

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS

Instituto de Ciências Exatas – ICEX

Programa de Pós-Graduação em Física

**MODELO DE ISING ANTIFERROMAGNÉTICO EM
UM CAMPO EXTERNO:**

Simulação por Amostragem Entrópica

Bruno Jeferson Lourenço

Belo Horizonte

2011

Bruno Jeferson Lourenço

MODELO DE ISING ANTIFERROMAGNÉTICO EM UM
CAMPO EXTERNO:
Simulação por Amostragem Entrópica

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação do Departamento de Física do Instituto de Ciências Exatas da Universidade Federal de Minas Gerais como requisito parcial à obtenção do grau de Mestre em Física.

Orientador: Ronald Dickman

Belo Horizonte
2011

Agradecimentos

Agradeço primeiramente à Deus por me dar todas as condições possíveis para estar realizando mais este sonho.

Agradeço meu pai e meu irmão pelo apoio incondicional, incentivo, carinho e amizade ao longo de todos esses anos e em todos os momentos.

Ao meu orientador Ronald Dickman – com o qual me sinto um privilegiado em trabalhar – pela oportunidade, confiança, dedicação e paciência.

Às minhas professoras Adriana Dickman e Maria Eugênia pelo incentivo, dedicação, apoio e confiança.

Aos meus amigos e colegas de estudos pela amizade e ajuda.

Aos funcionários da biblioteca do departamento de Física pelo excelente atendimento, atenção e ajuda.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo apoio financeiro.

Epígrafe

“O cientista não estuda a natureza por sua utilidade prática; ele a estuda por prazer, que advém do fato de ela ser bela. Se a natureza não fosse bela, não valeria a pena conhecê-la, e se não valesse a pena conhecê-la, não valeria a pena viver.”

Henry Poincaré

Resumo

Nesse trabalho estudamos o modelo de Ising antiferromagnético na presença de um campo externo na rede quadrada através de um novo método de amostragem, chamado *tomographic entropic sampling* (amostragem entrópica tomográfica). Esse novo algoritmo de amostragem entrópica se propõe a realizar um passeio completo por *todo* espaço configuracional, sem a necessidade de utilização de “janelas”, a fim de obter boas estimativas do número de configurações, Ω , dos estados do sistema em estudo. Tendo em vista esse propósito do algoritmo de amostragem entrópica tomográfica, definimos algumas *classes de configurações* fundamentais da rede quadrada no espaço energia–magnetização. Tais classes de configurações formam um conjunto básico e fundamental, das quais *todas* as possíveis configurações do sistema fazem parte – com isso podemos ter certeza de que todo espaço configuracional é visitado durante a amostragem. Realizamos estimativas de $\Omega(L)$ para $L = 10$ à 30 , com $\Delta L = 2$. Assim, calculamos as médias microcanônicas e canônicas das quantidades termodinâmicas de interesse. Lançamos mão da análise de escala de tamanho finito para estimar alguns pontos ao longo da linha crítica no plano h – T e comparamos esses resultados com uma aproximação teórica, deduzida por Müller-Hartmann e Zittartz, que fornece uma expressão analítica para a linha crítica do modelo de Ising antiferromagnético em um campo externo. Também estudamos os cruzamentos dos cumulantes de Binder do parâmetro de ordem em um ponto crítico. Além disso, em três pontos distintos ao longo da linha crítica, estudamos as propriedades críticas do sistema e estimamos os expoentes críticos associados ao parâmetro de ordem, ϕ , e à susceptibilidade alternada (associada ao parâmetro de ordem), χ_ϕ .

Abstract

In this work we study the Ising antiferromagnetic model in an external magnetic field on the square lattice using a new sampling method, called *tomographic entropic sampling*. The purpose of this new entropic sampling algorithm is to visit the *whole* configurational space to yield good estimates of the number of system configurations, Ω . To do so, we define fundamental classes of configurations on the square lattice. These classes partition the set of accessible configurations. In this way we can be sure that all possible classes are visited during the sampling. We estimate $\Omega(L)$ from $L = 10$ to 30 , using $\Delta L = 2$. Then we calculate the microcanonical and canonical averages of the thermodynamic quantities of interest. We use finite size scaling analysis to determine the critical line in the h - T plane, and compare these results with an approximate theoretical expression derived by Müller-Hartmann and Zittartz. We also analyse the crossing Binder's cumulant of the order parameter in a critical point. In addition, at three points along the critical line, we study the critical properties of the system and estimate the critical exponents related to the order parameter, ϕ , and to the staggered susceptibility (related to the order parameter), χ_ϕ .

Lista de Figuras

| | | |
|------|--|----|
| 2.1 | Subredes interpenetrantes da rede quadrada. Os elementos “ \times ” e “ \bullet ” pertencem a diferentes subredes. | 8 |
| 2.2 | Linha crítica do modelo de Ising AF na rede quadrada com campo externo obtida por Müller-Hartmann e Zittartz [1]. Abaixo da curva o estado é AF e acima é paramagnético. | 11 |
| 2.3 | Energias das diferentes configurações \mathcal{C}_1 e \mathcal{C}_2 em função de h para $T = 0$. . . | 13 |
| 3.1 | Estimativa de $\ln \Omega_0(n, m, L = 18)$ via aproximação de campo médio. | 25 |
| 3.2 | Estimativa de $\ln \Omega_0(n, m, L = 18)$ interpolado de $\ln \Omega_N(n, m, L = 16)$ | 26 |
| 3.3 | Média de $\ln \Omega_N(n, m, L = 18)$ da N -ésima iteração da simulação. | 26 |
| 3.4 | Diferença entre $\ln(\Omega_0^{int.})$, interpolado através da rede menor, e $\ln(\Omega_N^{sim.})$ obtido ao final da N -ésima iteração para $L = 18$; $N = L^2$. Pode-se notar que a maior diferença ocorre nas bordas do diagrama no espaço (n, m) . . . | 27 |
| 3.5 | Diferença entre $\ln(\Omega_0^{c.m.})$, estimado por aproximação de campo médio, e $\ln \Omega_N^{sim.}$ obtido ao final da N -ésima iteração para $L = 18$; $N = L^2$ | 28 |
| 3.6 | Classes de configurações acessíveis a um sistema de tamanho $L = 10$ | 29 |
| 3.7 | Região do diagrama (n, m) com todas as configurações possíveis para dois sistemas de tamanhos $L_1 = 26$ e $L_2 = 28$; $N = L^2$ | 30 |
| 3.8 | Região do diagrama (n, m) com rede de tamanho menor ($L_1 = 26$) estendida, a qual envolve todos os pontos da rede maior, $L_2 = 28$; $N = L^2$ | 31 |
| 3.9 | $\ln[\Omega(L_1)]$ com todas classes de configurações possíveis; $N = L_1^2$, para $L_1 = 26$ | 32 |
| 3.10 | $\ln[\Omega(L_1^{est})]$, com pontos extrapolados; $N = L_1^2$, para $L_1 = 26$ | 33 |
| 3.11 | Classes de configurações possíveis e extrapoladas de um sistema de tamanho $L = 10$ | 34 |
| 4.1 | Configuração compacta básica | 36 |

| | | |
|------|--|----|
| 4.2 | Modificação na configuração compacta básica | 37 |
| 4.3 | Configuração básica da 3ª classe compacta | 39 |
| 4.4 | Configuração estendida simples | 43 |
| 4.5 | Configuração estendida com inversão de dois spins | 44 |
| 4.6 | Configuração estendida modificada | 44 |
| 4.7 | Configuração estendida com aumento mínimo na energia u | 45 |
| 4.8 | Configuração Tabuleiro de Xadrez | 46 |
| 4.9 | configuração “limiar espalhada” | 49 |
| 4.10 | configuração “limiar espalhada” modificada | 50 |
| 5.1 | Susceptibilidade alternada por sítio em função de h para $T = 0.02$, para redes de tamanhos $L = 10$ à 30 . A curva com menor pico é a de $L = 10$ enquanto a de maior é a de $L = 30$. No gráfico menor estão as incertezas associadas à χ_ϕ em função de h | 53 |
| 5.2 | Parâmetro de ordem por sítio em função de h para $T = 0.02$, para $L = 10$ à 30 . A curva de menor inclinação é a de $L = 10$ e a de maior é a de $L = 30$. No gráfico menor estão as incertezas associadas à ϕ em função de h | 54 |
| 5.3 | Calor específico por sítio em função de h para $T = 0.2$, para $L = 10$ à 30 . No gráfico menor estão as incertezas associadas à c em função de h | 55 |
| 5.4 | Estimativa de $T_c(\chi_\phi^{max}, h = 0.2)$ | 56 |
| 5.5 | Diagrama de fase do modelo de Ising AF na rede quadrada. Comparação entre os dados simulacionais (pontos “*” e “o”) e a expressão teórica da linha crítica (curva pontilhada) obtida por Hartmann e Zittartz [1]. | 58 |
| 5.6 | Pontos ao longo da linha crítica nos quais são calculados os expoentes críticos. | 60 |
| 5.7 | Gráfico log-log do valor máximo de χ_ϕ para cada tamanho L . A inclinação da reta feita por ajuste linear fornece a estimativa de γ/ν | 61 |

Lista de Tabelas

| | | |
|-----|---|----|
| 4.1 | Valores de $u_{min}^{(2)}$ | 42 |
| 5.1 | Comparação entre T_c simulado e teórico [1] para h pequeno. | 56 |
| 5.2 | Comparação entre h_c simulado e teórico [1]. | 57 |
| 5.3 | Cruzamento do cumulante de Binder do parâmetro de ordem para sucessivos pares de tamanhos de sistemas à temperatura $T = 0.2$ | 59 |
| 5.4 | Propriedades críticas | 60 |

Sumário

| | |
|--|------------|
| Resumo | iii |
| 1 Introdução | 1 |
| 1.1 Justificativa | 2 |
| 1.2 Organização do Trabalho | 3 |
| 2 Revisão da Literatura | 5 |
| 2.1 Sistemas Magnéticos | 5 |
| 2.1.1 Paramagnetismo | 5 |
| 2.1.2 Ferromagnetismo | 6 |
| 2.1.3 Antiferromagnetismo | 7 |
| 2.2 Modelo de Ising e Método de Monte Carlo | 10 |
| 2.2.1 Modelo de Ising | 10 |
| 2.2.2 Médias Termodinâmicas | 13 |
| 2.2.3 Transições de Fase e Criticalidade | 14 |
| 2.2.4 Método de Monte Carlo | 17 |
| 3 Metodologia | 21 |
| 3.1 Amostragem Entrópica Tomográfica | 22 |
| 3.1.1 Implementação | 23 |
| 4 Classes de Configurações | 35 |
| 4.1 Determinação de u_{min} e Estados Próximos | 35 |
| 4.1.1 Configurações Compactas | 35 |
| 4.1.2 Configurações “compactas–estendidas” | 40 |
| 4.1.3 Configurações Estendidas | 42 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 4.2 | Determinação de u_{max} e Estados Próximos | 45 |
| 5 | Análise dos Resultados | 52 |
| 5.1 | Médias Termodinâmicas | 52 |
| 5.2 | Diagrama de Fase | 54 |
| 5.3 | Propriedades Críticas | 59 |
| 6 | Considerações Finais | 62 |
| | Referências Bibliográficas | 64 |

Capítulo 1

Introdução

Frequentemente é desejável estudar e descrever o comportamento de sistemas ou fenômenos por meio de modelos matemáticos, que são (tentativas de) representação de fenômenos reais. A eficácia de um modelo pode ser avaliada de acordo com a comparação dos resultados fornecidos pelo mesmo e o fenômeno real em análise. Um bom modelo pode possibilitar análises qualitativas, quantitativas e/ou numéricas de um determinado fenômeno, assim, fornecendo informações pertinentes à dinâmica do sistema em estudo.

Como são os poucos os modelos que apresentam soluções analíticas e também devido ao advento e evolução de poderosas ferramentas computacionais ao longo dos últimos anos, os métodos computacionais vêm recebendo cada vez mais importância nas ciências.

A física da matéria condensada é uma área de pesquisa em que as simulações computacionais desempenham um papel importante, uma vez que essa lida com sistemas compostos por muitas partículas que interagem entre si. As dinâmicas desses sistemas são regidas por determinadas funções hamiltonianas que, em geral, não possuem soluções analíticas das respectivas equações de movimento. Entretanto, lançando-se mão de ferramentas fornecidas pela mecânica estatística, esses problemas podem ser contornados, tratando-os justamente através de um ponto de vista probabilístico: conhecendo-se a função partição de um sistema, praticamente todas as quantidades termodinâmicas de interesse podem ser obtidas.

Essencialmente os únicos métodos simulacionais conhecidos para calcular a função partição de quaisquer sistemas com propriedades estocásticas são os de Monte Carlo [2, 3]. Esses métodos têm se mostrado bastante úteis na análise e estudo de propriedades termodinâmicas de equilíbrio de determinados sistemas físicos, os quais vão desde cadeias

de polímeros até sistemas magnéticos. Exemplos de modelos utilizados para simular sistemas magnéticos, além do modelo de Ising que provavelmente é o mais conhecido, são o de Potts [4, 5], *clock model* [6], Heisenberg [7] e *ice models* [2]. Vários algoritmos de Monte Carlo vêm sendo desenvolvidos com o intuito de otimizar as simulações em si e, conseqüentemente, os resultados obtidos. Dentre eles podemos citar como exemplos o de Metropolis [8], Wolff [9], Swendsen-Wang [10] e de Wang-Landau [11, 12].

Os estudos de transições de fase e fenômenos críticos de sistemas magnéticos iniciaram entre o final do século XIX e o início do século XX, período em que Whilhem Lenz propôs, ao seu então aluno Ernst Ising, um modelo de interação dos momentos magnéticos. Tal modelo é conhecido como “modelo de Ising” ou “modelo de Lenz-Ising” e provavelmente é um dos mais conhecidos e explorados desde que Lars Onsager [13] encontrou sua solução analítica na rede quadrada em 1944.

Uma vez que determinadas quantidades termodinâmicas de sistemas que sofrem transições de fase contínua ou descontínua divergem no ponto crítico, os métodos aproximativos analíticos e numéricos apresentam grande importância ao entendimento das propriedades desses sistemas na região crítica. Dessa forma, a simulação de Monte Carlo do modelo de Ising é de fundamental importância a esses estudos, por exemplo, através da análise de escala de tamanho finito [2].

1.1 Justificativa

Como mencionado anteriormente, alguns fenômenos e propriedades relacionadas a sistemas magnéticos vêm sendo estudados há décadas. Entretanto, a grande maioria dos trabalhos analíticos e teóricos do modelo de Ising, em particular, está relacionada especialmente à sistemas ferromagnéticos. Conseqüentemente, o modelo de Ising ferromagnético possui resultados bem estabelecidos, enquanto o modelo de Ising antiferromagnético (AF) com campo magnético externo foi pouco estudado e explorado. Ou seja, o modelo de Ising AF com campo externo, o qual estudamos, possui poucas propriedades e resultados conhecidos na literatura.

O modelo de Ising AF com campo magnético externo é, em geral, mais complexo que o ferromagnético – esse, por sua vez, é conhecido como um modelo “bem comportado”, de modo que muitas vezes é utilizado como referência de teste de qualidade e eficiência para

novos algoritmos e métodos simulacionais. Os sistemas AF podem apresentar um fenômeno chamado “frustração geométrica”, cujo aspecto fundamental é a impossibilidade de satisfazer todas as interações simultaneamente. Isso leva à alta degenerescência do estado fundamental [14] e faz com que tais sistemas possuam propriedades e comportamento que dependem da estrutura de rede. O modelo de Ising AF, por exemplo, não apresenta frustração na rede quadrada enquanto na rede triangular esse fenômeno ocorre.

Alguns trabalhos mostram que os resultados do modelo de Ising AF dependem fortemente do método aproximativo teórico utilizado [15], ou seja, existem resultados discordantes obtidos pelos diferentes métodos teóricos, além de discrepâncias entre os métodos simulacionais e os numéricos no que diz respeito à análise de escala de tamanho finito [16].

1.2 Organização do Trabalho

No Capítulo 2 apresentamos uma síntese de algumas propriedades de sistemas magnéticos, onde destacamos os sistemas paramagnéticos, ferromagnéticos e antiferromagnéticos. Também discutimos sobre o modelo de Ising, bem como o algoritmo de Metropolis e de Wang-Landau, o qual é amplamente utilizado em simulações de Monte Carlo.

Já no Capítulo 3 apresentamos um novo algoritmo de amostragem entrópica, chamado de amostragem entrópica tomográfica (*tomographic entropic sampling*) [17]. Também discutimos detalhadamente a metodologia utilizada na implementação desse algoritmo para a simulação do modelo de Ising AF com campo externo na rede quadrada.

Destacamos que os bons resultados obtidos nessa implementação se devem ao fato de *conhecermos previamente todas as configurações possíveis do sistema* para um determinado tamanho, L , da rede quadrada. O método utilizado para conhecermos essas configurações acessíveis é discutido no Capítulo 4, onde definimos algumas classes de configurações fundamentais na rede. Essas classes de configurações formam um conjunto básico e fundamental, das quais *todas* configurações acessíveis fazem parte.

Apresentamos no Capítulo 5 os resultados obtidos através da amostragem entrópica tomográfica do modelo de Ising AF com campo externo na rede quadrada. Mostramos o comportamento do calor específico, c , do parâmetro de ordem, ϕ , e da susceptibilidade alternada (associada ao parâmetro de ordem), χ_ϕ , para alguns valores de temperatura,

T , em função do campo externo, h . Também apresentamos o diagrama de fase desse modelo estudado, que é uma curva no plano $h - T$, e comparamos esses resultados com aproximações teóricas. Além disso estudamos algumas propriedades críticas desse sistema em três regiões distintas dessa linha crítica. Finalmente expomos nossas conclusões e considerações finais no Capítulo 6.

