente), onde cada termo da soma na eq. (1.1) deve satisfazer

$$\frac{\omega(c \rightarrow c')}{\omega(c' \rightarrow c)} = \frac{P_{eq}(c')}{P_{eq}(c)}, \quad (1.2)$$

onde  $P_{eq}(c')$  está relacionada à distribuição de equilíbrio de Gibbs, que depende da temperatura do banho térmico. Com essa escolha, que em geral não é única, temos a certeza de atingir um estado final de equilíbrio para tempos suficientemente grandes. Em geral, com exceção do modelo de Glauber em uma dimensão, o conjunto de equações diferenciais gerado pela equação mestra não é solúvel exatamente, sendo necessário o uso de aproximações.

### 1.3.2 Método de Monte Carlo

O método de simulação de Monte Carlo [37, 38] é uma técnica poderosa para se resolver vários problemas complexos em física. O método tem ganho muita importância e uma certa popularidade devido ao grande aumento na velocidade de processamento dos computadores atuais.

A determinação do valor médio de uma grandeza física  $Q$  (por exemplo, magnetização ou energia) em mecânica estatística, é feita através do cálculo da seguinte expressão:

$$\langle Q \rangle = \sum_i^M Q(c_i) P(c_i), \quad (1.3)$$

onde

$$P(c_i) = \frac{1}{Z} \exp \{-\beta E(c_i)\}, \quad (1.4)$$

e  $Z$  é a função de partição dada por

$$Z = \sum_i^M \exp \{-\beta E(c_i)\}, \quad (1.5)$$

sendo  $E(c_i)$  a energia na  $i$ -ésima configuração  $c_i$ , e  $\beta = 1/k_B T$ . A soma

acima deve ser feita sobre todas as configurações do sistema. Em geral, a sua realização é praticamente impossível devido à existência de um número muito grande de graus de liberdade. Por exemplo, no caso do modelo de Ising com  $N$  sítios, essa soma deve ser realizada sobre  $2^N$  configurações. Portanto, para  $N$  muito grande, torna-se impraticável usar a eq. (1.3) para efetuar esses cálculos numéricos. Logo, uma idéia para se contornar o problema, consiste em incluir na soma somente as configurações mais importantes do sistema, o que reduziria significativamente o número de termos no cálculo das médias. Nesse caso, desejamos transformar a eq. (1.3) numa simples média aritmética sobre  $M$  estados

$$\langle Q \rangle = \frac{1}{M} \sum_i^M Q(c_i) . \quad (1.6)$$

O problema ainda consiste em saber que procedimentos devemos tomar para determinar essa amostragem por importância das  $M$  configurações. Para responder a essas questões descrevemos o método de Monte Carlo que utiliza os algoritmos de Metropolis [39] e de Banho Térmico [38] para fornecer estas configurações.

### Algoritmo de Metropolis

A idéia do algoritmo de Metropolis consiste em gerar uma seqüência de configurações  $c_1, c_2, \dots, c_i, c_{i+1}, \dots, c_M$ , independentes, de tal forma que a configuração  $c_{i+1}$  seja gerada a partir de  $c_i$  através de uma probabilidade de transição por unidade de tempo  $\omega(c_i \rightarrow c_{i+1})$  previamente definida, constituindo assim uma cadeia de Markov. Muitas vezes é possível escolhermos uma probabilidade de transição  $\omega(c_i \rightarrow c'_i)$  tal que, após gerarmos um número muito grande de configurações através do processo de Markov, a função de distribuição das configurações  $P(c_i)$  tenda à distribuição de equilíbrio dada por

$$P_{eq}(c_i) = \frac{1}{Z} \exp \{ -\beta E(c_i) \} . \quad (1.7)$$

A condição suficiente para o equilíbrio é dada pelo princípio do balanço detalhado,

$$P_{eq}(c_i)\omega(c_i \rightarrow c'_i) = P_{eq}(c'_i)\omega(c'_i \rightarrow c_i) . \quad (1.8)$$

Portanto, as probabilidades de transição devem ser escolhidas de tal forma que

$$\frac{\omega(c_i \rightarrow c'_i)}{\omega(c'_i \rightarrow c_i)} = \exp \{-\beta\Delta E_i\} , \quad (1.9)$$

onde  $\Delta E_i$  é a diferença de energia entre as configurações  $c_i$  e  $c'_i$ .

A eq. (1.9) não fornece uma única solução para a probabilidade de transição  $\omega(c_i \rightarrow c'_i)$ . Uma condição apenas suficiente foi proposta por Metropolis e colaboradores [39], que apresentaram a seguinte prescrição para a probabilidade de transição:

$$\omega(c_i \rightarrow c'_i) = \begin{cases} 1, & \text{se } \Delta E_i \leq 0, \\ \exp(-\beta\Delta E_i) & \text{se } \Delta E_i > 0 . \end{cases} \quad (1.10)$$

O método de Monte Carlo pode ser implementado computacionalmente utilizando o algoritmo dado acima. Para isso, começamos com uma configuração qualquer  $c_i$ , e em seguida geramos uma nova configuração do sistema  $c'_i$ , e calculamos a variação de energia  $\Delta E = E(c'_i) - E(c_i)$ . Se a variação de energia for negativa, aceitamos a nova configuração do sistema, mas se ela for positiva, calculamos  $\exp(-\beta\Delta E_i)$  e geramos um número aleatório  $\xi$  distribuído no intervalo  $0 \leq \xi \leq 1$ . Se  $\xi \leq \exp(-\beta\Delta E_i)$  aceitamos a nova configuração do sistema, caso contrário a rejeitamos. Geralmente, as primeiras configurações são geradas longe do equilíbrio; logo devemos descartar essas configurações iniciais do sistema para estimar a média  $\langle Q \rangle$  de qualquer quantidade física. Este algoritmo será empregado nas simulações de Monte Carlo que serão desenvolvidas nos capítulos 3, 4 e 6.

### Algoritmo de Banho Térmico

Realizar simulações em sistemas com muitos estados por sítio da rede (ex. modelo de Potts) e em baixas temperaturas pode ser muito complicado. Para

isso, é necessário fazer uso de algoritmos mais eficientes, que nos leve mais rapidamente aos estados de equilíbrio. Por exemplo, para o modelo de Ising com somente dois estados por sítio, o algoritmo de Metropolis é o algoritmo mais eficiente [38]. Por outro lado, quando o número de estados aumenta, o algoritmo mais indicado é o algoritmo de banho térmico. Entretanto, em altas temperaturas, onde a probabilidade de se mudar o estado de um sítio é independente da vizinhança, os dois algoritmos são igualmente eficientes.

A cadeia de Markov é construída usando uma outra prescrição. A sua implementação pode ser feita da seguinte forma: primeiro construímos uma configuração inicial qualquer  $c_i$ . Depois, geramos uma nova configuração  $c'_i$ , onde mudamos o estado de uma partícula qualquer do sistema. Assim, independentemente do estado atual da partícula, a probabilidade por unidade de tempo de se aceitar essa mudança é dada por

$$\omega(c_i \rightarrow c'_i) = \frac{\exp[-\beta E(c'_i)]}{\sum_j^M \exp[-\beta E(c_j)]}, \quad (1.11)$$

onde a soma é feita sobre todos os  $M$  estados possíveis da partícula. Para saber qual a configuração que será aceita, devemos gerar um número aleatório e compará-lo com as probabilidades dos estados, eq. (1.11). Um ponto importante que devemos notar é que esta probabilidade não depende do estado inicial da partícula, mas somente do seu estado final, diferentemente do algoritmo de Metropolis. Usando a eq. (1.11) é fácil ver que a condição de balanço detalhado é satisfeita:

$$\begin{aligned} \frac{\omega(c_i \rightarrow c'_i)}{\omega(c'_i \rightarrow c_i)} &= \frac{\exp[-\beta E(c'_i)]}{\sum_j^M \exp[-\beta E(c_j)]} \times \frac{\sum_j^M \exp[-\beta E(c_j)]}{\exp[-\beta E(c_i)]} \\ &= \exp\{-\beta[E(c'_i) - E(c_i)]\}. \end{aligned} \quad (1.12)$$

Este algoritmo será empregado na simulação de Monte Carlo que será desenvolvida no capítulo 5.

### 1.3.3 Aproximação de campo médio

A aproximação de campo médio [40] é o cálculo mais simples que pode ser realizado como um estudo preliminar de sistemas mais complicados, e que pode servir de base para o uso de cálculos mais sofisticados. A idéia é simples e consiste em isolar um dado spin do sistema e assumir que todos os demais spins atuam como um campo médio que interage com o spin fixado. Essa aproximação exclui os efeitos de flutuações que se estendem fora do comprimento de escala associado com a célula fixada. O método inclui somente as flutuações que ocorrem na célula fixada, o que na realidade envolve somente um partícula. Com esse método reduzimos o problema de muitos corpos àquele de uma única partícula. Para sistemas próximos do ponto crítico, onde a cooperatividade nas flutuações se estendem até grandes distâncias, esse método é falho. Portanto, em altas temperaturas, onde se espera que não haja mais correlações entre os spins vizinhos mais próximos, esse método é interessante para descrever as propriedades termodinâmicas do sistema.

No capítulo 5, empregaremos a aproximação de campo médio baseada no princípio variacional de Peierls-Bogoliubov para encontrar a energia livre por partícula de um sistema de Ising de spins mistos.

### 1.3.4 Aproximação de pares

A aproximação de pares [37] é um nível mais elevado do que a aproximação de campo médio. Consiste em escrevermos uma probabilidade em termos das probabilidades de pares de spins vizinhos mais próximos independentemente dos valores assumidos pelos demais spins da rede. Nessa aproximação, são consideradas apenas as flutuações locais a nível do par de partículas negligenciando as correlações entre spins mais distantes. No capítulo 2 descreveremos a aproximação de pares, que também será empregada nos capítulos 3, 4 e 5.

## 1.4 Fenômenos críticos

A primeira tentativa de classificar as transições de fase foi realizada por Landau em 1937 [41], o qual relacionou as transições de fase a uma mudança de simetria associada ao parâmetro de ordem. As teorias mais modernas de transições de fase e fenômenos críticos datam da década de 60, quando surgiram os primeiros conceitos básicos acerca da universalidade e escala das funções termodinâmicas, bem como os primeiros cálculos associados ao grupo de renormalização [42]. Os fenômenos críticos ocorrem em geral nas vizinhanças de uma transição de fase contínua, onde o comprimento característico do sistema (comprimento de correlação) diverge. Os expoentes críticos associados a uma dada transição de fase caracterizam o comportamento singular de certas propriedades físicas do sistema tais como: magnetização, susceptibilidade, calor específico, etc. Estes estão geralmente agrupados em classes ditas universais, que dependem somente de características muito gerais dos sistemas, tais como a dimensionalidade, as simetrias do parâmetro de ordem e o alcance das interações.

As transições de fase estudadas no decorrer deste trabalho podem ser transições de fase de equilíbrio e de não equilíbrio. A diferença entre elas está diretamente relacionada ao tipo de dinâmica estocástica imposta ao sistema, ou seja, aquelas que obedecem, ou não, ao princípio do balanço detalhado.

## 1.5 Teoria de escala de tamanho finito

Na realização de simulações computacionais em modelos descritos em uma rede, é necessário analisar os resultados levando-se em conta o tamanho finito da rede. Para estudarmos o efeito de tamanho finito das redes nas simulações, usamos a teoria de escala de tamanho finito (*finite-size scaling*).

Em mecânica estatística de equilíbrio, as transições de fase ocorrem apenas no limite termodinâmico, ou seja, quando o volume  $V$  e o número de partículas  $N$  do sistema tendem ao infinito. No entanto, as simulações numéricas e os experimentos são realizados em sistemas finitos, nos levando a previsões e resultados muitas vezes dúbios. Fisher [43] na década de 70, introduziu um

método para avaliar o efeito de tamanho finito da rede que ficou conhecido como *finite-size scaling*. Ao aplicarmos essa teoria, tiramos partido das limitações dimensionais do sistema, para obter informações pertinentes ao limite termodinâmico partindo das propriedades correspondentes em sistemas finitos.

Analogamente, quando estudamos sistemas fora do equilíbrio termodinâmico através de simulações numéricas, observamos também o efeito de tamanho finito do sistema. Por isso, admitiremos que a teoria de escala de tamanho finito descrita para sistemas em equilíbrio seja aplicável também a sistemas fora do equilíbrio.

## 1.6 Universalidade

O termo universalidade será muito utilizado durante toda a tese, por isso é oportuno fazer aqui uma referência a ele. O conceito de universalidade é muito importante no estudo de transições de fases e fenômenos críticos. Diferentes sistemas com interações de curto alcance, e que possuem a mesma dimensionalidade espacial  $d$  e a mesma dimensionalidade do parâmetro de ordem  $D$ , apresentam os mesmos expoentes críticos no ponto de transição. Logo, se diz que esses sistemas estão na mesma classe de universalidade.

Segundo o que foi conjecturado por Grinstein, Jayaparakash e Yu He [44] todos os sistemas com dois estados por sítio, tanto no equilíbrio como fora dele, e que apresentam a simetria spin para cima spin para baixo (*up-down*) estão na mesma classe de universalidade.

Muitos sistemas de spins fora do equilíbrio têm sido estudados e verificada a qual classe de universalidade pertencem. Para os modelos com competição de dinâmicas, por exemplo, Glauber e Kawasaki, tem-se verificado que seus expoentes críticos estão de acordo com os expoentes do modelo de Ising em equilíbrio. Outros modelos bidimensionais de não equilíbrio foram também estudados, principalmente quando sujeitos a taxas de transição que não obedecem ao princípio da reversibilidade microscópica, apresentando assim um comportamento universal de Ising [45].

Em sistemas desordenados o estabelecimento de uma classe de universa-

lidade ainda não está bem definido. O critério de Harris [46] estabelece que a classe de universalidade será (ou não será) a mesma do sistema puro se o expoente  $\alpha$  da singularidade do calor específico do sistema puro for negativo (positivo).

## Capítulo 2

# O modelo de Ising de spins mistos fora do equilíbrio

### 2.1 Introdução

Neste capítulo definimos o modelo de Ising de spins mistos  $\sigma = 1/2$  e  $S = 1$ , fora do equilíbrio termodinâmico. Através da aplicação do formalismo da equação mestra encontramos um conjunto de equações de movimento para os estados do sistema. A evolução temporal dos estados do sistema é governada por dois processos dinâmicos competitivos: um simulando o contato do sistema com um banho térmico numa temperatura fixa  $T$ , e o outro simulando um fluxo de energia para o sistema. Em nosso sistema aberto de spins, o contato do sistema com o banho térmico é simulado pelo processo estocástico de Glauber [32], onde ambos os spins  $\sigma$  e  $S$  relaxam através da mudança dos spins, um por vez em cada unidade de tempo. O fluxo de energia para o sistema favorece os estados de mais alta energia, gerando uma competição com o processo de Glauber de mudança de um único spin por vez. O aumento na energia dos estados é obtido quando mudamos simultaneamente um par de spins vizinhos mais próximos  $\sigma$  e  $S$ . Atribuímos um peso  $p$  para o processo de Glauber de mudança de um único spin, e um peso  $(1 - p)$  para o processo de mudança simultânea de dois spins, que gera um aumento na energia do sistema.

Usamos a aproximação de pares dinâmica para desacoplar a hierarquia de

equações de movimento que encontramos pela aplicação da equação mestra. Encontramos os estados estacionários do modelo em função da temperatura  $T$  e do parâmetro de competição  $p$ , que promove a competição entre os dois processos dinâmicos. Na próxima seção descrevemos o modelo e derivamos as equações de movimento para as magnetizações de sub-rede e funções de correlação de interesse. Na seção 2.3, aplicamos a aproximação de pares para desacoplar as equações de movimento e determinar os valores médios das grandezas.

## 2.2 O modelo e as equações de movimento

Consideramos um modelo de Ising de spins mistos em uma rede quadrada com spins  $\sigma = 1/2$  e  $S = 1$ . A rede é dividida em duas sub-redes interpenetrantes, com os spins  $\sigma$  ocupando os sítios de uma sub-rede, enquanto que os spins  $S$  ocupam os sítios da outra sub-rede, e cada uma das sub-redes contém  $N$  sítios. Um estado do sistema é representado por  $(\sigma, S) \equiv (\sigma_1, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_N; S_1, \dots, S_j, \dots, S_N)$ , onde as variáveis de spin  $\sigma_i$  podem assumir os valores  $\pm 1$  e as variáveis de spin  $S_j$  podem assumir os valores  $0, \pm 1$ . A energia do sistema no estado  $(\sigma, S)$  é dada por

$$E(\sigma, S) = -J \sum_{(i,j)} \sigma_i S_j, \quad (2.1)$$

onde a soma é realizada sobre todos os pares de spins primeiros vizinhos da rede e  $J > 0$  é a interação de acoplamento entre os spins. Chamamos de  $P(\sigma, S; t)$  a probabilidade de se encontrar o sistema no estado  $(\sigma, S)$  no instante  $t$ . A equação de movimento para a probabilidade dos estados do sistema é dada pela equação mestra [37]

$$\frac{d}{dt} P(\sigma, S; t) = \sum_{\sigma', S'} [W(\sigma', S' \rightarrow \sigma, S) P(\sigma', S'; t) - W(\sigma, S \rightarrow \sigma', S') P(\sigma, S; t)], \quad (2.2)$$

onde  $W(\sigma, S \rightarrow \sigma', S')$  é a probabilidade, por unidade de tempo, para a transição do estado  $(\sigma, S)$  para o estado  $(\sigma', S')$ . Neste modelo, assumimos que a taxa de transição  $W(\sigma, S \rightarrow \sigma', S')$  é devido à competição entre dois processos estocásticos independentes: o processo de Glauber de mudança de um único spin, que descreve a relaxação dos spins  $\sigma$  e  $S$  devido ao contato com o banho térmico na temperatura  $T$ , e que podemos escrever na forma

$$W_G(\sigma, S \rightarrow \sigma', S') = W_G(\sigma, S \rightarrow \sigma', S) + W_G(\sigma, S \rightarrow \sigma, S'), \quad (2.3)$$

e o processo de mudança simultânea de um par de spins vizinhos mais próximos, independente da temperatura, e que está associado ao aumento de energia do sistema, que pode ser escrito como  $W_{GD}(\sigma, S \rightarrow \sigma', S')$ . Então, temos a seguinte equação para a probabilidade de transição total:

$$W(\sigma, S \rightarrow \sigma', S') = pW_G(\sigma, S \rightarrow \sigma', S') + (1-p)W_{GD}(\sigma, S \rightarrow \sigma', S'), \quad (2.4)$$

onde  $0 < p < 1$  é o parâmetro de competição entre o processo de mudança de um e dois spins. O processo de mudança de um spin é descrito pela dinâmica de Glauber,

$$\begin{aligned} W_G(\sigma, S \rightarrow \sigma', S') &= \sum_{i=1}^N \delta_{\sigma_1, \sigma'_1} \delta_{\sigma_2, \sigma'_2} \cdots \delta_{\sigma_i, -\sigma'_i} \cdots \delta_{\sigma_N, \sigma'_N} \\ &\quad \times \delta_{S_1, S'_1} \delta_{S_2, S'_2} \cdots \delta_{S_j, S'_j} \cdots \delta_{S_N, S'_N} \omega_i(\sigma') \\ &\quad + \sum_{j=1}^N \delta_{\sigma_1, \sigma'_1} \delta_{\sigma_2, \sigma'_2} \cdots \delta_{\sigma_i, \sigma'_i} \cdots \delta_{\sigma_N, \sigma'_N} \\ &\quad \times \delta_{S_1, S'_1} \delta_{S_2, S'_2} \cdots \delta_{S_j, \tilde{S}_j} \cdots \delta_{S_N, S'_N} \omega_j(\tilde{S}), \end{aligned} \quad (2.5)$$

onde  $\omega_i(\sigma)$  e  $\omega_j(S)$  são as probabilidades de mudança dos spins  $\sigma_i$  e  $S_j$ , respectivamente. Usamos a variável  $\tilde{S}_j$  para representar os dois possíveis valores que uma mudança do spin atual  $S_j$  possa ter. Adotamos a prescrição de Metropolis

para esse tipo de transição,

$$\omega_i(\sigma) = \min[1, \exp(-\beta\Delta E_i)] , \quad (2.6)$$

onde  $\beta = 1/k_B T$ , e  $T$  é a temperatura absoluta do banho térmico.  $\Delta E_i$  é a variação na energia depois que o spin  $\sigma_i$  no sítio  $i$ , é mudado. Assumimos também uma expressão similar para  $\omega_j(S)$ .

Para a mudança de dois spins podemos escrever

$$W_{GD}(\sigma, S \rightarrow \sigma', S') = \sum_{i,j=1}^N \delta_{\sigma_1, \sigma'_1} \delta_{\sigma_2, \sigma'_2} \cdots \delta_{\sigma_i, -\sigma'_i} \cdots \delta_{\sigma_N, \sigma'_N} \\ \times \delta_{S_1, S'_1} \delta_{S_2, S'_2} \cdots \delta_{S_j, \tilde{S}_j} \cdots \delta_{S_N, S'_N} \omega_{ij}(\sigma', S') , \quad (2.7)$$

onde  $\omega_{ij}(\sigma, S)$  é a probabilidade de uma mudança simultânea de um par de spins vizinhos mais próximos  $\sigma_i$  e  $S_j$ . Este processo favorece o aumento na energia do sistema, e é escrito como

$$\omega_{ij}(\sigma, S) = \begin{cases} 0 & \text{se } \Delta E_{ij} \leq 0 \\ 1 & \text{se } \Delta E_{ij} > 0 \end{cases} , \quad (2.8)$$

onde  $\Delta E_{ij}$  é a variação na energia depois da mudança dos spins  $\sigma_i$  e  $S_j$ , nos sítios vizinhos  $i$  e  $j$ .

Vamos definir o valor médio de uma função do estado  $A(\sigma, S)$  como

$$\langle A(\sigma, S) \rangle = \sum_{\sigma, S} A(\sigma, S) p(\sigma, S; t) , \quad (2.9)$$

onde a soma é feita sobre todas as possíveis configurações de spins  $\sigma$  e  $S$ . Se, por exemplo,  $A(\sigma, S) = \sigma_i$ , obtemos a magnetização da sub-rede  $\sigma$ . Por outro lado, se  $A(\sigma, S) = S_j$ , obtemos a magnetização da sub-rede  $S$ . Desta forma, podemos escrever o conjunto de equações:

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_i \rangle = pA_i + (1-p)D_i , \quad (2.10)$$

$$\frac{d}{dt} \langle S_j \rangle = pB_j + (1-p)E_j , \quad (2.11)$$

onde

$$A_i = -2 \langle \sigma_i \omega_i(\sigma) \rangle , \quad (2.12)$$

$$B_j = \left\langle (\tilde{S}_j - S_j) \omega_j(S) \right\rangle , \quad (2.13)$$

$$D_i = -2 \sum_{\substack{k \\ (PV \text{ de } i)}} \langle \sigma_i \omega_{ik}(\sigma, S) \rangle , \quad (2.14)$$

$$E_j = \sum_{\substack{m \\ (PV \text{ de } j)}} \left\langle (\tilde{S}_j - S_j) \omega_{jm}(\sigma, S) \right\rangle , \quad (2.15)$$

onde  $(PV \text{ de } i)$  significa que a soma é desenvolvida sobre todos os spins primeiros vizinhos do sítio  $i$  de uma dada sub-rede. Para a função de correlação entre os spins primeiros vizinhos nas sub-redes  $\sigma$  e  $S$ , ou seja,  $A(\sigma, S) = \sigma_i S_j$ , podemos escrever

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_i S_j \rangle = pA_{ij} + (1-p)D_{ij} , \quad (2.16)$$

onde

$$A_{ij} = -2 \langle \sigma_i S_j \omega_i(\sigma) \rangle + \left\langle \sigma_i (\tilde{S}_j - S_j) \omega_j(S) \right\rangle , \quad (2.17)$$

$$\begin{aligned} D_{ij} = & - \left\langle \sigma_i (\tilde{S}_j + S_j) \omega_{ij}(\sigma, S) \right\rangle \\ & + \sum_{\substack{m \neq i \\ (PV \text{ de } j)}} \left\langle \sigma_i (\tilde{S}_j - S_j) \omega_{mj}(\sigma, S) \right\rangle \\ & - 2 \sum_{\substack{k \neq j \\ (PV \text{ de } i)}} \langle \sigma_i S_j \omega_{ik}(\sigma, S) \rangle . \end{aligned} \quad (2.18)$$

As equações de movimento para as magnetizações de sub-rede  $\langle \sigma_i \rangle$  e  $\langle S_j \rangle$ , e para a função de correlação  $\langle \sigma_i S_j \rangle$  foram obtidas de forma exata. Infelizmente, não conhecemos uma expressão exata para a distribuição de probabilidade dos estados. Necessitamos empregar algum esquema de aproximação para desacoplar o conjunto de equações obtido acima. Aqui aplicaremos a aproximação de pares que é a aproximação mais simples para este problema. Notemos que

a aproximação de campo médio a nível de um sítio não é adequada, pois a dinâmica pressupõe a mudança simultânea de um par de spins vizinhos.

## 2.3 Aproximação de pares

Considerando a aplicação da aproximação de pares a este problema de spins mistos, um conjunto de equações auto-consistentes não é obtido imediatamente, porque aparecem também correlações do tipo  $\langle S_j^2 \rangle$  e  $\langle \sigma_i S_j^2 \rangle$ . Não é difícil de se verificar isto, se considerarmos a seguinte identidade para a probabilidade de um par de spins  $\sigma$  e  $S$ :

$$p(\sigma, S; t) = \sum_{\sigma', S'} \delta_{\sigma, \sigma'} \delta_{S, S'} p(\sigma', S'; t), \quad (2.19)$$

onde

$$\delta_{\sigma, \sigma'} = \frac{1}{2} (1 + \sigma \sigma'), \quad (2.20)$$

e

$$\delta_{S, S'} = 1 - (S^2 + S'^2) + \frac{1}{2} S S' + \frac{3}{2} (S S')^2. \quad (2.21)$$

Logo, a expressão para a probabilidade do par  $(\sigma, S)$  no instante  $t$ , pode ser escrita como

$$\begin{aligned} p(\sigma, S; t) = & \frac{1}{2} \left[ 1 + \sigma \langle \sigma(t) \rangle + \frac{1}{2} S \langle S(t) \rangle - S^2 - \langle S^2(t) \rangle \right. \\ & + \frac{3}{2} S^2 \langle S^2(t) \rangle + \frac{1}{2} \sigma S \langle \sigma(t) S(t) \rangle - \sigma S^2 \langle \sigma(t) \rangle \\ & \left. - \sigma \langle \sigma(t) S^2(t) \rangle + \frac{3}{2} \sigma S^2 \langle \sigma(t) S^2(t) \rangle \right]. \quad (2.22) \end{aligned}$$

Como podemos ver na eq. (2.22) além dos termos  $\langle \sigma \rangle$ ,  $\langle S \rangle$  e  $\langle \sigma S \rangle$ , aparecem outros tipos de correlações. Portanto, antes de proseguirmos com os cálculos, vamos escrever as equações de movimento para as outras correlações, ou seja, as equações para  $\langle S_j^2 \rangle$  e  $\langle \sigma_i S_j^2 \rangle$ , ou seja,

$$\frac{d}{dt} \langle S_j^2 \rangle = p C_j + (1 - p) F_j, \quad (2.23)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_i S_j^2 \rangle = p B_{ij} + (1 - p) E_{ij} , \quad (2.24)$$

onde

$$C_j = \left\langle (\tilde{S}_j^2 - S_j^2) \omega_j(S) \right\rangle , \quad (2.25)$$

$$F_j = \sum_{\substack{m \\ (PV \text{ de } j)}} \left\langle (\tilde{S}_j^2 - S_j^2) \omega_{jm}(\sigma, S) \right\rangle , \quad (2.26)$$

$$B_{ij} = -2 \langle \sigma_i S_j^2 \omega_i(\sigma) \rangle + \left\langle \sigma_i (\tilde{S}_j^2 - S_j^2) \omega_j(S) \right\rangle , \quad (2.27)$$

$$\begin{aligned} E_{ij} = & - \left\langle \sigma_i (\tilde{S}_j^2 + S_j^2) \omega_{ij}(\sigma, S) \right\rangle \\ & + \sum_{\substack{m \neq i \\ (PV \text{ de } j)}} \left\langle \sigma_i (\tilde{S}_j^2 - S_j^2) \omega_{jm}(\sigma, S) \right\rangle \\ & - 2 \sum_{\substack{k \neq j \\ (PV \text{ de } i)}} \left\langle \sigma_i S_j^2 \omega_{ik}(\sigma, S) \right\rangle . \end{aligned} \quad (2.28)$$

Agora, procuramos por soluções tais que  $m_1 = \langle \sigma_i \rangle$ , para qualquer spin pertencente à sub-rede  $\sigma$ , e  $m_2 = \langle S_j \rangle$ , para qualquer spin pertencente à sub-rede  $S$ . Definimos também as funções de correlação  $r = \langle \sigma_i S_j \rangle$ ,  $q = \langle S_j^2 \rangle$  e  $q_1 = \langle \sigma_i S_j^2 \rangle$ . Desta forma, podemos escrever as seguintes expressões para as probabilidades de um e de dois spins:

$$p_1(\sigma_1) = \frac{1}{2}(1 + \sigma_1 m_1) , \quad (2.29)$$

$$p_2(S_2) = 1 + \frac{1}{2} S_2 m_2 - S_2^2 - \left(1 - \frac{3}{2} S_2^2\right) q , \quad (2.30)$$

$$\begin{aligned} p_{12}(\sigma_1, S_2) = & \frac{1}{2} \left[ 1 + \sigma_1 m_1 + \frac{1}{2} S_2 m_2 - S_2^2 - \left(1 - \frac{3}{2} S_2^2\right) q \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \sigma_1 S_2 r - \sigma_1 S_2^2 m_1 - \sigma_1 \left(1 - \frac{3}{2} S_2^2\right) q_1 \right] , \end{aligned} \quad (2.31)$$

onde  $\sigma_1$  e  $S_2$  são spins primeiros vizinhos pertencentes às sub-redes  $\sigma$  e  $S$ ,

respectivamente. Para encontrar os valores médios de interesse, necessitamos considerar três tipos diferentes de aglomerados para a rede quadrada:

O aglomerado  $A$  (ver figura 2.1) é composto de um spin central de uma dada sub-rede, rodeado por quatro spins da outra sub-rede. As probabilidades para esses aglomerados são

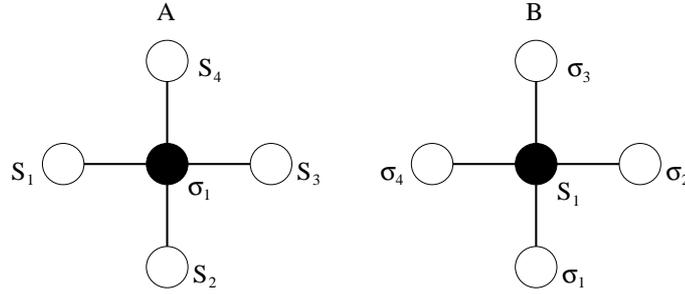


Figura 2.1: Representação esquemática de aglomerados com um spin central e seus respectivos primeiros vizinhos usados na aproximação de pares dinâmica.

$$p_A = p_1(\sigma_1) \prod_{(PV \text{ de } 1)}^i \frac{p_{12}(\sigma_1, S_i)}{p_1(\sigma_1)}, \quad (2.32)$$

$$p_B = p_2(S_1) \prod_{(PV \text{ de } 1)}^l \frac{p_{12}(\sigma_l, S_1)}{p_2(S_1)}. \quad (2.33)$$

Um terceiro aglomerado, aglomerado  $C$  (ver figura 2.2), é construído por um par de spins primeiros vizinhos  $\sigma_1$ , pertencente à sub-rede  $\sigma$  e  $S_2$  pertencente à sub-rede  $S$ , e seus respectivos primeiros vizinhos. Na aproximação de pares, a probabilidade deste aglomerado é dada por

$$p_C = p_{12}(\sigma_1, S_2) \prod_{(PV \text{ de } 1)}^{i \neq 2} \frac{p_{12}(\sigma_1, S_i)}{p_1(\sigma_1)} \prod_{(PV \text{ de } 2)}^{l \neq 1} \frac{p_{12}(\sigma_l, S_2)}{p_2(S_2)}. \quad (2.34)$$

Depois de algumas manipulações algébricas, finalmente chegamos ao seguinte conjunto de equações para a evolução temporal das magnetizações de sub-rede e funções de correlação:

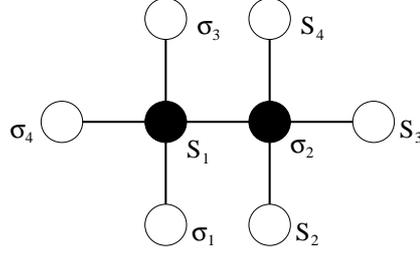


Figura 2.2: Representação esquemática de um aglomerado do tipo  $C$ , com spins centrais  $\sigma_1$  e  $S_2$ , e seus respectivos spins primeiros vizinhos.

$$\frac{d}{dt}m_1 = pA_1(m_1, m_2, r, q, q_1, T) + (1 - p)D_1(m_1, m_2, r, q, q_1, T) , \quad (2.35)$$

$$\frac{d}{dt}m_2 = pB_2(m_1, m_2, r, q, q_1, T) + (1 - p)E_2(m_1, m_2, r, q, q_1, T) , \quad (2.36)$$

$$\frac{d}{dt}q = pC_2(m_1, m_2, r, q, q_1, T) + (1 - p)F_2(m_1, m_2, r, q, q_1, T) , \quad (2.37)$$

$$\frac{d}{dt}r = pA_{12}(m_1, m_2, r, q, q_1, T) + (1 - p)D_{12}(m_1, m_2, r, q, q_1, T) , \quad (2.38)$$

$$\frac{d}{dt}q_1 = pB_{12}(m_1, m_2, r, q, q_1, T) + (1 - p)E_{12}(m_1, m_2, r, q, q_1, T) . \quad (2.39)$$

As expressões que aparecem do lado direito da eqs. (2.35)-(2.39) são bastante grandes, por isso não as apresentaremos explicitamente [47] aqui. A solução desse sistema de equações leva ao diagrama de fases [33] representado na figura 3.1 do próximo capítulo, onde comparamos os resultados da aproximação de pares com aqueles das simulações de Monte Carlo.

## Capítulo 3

# Simulações de Monte Carlo no modelo de Ising de spins mistos ferromagnético

### 3.1 Introdução

Consideramos um modelo particularmente simples de um sistema fora do equilíbrio termodinâmico, como o descrito no capítulo anterior. O modelo se refere a um sistema de Ising com variáveis de spin  $\sigma = 1/2$  e  $S = 1$  em diferentes sub-redes de uma rede quadrada, e com acoplamento ferromagnético. Este modelo já foi estudado na aproximação de pares no capítulo anterior, e determinamos o seu diagrama de fases no plano  $T - p$ . Encontramos duas linhas de transição contínuas: uma linha separando a fase ordenada onde as magnetizações de sub-rede são ambas diferentes de zero e apontam no mesmo sentido, de uma fase onde as magnetizações de sub-rede são ambas nulas (fase paramagnética), e uma outra linha separando a fase paramagnética de uma fase ordenada onde as magnetizações de sub-rede estão alinhadas em direções opostas. Na aproximação de pares, quase que a metade da área do diagrama de fases é ocupada pela fase paramagnética, a outra metade sendo ocupada pela fase com magnetizações opostas. A fase ordenada com ambas as magnetizações positivas ocupa uma região muito pequena do diagrama de fases.

Neste capítulo usamos as simulações de Monte Carlo e argumentos de escala de tamanho finito [48] para determinar as transições de fase e os expoentes críticos estáticos do modelo. Determinamos também o diagrama de fases do modelo no plano temperatura  $T$  versus parâmetro de competição  $p$ , e também notamos a presença de três fases diferentes: para  $p \simeq 1$  (pequeno fluxo de energia) obtemos uma fase ordenada onde as magnetizações de sub-rede são ambas positivas. Aumentando-se o fluxo de energia, a fase ordenada torna-se instável, aparecendo uma fase desordenada (fase paramagnética). Para valores grandes do fluxo de energia  $p \simeq 0$ , observamos a presença de uma nova fase ordenada, em que a simetria é diferente daquela encontrada para valores grandes de  $p$ .

Determinamos ainda os expoentes críticos  $\nu$ ,  $\beta$  e  $\gamma$  ao longo das linhas de transição contínua, e mostramos que o modelo de Ising de spins mistos está na mesma classe de universalidade do modelo de Ising em equilíbrio. O restante deste capítulo está organizado da seguinte forma: na seção 3.2 descrevemos o modelo de Ising de spins mistos e fornecemos alguns detalhes referentes às simulações de Monte Carlo. Na seção 3.3, apresentamos os resultados das simulações, o diagrama de fases e os expoentes críticos estáticos do modelo.

## 3.2 Simulações de Monte Carlo

Usamos a técnica de amostragem por importância para simular o modelo descrito no capítulo 2. A energia do sistema é dada por

$$E(\sigma, S) = -J \sum_{(i,j)} \sigma_i S_j, \quad (3.1)$$

com interação ferromagnética entre os spins primeiros vizinhos, ou seja,  $J > 0$ . A evolução temporal de  $P(\sigma, S; t)$ , a probabilidade de se encontrar o sistema no estado  $(\sigma, S)$  no instante  $t$ , é dada pela equação mestra (2.2), onde a competição entre as duas dinâmicas é expressa por (2.4). A probabilidade, por unidade de tempo, de se mudar um único spin  $\sigma$  ou  $S$  é dada pela prescrição de Metropolis (2.6), e a probabilidade, por unidade de tempo, de se mudar

simultaneamente um par de spins vizinhos mais próximos  $\sigma$  e  $S$  é dada por (2.8).

Para simular esse modelo consideramos uma rede quadrada de tamanho linear  $L$ , com valores de  $L$  no intervalo desde  $L = 16$  até  $L = 128$ , e aplicamos condições periódicas de contorno. Escolhemos configurações de spins completamente aleatórias como estado inicial de nossas simulações. Uma nova configuração é gerada a partir de uma anterior pelo seguinte processo de Markov: para uma dada temperatura  $T$  e um valor selecionado do parâmetro de competição  $p$ , escolhemos um spin aleatoriamente na rede, e então geramos um número aleatório  $\xi$  entre zero e um. Se  $\xi \leq p$  consideramos o processo de mudança de um spin, segundo a prescrição de Metropolis dada por (2.6). Se  $\xi > p$ , então consideramos o processo de mudança simultânea de um par de spins vizinhos mais próximos. Neste caso selecionamos um novo spin, vizinho mais próximo do spin escolhido inicialmente, e então aplicamos a prescrição dada por (2.8). Em geral, descartamos os primeiros  $5 \times 10^4$  MCs (passos de Monte Carlo) após atingirmos o regime estacionário para todos os tamanhos de rede. Para estimarmos as quantidades de interesse, consideramos os próximos  $4 \times 10^5$  MCs para calcular as médias para qualquer tamanho de rede. Um MCs é igual a  $L^2$  tentativas de mudança de um ou dois spins.

Calculamos as magnetizações de sub-rede por spin,  $m_1$  e  $m_2$ , definidas por

$$m_1 = \frac{1}{N} \left\langle \sum_i S_i \right\rangle, \quad (3.2)$$

e

$$m_2 = \frac{1}{N} \left\langle \sum_j \sigma_j \right\rangle. \quad (3.3)$$

Definimos também as magnetizações total e alternada, respectivamente, por

$$m^F = \frac{1}{2} |(m_1 + m_2)|, \quad (3.4)$$

e

$$m^{AF} = \frac{1}{2} |(m_1 - m_2)|, \quad (3.5)$$

e seus respectivos cumulantes de Binder de quarta ordem [48]

$$U_L(m) = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3 \langle m^2 \rangle^2} . \quad (3.6)$$

As susceptibilidades por spin correspondentes são definidas por

$$\chi(m) = N \{ \langle m^2 \rangle - \langle |m| \rangle^2 \} , \quad (3.7)$$

onde  $m$  pode ser  $m^F$  ou  $m^{AF}$ .

As quantidades definidas acima obedecem às seguintes relações de escala de tamanho finito nas vizinhanças do ponto crítico estacionário  $p_c$ :

$$m_L(p) = L^{-\beta/\nu} m_0(L^{1/\nu} \varepsilon) , \quad (3.8)$$

$$\chi_L(p) = L^{\gamma/\nu} \chi_0(L^{1/\nu} \varepsilon) , \quad (3.9)$$

$$U_L(p) = U_0(L^{1/\nu} \varepsilon) , \quad (3.10)$$

onde  $\varepsilon = (p - p_c)/p_c$ ,  $p_c$  é o parâmetro de competição crítico para cada valor de  $T$ .

A derivada de (3.10) com relação ao parâmetro de competição  $p$  nos dá a seguinte relação de escala:

$$U'_L(p) = L^{1/\nu} \frac{U'_0(L^{1/\nu} \varepsilon)}{p_c} . \quad (3.11)$$

Assim, no ponto crítico,

$$U'_L(p_c) = L^{1/\nu} \frac{U'_0(0)}{p_c} , \quad (3.12)$$

e podemos determinar o expoente crítico  $\nu$  do gráfico log-log de  $U'_L(p_c)$  versus  $L$ .

### 3.3 Resultados

Na figura 3.1 mostramos o diagrama de fases do modelo no plano  $T-p$ . Ele apresenta três fases diferentes, separadas por duas linhas de transições contínuas: uma linha separando uma fase ordenada (F), onde as magnetizações de sub-rede são ambas positivas, de uma fase desordenada, paramagnética (P), onde ambas as magnetizações de sub-rede são nulas. A outra linha separa a fase paramagnética de uma nova fase ordenada (AF), onde as magnetizações de sub-rede estão alinhadas em sentidos opostos. Como podemos ver, a fase paramagnética ocupa quase toda a região do diagrama de fases. Colocamos também na figura 3.1, a título de comparação, os resultados obtidos resolvendo-se as equações de movimento encontradas no capítulo anterior usando a aproximação de pares [33], e que são representados pelas linhas pontilhadas.

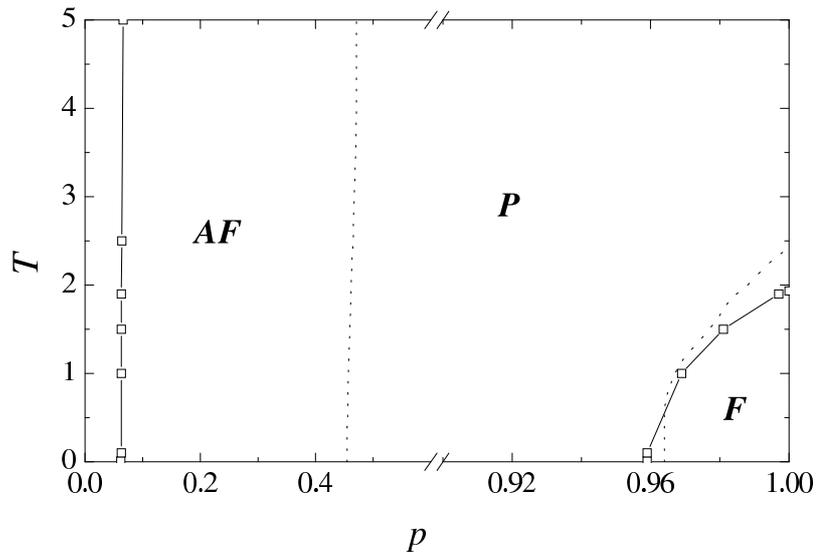


Figura 3.1: Diagrama de fases do modelo de Ising de spins mistos fora do equilíbrio termodinâmico no plano  $T-p$ . As letras denotam as fases ordenadas F e AF, e a fase paramagnética P. As linhas com símbolos quadrados são os resultados das simulações, enquanto que as linhas pontilhadas representam os cálculos na aproximação de pares dinâmica.

Nesta aproximação a fase ordenada AF ocupa uma área do diagrama de fases tão grande quanto a ocupada pela fase paramagnética. Por outro lado,

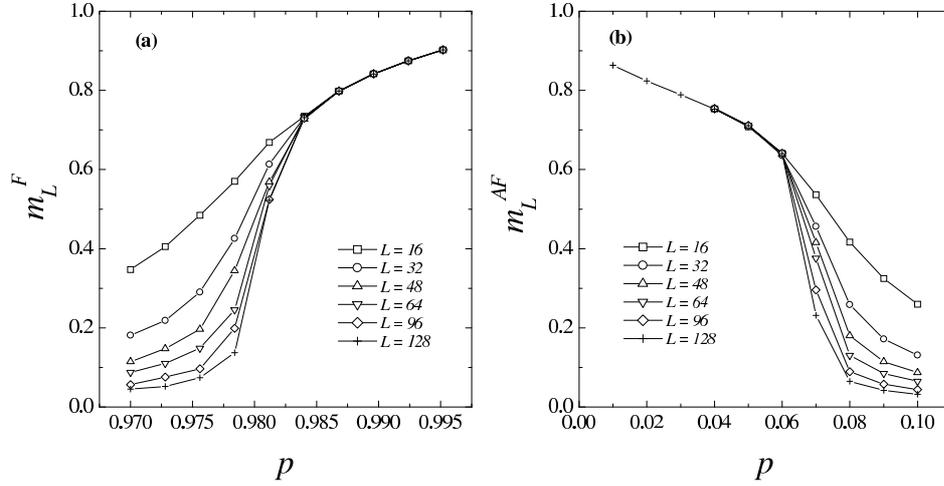


Figura 3.2: Comportamento do parâmetro de ordem em função da razão de competição  $p$  para vários tamanhos de rede  $L$  como indicado nas figuras. (a) Magnetização total  $m^F$  para  $T = 1.5$ . (b) Magnetização alternada  $m^{AF}$  para  $T = 2.0$ .

em ambos os cálculos a fase F ocupa uma área muito pequena do diagrama de fases. Para o caso particular  $p = 1$ , onde somente a mudança de um único spin é permitida, o estado estacionário coincide com o estado de equilíbrio termodinâmico, porque não há um fluxo de energia para o sistema. Se  $p = 1$ , a temperatura de transição entre a fase ordenada F e a fase paramagnética P nas simulações é  $T_c = 1.934 \pm 0.007$ . Este valor foi determinado pelo cruzamento dos cumulantes para diferentes tamanhos de rede, como veremos mais adiante. Na aproximação de pares dinâmica encontramos  $T_c = 2.4544$ .

O parâmetro de ordem da fase F é  $m^F$ , e aquele associado à fase ordenada AF é  $m^{AF}$ . Estes parâmetros vão continuamente a zero nas linhas de transição. As figuras 3.2 (a) e 3.2 (b) mostram o comportamento dos parâmetros de ordem  $m^F$  e  $m^{AF}$ , respectivamente, em função de  $p$ , para vários tamanhos de rede, e para uma temperatura fixa. A figura 3.2 (a) indica que o parâmetro de ordem  $m^F$  é próximo de 1 para  $p > p_c$  e vai a zero para  $p < p_c$ , exceto devido aos efeitos de tamanho finito. O mesmo comportamento também é observado para o parâmetro de ordem  $m^{AF}$  quando cruzamos o ponto de transição (figura 3.2 (b)).