Capítulo 2

Revisão da Literatura

2.1 Sistemas Magnéticos

Os materiais magnéticos são classificados de acordo com o estado físico em que se apresentam, dentre os quais os mais comuns são os estados ferromagnético (FM), anti-ferromagnético (AF), ferrimagnético, paramagnético e diamagnético. As fases ou estados magnéticos dependem, dentre outras variáveis, da temperatura e do campo magnético aplicado. O ordenamento magnético dos materiais tem origem quântica e se deve principalmente à interação de troca entre os momentos magnéticos de spin dos elétrons do sistema [6]. Vejamos a seguir as principais características de alguns desses estados magnéticos.

2.1.1 Paramagnetismo

Os materiais paramagnéticos se caracterizam pelo fato de suas magnetizações, M , apresentarem resposta linear a um campo magnético, h , de baixa intensidade aplicado, ou seja,

$$M = \chi h, \tag{2.1}$$

onde χ ($\chi > 0$) é a susceptibilidade magnética do material e h é o campo magnético aplicado. Os sistemas paramagnéticos mantêm uma magnetização não nula somente enquanto houver um campo externo aplicado, o que faz com que parte dos momentos magnéticos dos spins do sistema se alinhem paralelamente ao campo. Quando um sistema paramagnético *não* está sob influência de um campo externo, seus spins se orientam em direções

aleatórias, fazendo com que o sistema possua magnetização total nula.

A temperatura favorece a orientação aleatória dos spins enquanto o campo magnético aplicado tende a orientá-los em sua direção, então a susceptibilidade magnética é função da temperatura, $\chi = \chi(T)$. Experimentalmente observa-se que para materiais paramagnéticos ideais

$$\chi = \frac{C}{T}, \quad (2.2)$$

onde C é a constante de Curie, específica para cada material; a equação (2.2) é conhecida como lei de Curie.

Os sistemas paramagnéticos ideais são definidos como aqueles constituídos por momentos magnéticos sem interação entre si. Já materiais magnéticos que simplesmente podem sofrer uma transição para a fase paramagnética a lei de Curie, para temperaturas suficientemente altas, toma a forma:

$$\chi = \frac{C}{T - \Delta}, \quad (2.3)$$

onde Δ é uma constante tal que $\Delta > 0$ para sistemas que sofrem transição do estado paramagnético para o ferromagnético (Seção 2.1.2), e $\Delta < 0$ para sistemas que sofrem transição do estado paramagnético para o antiferromagnético (Seção 2.1.3).

2.1.2 Ferromagnetismo

Os átomos constituintes dos materiais ferromagnéticos (FM) possuem momento de dipolo permanente mesmo na ausência de um campo magnético externo, $h = 0$, à baixas temperaturas. Ou seja, para $h = 0$, os materiais FM apresentam magnetização espontânea, $M \neq 0$, à baixas temperaturas. Mas a uma determinada temperatura crítica ou temperatura de Curie, T_c , sofrem uma transição para a fase paramagnética e passam a ter magnetização nula, ou seja,

$$M(T \geq T_c, h = 0) = 0$$

$$M(T < T_c, h = 0) \neq 0.$$

Em geral, à temperatura constante, $T > T_c$, e campo magnético externo de baixa intensidade, pode-se observar que $M = \chi h$, o que realmente caracteriza que o sistema

está no estado paramagnético, como vimos na Seção 2.1.1. Já no caso em que $T < T_c$ a magnetização, M , é não nula mesmo para campo externo nulo; e para $h \ll 1$

$$M(T, h) = M_e(T) + \chi(T)h, \quad (2.4)$$

onde $M_e(T)$ é a magnetização espontânea do sistema, que é função da somente da temperatura. Pela equação (2.4) e pelas propriedades dos sistemas FM discutidas acima, podemos perceber que

$$M_e = \begin{cases} f(T) & \text{se } T < T_c \\ 0 & \text{se } T \geq T_c \end{cases}$$

onde $f(T)$ é uma função crescente de $\beta = 1/(k_B T)$ tal que $f(T = T_c) = 0$. Uma vez que a magnetização do sistema tem um valor finito no estado ferromagnético e é nula no paramagnético, ela é comumente chamada de *parâmetro de ordem* do sistema.

Na presença de um campo magnético, os materiais FM apresentam uma magnetização induzida que aumenta de intensidade de acordo com a intensidade do campo aplicado. Porém, esses materiais têm uma propriedade intrínseca chamada magnetização de saturação. A magnetização de saturação é o valor máximo da magnetização que pode ser induzida no sistema; ela independe do tamanho do mesmo, ocorrendo a partir de um valor específico da intensidade do campo magnético externo, h_{sat} , chamado de campo de saturação, o qual independe da temperatura.

2.1.3 Antiferromagnetismo

O estado antiferromagnético (AF) tem magnetização nula na ausência de campo magnético externo, $h = 0$. Mas diferentemente do estado paramagnético, os momentos magnéticos dos materiais AF não se orientam em direções aleatórias no estado fundamental. Os materiais AF possuem redes cristalinas bem ordenadas, que podem ser divididas em duas ou mais subredes interpenetrantes. Na Figura 2.1 mostramos um diagrama das subredes interpenetrantes de uma rede quadrada. Os momentos magnéticos dos átomos em cada uma dessas subredes apontam em direções opostas; por exemplo, se a rede cristalina de um material é dividida em duas subredes A e B , então, no estado fundamental, todos os momentos magnéticos dos átomos da subrede A apontam em uma determinada direção que é oposta aos da subrede B – o que proporciona uma magnetização total nula.

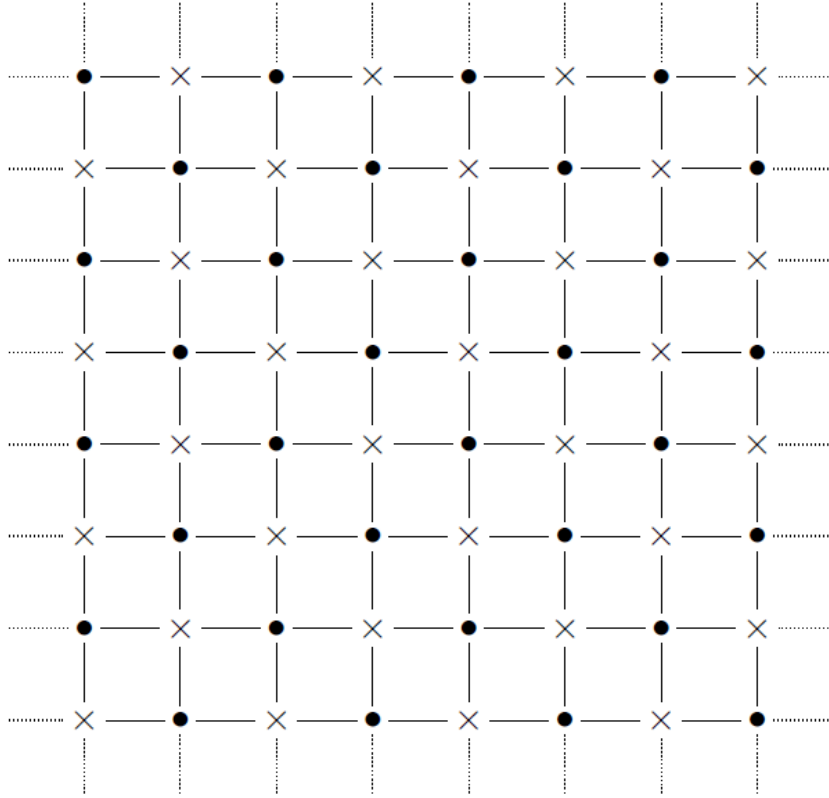


Figura 2.1: Subredes interpenetrantes da rede quadrada. Os elementos “ \times ” e “ \bullet ” pertencem a diferentes subredes.

Os sistemas AF perdem esse ordenamento a partir de uma determinada temperatura, denominada temperatura de Néel, T_N . Para $T \geq T_N$ e $h = 0$ os momentos magnéticos dos átomos da rede cristalina do material apontam em direções aleatórias, caracterizando uma transição de fase para o estado paramagnético ($M = 0$). À campo externo nulo $M = 0$ tanto na fase AF quanto paramagnética, então M não é um parâmetro de ordem para esses sistemas. A seguir vamos definir uma quantidade, associada à magnetização das subredes do sistema, que será o parâmetro de ordem dos sistemas AFs.

Seja um material AF com uma rede cristalina que se divide em duas subredes equivalentes e interpenetrantes, denotadas por A e B , com magnetizações por sítio m_A e m_B , respectivamente. Definimos a magnetização total por sítio do sistema como

$$m = \frac{1}{2}(m_A + m_B), \quad (2.5)$$

onde $m_j \in [-1, 1]$ e $j = A, B$. De acordo com o que foi discutido acima, se $h = 0$ e $T < T_N$, então $m_A = -m_B$ e conseqüentemente $m = 0$. Mas se $T > T_N$, então $m_A = m_B$ independentemente se o campo externo é nulo ou não; se $h \neq 0$ então $m_A = m_B \neq 0$ e

se $h = 0$ então $m_A = m_B = 0$. Portanto, é conveniente definirmos o parâmetro de ordem por sítio (também conhecido por *staggered magnetization* ou magnetização alternada), ϕ , de um sistema AF como

$$\phi = \frac{1}{2}(m_A - m_B). \quad (2.6)$$

Daí podemos ver que $\phi = 0$ na fase paramagnética (desordenada) e $\phi \neq 0$ na fase AF (ordenada), *a qual se define justamente pelo fato de as magnetizações de todas subredes do material possuírem valores distintos.*

A rede cristalina de um determinado material AF tem importância fundamental nas características e propriedades do sistema. Um fenômeno peculiar a algumas estruturas cristalinas é a *frustração geométrica*, que consiste em uma alta degenerescência do estado fundamental do sistema. Vejamos a seguir um exemplo de rede na qual ocorre esse fenômeno.

Seja uma rede triangular com interação de primeiros vizinhos entre os spins em cada vértice [14], tal que a energia de interação, E_{int} , seja dada por

$$E_{int} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad (2.7)$$

onde $J < 0$ é uma constante associada à interação de troca entre os spins do sistema AF; $\sigma_i = \pm 1$ e $\sigma_j = \pm 1$ são os momentos magnéticos dos spins nos sítios i e j , respectivamente; e $\sum_{\langle i,j \rangle}$ representa a soma sobre os pares de primeiros vizinhos da rede.

Analisando somente um triângulo dessa rede, podemos perceber que existem $2^3 = 8$ estados possíveis. Dois desses estados têm todos spins paralelos ($\uparrow\uparrow\uparrow$ ou $\downarrow\downarrow\downarrow$); já os outros seis estados têm um arranjo do tipo $\uparrow\downarrow\uparrow$ (os três spins são primeiros vizinhos), que são justamente as configurações com energia mínima. Sendo dois spins antiparalelos ($\uparrow\downarrow$ ou $\downarrow\uparrow$), o sistema estará no estado fundamental independentemente da orientação \uparrow ou \downarrow do outro spin. Ou seja, o estado fundamental é degenerado pois o terceiro spin tem uma configuração “frustrada”, que não altera o valor da energia. É justamente esse tipo de fenômeno que caracteriza a *frustração geométrica*.

2.2 Modelo de Ising e Método de Monte Carlo

2.2.1 Modelo de Ising

Um dos modelos mais conhecidos e explorados na física estatística é o modelo de Ising. Esse modelo foi na realidade proposto por Wilhelm Lenz (por isso também é conhecido como modelo de Lenz-Ising) ao seu então aluno de doutorado Ernst Ising para que ele estudasse transições de fase em sistemas magnéticos. O modelo de Ising foi resolvido analiticamente em uma dimensão pelo próprio Ising em 1925. Em 1944 o físico Lars Onsager encontrou sua solução analítica na rede quadrada com interação de primeiros vizinhos e na ausência de campo externo [13]. Porém sua solução analítica ainda não foi encontrada para dimensão $d = 3$.

Para a análise de um sistema magnético, o modelo de Ising assume que o sistema seja formado por uma rede (quadrada, triangular, hexagonal, cúbica simples ou cúbica de face centrada, por exemplo). Cada um dos N sítios (vértices) da rede possui um momento magnético ou spin, μ_i , ao longo do eixo z dado por

$$\mu_i = \gamma \sigma_i, \quad (2.8)$$

onde o índice i representa um sítio da rede, γ é uma constante e

$$\sigma_i = \pm 1 \quad (2.9)$$

é uma variável associada à orientação \uparrow ou \downarrow do spin na direção z (passaremos a nos referir à σ_i como momento magnético). Esse modelo assume que a interação entre os spins se dá através da interação de troca, de origem quântica [6].

Um dos casos mais simples do modelo de Ising consiste em assumir que a interação entre os spins seja apenas entre primeiros vizinhos e com um campo magnético externo, H , ao longo da direção z , de modo que o hamiltoniano do sistema seja

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i=1}^N \sigma_i, \quad (2.10)$$

onde J é uma constante associada à interação de troca entre os spins ($J > 0$ para sistemas ferromagnéticos e $J < 0$ para antiferromagnéticos); $\langle i, j \rangle$ representa a soma sobre todos

os pares de primeiros vizinhos e h é uma constante proporcional ao campo externo H (de agora em diante iremos nos referir à h simplesmente como campo magnético externo).

Modelo de Ising AF com campo externo na rede quadrada

Uma característica peculiar do modelo de Ising AF com campo externo na rede quadrada é a existência de uma linha crítica em seu diagrama de fase no plano h - T . Embora não haja solução exata para esse modelo, vários métodos aproximativos foram desenvolvidos com o intuito de descrever essa linha crítica [1, 18, 19].

Através de um método aproximativo de cálculo de propriedades de interface, Müller-Hartmann e Zittartz [1] deduziram a seguinte expressão analítica para essa linha crítica:

$$\cosh\left(\frac{h}{T_c}\right) = \sinh^2\left(\frac{2J}{T_c}\right), \quad (2.11)$$

onde J é a constante de interação de primeiros vizinhos (usamos unidades tais que $J \equiv -1$). Na Figura 2.2 mostramos essa linha crítica para $h > 0$, uma vez que essa curva é simétrica em torno do eixo T . Abaixo dessa linha o sistema se encontra no estado antiferromagnético enquanto acima se encontra no paramagnético.

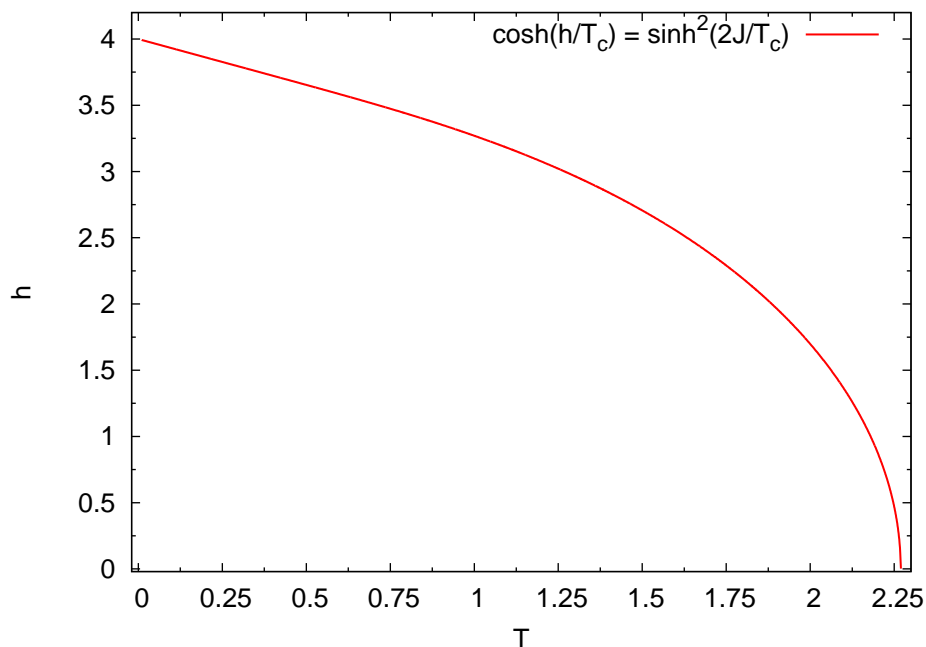


Figura 2.2: Linha crítica do modelo de Ising AF na rede quadrada com campo externo obtida por Müller-Hartmann e Zittartz [1]. Abaixo da curva o estado é AF e acima é paramagnético.

A partir dessa equação da linha crítica obtiveram uma aproximação para $T_c(h)$ com

$h \rightarrow 0$:

$$T_c(h) \approx T_c^0 \left[1 - \alpha \left(\frac{h}{J} \right)^2 \right], \quad h \rightarrow 0, \quad (2.12)$$

onde $T_c^0 \equiv T_c(h = 0) = 2/\ln(1 + \sqrt{2})$, que é justamente o ponto crítico do modelo de Ising ferromagnético e $\alpha \equiv \ln(1 + \sqrt{2})/(16\sqrt{2})$; e também a aproximação para $h_c(T_c)$ com $T_c \rightarrow 0$:

$$h_c(T_c) \approx h_c^0 - T_c \ln(2), \quad T_c \rightarrow 0, \quad (2.13)$$

onde $h_c^0 \equiv h_c(T_c = 0) = 4$; esse valor de h_c à temperatura nula tem uma explicação baseada no estado fundamental do sistema, o que apresentamos a seguir.

Seja uma configuração \mathcal{C}_n do sistema com energia total E_n dada por

$$E_n = E - hM, \quad (2.14)$$

onde usamos unidades tais que $J = -1$ na equação 2.10, definimos a energia de interação entre os spins, E , por

$$E = \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j$$

e a magnetização total, M , por

$$M = \sum_{i=1}^N \sigma_i.$$

À temperatura nula o sistema se encontra no estado fundamental. Nesse estado, para pequenos valores de h , definimos uma configuração \mathcal{C}_1 em que todos os spins da subrede A , por exemplo, estão paralelos ao campo h ($\sigma_i^A = +1$) enquanto os da subrede B estão no sentido oposto ($\sigma_i^B = -1$). A magnetização total dessa configuração é nula e então a energia total é $E_1 = -2L^2$, enquanto o parâmetro de ordem nesse estado, dado pela equação (2.6), é $\phi = 1$. Consideremos outra configuração \mathcal{C}_2 em que todos os spins estão paralelos ao campo magnético, cuja energia total é $E_1 = 2L^2 - hL^2$ e $\phi = 0$. Podemos ver pela Figura 2.3 que as energias dessas duas configurações são iguais para $h(T = 0) \equiv h_c^0 = 4$. Ou seja, nesse ponto de transição de primeira ordem ($T_c = 0, h_c = 4$) há uma descontinuidade na primeira derivada da energia do estado fundamental.

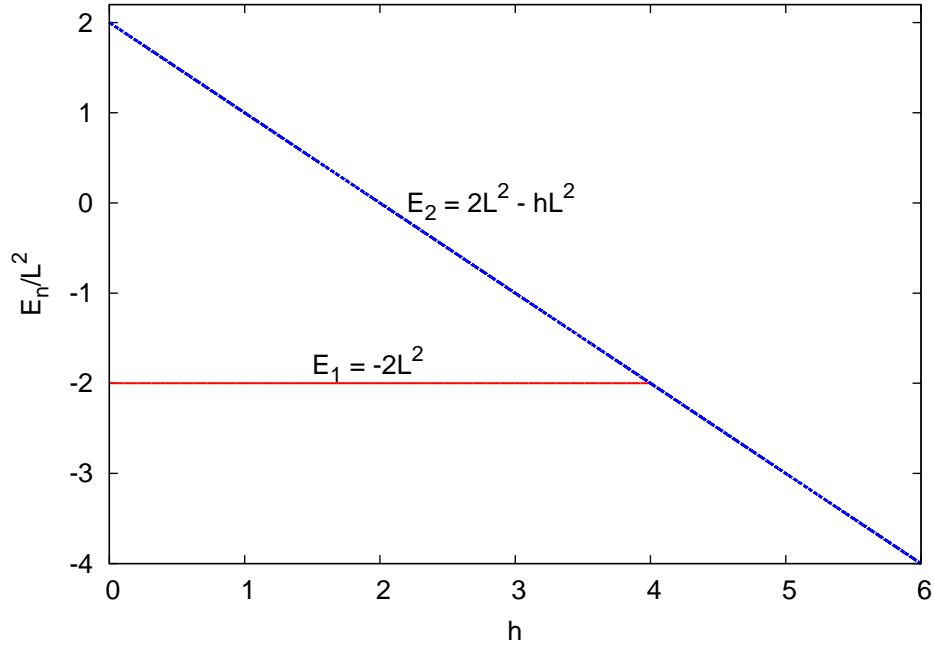


Figura 2.3: Energias das diferentes configurações \mathcal{C}_1 e \mathcal{C}_2 em função de h para $T = 0$.

2.2.2 Médias Termodinâmicas

Lançando-se mão da mecânica estatística de equilíbrio [7], à temperatura T , a função partição canônica desse sistema é

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta\mathcal{H}(\{\sigma\})}, \quad (2.15)$$

onde $\{\sigma\}$ representa a soma sobre todos os estados possíveis do sistema, e usamos a definição

$$\beta \equiv \frac{1}{k_B T}, \quad (2.16)$$

onde k_B é a constante de Boltzmann. A probabilidade, $P_c(\sigma)$, de o sistema se encontrar no estado σ é

$$P_c(\sigma) = \frac{1}{Z} e^{-\beta\mathcal{H}(\sigma)}. \quad (2.17)$$

Daí, a média canônica de um observável A é dada por

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma\}} A(\{\sigma\}) e^{-\beta\mathcal{H}(\{\sigma\})}. \quad (2.18)$$

Uma vez que a conexão entre o ensemble canônico e a termodinâmica se dá por

$$F(T) = -k_B T \ln(Z), \quad (2.19)$$

onde F é a energia livre de Helmholtz, é possível mostrar que o calor específico por spin à magnetização constante, c , está associado à flutuação térmica da energia, E , da seguinte forma:

$$c = \frac{1}{N} \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_m = \frac{1}{Nk_B T^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2). \quad (2.20)$$

Analogamente, a susceptibilidade magnética à temperatura constante, χ , está associada à flutuação na magnetização por

$$\chi = \left(\frac{\partial M}{\partial H} \right)_T = \frac{1}{Nk_B T} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2). \quad (2.21)$$

2.2.3 Transições de Fase e Criticalidade

Desde o final do século XIX as transições de fase e fenômenos críticos vêm sendo objetos de estudos de uma grande variedade de sistemas, os quais vão desde simples fluidos, passando por sistemas magnéticos, até superfluidos. Várias grandezas termodinâmicas apresentam singularidades, tendo um comportamento peculiar nas proximidades do ponto crítico. Porém, foi somente a partir de aproximadamente da segunda metade do século XX que foram desenvolvidos modelos e teorias que possibilitaram um melhor entendimento do comportamento de sistemas durante as transições de fase, como teoria de escala e grupo de renormalização [7].

Expoentes críticos

Nas proximidades do ponto crítico várias grandezas termodinâmicas obedecem leis de potência, cujos expoentes (críticos) dependem de poucos fatores associados ao sistema. Tais fatores são a dimensionalidade do sistema, o alcance das interações microscópicas (curto ou longo alcance) e da dimensionalidade do parâmetro de ordem (escalar ou um vetor tridimensional, por exemplo). Em sistemas magnéticos observa-se que nas proximi-

dades da região crítica

$$c_H(T, 0) \sim |T - T_c|^{-\alpha} \quad (2.22)$$

$$\chi(T, 0) \sim |T - T_c|^{-\gamma} \quad (2.23)$$

$$|m(T, 0)| \sim (T_c - T)^\beta \quad (2.24)$$

$$|m(T_c, H)| \sim |H|^{1/\delta}, \quad (2.25)$$

onde α , γ , β e δ são os expoentes críticos.

Suponhamos que a energia livre de Gibbs molar de um sistema magnético seja

$$g = g(T, H),$$

tal que

$$dg = -s dT - m dH, \quad (2.26)$$

onde s e m são a entropia e magnetização por spin, respectivamente. Daí temos

$$s(T, H) = - \left(\frac{\partial g}{\partial T} \right)_H \quad (2.27)$$

$$m(T, H) = - \left(\frac{\partial g}{\partial H} \right)_T. \quad (2.28)$$

Como

$$\frac{c_H(T, H)}{T} = \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_H \quad (2.29)$$

$$\chi(T, H) = \left(\frac{\partial m}{\partial H} \right)_T, \quad (2.30)$$

então

$$\frac{c_H(T, H)}{T} = - \left(\frac{\partial^2 g}{\partial T^2} \right)_H \quad (2.31)$$

$$\chi(T, H) = - \left(\frac{\partial^2 g}{\partial H^2} \right)_T. \quad (2.32)$$

Tendo em vista a teoria de escala de Widom ou hipótese de escala estática [20, 21] é

conveniente reescalar as variáveis T e H em relação ao ponto crítico (T_c, H_c) , definindo

$$t \equiv \frac{T - T_c}{T_c} \quad (2.33)$$

$$h \equiv H - H_c, \quad (2.34)$$

onde t é a temperatura reduzida e h o campo magnético relativo à H_c . Dessa maneira as equações (2.28), (2.31) e (2.32) podem ser reescritas com as substituições $T \rightarrow t$ e $H \rightarrow h$:

$$m(t, h) = - \left(\frac{\partial g(t, h)}{\partial h} \right)_t \quad (2.35)$$

$$c_h(t, h) = -t \left(\frac{\partial^2 g(t, h)}{\partial t^2} \right)_h \quad (2.36)$$

$$\chi(t, h) = - \left(\frac{\partial^2 g(t, h)}{\partial h^2} \right)_t. \quad (2.37)$$

A teoria de escala de Widom assume que a parte singular de $g(t, h)$, $g_s(t, h)$, próxima do ponto crítico é uma função homogênea generalizada, ou seja,

$$g_s(t, h) = \lambda^{-a} g_s(\lambda t, \lambda^b h), \quad (2.38)$$

onde λ ($\lambda > 0$), a e b são constantes.

Substituindo a equação (2.38) nas (2.35), (2.36) e (2.37) e em seguida avaliando para ($h = 0$, $\lambda = |t|^{-1}$) e também para ($t = 0$, $\lambda = |h|^{-1/b}$), obtemos as seguintes relações entre os expoentes α , β , γ , δ , a e b :

$$\alpha = -a + 2 \quad (2.39)$$

$$\gamma = -a + 2b \quad (2.40)$$

$$\beta = a - b \quad (2.41)$$

$$\delta = \frac{b}{a - b}. \quad (2.42)$$

Daí obtemos a relação de Rushbrooke

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2, \quad (2.43)$$

a relação de Griffiths

$$\alpha + \beta(\delta + 1) = 2 \quad (2.44)$$

e também a relação de Widom

$$\gamma = \beta(\delta - 1). \quad (2.45)$$

2.2.4 Método de Monte Carlo

Ao longo dos últimos anos vários artigos e livros envolvendo o método de Monte Carlo vêm sendo publicados em diversas áreas do conhecimento. Especialmente na área da física existem várias aplicações que vão desde cadeias de polímeros à sistemas magnéticos [2, 3, 22, 23, 24]. Do ponto de vista da física estatística de equilíbrio, o método de Monte Carlo consiste em uma classe de algoritmos que geram, através de sorteios, uma grande coleção de microestados, que irão representar o sistema como um todo.

Tendo em vista um sistema termodinâmico, por exemplo, o método de Monte Carlo consiste em gerar um grande número, n , de microestados $\{\sigma = \sigma_1, \dots, \sigma_n\}$ para então calcular a média canônica do observável A (equação (2.18))

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma=\sigma_1}^{\sigma_n} A e^{-\beta\mathcal{H}(\{\sigma\})}, \quad (2.46)$$

onde a soma se estende somente sobre os n microestados gerados. Entretanto, vê-se que é necessário um bom método para gerar tal conjunto de n microestados, uma vez que para alguns estados o fator exponencial pode fornecer uma contribuição sem importância significativa ao somatório no cálculo da média.

Algoritmo de Metropolis

Um dos algoritmos mais conhecidos e antigos, capaz de gerar estados que contribuam de maneira significativa ao cálculo da média, é o algoritmo de Metropolis [8]. Ele consiste na realização de um processo estocástico no espaço de configurações, partindo de uma configuração inicial aleatória, usando uma probabilidade de transição de um estado para outro que depende da diferença de energia entre tais estados. Esse algoritmo pode ser sumarizado como se segue:

1. À uma determinada temperatura fixa, T , escolha aleatoriamente um estado inicial

- σ' , com energia $E' = E(\sigma')$;
2. Sorteie um estado σ'' , com energia $E'' = E(\sigma'')$ [de maneira apropriada ao modelo em questão (para o modelo de Ising, por exemplo, podemos sortear um sítio da rede e inverter o spin)];
 3. Calcule $\delta E = E'' - E'$;
 4. Se $\delta E \leq 0$, o novo estado é aceito ($\sigma' \rightarrow \sigma''$): vá para o passo (6);
 5. Se $\delta E > 0$, sorteie um número aleatório r com distribuição uniforme no intervalo $[0, 1]$ e verifique
 - se $r \leq w \equiv e^{-\beta\delta E}$ aceita-se a transição ($\sigma' \rightarrow \sigma''$): vá para o passo (6);
 - se $r > w$ rejeita-se a transição: vá para o passo (2);
 6. Repita os passos (2) à (5);
 7. À cada N iterações do passo (2), independentemente do número de novas configurações aceitas ou não, calcule as médias termodinâmicas das quantidades de interesse.

Podemos ver que o algoritmo de Metropolis se baseia no fato de que a probabilidade de transição do estado σ' para o σ'' é proporcional a

$$w(\sigma' \rightarrow \sigma'') \equiv T(\sigma'', \sigma') = \min(1, e^{-\beta\delta E}). \quad (2.47)$$

Esse processo estocástico realizado no espaço de configurações possui a seguinte distribuição estacionária de probabilidades dos estados:

$$P(\sigma) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E(\sigma)}, \quad (2.48)$$

onde Z é a função partição. O princípio do balanço detalhado (BD)[25]

$$T(\sigma'', \sigma')P(\sigma') = T(\sigma', \sigma'')P(\sigma''), \quad (2.49)$$

garante que a distribuição de probabilidades dada pela equação (2.48) corresponde à distribuição estacionária. Para verificarmos que a probabilidade de transição, dada pela

equação (2.47), satisfaz o princípio do BD consideremos os estados σ' e σ'' tais que $E(\sigma'') > E(\sigma')$. Assim, pelas equações (2.47) e (2.48), temos que

$$T(\sigma'', \sigma') = \frac{1}{N} e^{-\beta[E(\sigma'') - E(\sigma')]},$$

$$P(\sigma') = \frac{1}{Z} e^{-\beta E(\sigma')},$$

$$T(\sigma', \sigma'') = \frac{1}{N},$$

e

$$P(\sigma'') = \frac{1}{Z} e^{-\beta E(\sigma')}.$$

onde N é o número de sítios do sistema. Levando as duas primeiras equações no lado esquerdo da equação (2.49) e tendo em vista as duas últimas, vemos que o princípio do BD é satisfeito.

Algoritmo de Wang-Landau

Claramente uma grande desvantagem na aplicação do algoritmo de Metropolis na análise de transições de fase, por exemplo, é o fato de ser necessário realizar uma simulação para cada valor de temperatura. Assim, teriam que ser realizadas várias simulações com pequenos incrementos em T para analisar o comportamento de algumas variáveis termodinâmicas de interesse nas proximidades de T_c , o que consumiria um grande tempo computacional.

Seria, então, conveniente a utilização de um algoritmo que determinasse o número de estados com energia E , $\Omega(E)$, uma vez que

$$Z = \sum_E \Omega(E) e^{-\beta E} \quad (2.50)$$

e

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_E \langle A \rangle_E \Omega(E) e^{-\beta E}, \quad (2.51)$$

onde $\langle A \rangle_E$ é a média microcanônica de A para cada valor de E e as somas são realizadas sobre todos os valores possíveis da energia.

Dentre os algoritmos que fazem o cálculo de $\Omega(E)$, o de Wang-Landau [11, 12] é um dos mais explorados nos últimos anos. O algoritmo de Wang-Landau consiste num passeio

aleatório no espaço de energia do sistema, o que proporciona o cálculo de $\Omega(E)$. Os valores de $\Omega(E)$ são desconhecidos inicialmente, de modo que define-se $\Omega(E) \equiv 1 \forall E$ no início da simulação.

A probabilidade de transição de um estado inicial σ' , com energia E' e $\Omega(E')$, para um σ'' , escolhido aleatoriamente, com energia E'' e $\Omega(E'')$ é

$$w(\sigma' \rightarrow \sigma'') = \min \left(1, \frac{\Omega(E')}{\Omega(E'')} \right). \quad (2.52)$$

Cada vez que um estado é visitado o valor de $\Omega(E)$ é atualizado através de um fator modificador $f > 1$, de modo que $\Omega(E) \rightarrow \Omega(E) f$; o valor inicial usual é $f_0 = e^1$. Esse passeio aleatório é feito até que o histograma $H(E)$ esteja “plano” (na prática é impossível que o histograma seja exatamente plano, então, usualmente, o histograma é dito plano quando $H(E)/\langle H(E) \rangle \geq 80\% \forall E$). Assim que isso ocorre, o fator modificador, f , é reescalado de modo que na i -ésima iteração $f \equiv f_{i+1} = \sqrt{f_i}$ e o histograma é novamente inicializado, $H(E) = 0$. A simulação só é encerrada quando $f < f_{final}$ (por exemplo, $f_{final} \equiv 1 + 10^{-8}$).

Capítulo 3

Metodologia

Na Subseção 2.2.4 apresentamos os algoritmos de Metropolis e de Wang-Landau como exemplos, dentre vários outros existentes, do método de Monte Carlo. Tendo em vista o cálculo de propriedades termodinâmicas como funções contínuas da temperatura e estudos de transições de fase, por exemplo, os algoritmos de amostragem entrópica (classe em que se enquadra o algoritmo de Wang-Landau) são em geral mais apropriados que os demais. Os algoritmos de amostragem entrópica possibilitam a obtenção de uma estimativa do número de configurações, Ω , de um determinado estado do sistema em estudo.

Embora o método de Wang-Landau seja provavelmente o método de amostragem entrópica mais usado e explorado, para sistemas grandes se faz necessário dividir o espaço de configurações em pequenos intervalos (“janelas”), os quais devem ser simulados separadamente. Esse procedimento gera algumas distorções em Ω justamente nas bordas dessas janelas [26, 27, 17]. Além disso, o algoritmo de Wang-Landau tem se mostrado não ser muito eficiente na obtenção de boas estimativas de expoentes críticos.

Nesse capítulo apresentamos um algoritmo de amostragem entrópica de alta precisão denominado *tomographic entropic sampling* (amostragem entrópica tomográfica) [17]. Esse método simulacional de amostragem entrópica se propõe a realizar um passeio completo em *todo* espaço de configurações, sem a necessidade da utilização de janelas, a fim de gerar uma boa estimativa de Ω .