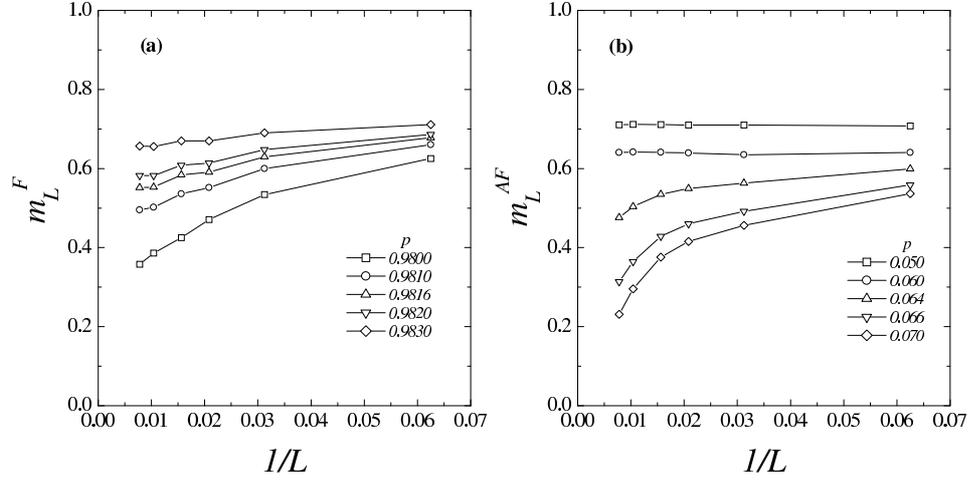


Figura 3.3: Magnetização em função de  $1/L$  para vários tamanhos de rede  $L$  como indicado nas figuras. (a) Para a magnetização total  $m^F$  em  $T = 1.5$ , a transição aparece no intervalo  $0.9810 \leq p \leq 0.9820$ . (b) Para a magnetização alternada  $m^{AF}$  em  $T = 2.0$ , a transição está localizada no intervalo  $0.060 \leq p \leq 0.066$ .

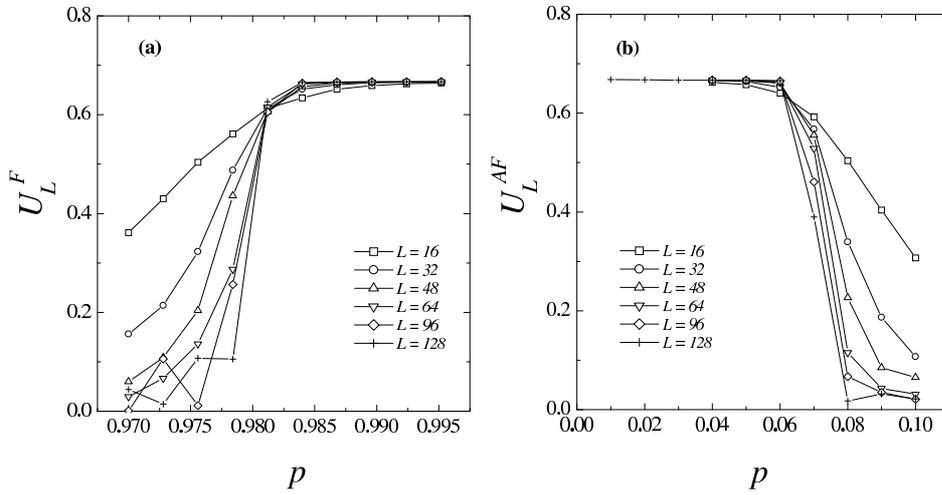


Figura 3.4: Cumulante reduzido de quarta ordem para vários tamanhos de rede como indicado nas figuras. (a) O parâmetro de competição crítica é  $p_c = 0.9812 \pm 0.0001$  na transição P-F para  $T = 1.5$ . (b) Na transição AF-P, para  $T = 2.0$ , obtemos  $p_c = 0.065 \pm 0.001$ .

Podemos também obter mais informações referente ao ponto de transição, examinando o comportamento do parâmetro de ordem em função de  $1/L$ , como podemos observar nas figuras 3.3 (a) e 3.3 (b). Por exemplo, na figura 3.3 (a), calculamos  $m^F$  contra  $1/L$  para alguns valores selecionados de  $p$  no intervalo desde  $p = 0.9800$  até  $p = 0.9830$ . Desse gráfico, podemos dizer que o valor crítico de  $p$  está localizado nesse intervalo. O valor crítico aparece quando o comportamento do parâmetro de ordem passa de um valor quase constante (fase ordenada) para um outro onde ele decresce com uma potência de  $L$  (fase desordenada). O mesmo comportamento também é observado na figura 3.3 (b), onde o parâmetro de ordem  $m^{AF}$  é desenhado em função de  $1/L$ , com  $p$  no intervalo entre 0.060 e 0.066.

Para uma melhor determinação do parâmetro crítico, usamos a propriedade de que os cumulantes de quarta ordem [49] para diferentes tamanhos de rede se interceptam no ponto crítico. A relação de escala para o cumulante de quarta ordem mostra que, no ponto crítico, todas as curvas se cruzam em um mesmo ponto. Para encontrarmos o parâmetro crítico, fixamos a temperatura, que é medida em unidades de  $J/k_B$ , e construímos o gráfico de  $U_L(p)$  versus o parâmetro de competição  $p$ , para vários tamanhos de rede  $L$ , como mostramos nas figuras 3.4 (a) e 3.4 (b). Nossa estimativa para o parâmetro de competição crítico, na transição entre a fase ordenada F e a fase paramagnética P é  $p_c = 0.9812 \pm 0.0001$ ; já o seu valor na transição AF-P é  $p_c = 0.065 \pm 0.001$ , para  $T = 2.0$ .

Na figura 3.5 mostramos o gráfico da susceptibilidade em função do parâmetro de competição  $p$ . Podemos observar os efeitos de tamanho finito nas vizinhanças do parâmetro de competição crítico. A altura do pico da susceptibilidade cresce com o tamanho  $L$  do sistema, embora continue finita. Este comportamento é observado nas duas linhas de transição como podemos ver nas figuras 3.5 (a) transição P-F e 3.5 (b) transição AF-P.

A partir das simulações de Monte Carlo, podemos também calcular os expoentes críticos do modelo. Por exemplo, o expoente  $\nu$ , que está associado ao comprimento de correlação, pode ser obtido de (3.12). Vimos que, para o parâmetro de competição crítico  $p_c$ ,  $U_L'(p_c)$  comporta-se como  $L^{1/\nu}$ . Portanto,

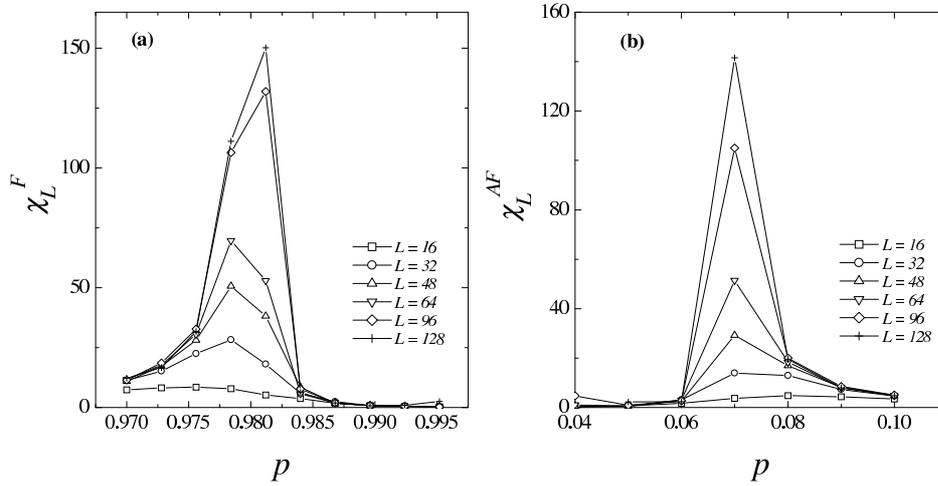


Figura 3.5: Comportamento da susceptibilidade em função do parâmetro de competição  $p$  para vários tamanhos de rede  $L$  como indicado nas figuras. (a) Susceptibilidade  $\chi^F$  para  $T = 1.5$ . (b) Susceptibilidade  $\chi^{AF}$  para  $T = 2.0$ .

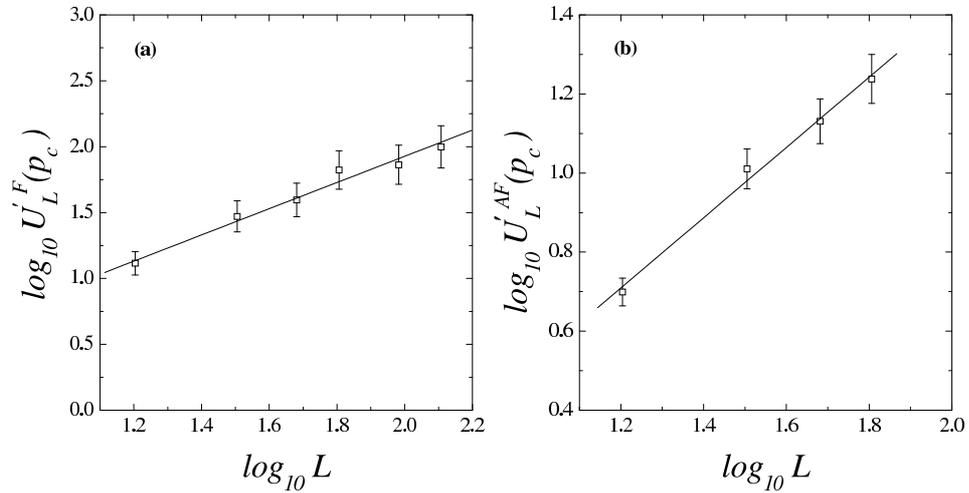


Figura 3.6: Gráfico log-log da derivada do cumulante  $U'_L(p_c)$  versus  $L$ . A linha reta é o melhor ajuste para os dados obtidos na simulação. (a) Na transição P-F, para  $T = 1.5$ , obtemos  $\nu = 1.01 \pm 0.06$ . (b) Na transição AF-P, para  $T = 2.0$ , obtemos  $\nu = 1.09 \pm 0.05$ .

a partir do gráfico log-log de  $U'_L(p_c)$  versus  $L$  (ver figura 3.6 (a)), o melhor ajuste para os dados obtidos nas simulações de Monte Carlo nos fornece  $\nu = 1.01 \pm 0.06$ . Na figura 3.6 (b), observamos que o melhor ajuste nos fornece  $\nu = 1.09 \pm 0.05$ . Na figura 3.7 mostramos os gráficos log-log de  $m^F$  e  $m^{AF}$  em

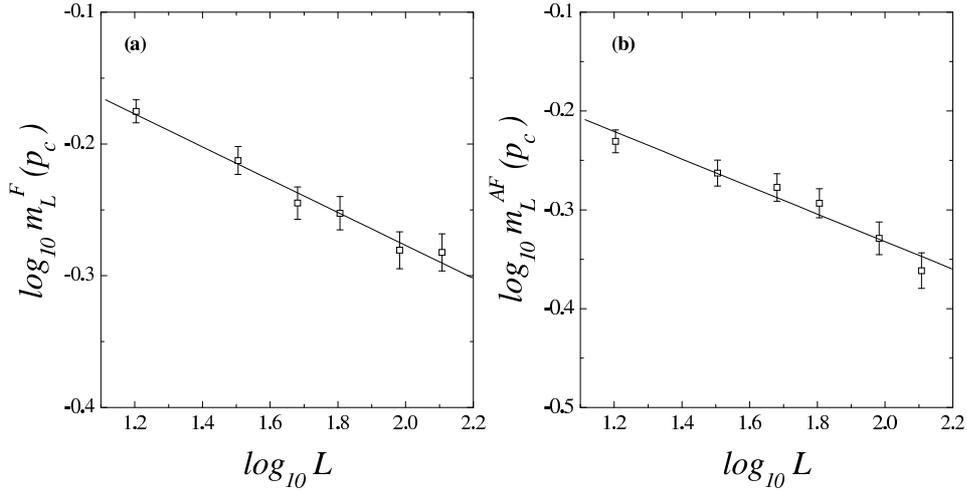


Figura 3.7: Gráfico log-log do parâmetro de ordem  $m_L(p_c)$  versus  $L$ . A linha reta é o melhor ajuste para os pontos. (a) Na transição P-F, para  $T = 1.5$ , obtemos  $\beta/\nu = 0.125 \pm 0.009$ . (b) Na transição AF-P, para  $T = 2.0$ , obtemos  $\beta/\nu = 0.13 \pm 0.01$ .

função de  $L$  no ponto crítico correspondente; o melhor ajuste para os pontos dados nas figuras 3.7 (a) e 3.7 (b) nos fornece a razão entre os expoentes críticos  $\beta$  e  $\nu$ . O valor obtido das simulações na figura 3.7 (a) é  $\beta/\nu = 0.125 \pm 0.009$  para a transição F-P, e encontramos o valor  $\beta/\nu = 0.13 \pm 0.01$  para a transição AF-P. Outro expoente crítico de interesse é aquele associado à susceptibilidade. A partir dos gráficos log-log de  $\chi^F$  e  $\chi^{AF}$  nos seus respectivos pontos críticos, podemos encontrar a razão entre os expoentes  $\gamma$  e  $\nu$ . Na figura 3.8 (a) encontramos  $\gamma/\nu = 1.67 \pm 0.08$  na transição F-P, e na figura 3.8 (b) obtemos  $\gamma/\nu = 1.63 \pm 0.04$  na transição AF-P.

Valores mais precisos dos expoentes críticos podem ser encontrados através da aplicação das relações de escala, para os diversos valores de  $L$ , aos dados obtidos nas simulações. Por exemplo, exibimos nas figuras 3.9 e 3.10, os resultados para os parâmetros de ordem  $m^F$  e  $m^{AF}$ , e para a susceptibilidade

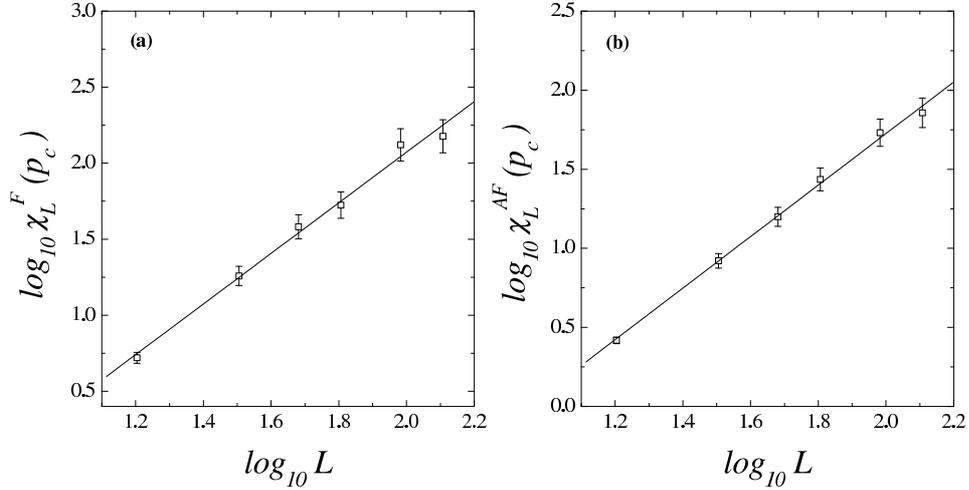


Figura 3.8: Gráfico log-log da susceptibilidade  $\chi_L(p_c)$  versus  $L$ . A linha reta é o melhor ajuste para os dados da simulação. (a) Na transição P-F, para  $T = 1.5$ , obtemos  $\gamma/\nu = 1.67 \pm 0.08$ . (b) Na transição AF-P, para  $T = 2.0$ , obtemos  $\gamma/\nu = 1.63 \pm 0.04$ .

$\chi^F$  e  $\chi^{AF}$ , respectivamente. Os resultados obtidos para todos os tamanhos de rede considerados estão localizados em dois ramos diferentes: um para  $\varepsilon > 0$ , e outro para  $\varepsilon < 0$ , onde  $\varepsilon = (p - p_c)/p_c$ . Na transição F-P, a fase paramagnética corresponde a  $\varepsilon < 0$ ; já na transição AF-P,  $\varepsilon > 0$  caracteriza a fase paramagnética. A partir da inclinação dessas curvas para valores grandes do parâmetro  $\varepsilon L^{1/\nu}$  podemos determinar os expoentes críticos  $\beta$  e  $\gamma$ . Por outro lado, os outros ramos, que estão relacionados com as fases ordenadas, a inclinação das curvas correspondentes para valores grandes de  $\varepsilon L^{1/\nu}$  fornece  $\beta - \nu$  (figura 3.9) e  $\gamma$  (figura 3.10). Os melhores valores que encontramos para os expoentes críticos empregando esse procedimento são: na transição F-P,  $\nu = 1.02 \pm 0.02$ ,  $\beta = 0.123 \pm 0.002$  e  $\gamma = 1.73 \pm 0.02$  e na transição AF-P,  $\nu = 1.02 \pm 0.02$ ,  $\beta = 0.123 \pm 0.03$  e  $\gamma = 1.73 \pm 0.03$ .

Repetimos os procedimentos descritos acima para outros pontos ao longo das linhas críticas. Resumimos esses resultados na figura 3.11, onde apresentamos um gráfico dos expoentes críticos  $\nu$ ,  $\beta$  e  $\gamma$  versus o parâmetro de competição  $p$ . A parte esquerda desta figura se refere à linha de transição

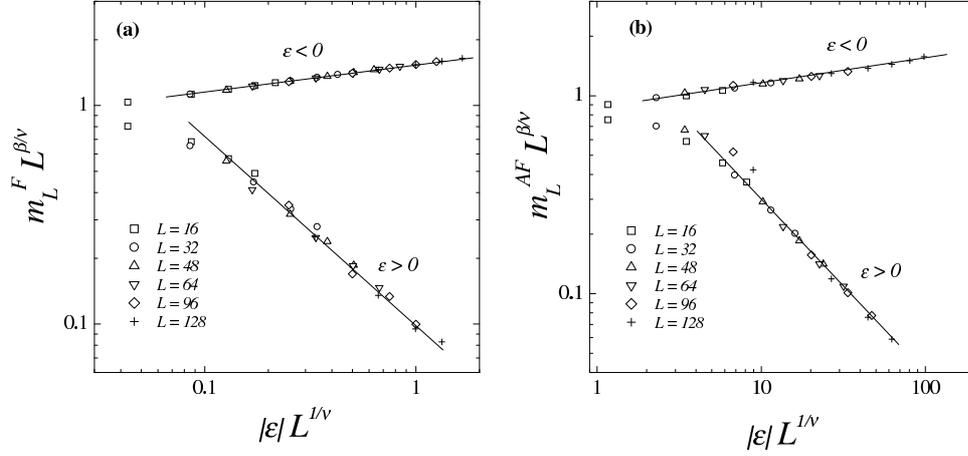


Figura 3.9: Magnetização  $m_L$ , para diferentes valores de  $L$  como indicado nas figuras. O parâmetro  $\epsilon$  é definido por  $\epsilon = (p - p_c)/p_c$ . As linhas retas representam o comportamento assintótico das funções de escala. (a) Na transição P-F, para  $T = 1.5$ , o melhor ajuste é obtido para  $p_c = 0.9812 \pm 0.0001$ ,  $\nu = 1.02 \pm 0.02$  e  $\beta = 0.123 \pm 0.002$ . (b) Na transição AF-P, para  $T = 2.0$ , o melhor ajuste é obtido para  $p_c = 0.065 \pm 0.001$ ,  $\nu = 1.02 \pm 0.02$  e  $\beta = 0.123 \pm 0.003$ .

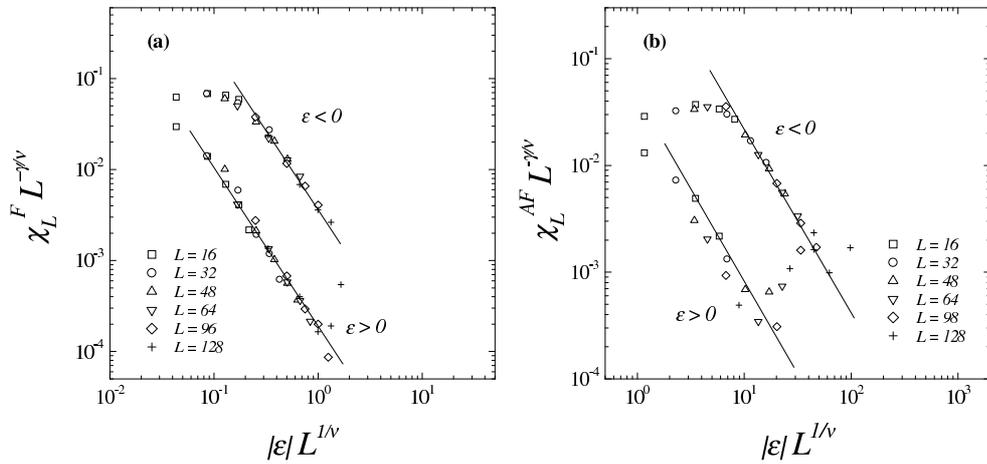


Figura 3.10: Susceptibilidade  $\chi_L$ , para diferentes valores de  $L$  como indicado nas figuras. O parâmetro  $\epsilon$  é definido por  $\epsilon = (p - p_c)/p_c$ . As linhas retas representam o comportamento assintótico das funções de escala. (a) Na transição P-F, para  $T = 1.5$ , o melhor ajuste é obtido para  $p_c = 0.9812 \pm 0.0001$ ,  $\nu = 1.02 \pm 0.02$  e  $\gamma = 1.73 \pm 0.02$ . (b) Na transição AF-P, para  $T = 2.0$ , o melhor ajuste é obtido para  $p_c = 0.065 \pm 0.001$ ,  $\nu = 1.02 \pm 0.02$  e  $\gamma = 1.73 \pm 0.03$ .

AF-P, e a parte à direita está relacionada com a linha de transição F-P. Como podemos verificar, os valores que obtivemos para estes expoentes críticos estão em boa concordância com os expoentes estáticos análogos do modelo de Ising bidimensional em equilíbrio ( $\nu = 1$ ,  $\beta = 1/8$  e  $\gamma = 7/4$ ). O modelo de Ising de spins mistos fora do equilíbrio que consideramos, preserva a simetria spin para cima, spin para baixo (*up-down*), e este fato o coloca na mesma classe de universalidade do correspondente modelo de Ising de equilíbrio bidimensional [44].

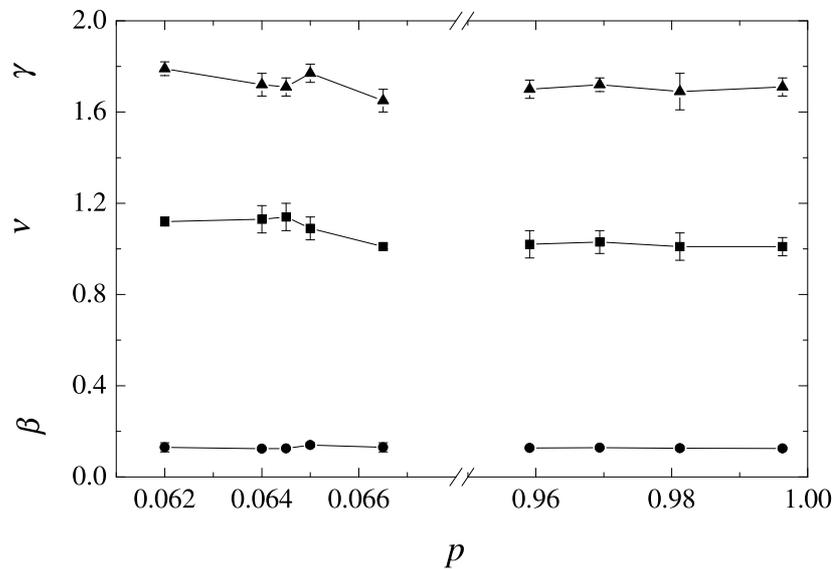


Figura 3.11: Expoentes críticos estáticos  $\nu$ ,  $\beta$  e  $\gamma$  em função do parâmetro de competição  $p$ . O lado esquerdo da figura se refere à linha de transição AF-P; já o seu lado direito está relacionado à linha de transição F-P.

## Capítulo 4

# Modelo de Ising de spins mistos com acoplamento antiferromagnético

### 4.1 Introdução

Neste capítulo, vamos estudar o modelo de Ising de spins mistos como o descrito no capítulo 2, mas com interação entre os spins primeiros vizinhos do tipo antiferromagnética. A versão ferromagnética do modelo de Ising de spins mistos já foi estudada na aproximação de pares dinâmica [33] e por simulações de Monte Carlo [50] como vimos nos capítulos 2 e 3. O diagrama de fases no plano temperatura versus parâmetro de competição entre os processos de mudança de um e dois spins, foi determinado. Encontramos duas linhas de transições contínuas neste plano, separando uma fase paramagnética de duas outras fases ordenadas. Nossa análise de escala de tamanho finito do parâmetro de ordem apropriado, mostrou que os expoentes críticos ao longo das duas linhas contínuas são os mesmos do modelo de Ising bidimensional no equilíbrio.