3.1 Amostragem Entrópica Tomográfica

Seja um sistema de tamanho L representado por um modelo estatístico com espaço de configurações discreto. Denotemos por Γ o conjunto de variáveis que caracterizam cada classe de configurações do sistema e por $\tilde{\Omega}(\Gamma)$ o número exato de configurações pertencentes à classe de configuração Γ . A distribuição de probabilidades utilizada para gerar as configurações é dada por

$$P(\mathcal{C}) \propto \frac{1}{\tilde{\Omega}[\Gamma(\mathcal{C})]}, \quad (3.1)$$

onde $\Gamma(\mathcal{C})$ é uma classe de configuração (CC) que contém a configuração \mathcal{C} . Dessa forma, a probabilidade de aceitar de uma nova configuração, \mathcal{C}' , é

$$p(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') = \min \left(\frac{\tilde{\Omega}[\Gamma(\mathcal{C})]}{\tilde{\Omega}[\Gamma(\mathcal{C}')]}, 1 \right). \quad (3.2)$$

Seja $H(\Gamma)$ o histograma contendo o número de vezes em que a CC Γ foi visitada durante a amostragem. Em uma simulação que segue a distribuição de probabilidades dada pela equação (3.1) obtém-se $\langle H(\Gamma) \rangle = \text{const.} \forall \Gamma$. Quanto melhor for uma estimativa $\Omega(\Gamma)$ utilizada na simulação para gerar a distribuição de probabilidades, em vez do valor exato (desconhecido) $\tilde{\Omega}(\Gamma)$, mais uniforme será o histograma $H(\Gamma)$, ou seja,

$$\langle H(\Gamma) \rangle \propto \frac{\tilde{\Omega}(\Gamma)}{\Omega(\Gamma)}. \quad (3.3)$$

Podemos então utilizar uma estimativa inicial, $\Omega_0(\Gamma)$, para a distribuição de probabilidades e simular por um tempo suficientemente longo, de modo que $H(\Gamma) \approx \langle H(\Gamma) \rangle$ para todas CCs. Com isso podemos atualizar nossa estimativa inicial usando a equação (3.3), tal que

$$\Omega_1(\Gamma) = \frac{H_1(\Gamma)}{\overline{H_1}(\Gamma)} \Omega_0(\Gamma), \quad (3.4)$$

onde $\Omega_1(\Gamma)$ é a nova estimativa obtida ao final dessa primeira simulação; $H_1(\Gamma)$ é o número de vezes em que Γ foi gerada durante a simulação e $\overline{H_1}(\Gamma)$ é a média de $H_1(\Gamma)$ sobre todos as CCs acessíveis ao sistema.

A idéia desse método de amostragem é justamente iterar N vezes o procedimento descrito pela equação (3.4), de modo que, partindo de uma estimativa inicial Ω_0 , possamos

obter na última iteração uma aproximação Ω_N que seja próxima do real $\tilde{\Omega}$. Na última iteração também são calculadas as médias microcanônicas das quantidades de interesse, as quais serão posteriormente utilizadas para o cálculo das médias canônicas.

Para que a estimativa Ω_N seja próxima o suficiente de $\tilde{\Omega}$ se faz necessária uma boa e completa amostragem, em cada uma das N iterações, por todo espaço de configurações do sistema. Cada uma dessas iterações possuem N_{sim} simulações (partindo de configurações iniciais diferentes) que duram N_U atualizações de rede ou passos de Monte Carlo. Esse conjunto de configurações iniciais é determinado de acordo com o modelo em estudo e é construído com o intuito de possibilitar que todas as CCs possíveis do sistema ocorram durante a simulação. O nome “amostragem tomográfica” se refere justamente ao fato de os estudos iniciarem em diferentes regiões do espaço configuracional do sistema, cujos resultados são reunidos para fornecer a estimativa de Ω .

3.1.1 Implementação

O sistema estudado nesse trabalho é o modelo de Ising antiferromagnético, com interação de primeiros vizinhos, em uma rede quadrada na presença de um campo magnético externo. Definimos uma rede de dimensões $L \times L$ com condições periódicas de fronteira. As CCs desse sistema são definidas no espaço bidimensional (n, m) , onde n é o número de pares de primeiros vizinhos com spins tendo a mesma orientação [n está relacionado à energia de interação entre os spins por $E = -2(L^2 - n)$] e m é a magnetização do sistema. Na rede quadrada os valores permitidos de n são $n = 0, 4, 6, \dots, n_{max} - 4, n_{max}$, onde $n_{max} = 2L^2$; e os valores permitidos de m são $m = -L^2, -L^2 + 2, \dots, L^2 - 2, L^2$.

O método de amostragem tomográfica descrito acima é aplicado de modo a gerar todas as CCs do espaço (n, m) . Devido aos altíssimos valores que $\Omega(n, m)$ assume eles são representados convenientemente através de seu logaritmo natural durante as simulações. O primeiro sistema simulado, de menor tamanho, é iniciado com uma estimativa de $\Omega_0(n, m)$ obtida através de aproximação de campo médio. Para a maioria dos estudos feitos realizamos $N = 5$ iterações, cada uma com $N_{sim} = 10$ configurações iniciais, as quais são simuladas durante $N_U = 10^7$ atualizações de redes.

A seguir descrevemos as dez configurações iniciais que utilizamos em cada iteração:

1. orientação aleatória de todos spins: $n \approx L^2$ e $m \approx 0$;

2. todos spins \uparrow : $n = 2L^2$ e $m = L^2$;
3. todos spins em uma subrede \uparrow e os outros \downarrow : $n = 0$ e $m = 0$;
4. orientação aleatória de todos spins: $n \approx L^2$ e $m \approx 0$;
5. todos spins \uparrow , exceto dois primeiros vizinhos: $n = 2L^2 - 6$ e $m = L^2 - 4$;
6. todos spins em uma subrede \uparrow e os outros \downarrow , mas com dois primeiros vizinhos invertidos: $n = 6$ e $m = 0$;
7. todos spins \downarrow : $n = 2L^2$ e $m = -L^2$;
8. todos spins \downarrow , exceto dois primeiros vizinhos: $n = 2L^2 - 6$ e $m = -L^2 + 4$;
9. todos spins em uma subrede \uparrow e os outros \downarrow : $n = 0$ e $m = 0$;
10. todos spins em uma subrede \uparrow e os outros \downarrow , mas com dois primeiros vizinhos invertidos: $n = 6$ e $m = 0$.

A dinâmica da simulação é de simples inversão de spin. As probabilidades de aceite de transição de uma configuração $\Gamma \equiv (n, m)$ para outra $\Gamma' \equiv (n' = n + \Delta n, m' = m + \Delta m)$ na N -ésima iteração, dada por

$$p_N(\Gamma \rightarrow \Gamma') = \min \left[\frac{\Omega_{N-1}(\Gamma')}{\Omega_{N-1}(\Gamma)}, 1 \right], \quad (3.5)$$

é armazenada em uma tabela; as possíveis variações de n são $\Delta n = 0, \pm 2, \pm 4$ e de m são $\Delta m = \pm 2$. Para cada configuração gerada, seja uma nova ou a mesma (caso a nova seja rejeitada), atualizamos a soma das quantidades de interesse que serão utilizadas posteriormente para os cálculos das médias canônicas. Para esse sistema as quantidades de interesse estão associadas ao parâmetro de ordem, ϕ , ($|\phi|$, ϕ^2 e ϕ^4) o qual é definido por

$$\phi \equiv m_A - m_B, \quad (3.6)$$

onde m_A e m_B são as magnetizações das subredes A e B , respectivamente (em alguns textos o parâmetro de ordem, ϕ , é chamado de *staggered magnetization* ou magnetização alternada). Ao término de cada iteração j a estimativa de $\Omega_j(n, m)$ é atualizada [de acordo com a equação (3.4)], o histograma $H_j(n, m)$ é zerado e a tabela das probabilidades de aceite de transição também é atualizada utilizando essa nova estimativa de $\Omega_j(n, m)$.

Determinação de $\Omega_0(n, m, L)$

Como foi mencionado anteriormente, esse método necessita de valores iniciais para $\Omega(n, m, L)$. Para o menor tamanho de rede simulado neste trabalho utilizamos os valores de $\Omega_0(n, m, L)$ estimado através de aproximação de campo médio (descrita na próxima subseção). Mas, quanto mais próximo Ω_0 for do valor exato, mais rápido o sistema irá convergir para tal valor e, conseqüentemente, fornecer melhores resultados. Tendo isso em vista, passamos a utilizar o valor final (da N -ésima iteração) de $\Omega_N(n, m, L_1)$, de um determinado sistema de tamanho $L_1 \times L_1$, para estimar o valor inicial de $\Omega_0(n, m, L_2)$ de um sistema de tamanho $L_2 \times L_2$ ($L_2 > L_1$). Com isso, para os sistemas maiores, obtivemos os valores de $\Omega_0(n, m)$ mais próximos do resultado final após as N iterações.

Para exemplificar o que acabamos de mencionar, mostramos na Figura 3.1 a estimativa de $\ln \Omega_0$ para $L = 18$ via aproximação de campo médio. Na Figura 3.2 mostramos o gráfico de $\ln \Omega_0(n, m, L = 18)$ estimado através de uma interpolação do valor final de $\Omega_N(n, m, L = 16)$. A estimativa de $\ln \Omega_N(n, m, L = 18)$ ao final da N -ésima iteração da simulação está representada na Figura 3.3. Nas figuras 3.4 e 3.5 plotamos as diferenças dessas duas estimativas de $\ln \Omega_0(n, m, L = 18)$ em relação aos valores de $\ln \Omega_N(n, m, L = 18)$. Podemos observar que a estimativa de $\Omega_0^{int.}$, obtida através da interpolação do resultado final de um sistema de tamanho menor, é de fato mais próxima (em relação à aproximação de campo médio, $\Omega_0^{c.m.}$) do valor final da simulação $\Omega_N^{sim.}$, ou seja, $\Omega_0^{int.} \sim \Omega_N^{sim.}$.

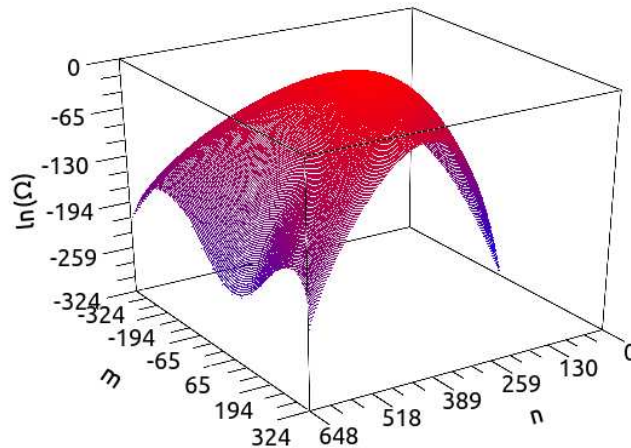


Figura 3.1: Estimativa de $\ln \Omega_0(n, m, L = 18)$ via aproximação de campo médio.

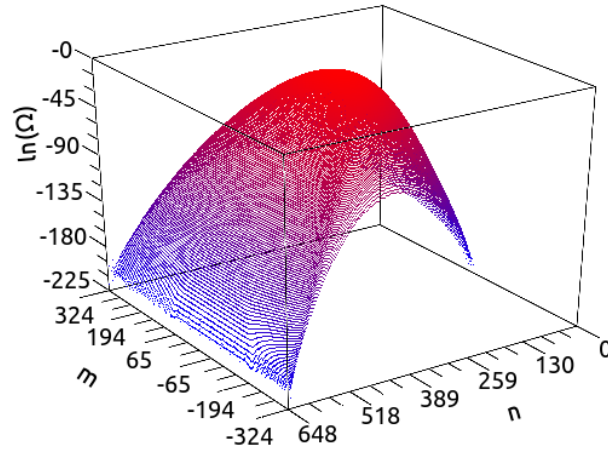


Figura 3.2: Estimativa de $\ln \Omega_0(n, m, L = 18)$ interpolado de $\ln \Omega_N(n, m, L = 16)$.

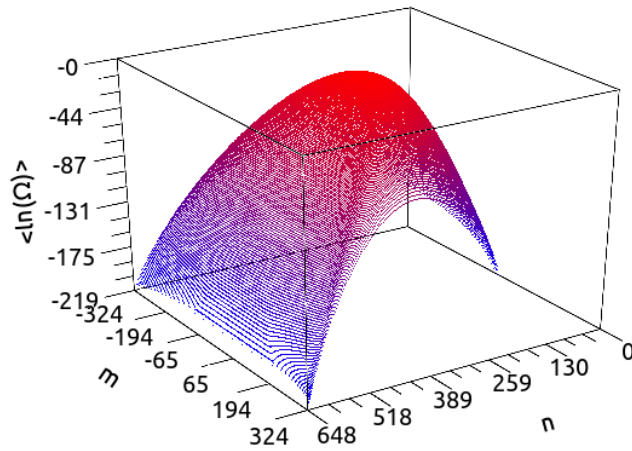


Figura 3.3: Média de $\ln \Omega_N(n, m, L = 18)$ da N -ésima iteração da simulação.

Aproximação de campo médio

Seja um sistema de spins-1/2 em uma rede quadrada $L \times L$ com condições periódicas de fronteira. O número de configurações com N_+ spins-up é dado por

$$\Omega(N_+) = \frac{(L^2)!}{(N_+)!(L^2 - N_+)!}. \quad (3.7)$$

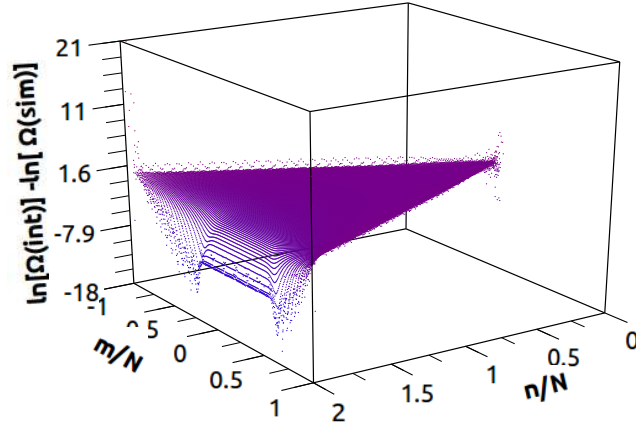


Figura 3.4: Diferença entre $\ln(\Omega_0^{int.})$, interpolado através da rede menor, e $\ln(\Omega_N^{sim.})$ obtido ao final da N -ésima iteração para $L = 18$; $N = L^2$. Pode-se notar que a maior diferença ocorre nas bordas do diagrama no espaço (n, m) .

Como a magnetização do sistema é $m = 2N_+ - L^2$, então, pela equação (3.7), o número de configurações com magnetização m é

$$\Omega(m) = \frac{(L^2)!}{\left(\frac{L^2+m}{2}\right)! \left(\frac{L^2-m}{2}\right)!}. \quad (3.8)$$

Definindo

$$s(m) \equiv \frac{1}{L^2} \ln \Omega(m) \quad (3.9)$$

e considerando $L^2 \gg 1$, podemos utilizar a aproximação de Stirling

$$\ln(x!) \approx x \ln(x) - x, \quad x \gg 1, \quad (3.10)$$

de modo que a levando a equação (3.8) na (3.9) obtemos

$$s(m) = \ln 2 - \frac{1}{2} [(1 + \mu) \ln(1 + \mu) + (1 - \mu) \ln(1 - \mu)], \quad (3.11)$$

onde $\mu \equiv m/L^2$.

Seja $\nu_+ = N_+/L^2$ e $\nu_- = N_-/L^2$ as frações de spins \uparrow e \downarrow , respectivamente. A

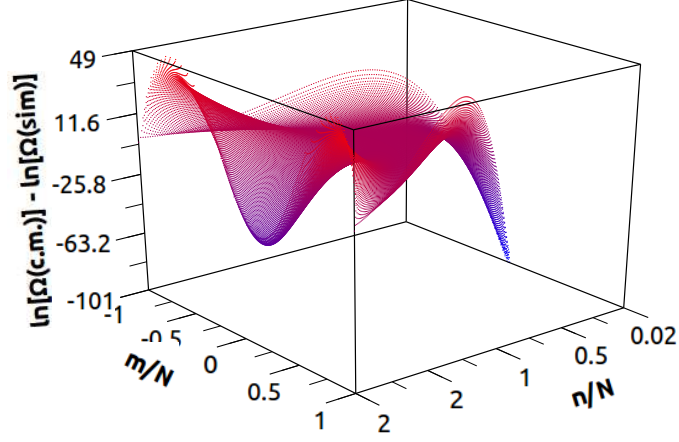


Figura 3.5: Diferença entre $\ln(\Omega_0^{c.m.})$, estimado por aproximação de campo médio, e $\ln \Omega_N^{sim.}$ obtido ao final da N -ésima iteração para $L = 18$; $N = L^2$.

aproximação utilizada para estimarmos $\Omega_0(n, m)$ é considerarmos os $2L^2$ elos (pares de sítios) como independentes. Assim, a probabilidade de um elo ter ambos spins na mesma orientação é

$$p(m) \equiv \nu_+^2 + \nu_-^2 = \frac{1}{2}(1 + \mu^2). \quad (3.12)$$

Dessa forma, o número de elos, n , com spins iguais é uma variável binomial com parâmetros $2L^2$ e p . Logo, a probabilidade de haver $n = k$ pares de spins iguais em uma configuração com magnetização m é

$$P(n = k|m) = \frac{(2L^2)!}{(k!)(2L^2 - k)!} p^k (1 - p)^{2L^2 - k}, \quad (3.13)$$

onde $q = 0, 1, 2, \dots, 2L^2$. Daí, $\langle n \rangle = 2L^2 p$ e $\text{var}(n) = 2L^2 p(1 - p)$. No limite gaussiano, essa distribuição binomial pode ser reescrita como

$$P(n = k|m) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left[-\frac{(k - \langle n \rangle)^2}{2\sigma^2}\right], \quad (3.14)$$

onde $\sigma(m) \equiv \sqrt{\text{var}(n)}$.

Sendo

$$\Omega(n, m) = \Omega(m)P(n|m) \quad (3.15)$$

e

$$s(n, m) \equiv \frac{1}{L^2} \ln \Omega(n, m) = s(n, m) + \frac{1}{L^2} \ln[P(n|m)], \quad (3.16)$$

onde usamos a equação (3.9), então, pela equação (3.14) obtemos a aproximação de campo médio para a estimativa de $\Omega_0(n, m)$:

$$\ln \Omega(n, m) = s(n, m) = s(m) - \frac{(n - \langle n \rangle)^2}{2L^2\sigma^2} - \frac{\ln \sigma}{L^2} + \text{const.}, \quad (3.17)$$

onde $s(m)$ é dado pela equação (3.11).

Interpolação e extrapolação

Como veremos a seguir, provavelmente o principal fator que nos permitiu fazer essas boas estimativas de $\Omega_0(n, m)$, através de uma interpolação a partir do resultado final simulacional de um tamanho menor, foi o fato de *conhecermos previamente todas as configurações possíveis* para todos os tamanhos, L , dos sistemas. A determinação prévia dessas configurações possíveis de sistemas de spin-1/2 numa rede quadrada no espaço (n, m) é discutida no Capítulo 4. A Figura 3.6 mostra o espaço configuracional de um sistema de $N \equiv L^2$ spins.

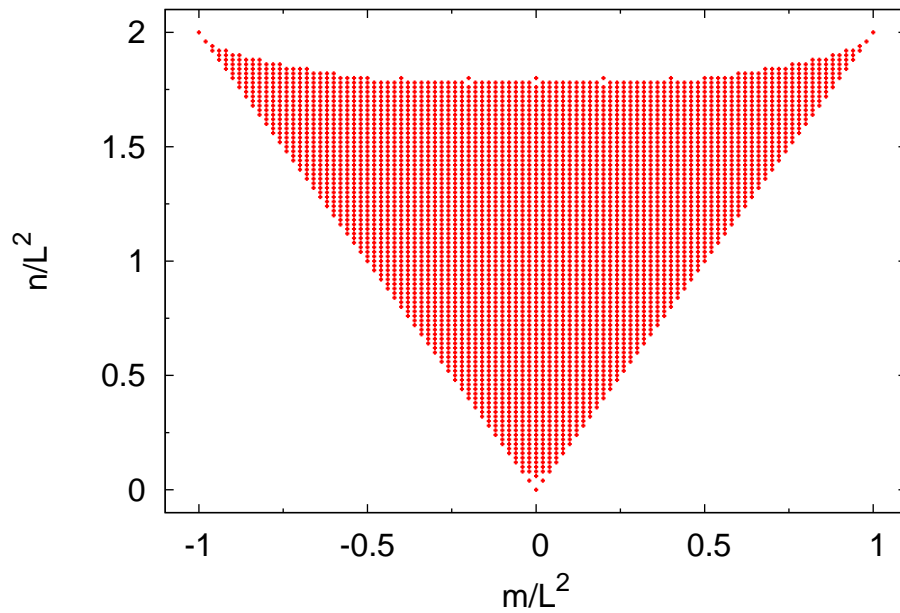


Figura 3.6: Classes de configurações acessíveis a um sistema de tamanho $L = 10$.

Seja uma rede de tamanho $L_1 \times L_1$ a partir da qual pretendemos interpolar $\Omega_N(L_1)$

(valor de Ω ao final da N -ésima iteração da simulação) para obter uma estimativa de $\Omega_0(L_2)$, para uma rede $L_2 \times L_2$ ($L_2 > L_1$). Como as CCs dos sistemas são definidas no plano (n, m) , precisamos fazer uma interpolação bidimensional. Para esse tipo de interpolação é necessário que *cada* ponto de L_2 esteja envolto por *quatro* pontos de L_1 (caso contrário, precisaríamos fazer uma extrapolação) nesse espaço (n, m) .

Entretanto, nem todos os pontos de L_2 possuem quatro pontos de L_1 próximos, como podemos ver na Figura 3.7. Observando essa figura, podemos notar que *nenhuma* das CCs de L_2 que estão nas fronteiras do diagrama possuem quatro correspondentes de L_1 próximas – principalmente as que estão próximas de $m = 1$ e aquelas na parte superior do diagrama. Dessa maneira, como primeira tentativa de estimar $\Omega_0(L_2)$, *interpolamos* todos os pontos de L_2 que possuem quatro pontos de L_1 próximos e *extrapolamos* os pontos de L_2 que estão nas fronteiras do diagrama. Porém, os valores de $\Omega_0(L_2)$ nas fronteiras do diagrama ficaram totalmente distorcidos e inconsistentes com a forma suave de $\ln \Omega$ que podemos ver na Figura 3.3, por exemplo.

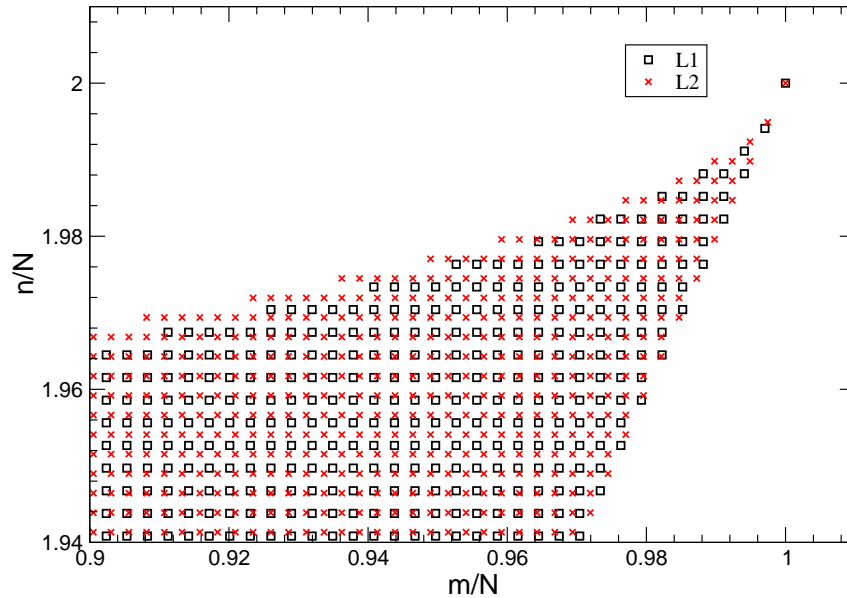


Figura 3.7: Região do diagrama (n, m) com todas as configurações possíveis para dois sistemas de tamanhos $L_1 = 26$ e $L_2 = 28$; $N = L^2$.

Extrapolação da rede menor

Para contornar esses problemas, ocorridos ao *extrapolar* os dados das fronteiras de $\Omega_N(L_1)$ para $\Omega_0(L_2)$, utilizamos uma alternativa simples: extrapolamos todos os pontos das fronteiras de L_1 de modo a obtermos pontos extras (configurações “fictícias”) para o próprio sistema de tamanho L_1 . Esses “pontos extras” são extrapolados até que todos os pontos de L_2 estejam envolvidos por quatro de L_1 próximos. Isso está representado na Figura 3.8, que são as configurações possíveis dos mesmos sistemas da Figura 3.7, porém, com a rede de L_1 estendida além das fronteiras. Com isso, o $\Omega_N(L_1)$ original (para todas as configurações possíveis), representado na Figura 3.9, passará a ter alguns pontos extras, gerando um novo $\Omega_N(L_1^{est})$ em uma rede estendida, mostrado na Figura 3.10.

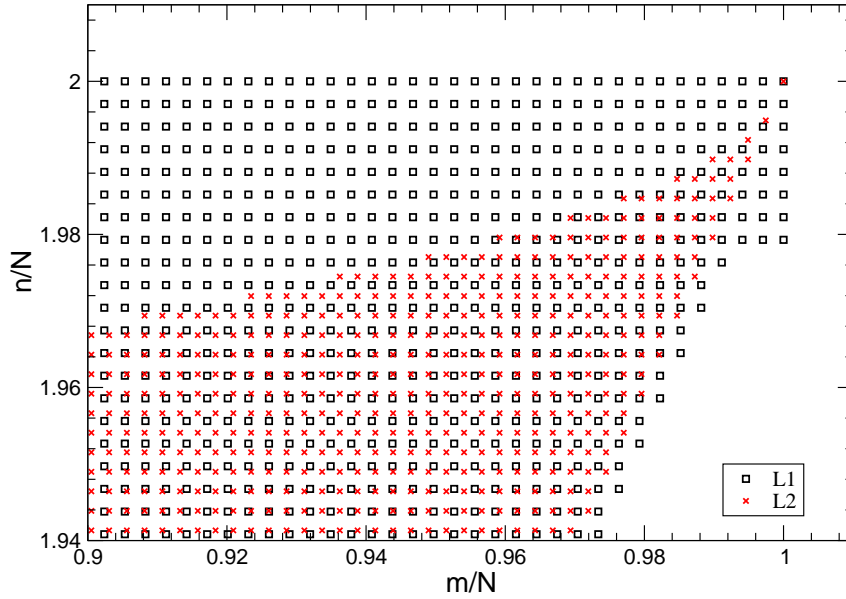


Figura 3.8: Região do diagrama (n, m) com rede de tamanho menor ($L_1 = 26$) estendida, a qual envolve todos os pontos da rede maior, $L_2 = 28$; $N = L^2$.

Com o intuito de criar essa rede estendida de L_1 e devido à complexidade da distribuição das configurações desse sistema nas extremidades do diagrama (n, m) , como pode ser visto na Figura 3.6, lançamos mão de uma extrapolção linear unidimensional ao longo de diferentes regiões das fronteiras desse diagrama. Na Figura 3.11 mostramos o novo diagrama estendido, no espaço (n, m) , com pontos extrapolados (marcados com “×” pretos) ao longo de todas as bordas do diagrama com as CCs acessíveis (marcadas com “o” vermelhos).

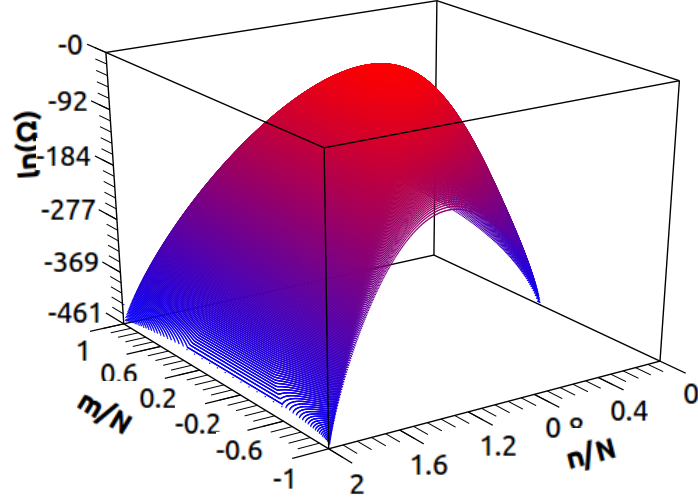


Figura 3.9: $\ln[\Omega(L_1)]$ com todas classes de configurações possíveis; $N = L_1^2$, para $L_1 = 26$.

As diferentes regiões mencionadas acima, nas quais realizamos as extrapolações lineares unidimensionais no espaço (n, m) , são

1. a parte inferior do diagrama, para $n \lesssim 0.25$, onde realizamos extrapolações na direção n ;
2. as fronteiras laterais, para $0.25 \lesssim n \lesssim 1.75$, onde foram realizadas extrapolações na direção m ;
3. a fronteira superior, para $|m| \lesssim 0.85$ e $1.75 \lesssim n \leq 2$, onde extrapolamos na direção n ;
4. as duas extremidades próximas de $n = 2$ e $|m| = 1$, nas quais foram realizadas extrapolações ao longo de m .

Salientamos ainda que para obtermos as redes estendidas, como a mostrada na Figura 3.11, as diferentes regiões do diagrama (n, m) foram extrapoladas exatamente na ordem em que as descrevemos acima. Isso se deve ao fato de que em algumas regiões, nas quais as densidades de CCs possíveis é pequena, alguns pontos são extrapolados utilizando justamente outros que já foram extrapolados a partir de outras regiões com maior

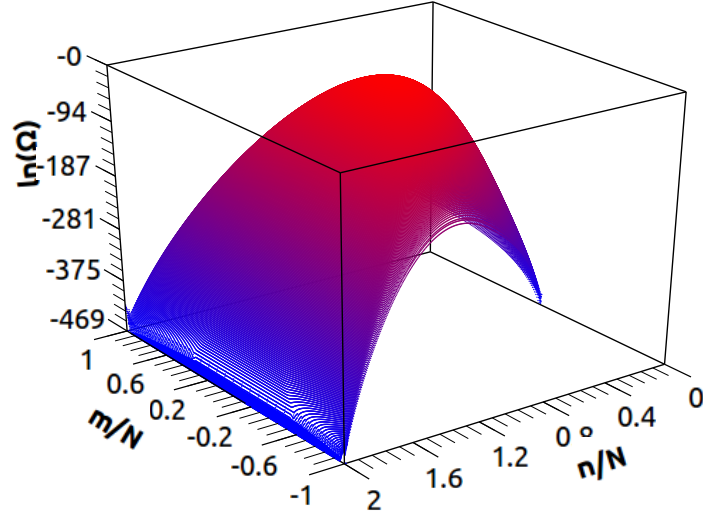


Figura 3.10: $\ln[\Omega(L_1^{est})]$, com pontos extrapolados; $N = L_1^2$, para $L_1 = 26$.

densidade de CCs possíveis. Ressaltamos também que os parâmetros mencionados acima, que delimitam as diferentes regiões, são específicos para cada tamanho, L_1 , da rede em análise.

Podemos observar, pela Figura 3.10, que $\Omega_N(L_1^{est})$ da rede estendida não apresenta distorções em relação ao $\Omega_N(L_1)$ mostrado na Figura 3.9. Dessa forma, uma vez que todos os pontos de L_2 estão envolvidos por quatro da rede L_1 estendida, interpolamos os pontos de $\Omega_0(L_2)$ a partir de $\Omega_N(L_1^{est})$, como veremos a seguir.

Interpolação bidimensional de primeira ordem

A fim de obter $\Omega_0(L_2)$ a partir de $\Omega_N(L_1^{est})$, como mencionado acima, realizamos uma interpolação bidimensional de primeira ordem através do vizinho mais próximo no espaço (n, m) . Sejam os sistemas de tamanho L_1 e L_2 , com $L_2 > L_1$, tais que

$$\omega_j(n'_j, m'_j, L_j) \equiv \frac{\ln \Omega^j(n_j, m_j, L_j)}{L_j^2}, \quad (3.18)$$

onde $j = 1, 2$; $n'_j = n_j/L_j^2$ e $m'_j = m_j/L_j^2$. Utilizando a rede L_1 estendida, todos os pontos, (n'_2, m'_2) , da rede L_2 estarão envolvidos por quatro pontos próximos, (n'_1, m'_1) , pertencentes à rede L_1^{est} , como está representado na Figura 3.8.

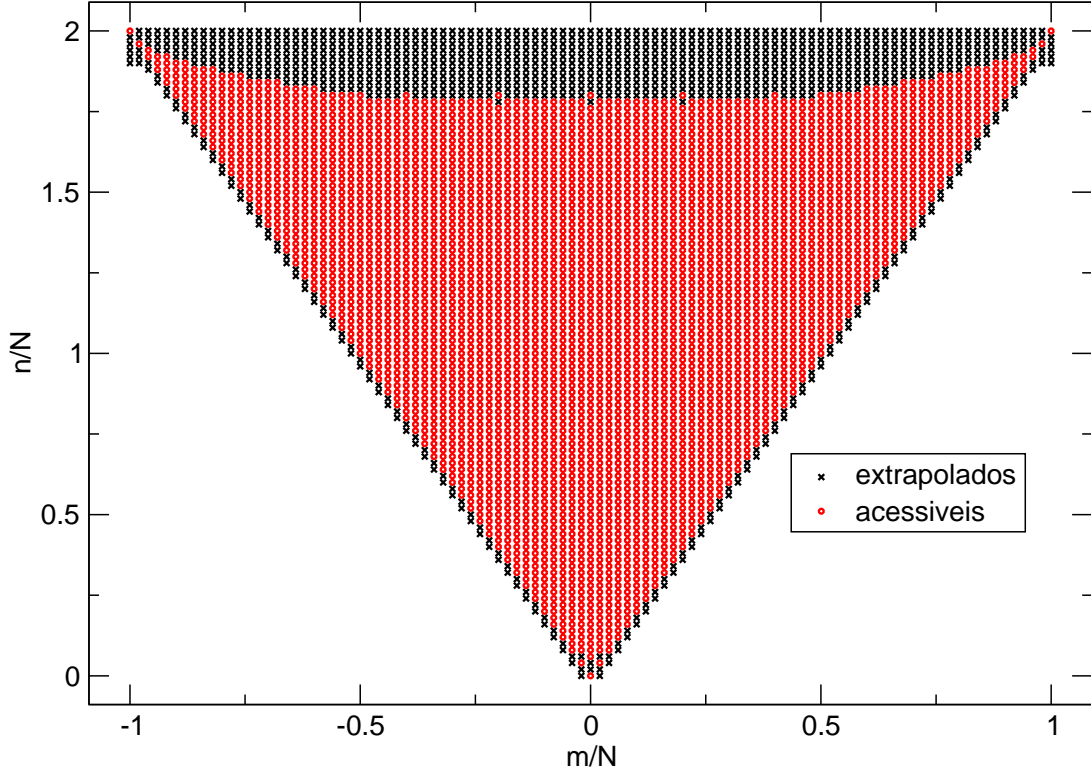


Figura 3.11: Classes de configurações possíveis e extrapoladas de um sistema de tamanho $L = 10$.