A motivação para se estudar o modelo com acoplamento antiferromagnético entre os spins está baseada nos resultados encontrados para o diagrama de fases do modelo de Ising ferromagnético [51] e antiferromagnético [52] fora

do equilíbrio termodinâmico. Nesses estudos, o sistema de spins de Ising foi também submetido a dois processos dinâmicos estocásticos independentes e que competiam entre si. A dinâmica de Glauber [32] com mudança de um único spin com probabilidade  $p$  e a dinâmica de Kawasaki [35] com a troca de dois spins com probabilidade  $1 - p$ . Similarmente ao sistema com spins mistos ferromagnético, a regra para a dinâmica de Glauber descreve a relaxação dos spins no banho térmico, enquanto que a dinâmica de Kawasaki descreve o aumento de energia do sistema. O diagrama de fases mostra a presença de três fases distintas no caso ferromagnético, e somente o aparecimento de duas fases no correspondente caso antiferromagnético. Logo, a simples mudança no sinal do acoplamento de troca neste modelo fora do equilíbrio, não deveria levar a uma diferença significativa na topologia dos diagramas de fase dos modelos ferromagnético e antiferromagnético. A explicação para este comportamento está relacionada à dinâmica de Kawasaki com troca de dois spins, em que o parâmetro de ordem não se altera. Os estados antiferromagnéticos são mais sensíveis a esta dinâmica do que os ferromagnéticos. Por outro lado, em nosso estudo do modelo de Ising de spins mistos antiferromagnético, os dois processos dinâmicos competitivos não conservam o parâmetro de ordem.

O modelo de Ising de spins mistos antiferromagnético com dinâmicas competitivas é estudado neste capítulo através da aproximação de pares dinâmica e de simulações de Monte Carlo. Como na versão ferromagnética, também atribuímos um peso  $p$  ao processo de mudança de um único spin, e um peso  $(1 - p)$  ao processo de mudança de dois spins. Determinamos o diagrama de fases do modelo e calculamos seus expoentes críticos estáticos. Na seção seguinte apresentamos o modelo. Na seção 4.3, encontramos o diagrama de fases e os expoentes críticos do modelo.

## 4.2 O modelo

O modelo de Ising de spins mistos antiferromagnético é definido em uma rede quadrada, com spins  $\sigma = 1/2$  e  $S = 1$ . As equações de movimento estão

descritas no capítulo 2. A energia do sistema no estado  $(\sigma, S)$  é dada por

$$E(\sigma, S) = J \sum_{(i,j)} \sigma_i S_j , \quad (4.1)$$

com acoplamento antiferromagnético,  $J > 0$ . Da probabilidade de estado  $P(\sigma, S; t)$  podemos derivar as expressões para a evolução das magnetizações de sub-rede,  $m_1 = \langle \sigma_i \rangle$ ,  $m_2 = \langle S_j \rangle$ , e para as funções de correlação,  $r = \langle \sigma_i S_j \rangle$ ,  $q = \langle S_i^2 \rangle$  e  $q_1 = \langle \sigma_i S_j^2 \rangle$ . O conjunto de equações de movimento é desacoplado usando a aproximação de pares dinâmica, e os estados estacionários do sistema podem ser encontrados em função de  $T$  e  $p$ . O procedimento para se obter estas equações é idêntico ao utilizado no caso ferromagnético e os detalhes estão descritos no capítulo 2.

Usamos também simulações de Monte Carlo para estudar esse modelo. O procedimento das simulações é idêntico ao utilizado no caso ferromagnético e está todo ele descrito na seção 3.2. Calculamos as grandezas físicas tais como: magnetizações total e alternada dadas por (3.4) e (3.5), cumulantes de Binder de quarta ordem (3.6) e susceptibilidades (3.7). Empregamos as relações de escala (3.8), (3.9) e (3.12) para determinar os expoentes críticos estáticos  $\beta$ ,  $\gamma$  e  $\nu$ .

### 4.3 Diagrama de fases

Nesta seção apresentamos os resultados obtidos para o diagrama de fases do modelo de Ising de spins mistos antiferromagnético e seus expoentes críticos. As soluções estacionárias do conjunto de eqs. (2.35)-(2.39) não podem ser obtidas analiticamente; para resolvê-las, usamos o método numérico de Runge-Kutta de quarta ordem. Esse sistema de equações diferenciais nos leva a três diferentes tipos de soluções estacionárias, ou seja, a três fases diferentes, identificadas pelos seguintes valores dos parâmetros de ordem: fase ordenada (AF) com  $m_1 \neq m_2$ ,  $m_1 < 0$  e  $m_2 > 0$ ; fase paramagnética (P) com  $m_1 = m_2 = 0$  e fase ordenada (F) com  $m_1 \neq m_2$ , e  $m_1, m_2 > 0$ .

Na figura 4.1 mostramos o diagrama de fases no plano temperatura  $T$  versus

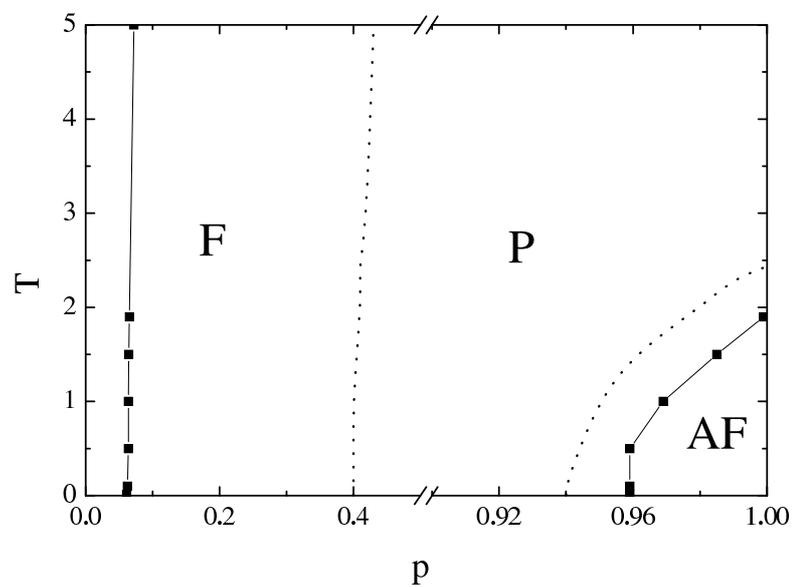


Figura 4.1: Diagrama de fases do modelo de Ising de spins mistos antiferromagnético no plano temperatura  $T$  versus parâmetro de competição  $p$ . As letras F e AF denotam fases ordenadas e P a fase paramagnética. As linhas pontilhadas representam os cálculos baseados na aproximação de pares, e as linhas com símbolos quadrados são os dados das simulações de Monte Carlo. As linhas ligando os quadrados servem somente para guiar os olhos. A temperatura é medida em unidades de  $J/k_B$  e  $p$  é adimensional.

parâmetro de competição  $p$ . As linhas pontilhadas representam os resultados da aproximação de pares, já a linha com os símbolos quadrados são os resultados obtidos nas simulações. O diagrama de fases exhibe três fases diferentes, separadas por duas linhas de transições contínuas: uma linha separando uma fase ordenada AF, onde uma das magnetizações de sub-rede é positiva e a outra é negativa, de uma fase paramagnética P, onde ambas as magnetizações são nulas. A outra linha separa a fase paramagnética de uma fase ordenada do tipo ferromagnética F, onde as magnetizações de sub-rede são positivas. Embora a constante de acoplamento seja do tipo antiferromagnética, a fase antiferromagnética ocupa uma região pequena do diagrama de fases. Aumentando-se o fluxo de energia para o sistema, que neste modelo significa diminuir o valor de  $p$ , a fase AF desaparece. Entretanto, para um fluxo muito intenso de energia, uma fase ferromagnética aparece. A diferença básica entre a aproximação de pares e simulações de Monte Carlo está no tamanho da região ocupada pela fase desordenada. Esta região é muito grande nas simulações de Monte Carlo. Os cálculos baseados na aproximação de pares diferem ligeiramente para os acoplamentos ferromagnético e antiferromagnético. Por exemplo, para temperaturas muito baixas, o ponto da transição AF-P no caso antiferromagnético desvia-se na direção de valores pequenos de  $p$  quando comparado ao ponto de transição F-P do caso ferromagnético.

O diagrama de fases dos casos ferromagnético e antiferromagnético é essencialmente o mesmo: mudando-se o sinal da interação de acoplamento é equivalente a mudar os lugares das fases F e AF em ambos os diagramas. Assim, a mudança simultânea de dois spins nesse modelo de spins mistos não faz desaparecer uma das fases para valores muito grandes do fluxo de energia. Isto é diferente do visto no modelo de Ising antiferromagnético puro [52], onde a troca de dois spins vizinhos mais próximos (dinâmica de Kawasaki) conserva o parâmetro de ordem. A simples mudança de dois spins não conserva o parâmetro de ordem no modelo de Ising de spins mistos. Certamente, quando dois spins primeiros vizinhos são paralelos podemos invertê-los, mudando o parâmetro de ordem e aumentando assim a energia do sistema. Por outro lado, no caso de Ising puro, a aplicação da dinâmica de Kawasaki a um par de spins

paralelos não adiciona mais energia ao sistema porque seu estado permanece o mesmo.

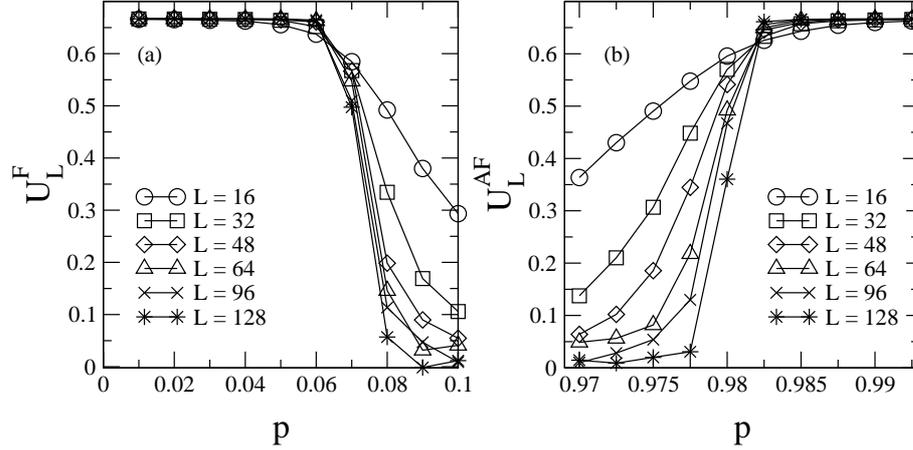


Figura 4.2: Cumulante reduzido de quarta ordem para vários tamanhos de rede como indicado nas figuras. (a)  $U_L^F$  é o cumulante em torno do ponto crítico da transição F-P, e (b)  $U_L^{AF}$  é o cumulante em torno do ponto crítico da transição AF-P. A temperatura é fixada no valor  $T = 1.5$ .

Os pontos críticos encontrados no diagrama de fases da figura 4.1, foram determinados pelo cruzamento dos cumulantes de quarta ordem para diferentes tamanhos de rede no ponto crítico [48]. Para encontrar o parâmetro crítico, fixamos a temperatura, que é medida em unidades de  $J/k_B$ , e construímos o gráfico de  $U_L(p)$  versus o parâmetro de competição  $p$ , para todos os tamanhos de rede  $L$  como mostrado nas figuras 4.2 (a) e 4.2 (b) para uma temperatura particular  $T = 1.5$ . Nossa estimativa para o parâmetro de competição crítico, na transição entre as fases ordenada AF e paramagnética P é  $p_c = 0.9812 \pm 0.0001$ ; já o seu valor para a outra transição (F-P) é  $p_c = 0.065 \pm 0.001$ .

Também é fácil de se determinar os expoentes críticos do modelo usando os dados obtidos nas simulações de Monte Carlo. Por exemplo, gráficos log-log das eqs. (3.8), (3.9) e (3.12), respectivamente, para a magnetização, susceptibilidade e derivada do cumulante, no ponto crítico  $p_c$ , nos dão os expoentes críticos relacionados à inclinação das correspondentes linhas retas. Isto pode ser visto na figura 4.3, para a transição entre as fases AF e P em  $T = 1.5$ . Do

melhor ajuste para os pontos encontramos  $\nu = 1.04 \pm 0.05$ ,  $\beta/\nu = 0.13 \pm 0.01$  e  $\gamma/\nu = 1.69 \pm 0.07$ . O mesmo procedimento foi usado para encontrar os expoentes críticos para outros valores de temperatura, e na transição P-F.

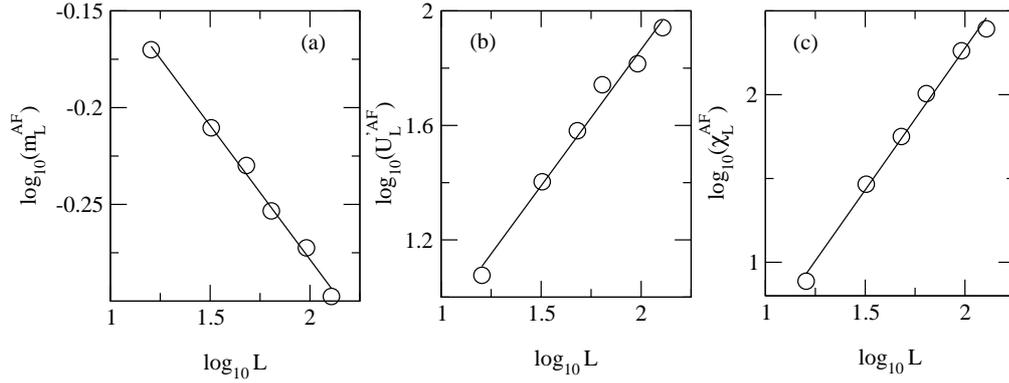


Figura 4.3: Gráfico log-log (a) do parâmetro de ordem, (b) da derivada do cumulante, e (c) da susceptibilidade em função do tamanho da rede, no ponto crítico da transição AF-P para  $T = 1.5$ . As linhas retas são os melhores ajustes para os dados. Os tamanhos dos círculos são escolhidos de tal forma que as barras de erro fiquem dentro deles.

Podemos ainda melhorar a estimativa para os expoentes críticos pelo colapso de dados. Por exemplo, exibimos na figura 4.4, o colapso de dados para o parâmetro de ordem  $m_L^{AF}$  e para a susceptibilidade  $\chi_L^{AF}$ , respectivamente. Os dados para todos os tamanhos de rede estão localizados em dois diferentes ramos: um para  $\varepsilon > 0$ , e outro para  $\varepsilon < 0$ , onde  $\varepsilon = (p - p_c)/p_c$ . Para a linha de transição AF-P, a fase paramagnética é dada por  $\varepsilon < 0$ , já que  $\varepsilon > 0$  caracteriza a fase antiferromagnética. A partir da inclinação destas curvas para valores grandes do parâmetro  $\varepsilon L^{1/\nu}$  podemos determinar os expoentes  $\beta$  e  $\gamma$ . Por outro lado, os outros ramos, que estão relacionados à fase ordenada ( $\varepsilon > 0$ ), a inclinação das curvas para valores grandes de  $\varepsilon L^{1/\nu}$  fornece  $\beta - \nu$  e  $\gamma$ . Os melhores valores que se encontra para os expoentes críticos empregando este procedimento são: na transição AF-P (figura 4.4)  $\nu = 1.01 \pm 0.01$ ,  $\beta = 0.125 \pm 0.001$  e  $\gamma = 1.74 \pm 0.01$  e na transição F-P, não mostrado, temos  $\nu = 1.01 \pm 0.02$ ,  $\beta = 0.124 \pm 0.002$  e  $\gamma = 1.74 \pm 0.02$ . Embora tenhamos exibido os resultados somente para a temperatura  $T = 1.5$ , nós repetimos os

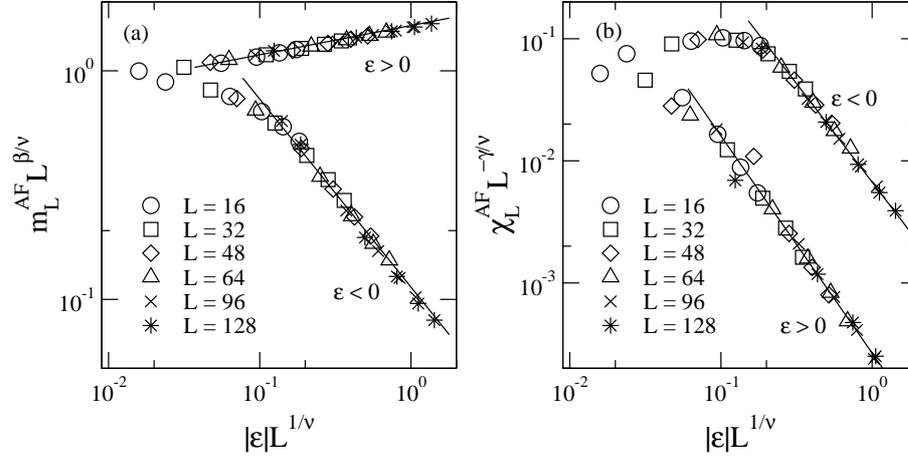


Figura 4.4: Colapso de dados em torno do ponto crítico da transição AF-P para (a) o parâmetro de ordem  $m_L^{AF}$ , e (b) susceptibilidade  $\chi_L^{AF}$ , para diferentes valores de  $L$  como indicado nas figuras. O parâmetro  $\epsilon$  é definido por  $\epsilon = (p - p_c)/p_c$ . A linha reta representa o comportamento assintótico das funções de escala. A temperatura é  $T = 1.5$ , e os melhores valores dos expoentes são  $\nu = 1.01 \pm 0.01$ ,  $\beta = 0.125 \pm 0.001$  e  $\gamma = 1.74 \pm 0.01$ .

procedimentos descritos acima para outros pontos ao longo das linhas críticas. O conjunto de nossos resultados indica claramente que o modelo de Ising de spins mistos antiferromagnético fora do equilíbrio termodinâmico está na mesma classe de universalidade do modelo de Ising bidimensional no equilíbrio. A escolha do processo dinâmico de mudança de dois spins vizinhos, que é usado para simular a absorção de energia pelo sistema, não afeta os expoentes críticos do modelo.

## Capítulo 5

# Modelo de Ising de spins mistos com interação de campo cristalino

### 5.1 Introdução

Neste capítulo estudamos o modelo de Ising de spins mistos no equilíbrio e fora do equilíbrio termodinâmico. Para isso, utilizamos a aproximação de campo médio baseada no princípio variacional de Peierls-Bogoliubov, a aproximação de campo médio dinâmica, a aproximação de pares e simulações de Monte Carlo. Através desses estudos investigamos o aparecimento de um ponto tricrítico no diagrama de fases temperatura  $T$  contra interação de campo cristalino  $D$ , especialmente no modelo fora do equilíbrio. Construímos também o diagrama de fases temperatura  $T$  versus parâmetro de competição  $p$ , a fim de observarmos se a interação de campo cristalino altera a topologia do diagrama de fases do modelo fora do equilíbrio apresentado nos capítulos anteriores.

### 5.2 Aproximação de campo médio

Iniciamos nesta seção o estudo do modelo de Ising de spins mistos com interação de campo cristalino, usando a aproximação de campo médio baseada no princípio variacional de Peierls-Bogoliubov [40]. Em seguida, fazemos uma expansão de Landau para os estados de equilíbrio, onde a energia livre é

desenvolvida em função do parâmetro de ordem.

O modelo é descrito pela seguinte Hamiltoniana

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \sigma_j - D \sum_j S_j^2 - H \left( \sum_i S_i + \sum_j \sigma_j \right), \quad (5.1)$$

onde  $J$  é a constante de acoplamento,  $D$  é a interação de campo cristalino e  $H$  é um campo magnético externo. A variável de spin  $S_i$  tem os valores  $\pm 1$  ou  $0$  e  $\sigma_j = \pm 1$ . Para  $D < 0$ , o campo cristalino favorece os estados  $S_i = 0$ , e a competição entre esta anisotropia e o acoplamento ferromagnético leva ao aparecimento de um ponto tricrítico.

Inicialmente estudamos o modelo dado por (5.1) utilizando a aproximação de campo médio de uma forma mais elegante a partir de um princípio variacional que está baseado na desigualdade de Peierls-Bogoliubov. Essa desigualdade pode ser escrita na forma

$$G(\mathcal{H}) \leq \Phi,$$

$$\Phi = G_0(\mathcal{H}_0) + \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0, \quad (5.2)$$

onde  $G(\mathcal{H})$  e  $G_0(\mathcal{H}_0)$  são energias livres associadas a dois sistemas definidos pelas Hamiltonianas  $\mathcal{H}$  e  $\mathcal{H}_0$ , respectivamente, e a média térmica deve ser tomada em relação a uma distribuição canônica associada à Hamiltoniana  $\mathcal{H}_0$ .

Escolhemos como Hamiltoniana tentativa

$$\mathcal{H}_0 = -D \sum_i S_i^2 - \eta \sum_i S_i - \gamma \sum_j \sigma_j, \quad (5.3)$$

onde  $\eta$  e  $\gamma$  são dois parâmetros variacionais. A função de partição associada a (5.3) toma a seguinte forma

$$Z_0 = \{ [1 + 2 \exp(\beta D) \cosh(\beta \eta)]^{N/2} [2 \cosh(\beta \gamma)]^{N/2} \}. \quad (5.4)$$

Portanto, a energia livre associada a  $\mathcal{H}_0$  é dada por

$$G_0(\mathcal{H}_0) = -\frac{N}{2\beta} \ln\{[1 + 2 \exp(\beta D) \cosh(\beta\eta)][2 \cosh(\beta\gamma)]\} , \quad (5.5)$$

e

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 &= -JdN \langle S_i \sigma_j \rangle_0 - H \frac{N}{2} (\langle S_i \rangle_0 + \langle \sigma_j \rangle_0) \\ &\quad + \eta \frac{N}{2} \langle S_i \rangle_0 + \gamma \frac{N}{2} \langle \sigma_j \rangle_0 , \end{aligned} \quad (5.6)$$

onde  $d$  é a dimensão espacial, e as médias térmicas para as variáveis de spin são dadas por

$$\langle S_i \rangle_0 = \frac{2 \exp(\beta D) \sinh(\beta\eta)}{1 + 2 \exp(\beta D) \cosh(\beta\eta)} , \quad (5.7)$$

$$\langle \sigma_j \rangle_0 = \tanh(\beta\gamma) , \quad (5.8)$$

e para a função de correlação por

$$\langle S_i \sigma_j \rangle_0 = \langle S_i \rangle_0 \langle \sigma_j \rangle_0 = \left[ \frac{2 \exp(\beta D) \sinh(\beta\eta)}{1 + 2 \exp(\beta D) \cosh(\beta\eta)} \right] \tanh(\beta\gamma) . \quad (5.9)$$

Temos então a seguinte energia livre por partícula:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \Phi &= -\frac{1}{2\beta} \ln\{[1 + 2 \exp(\beta D) \cosh(\beta\eta)][2 \cosh(\beta\gamma)]\} \\ &\quad - Jd \left( \frac{2 \exp(\beta D) \sinh(\beta\eta)}{1 + 2 \exp(\beta D) \cosh(\beta\eta)} \right) \tanh(\beta\gamma) \\ &\quad - \frac{H}{2} \left[ \left( \frac{2 \exp(\beta D) \sinh(\beta\eta)}{1 + 2 \exp(\beta D) \cosh(\beta\eta)} \right) + \tanh(\beta\gamma) \right] \\ &\quad + \frac{\eta}{2} \left( \frac{2 \exp(\beta D) \sinh(\beta\eta)}{1 + 2 \exp(\beta D) \cosh(\beta\eta)} \right) + \frac{\gamma}{2} \tanh(\beta\gamma) . \end{aligned} \quad (5.10)$$

A expressão (5.10) representa apenas um limite superior para a energia livre do sistema. Portanto, minimizando (5.10) em relação aos parâmetros variacionais  $\eta$  e  $\gamma$ , encontramos a energia livre por partícula na aproximação de campo médio

$$g_{CM} = \frac{1}{N} \min_{\eta, \gamma} \Phi(T, D, H, N; \eta, \gamma) , \quad (5.11)$$

que corresponde ao menor limite superior proporcionado pela desigualdade de Bogoliubov. Os parâmetros variacionais  $\eta$  e  $\gamma$  dependem de  $m_1 = \langle \sigma_j \rangle_0$  e  $m_2 = \langle S_i \rangle_0$  respectivamente, por meio das seguintes equações

$$\eta = zJm_1 + H, \quad (5.12)$$

e

$$\gamma = zJm_2 + H, \quad (5.13)$$

onde  $z = 2d$ . Logo podemos escrever a seguinte expressão para a energia livre por partícula

$$\begin{aligned} g_{CM} = & Jdm_1m_2 - \frac{1}{2\beta} \ln \{ [1 + 2 \exp(\beta D) \cosh(\beta z J m_1 + \beta H)] \\ & \times [2 \cosh(\beta z J m_2 + \beta H)] \}. \end{aligned} \quad (5.14)$$

Fazendo-se  $H = 0$  em (5.14), temos

$$\begin{aligned} g = & Jdm_1m_2 \\ & - \frac{1}{2\beta} \ln \{ [1 + 2 \exp(\beta D) \cosh(\beta z J m_1)] [2 \cosh(\beta z J m_2)] \}. \end{aligned} \quad (5.15)$$

Minimizando-se (5.15) com relação a  $m_1$  e  $m_2$ , temos as magnetizações de sub-rede

$$m_1 = \tanh(\beta J z m_2), \quad (5.16)$$

e

$$m_2 = \frac{2 \sinh(\beta J z m_1)}{\exp(-\beta D) + 2 \cosh(\beta J z m_1)}. \quad (5.17)$$

Podemos substituir (5.16) em (5.17), a fim de obtermos uma expressão para a energia livre em função de apenas um único parâmetro de ordem

$$\begin{aligned} g = & Jdm_2 [\tanh(\beta J z m_2)] \\ & - \frac{1}{2\beta} \ln \{ [1 + 2 \exp(\beta D) \cosh(\beta z J \tanh(\beta J z m_2))] \\ & \times [2 \cosh(\beta z J m_2)] \}. \end{aligned} \quad (5.18)$$

Vamos assumir que podemos expandir  $g$  em potências de  $m_2$  nas vizinhanças da criticalidade. Então, podemos fazer a expansão de Landau

$$g(T, D, H = 0; m_2) = a_0(T, D) + a_2(T, D)m_2^2 + a_4(T, D)m_2^4 + a_6(T, D)m_2^6 + \dots, \quad (5.19)$$

onde os coeficientes  $a_n$  da expansão dependem da temperatura  $T$  e do campo cristalino  $D$ . Como sabemos da teoria fenomenológica de Landau para sistemas magnéticos, todos os termos ímpares da expansão são nulos devido à simetria de inversão de spins do sistema. Os coeficientes da expansão são os seguintes:

$$a_0 = -\frac{\ln(2 + 2\alpha)}{2\beta}, \quad (5.20)$$

$$a_2 = dJzk - \frac{[z^4 k^4 \alpha + (1 + \alpha)z^2 k^2]}{4\beta(1 + \alpha)}, \quad (5.21)$$

$$a_4 = -\frac{1}{3}dJz^3 k^3 - \frac{[(1 + \alpha)z^4 k^4 - 2\alpha z^6 k^6 + \alpha z^8 k^8]}{48\beta(1 + \alpha)} + \frac{[\alpha z^4 k^4 + (1 + \alpha)z^2 k^2] z^2 k^2}{16\beta(1 + \alpha)} + \frac{[\alpha z^4 k^4 + (1 + \alpha)z^2 k^2] \alpha z^4 k^4}{16\beta(1 + \alpha)^2}, \quad (5.22)$$

$$\begin{aligned}
a_6 = & -\frac{2}{15}dJz^5k^5 + \frac{[\alpha z^4k^4 - (1+\alpha)z^2k^2]z^8k^8}{288\beta(1+\alpha)^2} \\
& - \frac{7[\alpha z^4k^4 + (1+\alpha)z^2k^2]\alpha z^6k^6}{144\beta(1+\alpha)^2} \\
& - \frac{[\alpha z^4k^4 + (1+\alpha)z^2k^2]\alpha^2 z^8k^8}{48\beta(1+\alpha)^3} \\
& - \frac{5[\alpha z^4k^4 + (1+\alpha)z^2k^2]z^4k^4}{288\beta(1+\alpha)} \\
& - \frac{[62\alpha z^8k^8 + 2(1+\alpha)z^6k^6 + 2\alpha z^{12}k^{12} - 50\alpha z^{10}k^{10}]}{2880\beta(1+\alpha)} \\
& + \frac{[2\alpha z^8k^8 - 4\alpha z^6k^6 + 2(1+\alpha)z^4k^4]z^2k^2}{288\beta(1+\alpha)} \\
& + \frac{[2\alpha z^8k^8 - 4\alpha z^6k^6 + 2(1+\alpha)z^4k^4]\alpha z^4k^4}{288\beta(1+\alpha)^2}, \tag{5.23}
\end{aligned}$$

onde  $k = \beta J$  e  $\alpha = 2 \exp(\beta D)$ . Na figura 5.1 apresentamos o diagrama de fases no plano  $k_B T/J$  contra  $D/J$ . Igualando-se a zero o segundo termo  $a_2$  da expansão, obtemos a seguinte expressão para a linha de transição de segunda ordem

$$\frac{D}{J} = -\frac{1}{k} \ln [2(k^2 z^2 - 1)]. \tag{5.24}$$

A eq. (5.24) fornece uma linha de transições contínuas. Esta solução é estável enquanto  $a_4 > 0$ . O valor que encontramos para a temperatura crítica em  $D = 0$  e  $z = 4$  é  $k_B T_c/J = \frac{4}{3}\sqrt{6}$ . Por outro lado, a localização do ponto tricrítico é dada por  $a_2 = a_4 = 0$ , onde  $a_6 > 0$ , fornece a estabilidade do ponto tricrítico. Os valores encontrados para o ponto tricrítico são os seguintes:  $k_B T_t/J = 1.7889$  e  $D_t/J = -3.7197$ . Estes valores estão de acordo com os encontrados na literatura [14, 53]. Abaixo do ponto tricrítico existe uma linha de coexistência de fases. Como temos uma expressão explícita para a energia livre, é fácil de se obter a linha de transição de primeira ordem.

Na figura 5.2 mostramos o gráfico da energia livre  $g$  em função do parâmetro de ordem  $m_2$ , próximo da linha de transição de primeira ordem. A energia livre é calculada para valores fixos da temperatura e do campo cristalino. Na fase ordenada, a energia livre possui três mínimos, sendo dois mínimos globais correspondentes a  $m_2 > 0$  e  $m_2 < 0$ , como podemos observar na figura 5.2 (a).

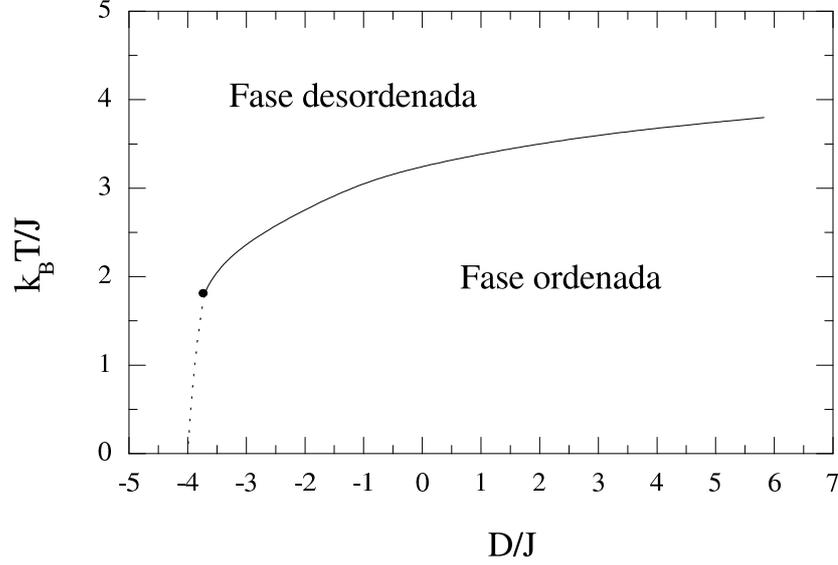


Figura 5.1: Diagrama de fases a campo nulo no plano  $k_B T/J$  contra  $D/J$ , obtido através da aproximação de campo médio. A linha cheia representa transições de segunda ordem, e a linha pontilhada representa transições de primeira ordem.

A figura 5.2 (b) possui três mínimos globais correspondentes a  $m_2 > 0$ ,  $m_2 < 0$  e  $m_2 = 0$ , mostrando uma coexistência de fases, de onde podemos obter a linha de transições de primeira ordem. Entretanto, na figura 5.2 (c) a energia livre possui apenas um mínimo global correspondente a  $m_2 = 0$ , caracterizando a fase desordenada.

### 5.3 Aproximação de campo médio dinâmica

Vamos agora estudar o sistema descrito pela Hamiltoniana

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \sigma_j - D \sum_j S_j^2, \quad (5.25)$$

usando a aproximação de campo médio dinâmica. Aqui a variável de spin  $S_i$  toma os valores  $\pm 1$  ou  $0$  e  $\sigma_j = \pm 1$ . Em primeiro lugar, definimos  $P(\sigma, t)$  como sendo a probabilidade de encontrar o sistema no estado  $\sigma = (\sigma_1, \dots, \sigma_{N/2})$ , no

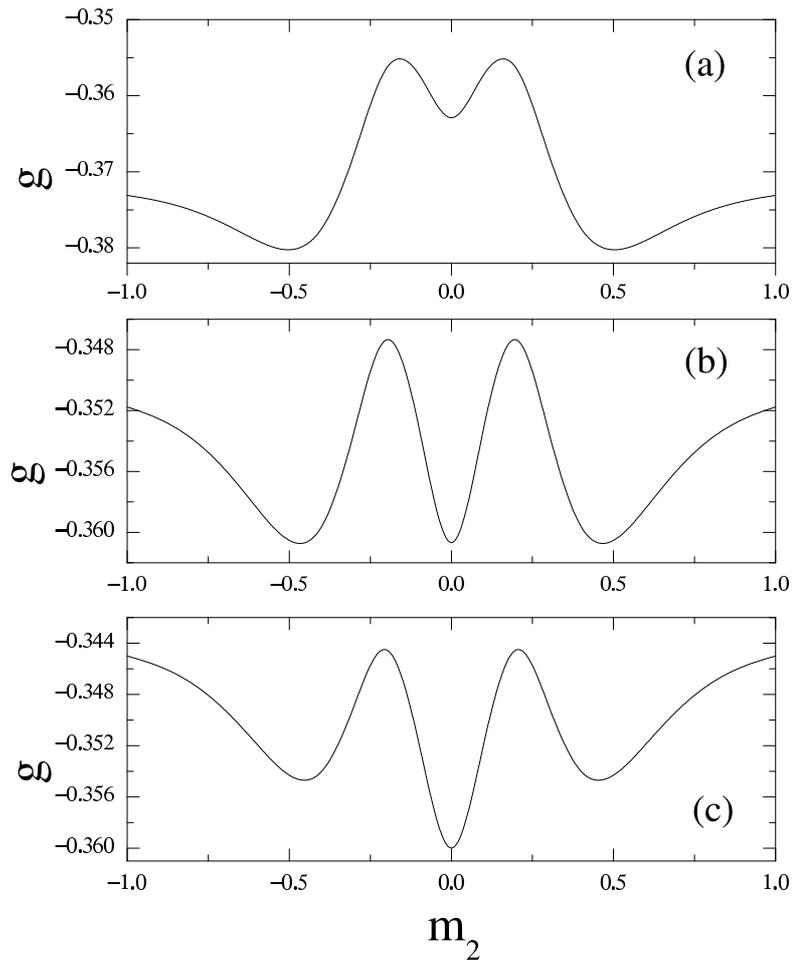


Figura 5.2: Função energia livre  $g$  versus o parâmetro de ordem  $m_2$ , para  $k_B T/J = 1.0$ . (a) Fase ordenada ( $D = -3.900J$ ). (b) Na transição de primeira ordem ( $D = -3.983J$ ). (c) Na fase desordenada ( $D = -4.010J$ ).

instante  $t$ , independentemente dos valores assumidos pelos spins  $S$ , e  $P(S, t)$  a probabilidade de encontrar o sistema no estado  $S = (S_1, \dots, S_{N/2})$ , no instante  $t$ , independentemente dos valores dos spins  $\sigma$ . A evolução temporal de  $P(\sigma, t)$  é dada pela equação mestra:

$$\frac{dP(\sigma, t)}{dt} = - \sum_{\sigma'_j} \omega(\sigma_j \rightarrow \sigma'_j) P(\sigma, t) + \sum_{\sigma'_j} \omega(\sigma'_j \rightarrow \sigma_j) P(\sigma', t) , \quad (5.26)$$

onde  $\omega(\sigma_j \rightarrow \sigma'_j)$  é a probabilidade, por unidade de tempo, para a transição do estado  $\sigma_j$  para o estado  $\sigma'_j$ . Em (5.26), temos que  $\sum_{\sigma'_j} \omega(\sigma_j \rightarrow \sigma'_j) = 1$ , então

$$\frac{dP(\sigma, t)}{dt} = -P(\sigma, t) + \sum_{\sigma'_j} \omega(\sigma'_j \rightarrow \sigma_j) P(\sigma', t) . \quad (5.27)$$

Vamos supor que os estados do sistema evoluem de acordo com a dinâmica estocástica de Glauber, que descreve a interação do sistema com um reservatório térmico a uma determinada temperatura. A taxa de inversão de Glauber para os spins da sub-rede  $\sigma$  é dada por

$$\omega_j(\sigma'_j \rightarrow \sigma_j) = \frac{\exp(-\beta \Delta E_j)}{1 + \exp(-\beta \Delta E_j)} , \quad (5.28)$$

onde  $\beta = 1/k_B T$  e

$$\Delta E_j = 2\sigma_j \left( J \sum_{\langle i \rangle} S_i \right) , \quad (5.29)$$

é a variação na energia do sistema após invertermos o spin  $\sigma_j$ .

Substituindo-se (5.28) em (5.27), e multiplicando ambos os lados dessa equação por  $\sum_{\sigma_j} \sigma_j$ , obtemos a seguinte equação de movimento

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_j \rangle = - \langle \sigma_j \rangle + \left\langle \tanh \left[ \beta \left( J \sum_{\langle i \rangle} S_i \right) \right] \right\rangle . \quad (5.30)$$

Esta equação é de difícil solução, pois ela em geral envolve outras correlações além de  $\langle \sigma_j \rangle$ . Fazendo a seguinte aproximação  $\langle \tanh x \rangle = \tanh \langle x \rangle$  em (5.30),

onde  $x = \sum_{\langle i \rangle} S_i$ , chegamos à equação de movimento para os spins da sub-rede  $\sigma$

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma \rangle = - \langle \sigma \rangle + \tanh [\beta (Jz \langle S \rangle)] , \quad (5.31)$$

onde  $\langle \sigma \rangle$  e  $\langle S \rangle$  são as magnetizações das sub-redes  $\sigma$  e  $S$ , respectivamente, e  $z$  é o número de coordenação da rede.

De forma análoga, para a sub-rede  $S$  temos

$$\frac{dP(S, t)}{dt} = - \sum_{S'_i} \omega(S_i \rightarrow S'_i) P(S, t) + \sum_{S'_i} \omega(S'_i \rightarrow S_i) P(S', t) , \quad (5.32)$$

onde  $\omega(S_i \rightarrow S'_i)$  é a probabilidade, por unidade de tempo, para a transição do estado  $S$  para o estado  $S'_i$ , então

$$\frac{dP(S, t)}{dt} = -P(S, t) + \sum_{S'_i} \omega(S'_i \rightarrow S_i) P(S', t) . \quad (5.33)$$

Usamos também a seguinte taxa de transição:

$$\omega_i(S'_i \rightarrow S_i) = \frac{\exp(-\beta \Delta E_i)}{\sum_{S_i} \exp(-\beta \Delta E_i)} , \quad (5.34)$$

onde a soma é sobre todos os três valores possíveis de  $S_i = \pm 1, 0$ , e

$$\Delta E_i = -(S'_i - S_i) \left( J \sum_{\langle j \rangle} \sigma_j \right) - (S'_i - S_i) D , \quad (5.35)$$

é a variação na energia do sistema após mudarmos o spin  $S_i$ . As taxas de transição para todos os três valores possíveis de  $S_i$ , são

$$\omega(1 \rightarrow 0) = \omega(-1 \rightarrow 0) = \frac{\exp(-\beta D)}{2 \cosh(\beta \alpha) + \exp(-\beta D)} , \quad (5.36)$$

$$\omega(1 \rightarrow -1) = \omega(0 \rightarrow -1) = \frac{\exp(-\beta \alpha)}{2 \cosh(\beta \alpha) + \exp(-\beta D)} , \quad (5.37)$$

$$\omega(0 \rightarrow 1) = \omega(-1 \rightarrow 1) = \frac{\exp(\beta \alpha)}{2 \cosh(\beta \alpha) + \exp(-\beta D)} , \quad (5.38)$$

onde  $\alpha = J \sum_{\langle j \rangle} \sigma_j$ . Escrevendo que  $\langle \sum_{\langle j \rangle} \sigma_j \rangle = z \langle \sigma \rangle$ , e substituindo as eqs. (5.36)-(5.38) em (5.33), após algumas manipulações algébricas, chegamos à seguinte equação de movimento para os spins da sub-rede  $S$

$$\frac{d}{dt} \langle S \rangle = - \langle S \rangle + \frac{2 \sinh(\beta J z \langle \sigma \rangle)}{2 \cosh(\beta J z \langle \sigma \rangle) + \exp(-\beta D)}. \quad (5.39)$$

Escrevendo que  $m_1 = \langle \sigma \rangle$  e  $m_2 = \langle S \rangle$  nas eqs. (5.31) e (5.39), respectivamente,

$$\frac{d}{dt} m_1 = -m_1 + \tanh(\beta J z m_2), \quad (5.40)$$

$$\frac{d}{dt} m_2 = -m_2 + \frac{2 \sinh(\beta J z m_1)}{2 \cosh(\beta J z m_1) + \exp(-\beta D)}. \quad (5.41)$$

No estado estacionário onde  $\frac{d}{dt} m_1 = 0$  e  $\frac{d}{dt} m_2 = 0$ , obtemos as seguintes equações para as magnetizações de sub-rede

$$m_1 = \tanh(\beta J z m_2), \quad (5.42)$$

e

$$m_2 = \frac{2 \sinh(\beta J z m_1)}{2 \cosh(\beta J z m_1) + \exp(-\beta D)}. \quad (5.43)$$

Podemos obter soluções a partir de uma análise semelhante à teoria de Landau para as transições de fase em equilíbrio. No entanto, ao contrário daquela teoria, não temos aqui uma energia livre que permita discutir a estabilidade das soluções. No estudo do modelo de Ising em um campo aleatório, Dutta, Chakrabarti e Stinchcombe [54] usaram uma expansão equivalente. Substituindo-se (5.42) em (5.43) e expandindo o lado direito dessa equação com relação ao parâmetro de ordem  $m_2$ , obtemos a seguinte expressão correspondente aos estados estacionários:

$$0 = c_1(T, D)m_2 + c_3(T, D)m_2^3 + c_5(T, D)m_2^5 + \dots \quad (5.44)$$

Os coeficientes da expansão são os seguintes:

$$c_1 = -1 + \frac{2k^2 z^2}{2 + \exp(-\beta D)} , \quad (5.45)$$

$$c_3 = \frac{k^6 z^6}{3[2 + \exp(-\beta D)]} - \frac{2k^4 z^4}{3[2 + \exp(-\beta D)]} - \frac{2k^6 z^6}{[2 + \exp(-\beta D)]^2} , \quad (5.46)$$

$$c_5 = \frac{4k^6 z^6}{15[2 + \exp(-\beta D)]} - \frac{k^8 z^8}{3[2 + \exp(-\beta D)]} - \frac{k^{10} z^{10}}{60[2 + \exp(-\beta D)]} + \frac{2k^{10} z^{10}}{[2 + \exp(-\beta D)]^3} + \frac{2k^8 z^8}{[2 + \exp(-\beta D)]^2} - \frac{k^{10} z^{10}}{2[2 + \exp(-\beta D)]^2} , \quad (5.47)$$

onde  $k = \beta J$ .

Fazendo-se o coeficiente  $c_1 = 0$ , obtemos uma expressão para a linha de transições contínuas

$$\frac{D}{J} = -\frac{1}{k} \ln [2 (k^2 z^2 - 1)] . \quad (5.48)$$

Para  $z = 4$  e  $D = 0$  temos a temperatura crítica  $k_B T_c / J = \frac{4\sqrt{6}}{3}$ , com  $c_3 > 0$ . O ponto tricrítico é dado por  $c_1 = c_3 = 0$  e  $c_5 > 0$ . Temos então  $D_t / J = -3.7197$  e  $k_B T_t / J = 1.7889$ . O diagrama de fases é apresentado na figura 5.3. A linha de transições contínuas foi obtida resolvendo-se a eq. (5.48) para diferentes valores de temperatura. Por outro lado, a linha de transição de primeira ordem foi encontrada resolvendo-se simultaneamente as eqs. (5.42) e (5.43) para diferentes valores de  $D$ , e observando o comportamento das magnetizações de sub-rede em função da temperatura  $T$ . As magnetizações de sub-rede vão descontinuamente a zero quando cruzamos essa linha.

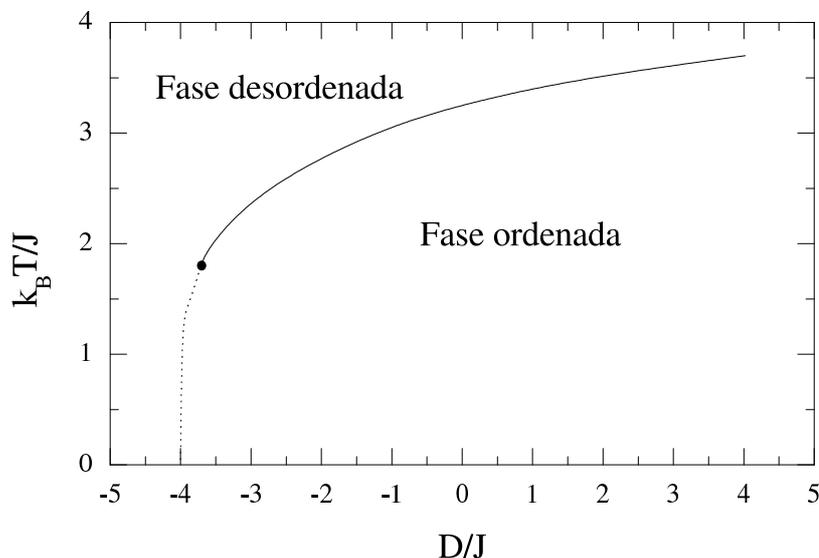


Figura 5.3: Diagrama de fases a campo nulo no plano  $k_B T/J$  contra  $D/J$ , obtido através da aproximação de campo médio dinâmica. A linha cheia representa transições de segunda ordem, enquanto que a linha pontilhada representa transições de primeira ordem.