Em seguida identificamos, dentre os quatro pontos de L_1^{est} , qual ponto está mais próximo de (n'_2, m'_2) . Esse ponto mais próximo será utilizado como um ponto de referência, em torno do qual iremos expandir $\omega_2(n'_2, m'_2, L_2)$ até a primeira ordem em n e m :

$$\begin{aligned} \omega_2(n'_2, m'_2, L_2) \approx & \omega_1(n'_1, m'_1, L'_1)|_{ref} + (n'_2 - n_1^{ref}) \left(\frac{\partial \omega_1}{\partial n'_1} \right) \Big|_{ref} + \\ & + (m'_2 - m_1^{ref}) \left(\frac{\partial \omega_1}{\partial m'_1} \right) \Big|_{ref} \end{aligned} \quad (3.19)$$

onde “ $|_{ref}$ ” indica que avaliamos ω_1 e suas respectivas derivadas no ponto de referência. É importante frisar que os pontos interpolados (n_2, m_2) envolvem *somente* CCs possíveis do sistema de tamanho L_2 , enquanto os pontos utilizados para fazer tais interpolações, (n_1, m_1) , envolvem também as “fictícias” criadas para estender a rede L_1 . Portanto, os valores de $\Omega_0(L_2)$ para o conjunto de configurações possíveis, $\{(n_2, m_2)\}$, interpoladas a partir de $\Omega_N(L_1)$, é dado por

$$\ln \Omega_0(n_2, m_2, L_2) = L_2^2 \omega_2(n'_2, m'_2, L_2). \quad (3.20)$$

Capítulo 4

Classes de Configurações

Em uma rede quadrada $L \times L$ com $N = L^2$ spins identificamos várias *classes de configurações*, das quais todas as outras fazem parte. Devido à simetria do sistema (em relação ao número de spins-up, N_+ , e spins-down, N_-), determinamos os possíveis valores do número de pares de spins diferentes (pares de spins com sentidos opostos), u , para cada valor de $N_+ \in [0, \frac{L^2}{2}]$.

Isso é feito pois um dos principais problemas na análise desse sistema é a determinação prévia de u_{min} e u_{max} e também a verificação se as classes de configurações próximas às extremas, (N_+, u_{min}) e (N_+, u_{max}) , são acessíveis. Como o número de pares de primeiros vizinhos iguais, n , e a magnetização, m , estão relacionados à u e N_+ , respectivamente, por

$$n = 2L^2 - u$$

e

$$m = 2N_+ - L^2$$

então, conhecendo os valores possíveis de (N_+, u) , ficam determinados os possíveis valores de (n, m) .

4.1 Determinação de u_{min} e Estados Próximos

4.1.1 Configurações Compactas

Chamamos de *configurações compactas* aquelas que, basicamente, apresentam um aglomerado retangular ou quadrado de tamanho $l \times l$ ($2 < l < L$) com $N_+ = l^2$ spins-up e

$N_- = L^2 - N_+$ spins-down. Essa configuração está ilustrada na Figura 4.1, onde os spins-up e spins-down estão representados por “×” e “•”, respectivamente; as linhas curvas representam os pares de spins diferentes.

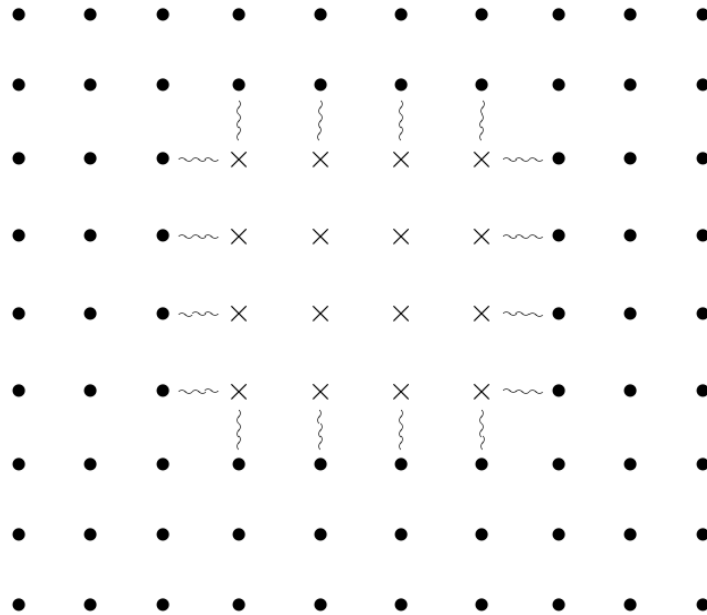


Figura 4.1: Configuração compacta básica

Nessa classe de configurações compactas existem basicamente quatro casos especiais, os quais analisamos a seguir:

i) $N_+ = l^2$:

Podemos ver pela Figura 4.1 que os pares de primeiros vizinhos diferentes estão nas bordas do aglomerado, nas quais cada spin-up tem um primeiro vizinho diferente (exceto os quatro que estão no vértice), ou seja, $u \equiv u^{(0)} = 4l$. Vamos agora verificar qual o valor de u para outra configuração com $N_+ = l^2$. Primeiramente vamos inverter qualquer um dos spins-up de algum dos vértices do aglomerado; isso não altera o valor de u (continua sendo igual a $u^{(0)} = 4l$), pois tais spins têm dois primeiros vizinhos iguais e dois diferentes! Em seguida, para manter $N_+ = l^2$, invertemos um dos spins-down que seja primeiro vizinho de algum dos spins-up das bordas do aglomerado; isso faz com que surjam mais dois pares de primeiros vizinhos diferentes, ou

seja, nessa nova configuração $u^{(1)} = u^{(0)} + 2$. Essa modificação está representada na Figura 4.2, onde destacamos os spins-up e down que acabaram de ser invertidos por “ \otimes ” (era “ \bullet ” inicialmente) e “ \ominus ” (era “ \times ” inicialmente), respectivamente; as linhas duplas retas representam novos pares de vizinhos iguais enquanto as linhas duplas curvas representam novos pares de vizinhos diferentes devidas às inversões dos spins.

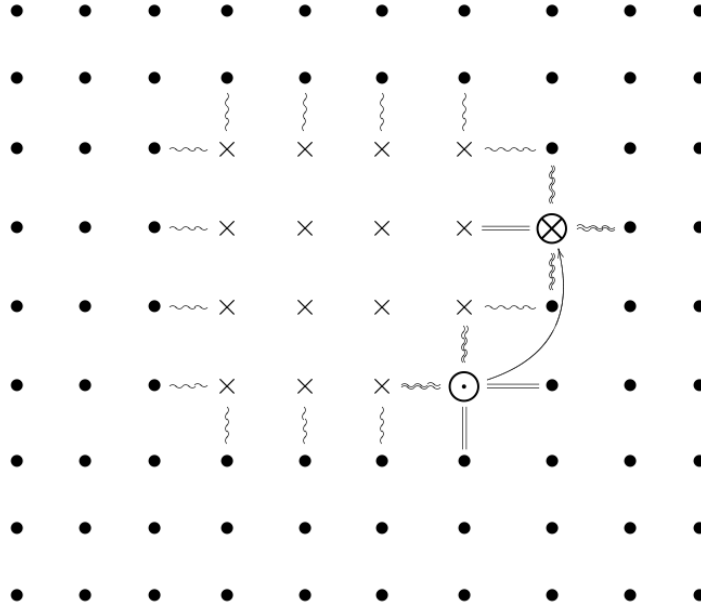


Figura 4.2: Modificação na configuração compacta básica

Qualquer outra modificação, análoga à mencionada acima, na configuração inicial do sistema, faz com que u *auumente* em dois ou quatro. Assim, vemos que é possível ocorrer a transição ¹

$$(N_+, u_{min}) \longrightarrow (N_+, u_{min} + 2)$$

(como poderá ser visto a seguir, para *todas configurações compactas essa transição será possível!*). Portanto, a configuração inicial (quadrada) possui o *menor valor de* u , ou seja, nesse caso

$$u_{min} = 4l \tag{4.1}$$

¹O termo “transição” usado neste capítulo se refere a uma transformação de uma configuração para gerar outra.

e os *menores* valores possíveis de u são:

$$u = \begin{cases} u_{min} = 4l \\ u_{min} + 2 \\ u_{min} + 4 \\ \dots \end{cases} \quad (4.2)$$

ii) $N_+ = l(l \pm 1)$:

Essas são as configurações retangulares mais “compactas” possíveis, no sentido de não terem a forma de uma “fita” estendida. Como os lados desse retângulo são l e $(l \pm 1)$, então u_{min} é tal que

$$u_{min} = 2l + 2(l \pm 1) = 4l \pm 2. \quad (4.3)$$

Analogamente à análise do caso anterior, de um aglomerado quadrado de dimensões $l \times l$, os menores valores possíveis de u são:

$$u = \begin{cases} u_{min} = 4l \pm 2 \\ u_{min} + 2 \\ u_{min} + 4 \\ \dots \end{cases} \quad (4.4)$$

iii) $l(l - 1) < N_+ < l^2$:

Essa configuração pode ser construída pela inversão de $q \in [1, l)$ spins-down que sejam primeiros vizinhos dos spins-up das bordas do aglomerado retangular “inicial” $l \times (l - 1)$, para a qual, pela equação (4.3), temos que $u_{min}^{(0)} = 4l - 2$.

Podemos notar que para $q = 1$, invertemos um spin-down próximo à borda do aglomerado como está mostrado na Figura 4.3. Com isso, o valor de u_{min} *augmenta*

em dois, ou seja, essa nova configuração possui

$$u_{min}^{(1)} = u_{min}^{(0)} + 2 = 4l$$

pares de vizinhos diferentes.

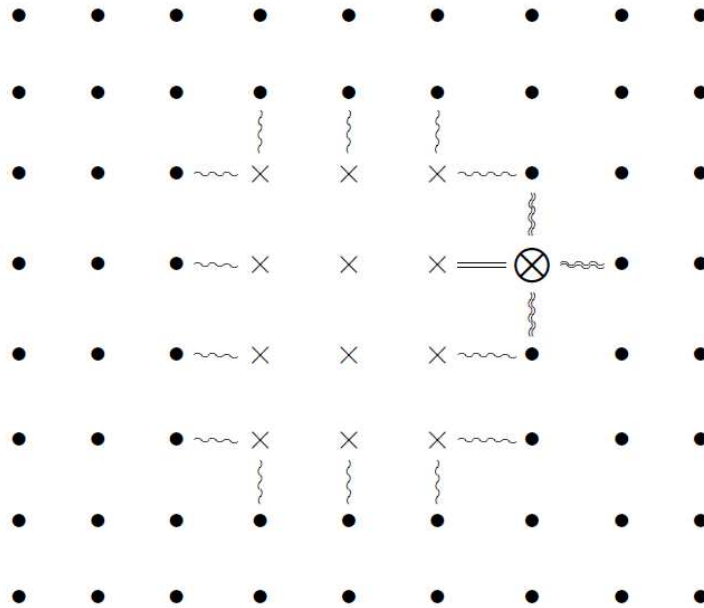


Figura 4.3: Configuração básica da 3ª classe compacta

Para $q = 2$ podemos inverter um dos spins-down que esteja próximo da borda do aglomerado e que seja primeiro vizinho do spin-up que está destacado por \otimes na Figura 4.3. Isso *não* altera o valor de u_{min} e então $u_{min}^{(2)} = u_{min}^{(1)}$. Em geral, para qualquer valor de $q \in [1, l)$, temos

$$u_{min} = 4l. \tag{4.5}$$

Assim, os *menores* valores possíveis de u são:

$$u = \begin{cases} u_{min} = 4l \\ u_{min} + 2 \\ u_{min} + 4 \\ \dots \end{cases} \tag{4.6}$$

iv) $l^2 < N_+ < l(l+1)$:

Essa configuração pode ser construída de maneira análoga à mencionada na discussão do caso anterior. Nesse caso, o aglomerado retangular “inicial” é o quadrado $l \times l$, para o qual $u_{min}^{(0)} = 4l$, e invertemos $q \in [1, l)$ spins-down que sejam primeiros vizinhos dos spins-up das bordas do aglomerado, o que faz com que

$$u_{min} = 4l + 2. \quad (4.7)$$

Então, os menores valores possíveis de u são:

$$u = \begin{cases} u_{min} = 4l + 2 \\ u_{min} + 2 \\ u_{min} + 4 \\ \dots \end{cases} \quad (4.8)$$

4.1.2 Configurações “compactas–estendidas”

Destacamos ainda que as configurações retangulares $l \times (l - q)$, para $l > 3$ e $1 < q < q_{max} = l - 2$ (que são “estendidas”, análogas à uma pequena “fita”) não foram classificadas como fundamentais! O valor $q_{max} = l - 2$ se deve ao fato de que para

$$q = l - 1 \quad \Rightarrow \quad l - q = 1$$

teríamos uma “fita” de espessura unitária, ou seja, seria uma cadeia reta de spins-up. Devido a esses possíveis valores de q é notável que os lados l_1 e l_2 dessas configurações retangulares obedecem a desigualdade:

$$l_1 \equiv l > l_2 \equiv (l - q) \quad (4.9)$$

Vejamos, para tais configurações estendidas

$$u_{min}^{est} = 2l + 2(l - q) = 4l - 2q$$

Mas é *sempre* possível reorganizar essas configurações retangulares de modo a termos configurações que se enquadrem em alguma das quatro classes “compactas” mencionadas acima.

Para verificar isso vamos modificar uma configuração retangular inicial de lados $l_1 = l$ e $l_2 = l - q$. Para essa configuração inicial

$$N_+^{(0)} = l(l - q) \tag{4.10}$$

$$u_{min}^{(0)} = u_{min}^{est} = 4l - 2q \tag{4.11}$$

Agora vamos modificar esse retângulo, reduzindo um lado e aumentando o outro, para que tenhamos o *maior quadrado* de lados l' com

$$(l - q) < l' < l$$

tal que

$$N_+^{(1)} = l'^2 < N_+^{(0)} \tag{4.12}$$

e

$$u_{min}^{(1)} = 4l'. \tag{4.13}$$

Então os $k = N_+^{(0)} - N_+^{(1)}$ spins que “sobraram” (estão fora desse quadrado de lados l') dessa modificação podem ser recolocados próximos às bordas do quadrado $l' \times l'$. Assim, a configuração final, modificada, terá

$$N_+^{(2)} = N_+^{(0)}. \tag{4.14}$$

Os valores de $u_{min}^{(2)}$, assim como a identificação da classe da nova configuração em função de k , estão representados na Tabela 4.1.

É importante observar ainda que as configurações retangulares $(l + q) \times l$ têm:

Tabela 4.1: Valores de $u_{min}^{(2)}$

| k | $u_{min}^{(2)}$ | Valores de $N_+^{(2)}$ | Classe compacta |
|-----------------|-----------------|---------------------------------------|-----------------|
| $1 \leq k < l'$ | $4l' + 2$ | $l'^2 < N_+^{(2)} < l'(l' + 1)$ | (iv) |
| $k = l'$ | $4l' + 2$ | $N_+^{(2)} = l'(l' + 1)$ | (ii) |
| $l' < k < 2l'$ | $4(l' + 1)$ | $(l' + 1)l' < N_+^{(2)} < (l' + 1)^2$ | (iii) |
| $k = 2l'$ | $4(l' + 1)$ | $N_+^{(2)} = (l' + 1)^2$ | (i) |

- o mesmo resultado que a anterior, feita para $l \times (l - q)$. Para ver isto, basta notar a correspondência entre os dois casos: o primeiro tem $l_1 \equiv l$ como o maior lado do retângulo, enquanto o segundo tem $l_1 \equiv (l + q)$.
- correspondência com as “configurações estendidas” (tipo “fitas”), que serão discutidas na Subseção (4.1.3). Isso ocorre pois q pode estar em uma faixa de valores para os quais

$$N_+ = l_1 l_2 = (l + q)l \geq L$$

e conseqüentemente $l_1 \equiv l + q = L$.

4.1.3 Configurações Estendidas

As configurações chamadas estendidas são aquelas em que $N_+ \geq kL$, onde $k \geq 1$. Essa estruturas se assemelham a uma fita que cruza toda a extensão da rede, como pode ser visto na Figura 4.4. Essas *configurações estendidas* podem ser divididas em somente duas classes básicas:

i) $N_+ = kL$:

Esse caso está representado na Figura 4.4, pela qual podemos observar que

$$u_{min} = 2L, \tag{4.15}$$

pois todos os spins-up do aglomerado possuem somente um primeiro vizinho diferente.