## 5.4 Aproximação de pares

Nesta seção resolvemos o modelo de Ising de spins mistos com interação de campo cristalino e agora sob a influência dos dois processos dinâmicos competitivos, apresentados nos capítulos anteriores. A Hamiltoniana do sistema que consideramos nesta seção é dada por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \sigma_j - D \sum_j S_j^2, \quad (5.49)$$

onde  $J$  é a constante de acoplamento ferromagnético e  $D$  é a interação de campo cristalino. Os processos dinâmicos competitivos estão descritos no capítulo 2. O conjunto de equações de movimento para as magnetizações de sub-rede (2.10) e (2.11) e para as funções de correlação (2.16), (2.23) e (2.24) é resolvido através da aproximação de pares (os detalhes podem ser encontrados no capítulo 2). Como agora a Hamiltoniana depende também de  $D$ , os estados

estacionários do sistema são encontrados em função de  $T$ ,  $p$  e  $D$ . Logo, temos o seguinte conjunto de equações auto-consistentes para a evolução temporal das magnetizações de sub-rede e funções de correlação:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}m_1 &= pA_1(m_1, m_2, r, q, q_1, D, T) \\ &+ (1-p)D_1(m_1, m_2, r, q, q_1, D, T) , \end{aligned} \quad (5.50)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}m_2 &= pB_2(m_1, m_2, r, q, q_1, D, T) \\ &+ (1-p)E_2(m_1, m_2, r, q, q_1, D, T) , \end{aligned} \quad (5.51)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}q &= pC_2(m_1, m_2, r, q, q_1, D, T) \\ &+ (1-p)F_2(m_1, m_2, r, q, q_1, D, T) , \end{aligned} \quad (5.52)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}r &= pA_{12}(m_1, m_2, r, q, q_1, D, T) \\ &+ (1-p)D_{12}(m_1, m_2, r, q, q_1, D, T) , \end{aligned} \quad (5.53)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}q_1 &= pB_{12}(m_1, m_2, r, q, q_1, D, T) \\ &+ (1-p)E_{12}(m_1, m_2, r, q, q_1, D, T) . \end{aligned} \quad (5.54)$$

As expressões que aparecem do lado direito das eqs. (5.50)-(5.54) são muito extensas, e por isso não as apresentamos explicitamente aqui. Podemos encontrar as soluções estacionárias para essas equações fixando-se valores para as variáveis  $T$ ,  $D$  e  $p$ . As equações são resolvidas numericamente através do método de Runge-Kutta de quarta ordem. As soluções e as fases correspondentes são denominadas da seguinte forma: fase ferromagnética (F),  $m_1 \neq m_2$ ,  $m_1$  e  $m_2$  são ambas positivas; fase paramagnética (P),  $m_1 = m_2 = 0$ ; fase antiferromagnética (AF),  $m_1 \neq m_2$ ,  $m_1$  e  $m_2$  apresentam sinais opostos.

Na figura 5.4 exibimos o diagrama de fases do modelo no plano temperatu-

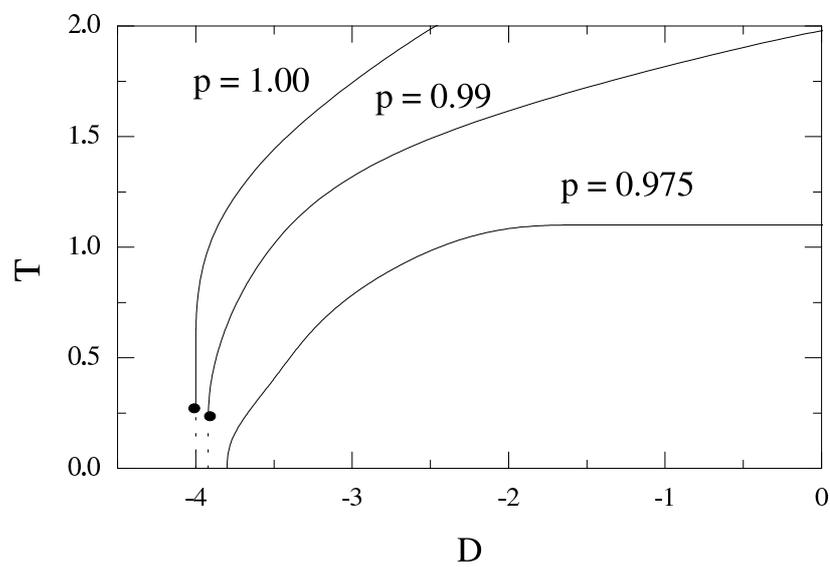


Figura 5.4: Diagrama de fases no plano temperatura  $T$  versus campo cristalino  $D$ , para três valores diferentes do parâmetro de competição  $p$  obtidos através da aproximação de pares dinâmica. As linhas cheias representam transições contínuas enquanto que as linhas pontilhadas transições de primeira ordem. Os círculos sólidos representam pontos tricríticos. Pontos tricríticos existem apenas no intervalo  $1 \geq p \geq 0.976$ .

ra  $T$  versus intensidade do campo cristalino  $D$ , para três valores diferentes do parâmetro de competição  $p$ . A temperatura e o campo cristalino são medidos em unidades de  $J/k_B$ . A curva para  $p = 1$ , onde não há fluxo de energia para o sistema, é uma linha de transições contínuas que termina em um ponto tricrítico em baixas temperaturas. Este resultado está de acordo com cálculos recentes baseados em teorias efetivas de campo médio para sistemas em equilíbrio [16, 55]. Recentemente, alguns cálculos foram considerados para este modelo numa rede de Bethe de número de coordenação  $q$  [56]. Foi mostrado que para  $q < 5$ , a transição de fase é sempre contínua. Estes resultados estão de acordo com cálculos de grupo de renormalização [14] e com simulações de Monte Carlo [17, 57, 58]. Entretanto, como esperado, quando o número de coordenação da rede de Bethe vai para infinito, recuperamos os resultados de campo médio, apresentando um ponto tricrítico no diagrama de fases. Notamos também que nessa aproximação de pares para  $p = 1$ , encontramos uma temperatura tricrítica  $T_t = 0.2620$  que é menor do que aquela encontrada na aproximação de campo médio simples  $T_t = 1.789$ , conforme vimos nas seções 5.2 e 5.3 deste capítulo.

Como podemos observar na figura 5.4, à medida que aumentamos o fluxo de energia para o sistema a temperatura tricrítica move-se para a região de baixas temperaturas. O ponto tricrítico desaparece ( $T_t = 0$ ) para um valor crítico do parâmetro de competição  $p_c = 0.976$ . Para este valor de  $p_c$  temos que  $D_c = -3.8$ .

Apresentamos na figura 5.5 o diagrama de fases do modelo no plano intensidade do campo cristalino  $D$  versus o parâmetro de competição  $p$ , para dois valores selecionados de temperatura. O diagrama de fases apresenta três diferentes fases separadas por diferentes linhas de transição. Para valores de  $p$  no intervalo  $1 > p \gtrsim 0.964$ , e  $D > -4.0$ , o diagrama de fases apresenta uma fase ferromagnética (F). Notamos também que a linha de transição contínua em  $T = 0.1$ , muda para uma linha de primeira ordem para um valor negativo de  $D$ . As coordenadas do ponto tricrítico nesta temperatura são  $p_t = 0.977$  e  $D_t = -3.9$ . Aumentando-se a temperatura, notamos que o ponto tricrítico desaparece para  $T > 0.262$ . Acima desta temperatura temos somente uma

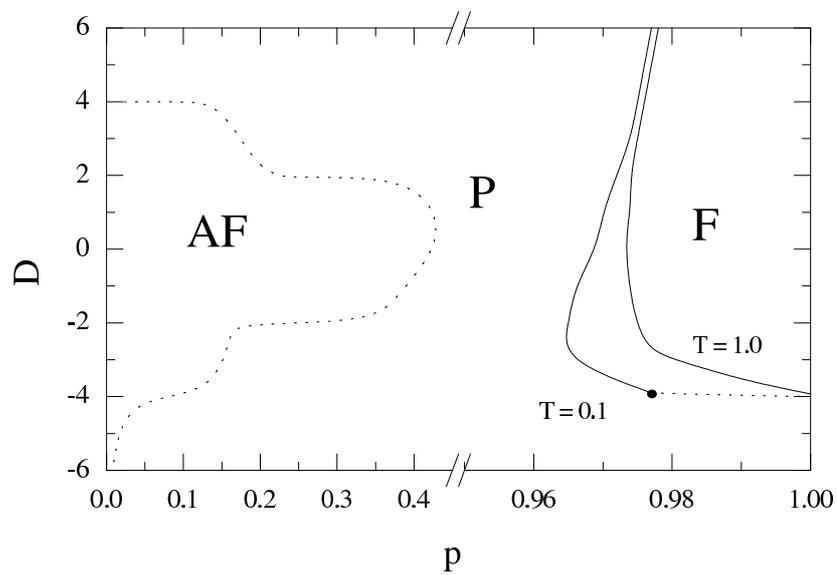


Figura 5.5: Diagrama de fases no plano campo cristalino  $D$  versus parâmetro de competição  $p$ , para dois valores selecionados de temperatura, na aproximação de pares dinâmica. As letras F, AF e P, denotam as fases ferromagnética, antiferromagnética e paramagnética, respectivamente. As linhas cheias representam transições de fase contínuas e as linhas pontilhadas representam transições de primeira ordem. As temperaturas estão indicadas na figura.

linha de transição contínua separando as fases ferromagnética (F) e paramagnética (P). Na figura 5.5 este comportamento é exemplificado pela linha na temperatura  $T = 1.0$ . A área ocupada pela fase ferromagnética (F) aumenta quando a temperatura diminui.

Por outro lado, para valores pequenos de  $p$ , isto é, um grande fluxo de energia para o sistema, observamos a presença de duas fases: as fases antiferromagnética (AF) e paramagnética (P) separadas por uma linha de transições de primeira ordem, para qualquer valor de temperatura. O caráter da transição de primeira ordem pode ser apreciado pela curva de histerese da magnetização de sub-rede em função da intensidade do campo cristalino  $D$ . Na figura 5.6 observamos o ciclo de histerese, indicando que a natureza da transição de fase é claramente de primeira ordem.

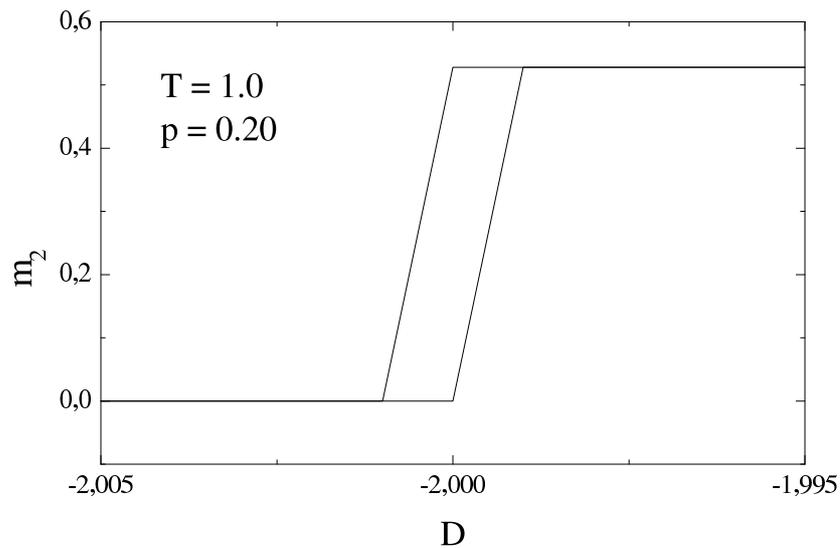


Figura 5.6: Curva de histerese da magnetização de sub-rede correspondente ao ramo inferior da linha de transição de primeira ordem AF-P da figura 5.5.

## 5.5 Simulações de Monte Carlo

Nesta seção apresentamos alguns resultados obtidos para o modelo através de simulações de Monte Carlo, e comparamos com aqueles encontrados na

aproximação de pares. Consideramos uma rede quadrada de tamanho linear  $L$ , com valores de  $L$  no intervalo desde  $L = 16$  até  $L = 128$ , e aplicamos condições periódicas de contorno. Os estados iniciais do modelo correspondem a spins descorrelacionados. Uma nova configuração é gerada pelo seguinte processo de Markov: para um valor selecionado de temperatura  $T$ , intensidade do campo cristalino  $D$ , e do parâmetro de competição  $p$ , escolhemos um spin aleatoriamente na rede, e então geramos um número aleatório  $\xi$  entre zero e um. Se  $\xi \leq p$  consideramos o processo de mudança de um único spin, de acordo com o algoritmo de Banho Térmico. Por outro lado, se  $\xi > p$ , então consideramos o processo de mudança simultânea de um par de spins vizinhos mais próximos. Neste caso, selecionamos aleatoriamente um novo spin, que é vizinho mais próximo do spin escolhido inicialmente, e então o estado é mudado somente se  $\Delta E > 0$ . Aguardamos em torno de  $5 \times 10^4$  MCs para que o sistema atinja o regime estacionário para todos os tamanhos de rede. Usamos mais  $5 \times 10^4$  MCs para calcularmos as médias das quantidade de interesse, para qualquer tamanho de rede.

Calculamos as magnetizações de sub-rede por spin,  $m_1$  e  $m_2$ , definidas por

$$m_1 = \frac{1}{N} \left\langle \sum_i S_i \right\rangle , \quad (5.55)$$

e

$$m_2 = \frac{1}{N} \left\langle \sum_j \sigma_j \right\rangle . \quad (5.56)$$

As linhas de transição no diagrama de fases foram obtidas considerando os seguintes dois parâmetros de ordem: as magnetizações total e alternada, respectivamente, definidas por

$$m_L^F = \frac{1}{2} |(m_1 + m_2)| , \quad (5.57)$$

e

$$m_L^{AF} = \frac{1}{2} |(m_1 - m_2)| . \quad (5.58)$$

Também determinamos os cumulantes de Binder de quarta ordem associados

a essas magnetizações,

$$U_L(m_L) = 1 - \frac{\langle m_L^4 \rangle}{3 \langle m_L^2 \rangle^2} . \quad (5.59)$$

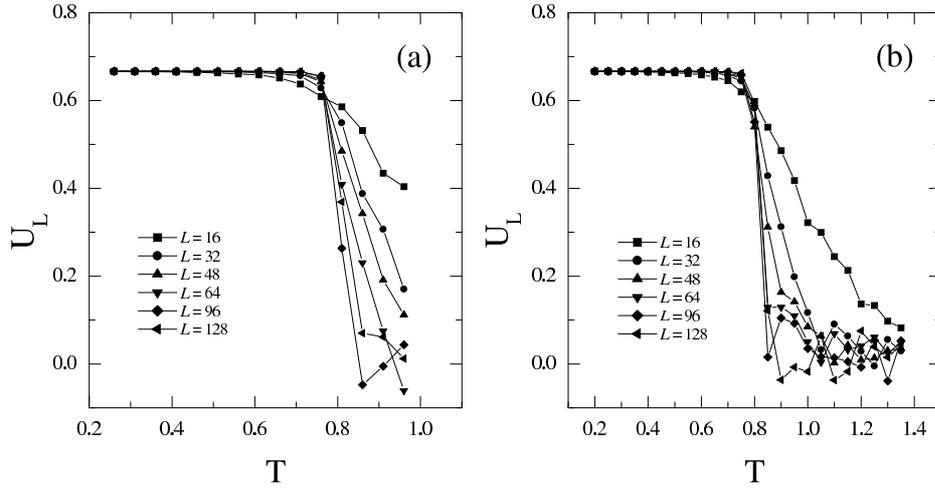


Figura 5.7: Cumulantes de quarta ordem  $U_L$  em função da temperatura  $T$  para  $D = -3.6$  e para dois valores diferentes do parâmetro de competição  $p$ , indicando transições de fase contínuas. (a)  $p = 1.0$  e (b)  $p = 0.99$ .

Os pontos críticos encontrados nos diagramas de fase (ver figuras 5.8 e 5.10) foram determinados pelo cálculo dos cumulantes para os diferentes tamanhos de rede, em função da temperatura. Usamos a propriedade da interseção dos cumulantes para determinar o ponto de transição entre as fases desordenada e ordenada (ver figura 5.7). Na figura 5.7, mostramos os cumulantes de quarta ordem  $U_L$  em função da temperatura  $T$ , para  $D = -3.6$ , e para dois valores diferentes do parâmetro de competição  $p$  ( $p = 1.0$  e  $0.99$ ), indicando uma transição contínua. O caso  $p = 1.0$  representa o modelo de Ising de spins mistos em equilíbrio. Por exemplo, a temperatura crítica para  $D = 0$  é  $T_c = 1.93$ , que pode ser comparada com o valor  $T_c = 1.95$  encontrado por Zhang e Yang, usando o algoritmo de Metropolis.

Na figura 5.8 apresentamos o diagrama de fases do modelo no plano temperatura  $T$  versus campo cristalino  $D$ , para alguns valores de  $p$ . Agora, o diagrama

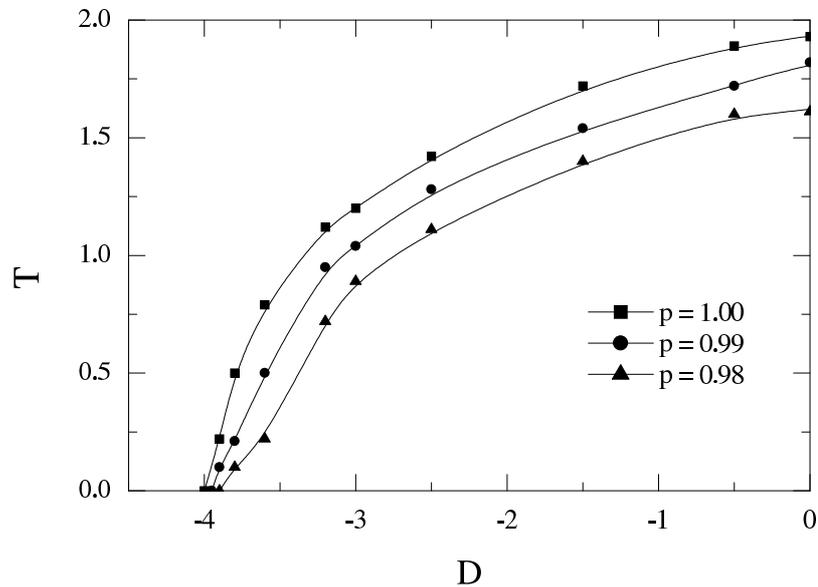


Figura 5.8: Diagrama de fases no plano temperatura  $T$  versus campo cristalino  $D$ , obtido através de simulações de Monte Carlo. O diagrama apresenta somente linhas de transições contínuas para os diferentes valores do parâmetro  $p$  indicados na figura.

de fases exibe somente linhas de transições contínuas, para os três valores diferentes do parâmetro de competição. Então, contrariamente à aproximação de pares, as simulações de Monte Carlo fornecem somente transições contínuas para qualquer valor do parâmetro  $p$ .

Calculamos também os cumulantes para pequenos valores do parâmetro de competição. Na figura 5.9 mostramos a transição de fases entre as fases AF e P. Para esses valores pequenos do parâmetro de competição a dependência dos cumulantes com relação a temperatura é muito fraca. A dinâmica de mudança de dois spins é independente da temperatura. Então, construímos o gráfico dos cumulantes de Binder de quarta ordem em função de  $p$ , para localizar os pontos de transição. Mostramos também que a transição entre as fases AF e P é também contínua para esses valores pequenos de  $p$ .

Na figura 5.10 mostramos o diagrama de fases completo do modelo no plano campo cristalino  $D$  versus parâmetro de competição  $p$ , obtido através das simulações de Monte Carlo. Como na aproximação de pares, encontramos

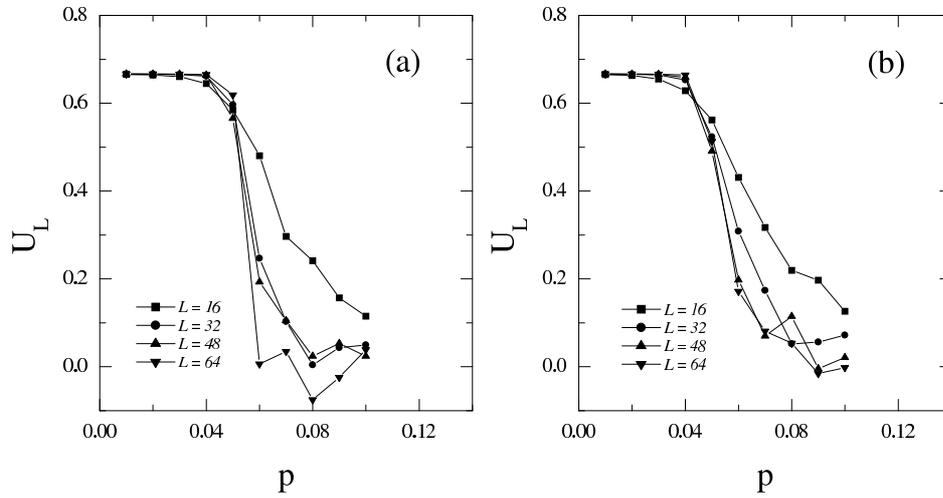


Figura 5.9: Cumulantes de quarta ordem  $U_L$  em função do parâmetro de competição  $p$ . (a)  $D = 2.0$  e (b)  $D = -3.0$ .

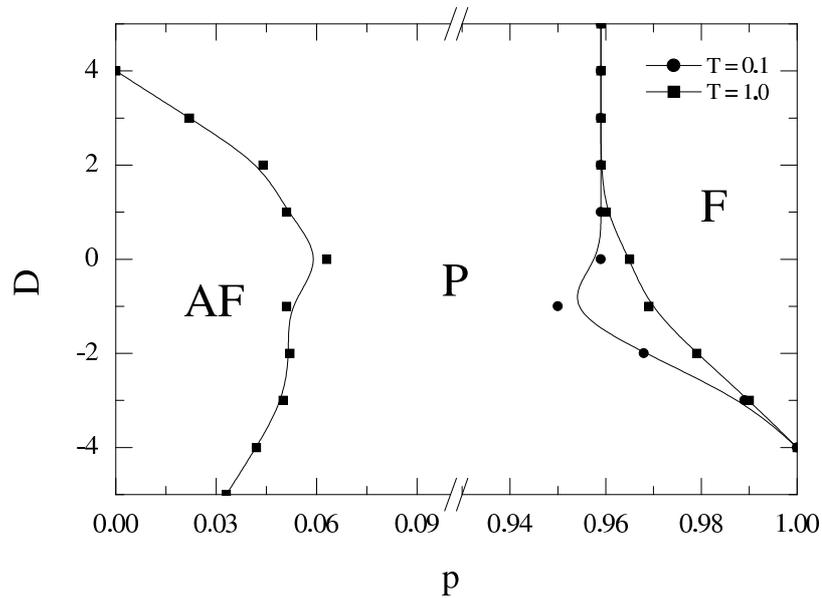


Figura 5.10: Diagrama de fases no plano campo cristalino  $D$  versus parâmetro de competição  $p$ , nas simulações de Monte Carlo, para dois valores selecionados de temperatura, como indicado na figura. As letras F, AF e P, denotam as fases ferromagnética, antiferromagnética e paramagnética, respectivamente. As curvas que ligam quadrados e círculos representam transições contínuas.

as mesmas três fases diferentes observadas na figura 5.5. Entretanto, nas simulações de Monte Carlo, todas as linhas de transição são contínuas, e nenhum ponto tricrítico é observado. Para valores grandes de  $p$  ( $0.95 \leq p < 1.0$ ) e  $D \geq -4$ , a figura 5.10 mostra somente uma fase ferromagnética (F). A área ocupada por esta fase também diminui com o aumento da temperatura. Por outro lado, a fase antiferromagnética (AF) aparece somente para valores pequenos de  $p$ . Na figura 5.10, vemos que ela está restrita à região  $0.0 < p \leq 0.06$ . Comparado ao diagrama de fases determinado no contexto da aproximação de pares, notamos que a fase paramagnética P ocupa uma área muito maior nas simulações.

## Capítulo 6

# Modelo de Ising de spins mistos com desordem temperada

### 6.1 Introdução

Nos capítulos anteriores, estudamos o modelo de Ising de spins mistos numa rede quadrada, a qual foi dividida em duas outras sub-redes, com os spins  $\sigma = 1/2$  ocupando os sítios de uma sub-rede, e os spins  $S = 1$  ocupando os sítios da outra sub-rede. Determinamos o diagrama de fases do modelo através da aproximação de pares e de simulações de Monte Carlo. Agora, introduzimos o modelo de Ising de spins mistos com uma distribuição aleatória dos spins na rede, porém mantendo a concentração de ambas as espécies iguais. Desenvolvemos simulações de Monte Carlo e utilizamos argumentos de escala de tamanho finito para estudar o comportamento crítico do modelo. Estudamos também o efeito da desordem nas propriedades termodinâmicas do sistema no ponto crítico e longe dele. Aqui o modelo obedece ao princípio da reversibilidade microscópica.