Pela Figura 4.5 podemos ver que qualquer inversão de dois spins diferentes, que não sejam primeiros vizinhos e estejam em uma das bordas da “fita”, leva u a *aumentar*

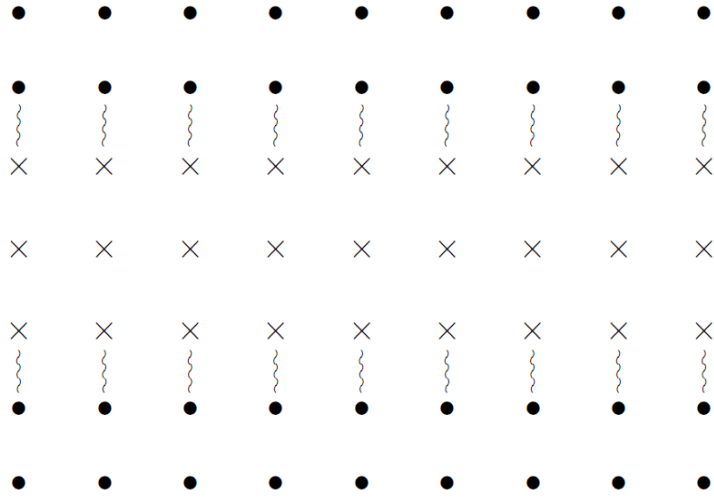


Figura 4.4: Configuração estendida simples

no mínimo em quatro; se eles fossem primeiros vizinhos teríamos $\Delta u = 6$. Assim, como *não* existe a transição

$$(N_+, u_{min}) \longrightarrow (N_+, u_{min} + 2),$$

e conseqüentemente os *menores* valores possíveis de u são:

$$u = \begin{cases} u_{min} = 2L \\ u_{min} + 4 \\ u_{min} + 6 \\ \dots \end{cases} \quad (4.16)$$

ii) $N_+ > L$ e $N_+ \neq kL$:

Essa configuração pode ser construída invertendo qualquer quantidade $k \neq L$ de spins-down, e que sejam primeiros vizinhos dos spins-up das bordas da “fita”. Seja uma configuração inicial com $k = 1$, então, pela Figura 4.6 podemos ver que $u^{(0)} = 2L + 2$. Para qualquer outro valor de $k > 1$ e $k \neq L$ spins-up, adicionados lado a lado em uma das bordas, não haverá alteração em u . Portanto

$$u_{min} = 2L + 2. \quad (4.17)$$

Pela Figura 4.7 é notável que pode-se conseguir um *aumento mínimo* de u , em dois,

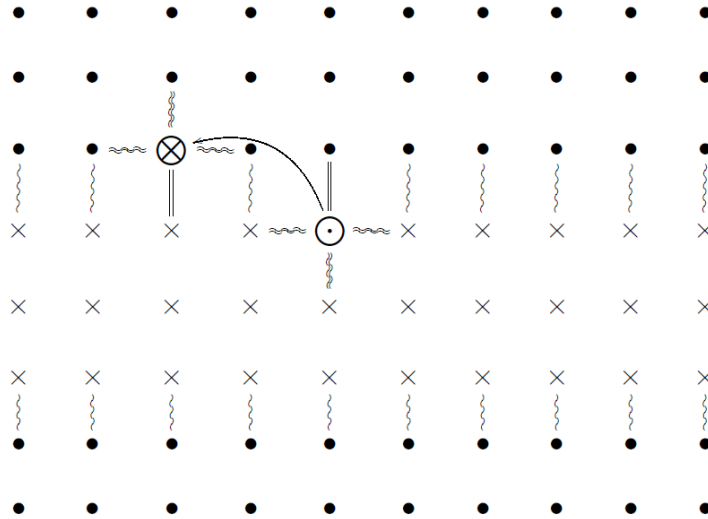


Figura 4.5: Configuração estendida com inversão de dois spins

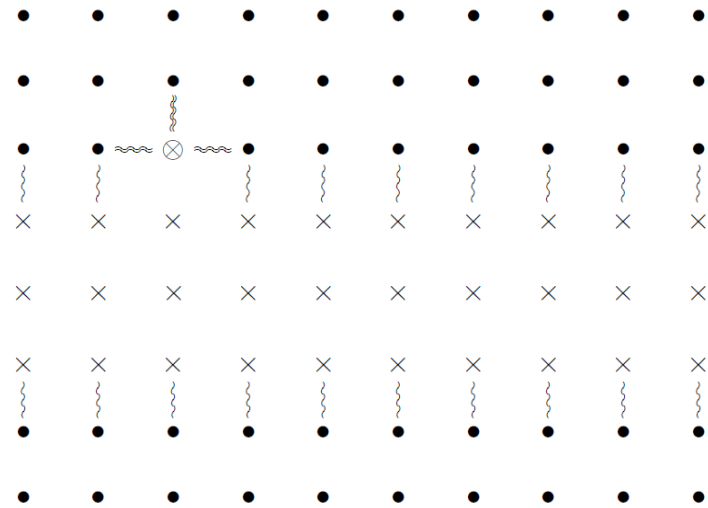


Figura 4.6: Configuração estendida modificada

invertendo-se um spin-up (tornou-se o spin-down \ominus na figura) da borda do aglomerado e em seguida invertendo um spin-down (tornou-se o spin-up \otimes na figura) que tenha dois vizinhos no aglomerado. Como *existe* a transição

$$(N_+, u_{min}) \longrightarrow (N_+, u_{min} + 2)$$

então os *menores* valores possíveis de u são:

$$u = \begin{cases} u_{min} = 2L + 2 \\ u_{min} + 2 \\ u_{min} + 4 \\ \dots \end{cases} \quad (4.18)$$

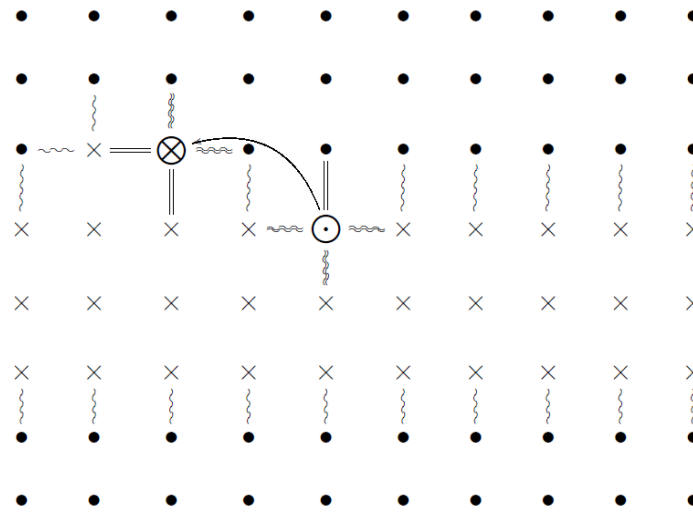


Figura 4.7: Configuração estendida com aumento mínimo na energia u

Através das análises feitas acima, podemos observar que u_{min} é independentemente da espessura da fita.

4.2 Determinação de u_{max} e Estados Próximos

O maior valor possível de $u_{max} = f(N_+)$, dentre todos os valores possíveis de $N_+ \in [0, \frac{L^2}{2}]$, ocorre para $N_+ = \frac{L^2}{2}$: quando o sistema se encontra numa configuração análoga a um “tabuleiro de xadrez”. Essa configuração está representada na Figura 4.8 (as linhas curvas representam os pares de primeiros vizinhos diferentes), através da qual podemos verificar que $u_{max} = 2L^2$.

A forma funcional de u_{max} em relação a N_+ pode ser obtida analisando algumas configurações de redes $L \times L$ com:

- $N_+ = 1$: Evidentemente temos que $u = u_{max} = 4$.

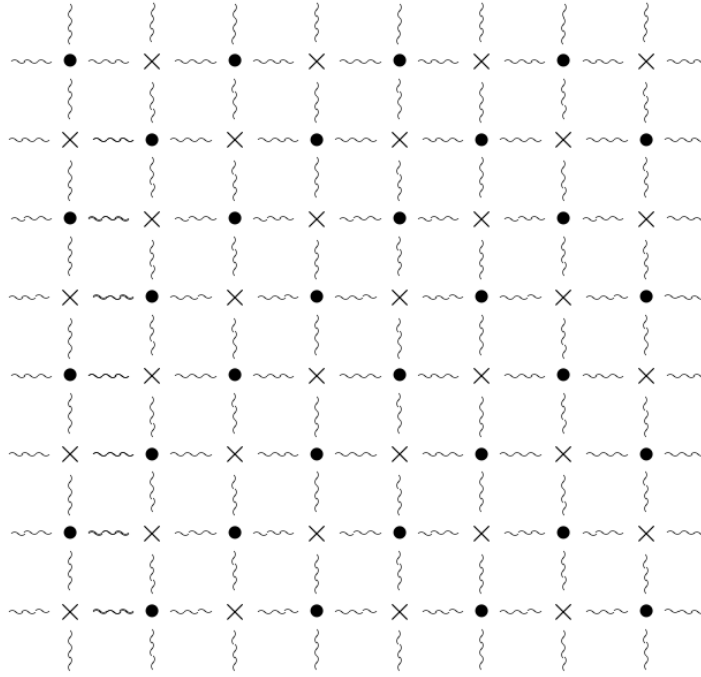


Figura 4.8: Configuração Tabuleiro de Xadrez

- $N_+ = 2$: Se os dois spins-up forem primeiros vizinhos $u^{(1)} = 6$; se os dois spins-up *não* forem primeiros vizinhos $u^{(2)} \equiv u_{max} = 8$.
- $N_+ \geq 3$: Aumentando o valor de N_+ e fazendo análises análogas às realizadas acima, é fácil notar que para um determinado valor de N_+ , o valor máximo de u , u_{max} , ocorre quando todos os N_+ spins-up *não* são primeiros vizinhos. Portanto, para

$$0 \leq N_+ \leq \frac{L^2}{2}$$

temos

$$u_{max} = 4N_+ \tag{4.19}$$

A seguir vamos determinar u_{max} e os valores próximos para cada configuração, a partir da “tabuleiro de xadrez”, para todos os valores de $N_+ \in [0, \frac{L^2}{2}]$:

- $N_+ = \frac{L^2}{2}$:

Como discutido no início da seção, para $N_+ = \frac{L^2}{2}$, temos que $u_{max} = 2L^2$ para a configuração “tabuleiro de xadrez” mostrada na Figura 4.8. Esse resultado concorda

com a equação (4.19).

Vejamos agora quais são as configurações com valores mais próximos de (N_+, u_{max}) : É fácil notar pela Figura 4.8 que a *menor* variação de u_{max} ocorre quando dois spins que sejam primeiros vizinhos são invertidos. Essa modificação faz com que

$$u = u_{max} \longrightarrow u = u_{max} - 6$$

ou seja, a transição mais próxima é

$$(N_+, u_{max}) \longrightarrow (N_+, u_{max} - 6). \quad (4.20)$$

Portanto as configurações $(N_+, u_{max} - 2)$ e $(N_+, u_{max} - 4)$ *não* são acessíveis! Então os *maiores* valores possíveis de u são:

$$u = \begin{cases} u_{max} = 2L^2 \\ u_{max} - 6 \\ u_{max} - 8 \\ u_{max} - 10 \\ \dots \end{cases} \quad (4.21)$$

- $N_+ = \frac{L^2}{2} - 1$:

Essa configuração pode ser construído invertendo um spin-up da configuração "tabuleiro de xadrez". Nesse caso temos que

$$u_{max} = 4N_+ = 2L^2 - 4.$$

Verifiquemos quais são as configurações com valores de (N_+, u) mais próximos de (N_+, u_{max}) : de modo similar à análise acima, é possível verificar que a *menor* variação de u ocorre, por exemplo, quando invertemos um dos segundos vizinhos do spin-down que foi invertido (da configuração "tabuleiro de xadrez") para construir essa configuração inicial. Isso faz com que

$$N_+ \longrightarrow N_+ - 1 = \frac{L^2}{2} - 2$$

e

$$u \longrightarrow u_{max} - 4.$$

Em seguida invertemos um spin-down que seja primeiro vizinho desses, o que faz com que N_+ volte a ser $N_+ = \frac{L^2}{2} - 1$ e não altera o valor de u (que havia sido *reduzido* em quatro no primeiro passo). Houve, então, a transição

$$(N_+, u_{max}) \longrightarrow (N_+, u_{max} - 4). \quad (4.22)$$

Desse modo, vemos que a configuração $(N_+, u_{max} - 2)$ *não* é acessível e então os *maiores* valores possíveis de u são:

$$u = \begin{cases} u_{max} = 2L^2 - 4 \\ u_{max} - 4 \\ u_{max} - 6 \\ \dots \end{cases} \quad (4.23)$$

- $1 < N_+ < \frac{L^2}{2} - 1$:

Todas as configurações com N_+ nesse intervalo apresentam o mesmo espectro de u . Para verificar isso e também encontrar todos os valores possíveis das configurações (N_+, u_{max}) , vamos analisar uma rede $L \times L$ na configuração inicial (N_+, u_{max}) com

$$N_+ = \frac{L^2}{2} - k, \quad (4.24)$$

onde k é o número de spins-up invertidos a partir da configuração “tabuleiro de xadrez” tal que

$$1 < k < \frac{L^2}{2} - 1. \quad (4.25)$$

Como podemos perceber, o principal problema dessa seção a ser resolvido é inferir,

para cada configuração, se as transições

$$(N_+, u_{max}) \longrightarrow (N_+, u_{max} - 2)$$

e

$$(N_+, u_{max}) \longrightarrow (N_+, u_{max} - 4)$$

são ou não possíveis, já que existem algumas “lacunas” próximo às fronteiras de (N_+, u_{max}) e (N_+, u_{min}) — como foi visto na também Seção 4.1.

Vejam, pelas análises feitas anteriormente, foi possível perceber que a configuração $(N_+, u_{max} - 2)$ *nunca* é acessível a partir de configurações em que os k spins não sejam primeiros e/ou segundos vizinhos entre si. Essa configuração “limiar espalhada” está representada na Figura 4.9.

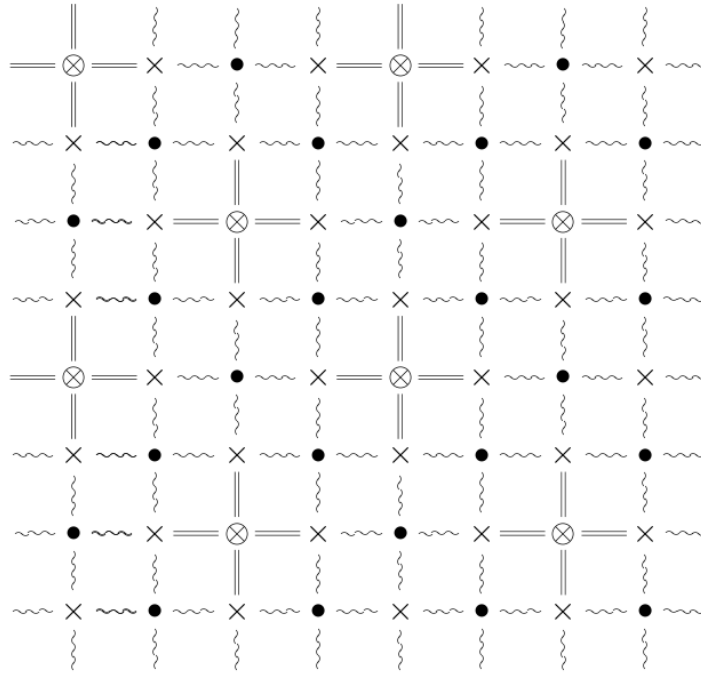


Figura 4.9: configuração “limiar espalhada”

Podemos ver que essa configuração foi construída invertendo a metade ($\frac{1}{2}L$) dos spins-up em $\frac{L}{2}$ fileiras, escolhidas alternadamente (justamente para que tais spins invertidos não sejam primeiros ou segundos vizinhos entre si). Portanto, foram invertidos

$$k_{limiar} = \left(\frac{L}{2}\right) \left[\frac{1}{2} \left(\frac{L}{2}\right)\right] = \frac{L^2}{8} \quad (4.26)$$

spins-up da configuração “tabuleiro de xadrez”.

Embora a configuração $(N_+, u_{max} - 2)$ não seja acessível pela configuração “limiar espalhada”, podemos modificá-la (ver exemplo na Figura 4.10) de modo a termos ao menos dois dos k_{limiar} spins-up como segundos vizinhos entre si (representados por “ \otimes ” que estão próximos de “ \boxtimes ” nessa figura). Invertendo um dos spins-up representados por “ \boxtimes ” não alteramos o valor de u , e em seguida invertendo seu primeiro vizinho “ \bullet ” (spin-down) aumentamos o número de elos iguais em dois, e consequentemente reduzimos u na mesma proporção. Ou seja, essa modificação na rede “limiar espalhada” claramente *permite* a transição

$$(N_+, u_{max}) \longrightarrow (N_+, u_{max} - 2).$$

Mas, se o spin-down “ \bullet ” citado acima não fosse primeiro vizinho do “ \boxtimes ” invertido, então haveria um aumento em quatro do número de elos iguais, ou seja, haveria a transição

$$(N_+, u_{max}) \longrightarrow (N_+, u_{max} - 4).$$

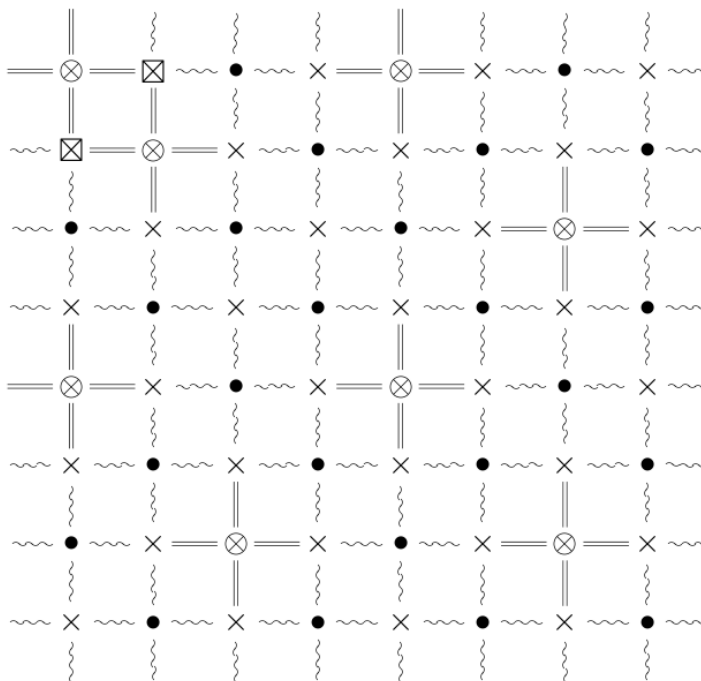


Figura 4.10: configuração “limiar espalhada” modificada

O nome “limiar espalhada” dado à configuração da Figura 4.10 e à k_{limiar} se justifica pelo fato de que, para *qualquer*

$$k > k_{limiar} = \frac{L^2}{8} \quad (4.27)$$

sempre haverá pelo menos dois dos k spins invertidos da configuração “tabuleiro de xadrez” sendo primeiro ou segundo vizinhos entre si. Portanto, para

$$N_+ = \frac{L^2}{2} - k,$$

onde

$$1 < k < \frac{L^2}{2} - 1,$$

os *maiores* valores possíveis de u são:

$$u = \begin{cases} u_{max} = 2L^2 - 4k \\ u_{max} - 2 \\ u_{max} - 4 \\ u_{max} - 6 \\ \dots \end{cases} \quad (4.28)$$

- $N_+ = 1$:

Esse é um caso muito simples, no qual existe somente um spin-up. Evidentemente esse spin terá quatro primeiros vizinhos diferentes e, conseqüentemente, qualquer modificação feita nesse sistema *não* altera a classe de configuração do mesmo! Assim, o único valor possível de u é

$$u = u_{max} = 4. \quad (4.29)$$

- $N_+ = 0$:

Essa é a configuração mais trivial, onde $u = u_{max} = 0$ é o único valor possível de u .