Este capítulo está organizado da seguinte forma: a seguir, descrevemos o modelo de Ising de spins mistos aleatório e definimos alguns observáveis de interesse. Na seção 6.3, apresentamos alguns detalhes referentes aos procedimentos das simulações bem como alguns dos resultados obtidos. Na seção 6.4 estudamos a variância relativa de algumas quantidades termodinâmicas do

sistema, e discutimos as propriedades relativas a sua auto-mediação.

## 6.2 Definição do modelo e alguns observáveis de interesse

Consideramos um modelo de Ising de spins mistos com desordem temperada definido em uma rede quadrada de tamanho linear  $L$ . O modelo é definido pela seguinte Hamiltoniana

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -J \sum_{\langle i,j \rangle} \{c_i c_j \sigma_i \sigma_j + (1 - c_i)(1 - c_j) S_i S_j \\ & + c_i(1 - c_j) \sigma_i S_j + c_j(1 - c_i) S_i \sigma_j\} , \end{aligned} \quad (6.1)$$

onde  $S_i = \pm 1, 0$ ,  $\sigma_j = \pm 1/2$ , e a interação entre spins vizinhos mais próximos é ferromagnética,  $J > 0$ . Associamos a cada sítio  $i$  da rede uma variável de ocupação  $c_i$ , tal que se  $c_i = 1$  o sítio está ocupado por uma partícula com spin  $\sigma = 1/2$  e se  $c_i = 0$  está ocupado por uma partícula com spin  $S = 1$ . Os sítios são ocupados de forma independente uns dos outros, e podemos escrever uma distribuição de probabilidades para as variáveis de ocupação da seguinte forma

$$P(c_i) = \frac{1}{2} (\delta_{c_i,0} + \delta_{c_i,1}), \quad i = 1, 2, \dots, N . \quad (6.2)$$

Calculamos algumas quantidades termodinâmicas de interesse tais como: a magnetização  $m_L$ , a energia  $E_L$ , a susceptibilidade  $\chi_L$  e o calor específico  $c_L$ , por spin definidos abaixo como

$$m_L = \left[ \frac{1}{N} \left\langle \left| \sum_{i=1}^N \{(1 - c_i) S_i + c_i \sigma_i\} \right| \right\rangle \right] , \quad (6.3)$$

$$E_L = \frac{1}{N} [\langle \mathcal{H} \rangle] , \quad (6.4)$$

$$\chi_L = N ([\langle m_L^2 \rangle] - [\langle m_L \rangle]^2) , \quad (6.5)$$

$$c_L = N ([\langle E_L^2 \rangle] - [\langle E_L \rangle^2]) . \quad (6.6)$$

Para localizarmos o ponto crítico, usamos o cumulante de Binder de quarta ordem definido como

$$U_L = 1 - \frac{[\langle m_L^4 \rangle]}{3 [\langle m_L^2 \rangle]^2} . \quad (6.7)$$

Nas expressões acima  $[\dots]$  denota a média sobre as amostras do sistema, e  $\langle \dots \rangle$  denota a média térmica. Usamos a teoria de escala de tamanho finito para estimarmos os expoentes críticos estáticos  $\beta$ ,  $\nu$  e  $\gamma$  no ponto crítico do sistema. Em torno do ponto crítico, temos as seguintes relações de escala para as observáveis em um sistema de tamanho finito:

$$m_L(T) = L^{-\beta/\nu} m_{\pm}(L^{1/\nu} \varepsilon) , \quad (6.8)$$

$$\chi_L(T) = L^{\gamma/\nu} \chi_{\pm}(L^{1/\nu} \varepsilon) , \quad (6.9)$$

$$U_L(T) = U_{\pm}(L^{1/\nu} \varepsilon) , \quad (6.10)$$

onde  $\varepsilon = (T - T_c)/T_c$  é a temperatura crítica reduzida, e  $m_{\pm}$ ,  $\chi_{\pm}$  e  $U_{\pm}$  são funções de escala, e os índices  $+$  e  $-$  referem-se a  $T > T_c$  e  $T < T_c$ . Derivando a eq. (6.10) com relação a temperatura  $T$ , obtemos a seguinte relação

$$U'_L(T) = L^{1/\nu} \frac{U'_{\pm}(L^{1/\nu} \varepsilon)}{T_c} . \quad (6.11)$$

Assim, no ponto crítico, as relações de escala (6.8), (6.9) e (6.11), tomam a seguinte forma:

$$m_L(T_c) = L^{-\beta/\nu} m_{\pm}(0) , \quad (6.12)$$

$$\chi_L(T_c) = L^{\gamma/\nu} \chi_{\pm}(0) , \quad (6.13)$$

$$U'_L(T_c) = L^{1/\nu} \frac{U'_{\pm}(0)}{T_c} . \quad (6.14)$$

As relações (6.12) e (6.13), nos dão estimativas para a razão entre os expoentes  $\beta/\nu$  e  $\gamma/\nu$ , respectivamente, e a eq. (6.14) nos permite determinar o expoente crítico  $\nu$  relacionado ao comprimento de correlação.

Como veremos adiante, o calor específico  $c_L$ , em torno da temperatura crítica, diverge muito lentamente quando o tamanho do sistema  $L$  aumenta. Uma proposta razoável é assumir uma divergência logarítmica [59] para o calor específico dada por

$$c_L(T) = c_1 \ln[Lc_{\pm}(L^{1/\nu}\varepsilon)] , \quad (6.15)$$

que no ponto crítico torna-se

$$c_L(T_c) = c_2 + c_1 \ln(L) , \quad (6.16)$$

onde  $c_1$  e  $c_2$  são duas constantes.

### 6.3 Procedimentos e resultados

Técnicas de simulação computacionais têm sido aplicadas a sistemas magnéticos desordenados [21]. Para o estudo do modelo de Ising de spins mistos com desordem temperada usamos a técnica de simulação de Monte Carlo. Consideramos uma rede quadrada de tamanho linear  $L$ , com valores de  $L$  variando desde  $L = 12$  até  $L = 48$  e consideramos condições de contorno periódicas.

Preparamos o sistema com os spins distribuídos aleatoriamente na rede, ou seja, escolhido um sítio da rede, ele pode estar ocupado por um spin do tipo  $\sigma$  ou  $S$ , tendo como primeiros vizinhos spins do tipo  $\sigma$  ou  $S$ . Os spins são distribuídos na rede de tal forma que mantemos constante as concentrações das espécies  $\sigma$  e  $S$ . Aqui, as concentrações foram tomadas iguais. Cada tentativa de mudança do estado de um dado spin na rede é aceita de acordo com a prescrição de Metropolis,  $\omega(\alpha \rightarrow \alpha') = \min[1, \exp(-\beta\Delta E)]$ , onde  $\Delta E$  é a variação de energia ( $E_{\alpha'} - E_{\alpha}$ ), e  $\beta = 1/k_B T$ . Para se atingir o regime de equilíbrio devemos esperar pelo menos  $1 \times 10^6$  MCs (passos de Monte Carlo) para todos os tamanhos de rede considerados. Então, para se estimar os valores médios das quantidades de interesse foram tomadas mais  $5 \times 10^5$  MCs, após o sistema ter atingido o estado de equilíbrio, para qualquer tamanho de rede. As médias sobre a desordem foram realizadas sendo que utilizamos 50 amostras independentes para as redes no intervalo  $12 \leq L \leq 48$ .

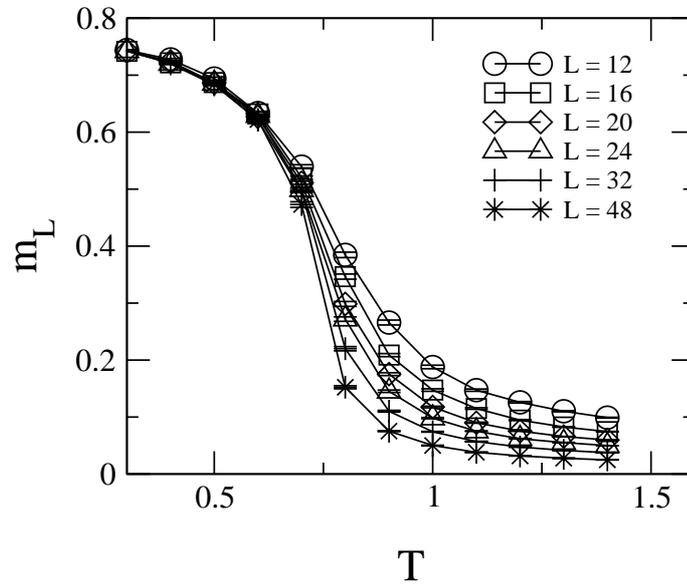


Figura 6.1: Magnetização  $m_L$  em função da temperatura  $T$  para vários tamanhos de rede  $L$  indicados na figura.

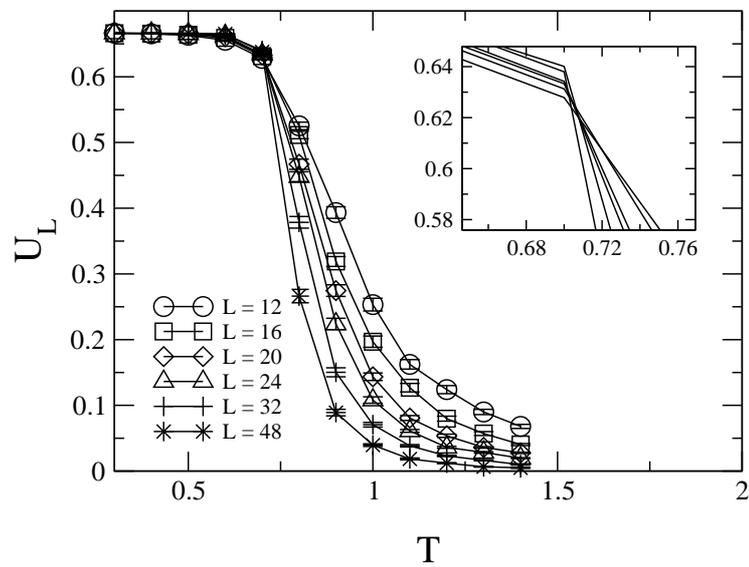


Figura 6.2: Cumulante de quarta ordem  $U_L$  em função da temperatura  $T$  para vários tamanhos de rede  $L$  indicados na figura.

Na figura 6.1 mostramos o comportamento da magnetização em função da temperatura  $T$  para vários tamanhos do sistema. Podemos observar que as magnetizações vão a zero com o aumento da temperatura, o que indica a ocorrência de uma transição de fase. A temperatura é medida em unidades de  $J/k_B$ .

Para se estudar a transição com mais detalhes, calculamos o cruzamento dos cumulantes de Binder de quarta ordem  $U_L$  para estimar o valor da temperatura  $T$  na qual a transição ocorre. De acordo com a teoria de escala de tamanho finito para as transições de fase contínuas, o comportamento de tamanho finito é governado pela razão  $L/\xi$ , onde  $\xi$  é o comprimento de correlação. A relação de escala para o cumulante de quarta ordem mostra que, na temperatura crítica, onde o comprimento de correlação é infinito, todas as curvas devem se cruzar em um único ponto, pois a razão  $L/\xi$  é nula para todos os tamanhos  $L$ . Para encontrar a temperatura crítica, mostramos na figura 6.2 os cumulantes  $U_L(T)$  versus a temperatura  $T$ , para vários tamanhos de rede do sistema. Nossa estimativa para a temperatura crítica adimensional é  $T_c = 0.708 \pm 0.004$ .

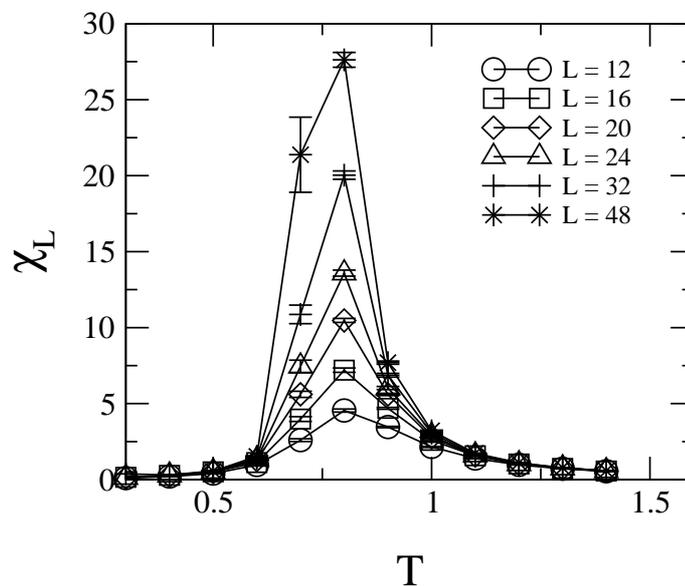


Figura 6.3: Susceptibilidade  $\chi_L$  em função da temperatura  $T$  para vários tamanhos de rede  $L$  indicados na figura.

A susceptibilidade  $\chi_L$  em função da temperatura  $T$  é mostrada na figura 6.3. Para sistemas finitos  $\chi_L$  apresenta um pico característico em torno da temperatura crítica  $T_c$ , que aumenta em altura com o aumento da dimensão linear do sistema  $L$ . Na figura 6.4 apresentamos também as medidas do calor específico. Os picos observados nas curvas do calor específico exibem uma fraca dependência com o tamanho do sistema, se comparados com aqueles da susceptibilidade. A posição do pico do calor específico e da susceptibilidade pode ser pensada como que definindo uma temperatura pseudocrítica  $T^{max}(L)$ , que se aproxima de  $T_c$  quando  $L \rightarrow \infty$  [43], como podemos observar nas figuras 6.3 e 6.4.

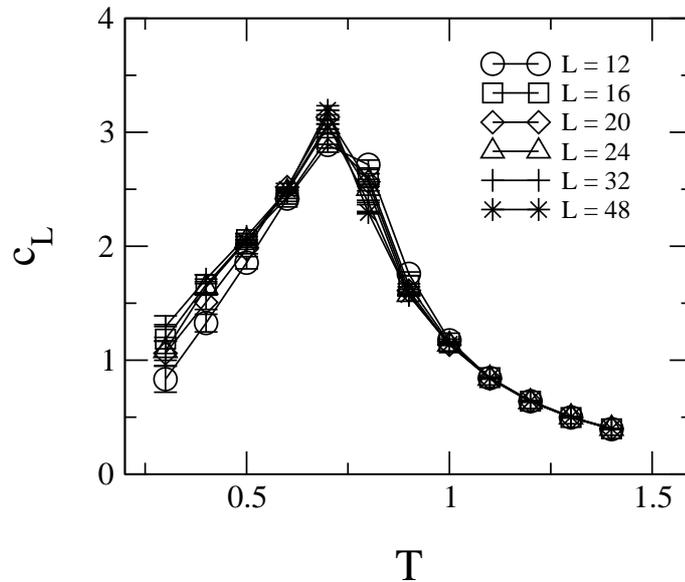


Figura 6.4: Calor específico  $c_L$  em função da temperatura  $T$  para vários tamanhos de rede  $L$  indicados na figura.

A partir das simulações de Monte Carlo, podemos também calcular os expoentes críticos do modelo. Por exemplo, na figura 6.5 (a), mostramos o gráfico log-log de  $m_L$  em função da dimensão linear  $L$  no ponto crítico. O melhor ajuste aos dados nos fornece o valor  $\beta/\nu = 0.125 \pm 0.005$ . Um outro expoente crítico estático de interesse é aquele associado à susceptibilidade. A partir do gráfico log-log de  $\chi_L$  no ponto crítico, podemos determinar a razão

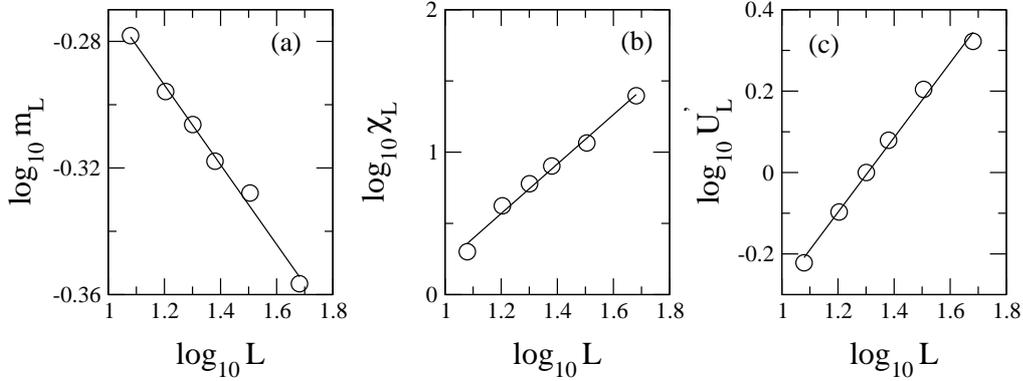


Figura 6.5: Gráficos log-log (a) do parâmetro de ordem  $m_L$ , (b) da susceptibilidade  $\chi_L$  e (c) da derivada do cumulante  $U_L$  em função do tamanho linear da rede, no ponto crítico. A linha reta representa o melhor ajuste para os dados. Os tamanhos dos círculos são escolhidos de tal forma que as barras de erro fiquem dentro deles.

entre os expoentes  $\gamma$  e  $\nu$ . Na figura 6.5 (b), a inclinação da linha reta, que nos fornece o melhor ajuste aos dados da simulação dá  $\gamma/\nu = 1.74 \pm 0.09$ . O expoente  $\nu$ , que está relacionado ao comprimento de correlação, pode ser obtido da eq. (6.14). Vimos que, na temperatura crítica  $T_c$ , a derivada do cumulante  $U'_L(T_c)$  se escala com  $L^{1/\nu}$ . Então, do gráfico log-log de  $U'_L$  versus o comprimento  $L$ , o melhor ajuste aos dados de Monte Carlo nos fornece  $\nu = 1.08 \pm 0.04$  (figura 6.5 (c)).

Na figura 6.6 mostramos o comportamento de escala para a divergência logarítmica do calor específico. Os valores do máximo do calor específico  $c_L^{max}(T_c)$  foram ajustados pela eq. (6.16), e apresentados na figura 6.6, onde as constantes são  $c_1 = 2.43 \pm 0.04$  e  $c_2 = 0.45 \pm 0.03$ .

Como vimos anteriormente, uma outra alternativa para se estimar os valores dos expoentes críticos é pelo colapso dos dados. Apresentamos os gráficos de  $m_L L^{\beta/\nu}$  (figura 6.7 (a)) e  $\chi_L L^{-\gamma/\nu}$  (figura 6.7 (b)) contra  $|\varepsilon| L^{1/\nu}$ . Os dados para todos os tamanhos de rede considerados estão localizados em dois ramos: um para  $\varepsilon > 0$  e outro para  $\varepsilon < 0$ , onde  $\varepsilon = (T - T_c)/T_c$ . A fase desordenada é dada por  $\varepsilon > 0$ . A partir da inclinação destas curvas para valores grandes do parâmetro  $|\varepsilon| L^{1/\nu}$  podemos determinar os expoentes  $\beta$  e  $\gamma$ , no caso de  $\varepsilon > 0$ . Por outro lado, os outros ramos, para valores grandes de  $|\varepsilon| L^{1/\nu}$ , nos dão

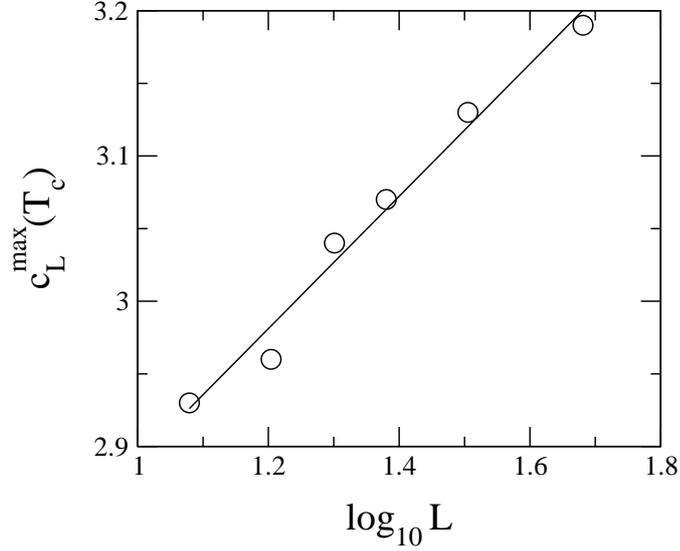


Figura 6.6: Gráfico do valor máximo do calor específico em função do tamanho linear do sistema  $L$ , no ponto crítico. A linha reta representa o melhor ajuste para os pontos, usando a Eq. (6.16). As constantes encontradas pelo ajuste são  $c_1 = 2.43 \pm 0.04$  e  $c_2 = 0.45 \pm 0.03$ .

$\beta - \nu$  e  $\gamma$ , se  $\varepsilon < 0$ . Os melhores valores encontrados para os expoentes críticos empregando o procedimento descrito acima são os seguintes:  $\beta = 0.125 \pm 0.001$ ,  $\gamma = 1.74 \pm 0.01$  e  $\nu = 1.01 \pm 0.02$ .

## 6.4 Auto-mediação

Nesta seção, estudamos como a variância relativa  $R_P(L)$  se escala com o tamanho  $L$  do sistema. A variância relativa da média térmica de uma quantidade física qualquer  $\langle P \rangle$ , é definida por

$$R_P(L) = \frac{[\langle P^2 \rangle] - [\langle P \rangle]^2}{[\langle P \rangle]^2}. \quad (6.17)$$

Se diz que uma propriedade termodinâmica de um sistema exibe auto-mediação se  $R_P(L) \rightarrow 0$  para  $L \rightarrow \infty$  [28, 60]. Para calcular a variância relativa utilizamos cerca de 100 amostras para qualquer tamanho de rede  $L$  ( $16 \leq L \leq 128$ ).

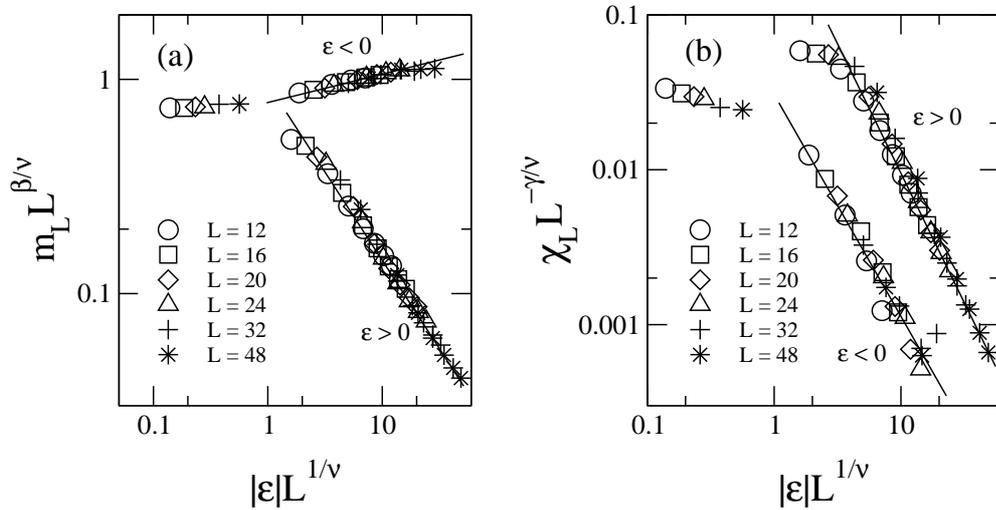


Figura 6.7: Colapso dos dados em torno do ponto crítico da transição entre as fases ordenada e desordenada do (a) parâmetro de ordem  $m_L$ , e da (b) susceptibilidade  $\chi_L$ , para diferentes valores de  $L$  como indicado nas figuras. O parâmetro  $\epsilon$  é definido por  $\epsilon = (T - T_c)/T_c$ . As linhas retas representam o comportamento assintótico das funções de escala. Os melhores valores determinados para os expoentes críticos são  $\nu = 1.01 \pm 0.02$ ,  $\beta = 0.125 \pm 0.001$  e  $\gamma = 1.74 \pm 0.01$ .

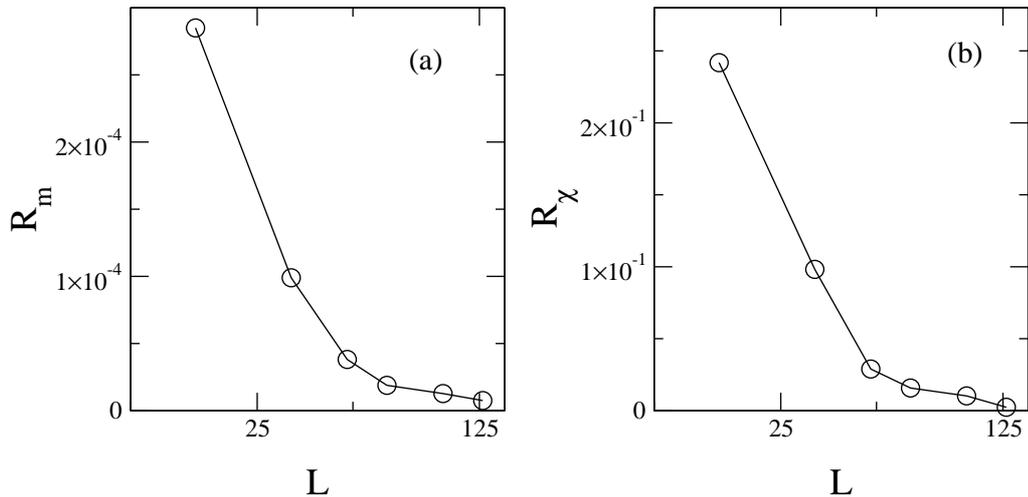


Figura 6.8: Gráficos da variância relativa (longe do ponto crítico, para  $T = 0.4$ ) contra o tamanho linear da rede  $L$ . (a) Variância relativa da magnetização  $m$ , (b) variância relativa da susceptibilidade  $\chi$ .

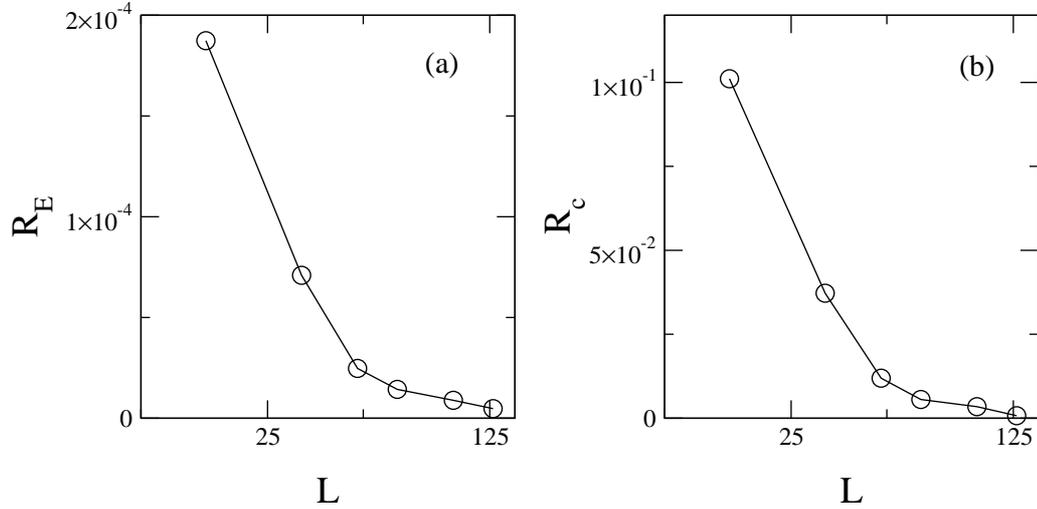


Figura 6.9: Gráficos da variância relativa (longe do ponto crítico, para  $T = 0.40$ ) contra o tamanho linear da rede  $L$ . (a) Variância relativa da energia  $E$ , (b) variância relativa do calor específico  $c$ .

### 6.4.1 Variância relativa longe do ponto crítico

Longe da criticalidade, o comprimento de correlação é finito e se espera que o sistema se comporte similarmente a uma coleção de sistemas pequenos e independentes. O argumento de Brout [24] prediz que a variância se escala com  $L^{-d}$  (onde  $d = 2$  é a dimensão do sistema). Mostramos a seguir que esse argumento é realmente confirmado para as quantidades físicas calculadas longe do ponto crítico. Para isso, calculamos o valor de  $d$  fazendo-se um gráfico log-log de  $R_P(L)$  contra  $L$ . A inclinação dará o valor esperado da dimensão espacial. Por exemplo, os valores que encontramos para  $\chi$  e  $c$  são  $d = 2.10 \pm 0.09$ ,  $2.19 \pm 0.20$ , respectivamente. Os resultados mostram que o argumento de Brout parece ser confirmado, e que as grandezas calculadas são fortemente auto-mediadas distante do ponto crítico.

Calculamos a variância relativa para a temperatura  $T = 0.40$  ( $T_c = 0.708$ ). Na figura 6.8, apresentamos a variância relativa para a magnetização  $R_m(L)$  e para a susceptibilidade  $R_\chi(L)$ , em função da dimensão linear do sistema, longe do ponto crítico. Quando  $L \rightarrow \infty$ , as variâncias vão para zero, o que confirma

que estas quantidades físicas são fortemente auto-mediadas. Podemos observar o mesmo comportamento para a variância relativa da energia  $R_E(L)$  e do calor específico  $R_c(L)$ , como mostrado na figura 6.9.

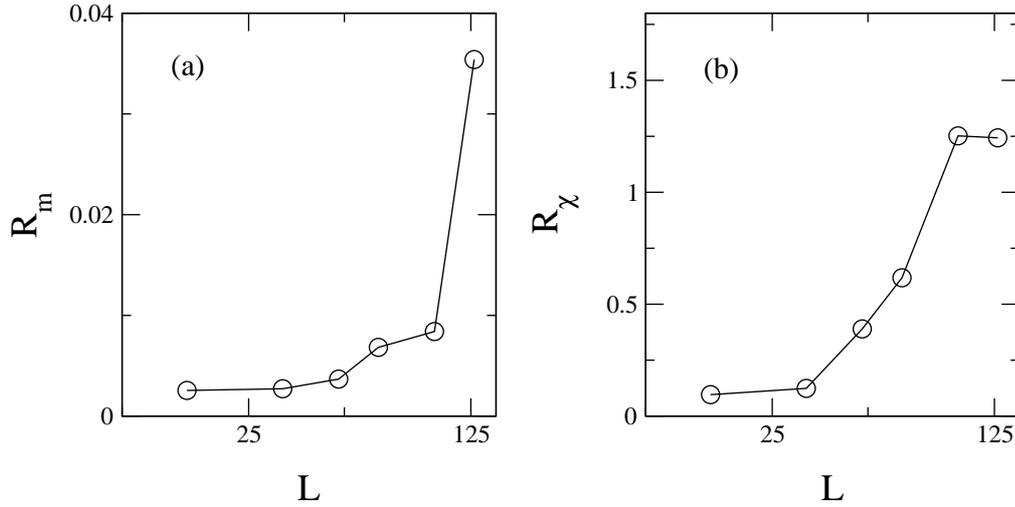


Figura 6.10: Gráficos da variância relativa (no ponto crítico, para  $T = 0.708$ ) contra o tamanho linear da rede  $L$ . (a) Variância relativa da magnetização  $m$ , (b) variância relativa da susceptibilidade  $\chi$ .

### 6.4.2 Variância relativa no ponto crítico

Na figura 6.10 apresentamos a variância relativa  $R_m(L)$  para a magnetização  $m$  e  $R_\chi(L)$  para a susceptibilidade  $\chi$ , em função da dimensão linear do sistema  $L$ , na temperatura crítica  $T_c$ . Como podemos observar  $R_m(L)$  e  $R_\chi(L)$  não vão a zero quando o tamanho da rede  $L$  aumenta: logo, a magnetização e a susceptibilidade não são auto-mediadas na criticalidade. Entretanto, na figura 6.11, apresentamos a variância relativa  $R_E(L)$  para a energia  $E$ , e  $R_c(L)$  para o calor específico  $c$ , na temperatura crítica.  $R_E(L)$  e  $R_c(L)$  são grandes para  $L$  pequeno, mas tornam-se pequenos para  $L$  grande. De qualquer forma, é fácil perceber que  $R_E(L)$  e  $R_c(L) \rightarrow 0$  quando  $L \rightarrow \infty$ . Logo podemos afirmar que estas quantidades exibem uma fraca auto-mediação (*weak self-averaging*). Em outras palavras, na criticalidade, as médias térmicas da energia e do calor

específico flutuam pouco de amostra para amostra quando o sistema torna-se muito grande [29].

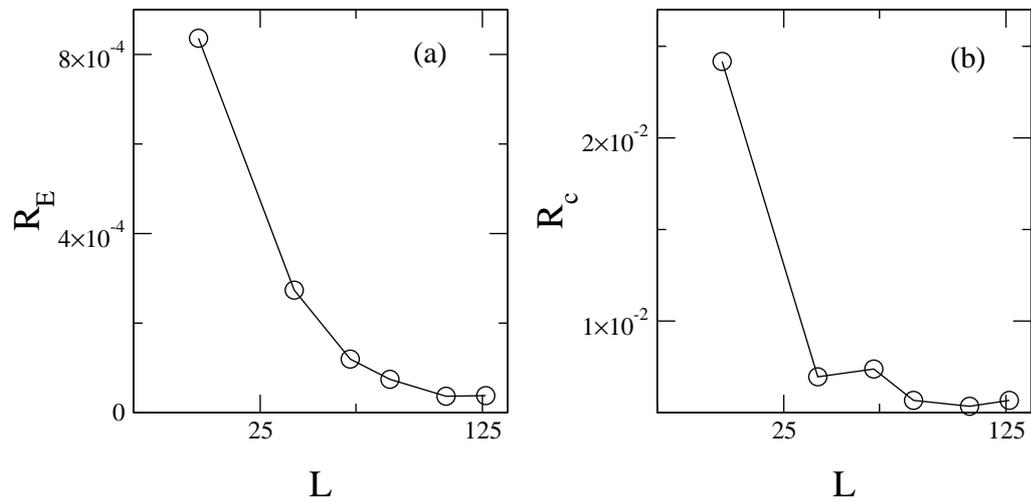


Figura 6.11: Gráficos da variância relativa (no ponto crítico, para  $T = 0.708$ ) contra o tamanho linear da rede  $L$ . (a) Variância relativa da energia  $E$ , (b) variância relativa do calor específico  $c$ .

## Capítulo 7

### Conclusões e perspectivas

Na presente tese estudamos inicialmente um modelo de Ising de spins mistos ferromagnético em uma rede quadrada. Spins de magnitude  $\sigma = 1/2$  foram colocados em uma das sub-redes, enquanto que spins de magnitude  $S = 1$  foram colocados na outra sub-rede. O sistema está em contato com um banho térmico numa temperatura fixa e, ao mesmo tempo, sujeito a um fluxo externo de energia. O contato com o banho térmico é simulado pela mudança de um único spin na unidade de tempo (processo de Glauber), com probabilidade  $p$ , enquanto que o fluxo de energia é descrito por um processo envolvendo a mudança simultânea de um par de spins vizinhos mais próximos, com probabilidade  $(1 - p)$ . Através de simulações de Monte Carlo e argumentos de escala de tamanho finito determinamos o diagrama de fases do modelo no plano temperatura  $T$  versus parâmetro de competição  $p$ . Mostramos que o diagrama de fases contém três fases separadas por duas linhas de transições contínuas e apresenta a mesma topologia que o obtido na aproximação de pares. Quando o fluxo de energia é muito pequeno o sistema está ordenado, com os spins de ambas as sub-redes apontando no mesmo sentido. Para valores grandes do fluxo de energia, o sistema está também ordenado, mas com os spins das sub-redes apontando em sentidos opostos. Para quase todos os valores de  $p$ , o diagrama de fases exibe uma fase paramagnética bem definida onde as magnetizações de sub-rede são nulas.

Em seguida, estudamos o caso com acoplamento antiferromagnético entre

os spins  $\sigma$  e  $S$ . Mostramos que o diagrama de fases também contém três fases separadas por duas linhas de transições contínuas. Quando o fluxo de energia é muito pequeno o sistema está ordenado antiferromagneticamente, enquanto que para valores grandes do fluxo de energia, o sistema fica em um estado estacionário ferromagnético. Para valores intermediários do fluxo de energia o sistema permanece num estado paramagnético. O diagrama de fases é similar ao encontrado no caso ferromagnético. Mudando-se o sinal do acoplamento magnético é equivalente a trocar no diagrama de fases o lugar ocupado pelas fases ferromagnética e antiferromagnética. Esta simetria não é observada para o modelo de Ising puro quando mudamos o sinal do acoplamento magnético e o mecanismo de troca de dois spins é do tipo Kawasaki. A conservação do parâmetro de ordem na cinética de Kawasaki destrói a fase ferromagnética.

Determinamos também os expoentes críticos  $\nu$ ,  $\beta$  e  $\gamma$  para o modelo de Ising de spins mistos ferromagnético e antiferromagnético. Os valores que encontramos para os expoentes críticos estáticos destes modelos fora do equilíbrio termodinâmico os coloca na mesma classe de universalidade do modelo de Ising bidimensional, no equilíbrio.

Estudamos também o modelo de Ising de spins mistos com a inclusão do termo de campo cristalino. Inicialmente, fizemos um estudo preliminar do modelo usando duas abordagens diferentes a nível de campo médio: uma em que obtemos uma expressão para a energia livre, e uma outra onde resolvemos o conjunto de equações de movimento obtido a partir do formalismo da equação mestra. Em ambos os casos foram analisados apenas os estados de equilíbrio do modelo. Os diagramas de fases obtidos, no plano temperatura  $T$  versus intensidade do campo cristalino  $D$ , são idênticos, e exibem um ponto tricrítico. Em seguida, estudamos o modelo sujeito a dois processos dinâmicos competitivos. No estudo deste modelo aplicamos a aproximação de pares dinâmica e simulações de Monte Carlo. Determinamos o seu diagrama de fases no plano  $T$  versus  $D$ , para vários valores do parâmetro de competição  $p$ , e encontramos uma linha de pontos tricríticos para esse sistema termodinâmico fora do equilíbrio somente na aproximação de pares. Construímos ainda o diagrama de fases correspondente no plano campo cristalino  $D$  versus parâ-

---

metro de competição  $p$ . Nossos cálculos, baseados na aproximação de pares e nas simulações, fornecem um diagrama de fases onde aparecem três fases diferentes: ferromagnética, antiferromagnética e paramagnética. Observamos que a área ocupada pela fase paramagnética é maior nas simulações do que na aproximação de pares. No entanto, a aproximação de pares prediz pontos tricríticos para valores grandes de  $p$ , o que não é confirmado nas simulações de Monte Carlo, onde as transições são todas contínuas.

Finalmente, estudamos o modelo de Ising de spins mistos com desordem temperada numa rede quadrada. O modelo consiste de dois tipos diferentes de partículas com spins  $\sigma = 1/2$  (estados  $\pm 1/2$ ) e  $S = 1$  (estados  $\pm 1, 0$ ). Estas partículas são distribuídas aleatoriamente na rede, e consideramos somente interações entre spins primeiros vizinhos. Através de simulações de Monte Carlo e argumentos de escala de tamanho finito, calculamos os expoentes críticos estáticos  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\nu$  e mostramos que este modelo está na mesma classe de universalidade do modelo de Ising bidimensional. Investigamos também o comportamento da variância relativa de algumas quantidades termodinâmicas. Mostramos que na criticalidade as grandezas termodinâmicas tais como a magnetização e a susceptibilidade não são auto-mediadas, embora a energia e o calor específico apresentem uma fraca auto-mediação. Por outro lado, longe do ponto crítico, os resultados encontrados estão de acordo com os argumentos de Brout.

Como uma perspectiva para trabalhos futuros nessa área, destacamos um estudo mais sistemático acerca da temperatura de compensação que apresenta algum interesse tecnológico. Por exemplo, seria interessante investigar o comportamento do ponto de compensação de sistemas de spins mistos fora do equilíbrio, particularmente quando o sistema é submetido a um fluxo externo de energia, como vimos nesta tese.

Além desse tópico, a inclusão de campo magnético externo variável poderia nos dar indicações relativas ao ciclo de histerese desses sistemas, bem como verificar o aumento da coercividade na temperatura de compensação quando a intensidade do campo magnético aumenta.

## Referências Bibliográficas

- [1] D. Gatteschi, O. Kahn, J. S. Miller e F. Palacio, *Magnetic Molecular Materials* (NATO ASI Series), Kluwer Academic, Dordrecht, (1991).
- [2] R. D. Willet, Z. Wang, S. Molnar, K. Brewer, C. P. Landee, M. M. Turnbull e W. Zhang, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **23**, 277 (1993).
- [3] G. Du, J. Joo e A. Epstein, *J. Appl. Phys.* **73**, 6566 (1993).
- [4] G. A. N. Cornell, R. Allen e M. Mansuripur, *J. Appl. Phys.* **53** (11), 7759 (1982).
- [5] S. Ohkoshi, Y. Abe, A. Fujishima e K. Hashimoto, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 1285 (1999).
- [6] A. F. Siqueira e I. P. Fittipaldi, *J. Magn. Magn. Mater.* **54**, 678 (1986).
- [7] A. Bobak e M. Jascur, *Phys. Rev. B* **51**, 1153 (1995).
- [8] G. M. Buendía e J. A. Liendo, *J. Phys.: Condens. Mater.* **9**, 5439 (1997).
- [9] W. Figueiredo, M. Godoy e V. S. Leite, *Braz. J. of Phys.* **34**, (2004).
- [10] M. Godoy, V. S. Leite e W. Figueiredo, *Phys. Rev. B* **69**, 054428 (2004).
- [11] G. J. A. Hunter, R. C. L. Jenkins e C. J. Tinsley, *J. Phys. A: Math. Gen.* **23**, 4547 (1990).
- [12] R. G. Bowers e B. Y. Yousif, *Phys. Lett.* **96A**, 49 (1983).

- [13] H. F. Verona de Resende, F. C. Sá Barreto e J. A. Plascak, *Physica A* **149A**, 606 (1988).
- [14] S. G. A. Quadros e S. R. Salinas, *Physica A* **206**, 479 (1994).
- [15] B. Boechat, R. Filgueiras, L. Marins, C. Cordeiro e N. S. Branco, *Physica A* **304**, 429 (2002).
- [16] T. Kaneyoshi, *Solid State Communic.* **70**, 975 (1989); *Physica A* **205**, 677 (1994).
- [17] G. M. Buendía e M. A. Novotny, *J. Phys.: Condens. Matter* **9**, 5951 (1997).
- [18] C. Domb, *Adv. Phys.* **9**, 149 (1960).
- [19] L. L. Gonçalves, *Phys. Scr.* **32**, 248 (1985).
- [20] A. P. Vieira, J. X. de Carvalho e S. R. Salinas, *Phys. Rev. B* **63**, 184415 (2001).
- [21] R. B. Stinchcombe, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, by C. Domb e J. L. Lebowitz (Academic, New York, 1983), Vol. 7.
- [22] M. Mézard, G. Parisi e M. A. Virasoro, in *Spin Glasses Theory and Beyond* (World Scientific, Singapore, 1987).
- [23] A. P. Young, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **9**, 2103 (1976).
- [24] R. Brout, *Phys. Rev.* **115**, 824 (1959).
- [25] K. Binder e A. P. Young, *Rev. Mod. Phys.* **58**, 976 (1986).
- [26] S. Wiseman e E. Domany, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 22 (1998).
- [27] S. Wiseman e E. Domany, *Phys. Rev. E* **58**, 2938 (1998).
- [28] A. Aharony e A. B. Harris, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3700 (1996).
- [29] S. Wiseman e E. Domany, *Phys. Rev. E* **52**, 3469 (1995).

- [30] J. Marro e R. Dickman, *Nonequilibrium Phase Transitions in Lattice Models* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 1999).
- [31] V. Privman, ed., *Nonequilibrium Statistical Mechanics in One Dimension* (Cambridge University Press, Cambridge, 1996).
- [32] R. J. Glauber, *J. Math. Phys.* **4**, 294 (1963).
- [33] M. Godoy e W. Figueiredo, *Phys. Rev. E* **61**, 218 (2000).
- [34] T. Tomé e M. J. de Oliveira, *Phys. Rev. A* **40**, 6643 (1989).
- [35] K. Kawasaki, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, ed. by C. Domb e M. S. Green (Academic, London, 1972), Vol. 2, p. 443.
- [36] W. Figueiredo e B. C. S. Grandi, *Braz. J. Phys.* **30**, 58 (2000).
- [37] T. Tomé e M. J. de Oliveira, *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade* (Editora da Universidade de São Paulo, São Paulo, 2001).
- [38] M. Newman e G. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics* (Oxford University Press, Oxford, 1999).
- [39] N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller e E. Teller, *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953).
- [40] S. R. Salinas, *Introdução a Física Estatística* (Editora da Universidade de São Paulo, São Paulo, 1997).
- [41] L. D. Landau e E. Lifshitz, *Statistical Physics* (Pergamon, London, 1981).
- [42] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher e M. E. J. Newman, *An Introduction to the Renormalization Group* (Clarendon Press, Oxford, 1992).
- [43] V. Privman, ed., *Finite-Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems* (World Scientific, Singapore, 1990).
- [44] G. Grinstein, C. Jayaparakash e Yu He, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 2527 (1985).

- [45] J. F. F. Mendes, *Dinâmicas Estocásticas em Modelos de Spins*, Tese de Doutorado, Universidade do Porto, Porto, Portugal, (1994).
- [46] A. B. Harris, *J. Phys. C* **7**, 1671 (1974).
- [47] M. Godoy, *Dinâmica do Modelo de Ising Ferromagnético com Spins Mistos  $\sigma = 1/2$  e  $S = 1$* , Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, Brasil (1999).
- [48] K. Binder in *Finite-Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems*, ed. by V. Privman (World Scientific, Singapore, 1990).
- [49] K. Binder e D. W. Heermann, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics. An Introduction*, 3rd edn. (Springer, Berlin, 1997).
- [50] M. Godoy e W. Figueiredo, *Phys. Rev. E* **65**, 026111 (2002).
- [51] B. C. S. Grandi e W. Figueiredo, *Phys. Rev. E* **53**, 5484 (1996).
- [52] B. C. S. Grandi e W. Figueiredo, *Phys. Rev. E* **56**, 5240 (1997).
- [53] T. Kaneyoshi e J. C. Chen - *J. Magn. Magn. Mater.*, 201 (1991).
- [54] A. Dutta, B. K. Chakrabarti e R. B. Stinchcombe, *J. Phys. A: Math. Gen.* **29**, 5285 (1996).
- [55] A. L. de Lima, B. D. Stošić e I. F. Fittipaldi, *J. Magn. Magn. Mater.* **226**, 635 (2001).
- [56] E. Albayrak e M. Keskin, *J. Magn. Magn. Mater.* **261**, 196 (2003).
- [57] G. -M. Zhang e C. -Z. Yang, *Phys. Rev. B* **48**, 9452 (1993).
- [58] G. M. Buendía, M. A. Novotny e J. Zhang, in: D. P. Landau, K. K. Mon e H. B. Schüttler (eds.), *Springer Proceedings in Physics, Vol. 78, Computer Simulations in Condensed Matter Physics VII*, Springer, Heidelberg, 1994, p. 223.

- [59] G. Korniss, C. J. White, P. A. Rikvold e M. A. Novotny, Phys. Rev. E **63**, 016120 (2000).
- [60] A. M. Ferrenberg, D. P. Landau e K. Binder, J. Stat. Phys. **63**, 867 (1991).