Capítulo 5

Análise dos Resultados

Neste capítulo apresentamos os resultados obtidos em nossos estudos simulacionais do modelo de Ising antiferromagnético (AF) com campo externo numa rede quadrada. Utilizamos o método de amostragem entrópica tomográfica, descrito na Seção 3.1, para simular os sistemas cujos tamanhos de rede vão de $L = 10$ à 30 , com $\Delta L = 2$.

Em todos estudos utilizamos $N_{sim} = 10$ configurações iniciais, as quais foram simuladas durante $N_U = 10^7$ atualizações de rede (ou passos de Monte Carlo). Cada um desses estudos foram iterados $N = 5$ vezes, porém, para realizar os cálculos de expoentes críticos, iterarmos dez vezes os sistemas de tamanhos $L = 22$ à 28 e quinze vezes os de $L = 28$ e 30 . Para o cálculo das incertezas realizamos cinco estudos independentes para cada sistema.

5.1 Médias Termodinâmicas

Na Seção 2.2.2 vimos que o calor específico e a susceptibilidade magnética por sítio estão relacionados às flutuações térmicas da energia e magnetização, respectivamente, por

$$c = \frac{1}{L^d k_B T^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (5.1)$$

e

$$\chi = \frac{1}{L^d k_B T} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2), \quad (5.2)$$

onde d é a dimensão da rede do sistema e k_B é a constante de Boltzmann (de agora em diante usaremos unidades tais que $k_B \equiv 1$). Porém sabemos que a magnetização não é o parâmetro de ordem do modelo de Ising AF. Como discutimos na Seção 2.1.3, definimos

o parâmetro de ordem desse sistema como

$$\phi \equiv m_A - m_B,$$

onde m_A e m_B são as magnetizações das subredes A e B , respectivamente. Assim, analogamente à susceptibilidade magnética, definimos uma quantidade chamada susceptibilidade alternada (também chamada *staggered susceptibility*) por sítio, χ_ϕ , a qual está associada à flutuação térmica do parâmetro de ordem por

$$\chi_\phi \equiv \frac{1}{L^d} (\langle \phi^2 \rangle - \langle \phi \rangle^2). \quad (5.3)$$

Como veremos nas Seções 5.2 e 5.3, as principais quantidades termodinâmicas que utilizamos para realizar análises de escala de tamanho finito [28], o que nos possibilitou a obtenção do diagrama de fase e estimativas de alguns expoentes críticos, foram justamente c , ϕ e χ_ϕ . Na Figura 5.1 mostramos o comportamento de χ_ϕ em função de h para $T = 0.02$. Podemos notar que quanto maior a rede mais acentuado é o pico de χ_ϕ , que é um efeito intrínseco de sistemas de tamanho finito. Mas para um sistema de tamanho infinito esse máximo ocorre exatamente em um determinado ponto crítico (T_c, h_c) . No gráfico menor da Figura 5.1 podemos ver que as incertezas associadas à χ_ϕ são maiores nas proximidades do ponto crítico.

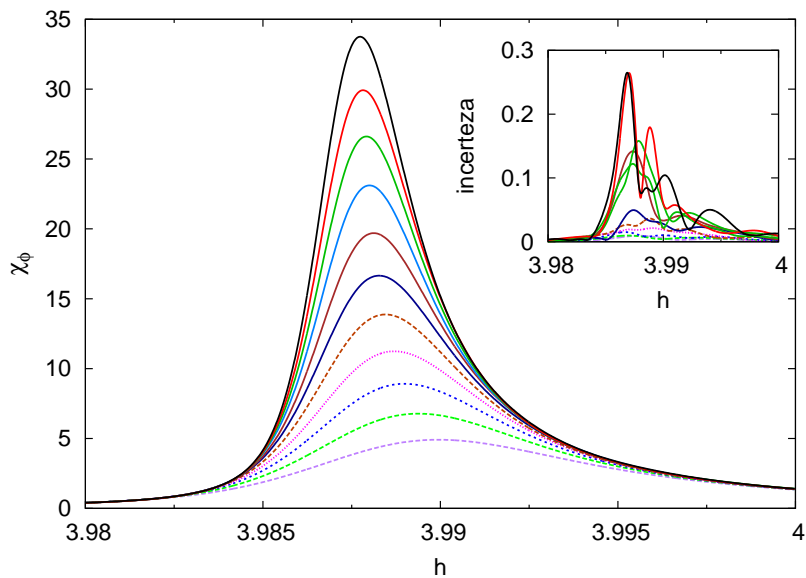


Figura 5.1: Susceptibilidade alternada por sítio em função de h para $T = 0.02$, para redes de tamanhos $L = 10$ à 30 . A curva com menor pico é a de $L = 10$ enquanto a de maior é a de $L = 30$. No gráfico menor estão as incertezas associadas à χ_ϕ em função de h .

Plotamos ϕ versus h , também à temperatura $T = 0.02$, na Figura 5.2. Podemos perceber que ϕ vai praticamente à zero a partir de um determinado valor de h que está na mesma região dos picos de χ_ϕ , mostrados na Figura 5.1. As incertezas de ϕ também são mais acentuadas nessa mesma região crítica.

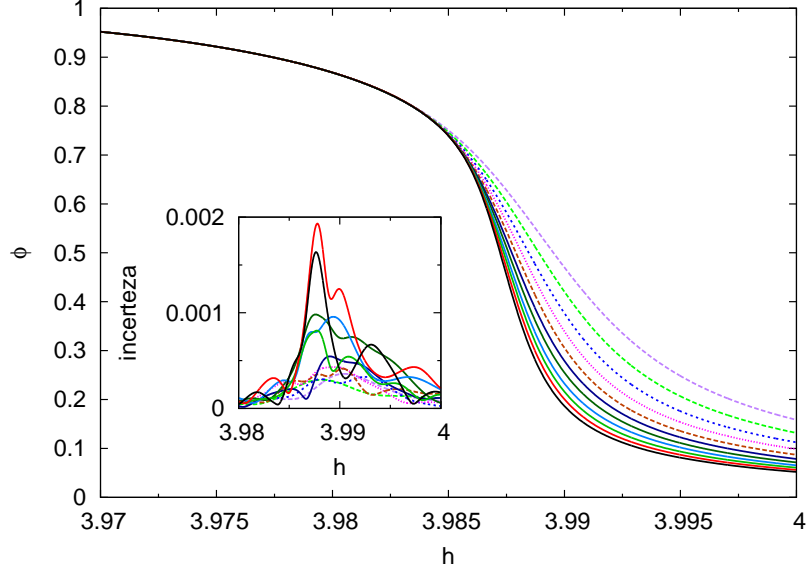


Figura 5.2: Parâmetro de ordem por sítio em função de h para $T = 0.02$, para $L = 10$ à 30. A curva de menor inclinação é a de $L = 10$ e a de maior é a de $L = 30$. No gráfico menor estão as incertezas associadas à ϕ em função de h .

Na Figura 5.3 mostramos o gráfico do calor específico por sítio, c , em função do campo externo, h , à temperatura $T = 2$. Podemos observar um comportamento análogo ao de χ_ϕ , mostrado na Figura 5.1. Nas proximidades do ponto crítico os picos de c são mais acentuados para as redes maiores, assim como as respectivas incertezas.

5.2 Diagrama de Fase

Para estimarmos as temperaturas críticas para determinados valores de h , $T_c(h)$, lançamos mão das relações de análise de escala de tamanho finito [28]

$$T_c(c_{max}, h, L) = T_c(c_{max}, h) + \frac{a_1}{L} + \frac{a_2}{L^2} \quad (5.4)$$

e

$$T_c(\chi_\phi^{max}, h, L) = T_c(\chi_\phi^{max}, h) + \frac{b_1}{L} + \frac{b_2}{L^2}, \quad (5.5)$$

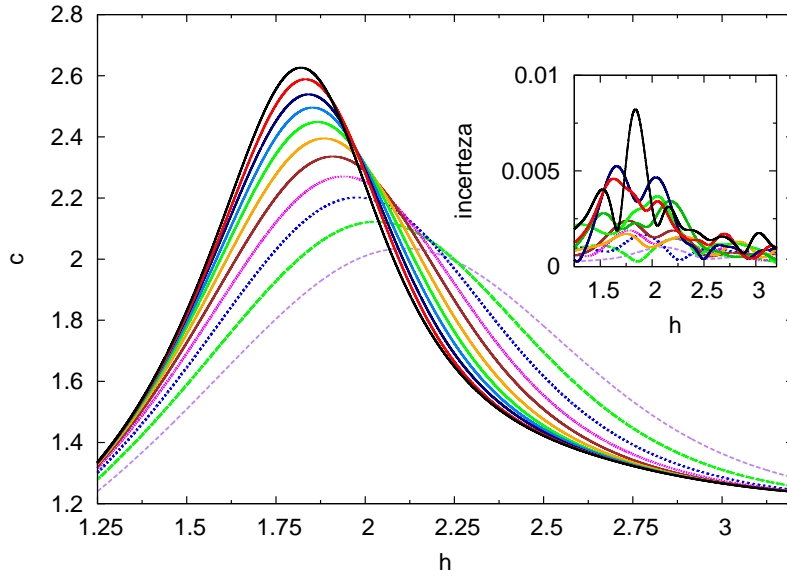


Figura 5.3: Calor específico por sítio em função de h para $T = 0.2$, para $L = 10$ à 30 . No gráfico menor estão as incertezas associadas à c em função de h .

onde $T_c(c_{max}, h, L)$ e $T_c(\chi_\phi^{max}, h, L)$ são os valores da temperatura onde ocorrem os máximos (picos) de c e χ_ϕ , respectivamente, à um determinado valor de h_c para cada tamanho L dos sistemas simulados, ao passo que $T_c(c_{max}, h)$ e $T_c(\chi_\phi^{max}, h)$ são as estimativas das temperaturas críticas obtidas através dos máximos de c e χ_ϕ , respectivamente, para um valor de h . Na Figura 5.4 mostramos um gráfico com a estimativa de $T_c(\chi_\phi^{max}, h = 0.2)$ obtida através da equação (5.5). As estimativas dos pontos críticos $T_c(h)$ foram obtidas através dos respectivos cálculos das médias de $T_c(c_{max}, h)$ e $T_c(\chi_\phi^{max}, h)$.

Tendo em vista a aproximação de $T_c(h)$ para pequenos valores de h , obtida por Müller-Hartmann e Zittartz [1], fornecida pela equação (2.12):

$$T_c(h) \approx T_c^0 \left[1 - \alpha \left(\frac{h}{J} \right)^2 \right], \quad h \rightarrow 0, \quad (5.6)$$

[onde $J \equiv -1$, $T_c^0 \equiv T_c(h = 0) = 2/\ln(1 + \sqrt{2})$ e $\alpha \equiv \ln(1 + \sqrt{2})/(16\sqrt{2})$], mostramos na Tabela 5.1 as comparações entre as estimativas simulacionais de $T_c(h)$ com os respectivos valores teóricos fornecidos pela equação (5.6). Pode-se notar uma boa concordância entre nossos dados e essa aproximação teórica, com erros relativos menores que 0.09%.

De maneira análoga à comparação entre as estimativas teóricas e simulacionais para $T_c(h)$, utilizamos as estimativas teóricas de $h_c(T)$ fornecidas pela equação 2.11:

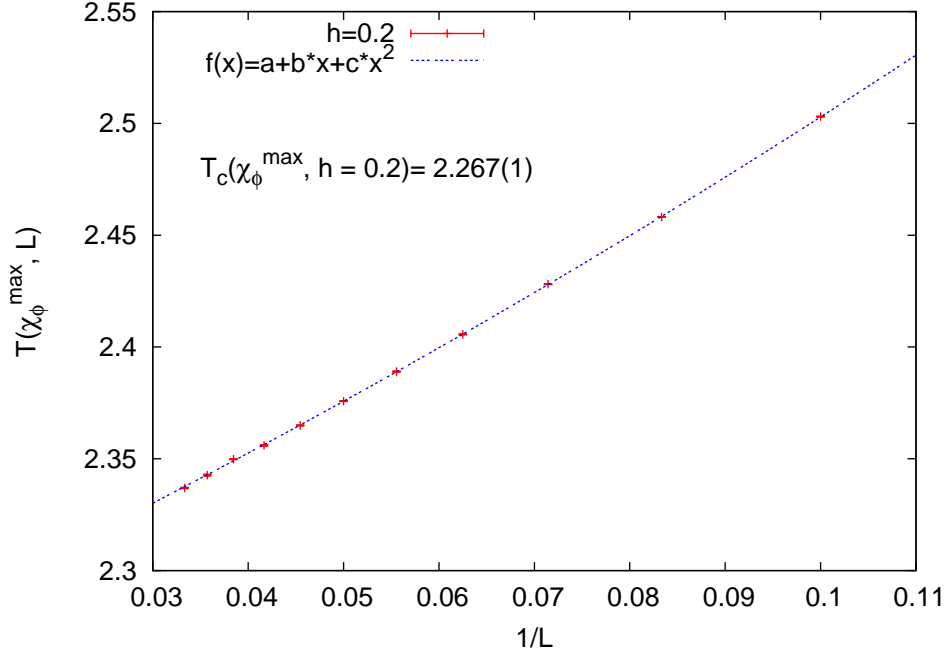


Figura 5.4: Estimativa de $T_c(\chi_\phi^{max}, h = 0.2)$.

Tabela 5.1: Comparação entre T_c simulado e teórico [1] para h pequeno.

| h_c | T_c (simulação) | T_c (teórico) | erro relativo (%) |
|-------|-------------------|-----------------|-------------------|
| 0.02 | 2.2704(9) | 2.2691 | 0.06 |
| 0.1 | 2.2694(9) | 2.2683 | 0.05 |
| 0.2 | 2.2666(9) | 2.2656 | 0.04 |
| 0.3 | 2.2621(9) | 2.2612 | 0.04 |
| 0.4 | 2.2565(9) | 2.2550 | 0.07 |
| 0.5 | 2.2483(9) | 2.2471 | 0.05 |
| 0.6 | 2.239(1) | 2.237 | 0.09 |
| 0.7 | 2.227(1) | 2.226 | 0.04 |
| 0.8 | 2.214(1) | 2.213 | 0.04 |
| 0.9 | 2.199(1) | 2.198 | 0.04 |

$$\cosh\left(\frac{h_c}{T_c}\right) = \sinh^2\left(\frac{2J}{T_c}\right) \quad (5.7)$$

para compararmos com as nossas estimativas simulacionais, as quais foram obtidas utilizando as relações de análise de escala de tamanho finito [28]:

$$h_c(c_{max}, T, L) = h_c(c_{max}, T) + \frac{a_1}{L} + \frac{a_2}{L^2} \quad (5.8)$$

e

$$h_c(\chi_\phi^{max}, T, L) = h_c(\chi_\phi^{max}, T) + \frac{b_1}{L} + \frac{b_2}{L^2}, \quad (5.9)$$

onde $h_c(c_{max}, T, L)$ e $h_c(\chi_\phi^{max}, T, L)$ são os valores de h_c em que ocorrem os máximos de c e χ_ϕ , respectivamente, à uma determinada temperatura para cada tamanho L , enquanto $h_c(c_{max}, T)$ e $h_c(\chi_\phi^{max}, T)$ são as estimativas de h_c para cada valor de T obtidas pelos máximos de c e χ_ϕ , respectivamente. As estimativas dos pontos críticos $h_c(T)$ foram calculadas através das médias de $h_c(c_{max}, T)$ e $h_c(\chi_\phi^{max}, T)$. Esses resultados são mostrados na Tabela 5.2, de onde podemos ver que as diferenças relativas entre os resultados simulacionais e teóricos são, em geral, menores que 0.6%.

Tabela 5.2: **Comparação entre h_c simulado e teórico [1].**

| T_c | h_c (simulação) | h_c (teórico) | erro relativo (%) |
|-------|-------------------|-----------------|-------------------|
| 0.02 | 3.98661(3) | 3.98614 | 0.01 |
| 0.1 | 3.9331(2) | 3.9307 | 0.06 |
| 0.2 | 3.8661(3) | 3.8614 | 0.1 |
| 0.3 | 3.7993(5) | 3.7920 | 0.2 |
| 0.4 | 3.7321(7) | 3.7227 | 0.3 |
| 0.5 | 3.6649(9) | 3.6531 | 0.3 |
| 0.6 | 3.5971(9) | 3.5826 | 0.4 |
| 0.7 | 3.525(2) | 3.510 | 0.4 |
| 0.8 | 3.4525(9) | 3.4345 | 0.5 |
| 0.9 | 3.374(1) | 3.354 | 0.6 |

Na Figura 5.5 está representado o diagrama de fase do modelo de Ising AF no plano h - T para $h > 0$. Abaixo da curva o sistema se encontra no estado antiferromagnético, ao passo que acima o estado é paramagnético. Os pontos marcados com “*” foram obtidos utilizando as estimativas de $T_c(c_{max}, h)$ e $T_c(\chi_\phi^{max}, h)$, das quais calculamos $T_c(h)$; enquanto para obtermos aqueles marcados com “o” utilizamos as estimativas de $h_c(c_{max}, T)$ e $h_c(\chi_\phi^{max}, T)$, das quais obtivemos $h_c(T)$. A curva pontilhada foi obtida utilizando-se a expressão analítica da linha crítica [equação (5.7)] deduzida por Müller-Hartmann e Zittartz [1]. Podemos notar nessa figura que existem dois pontos “*” e “o” sobrepostos nas proximidades de $h = 1$ e $T = 2.2$; com isso podemos ver que as estimativas $T_c(h)$ e $h_c(T)$ são equivalentes para obtenção dos pontos críticos ao longo da linha crítica.

Outra quantidade importante na determinação de um ponto crítico é o chamado cumulante de quarta ordem ou cumulante de Binder [29] do parâmetro de ordem, ϕ :

$$Q_4^\phi = 1 - \frac{\langle \phi^4 \rangle}{3\langle \phi^2 \rangle^2}. \quad (5.10)$$

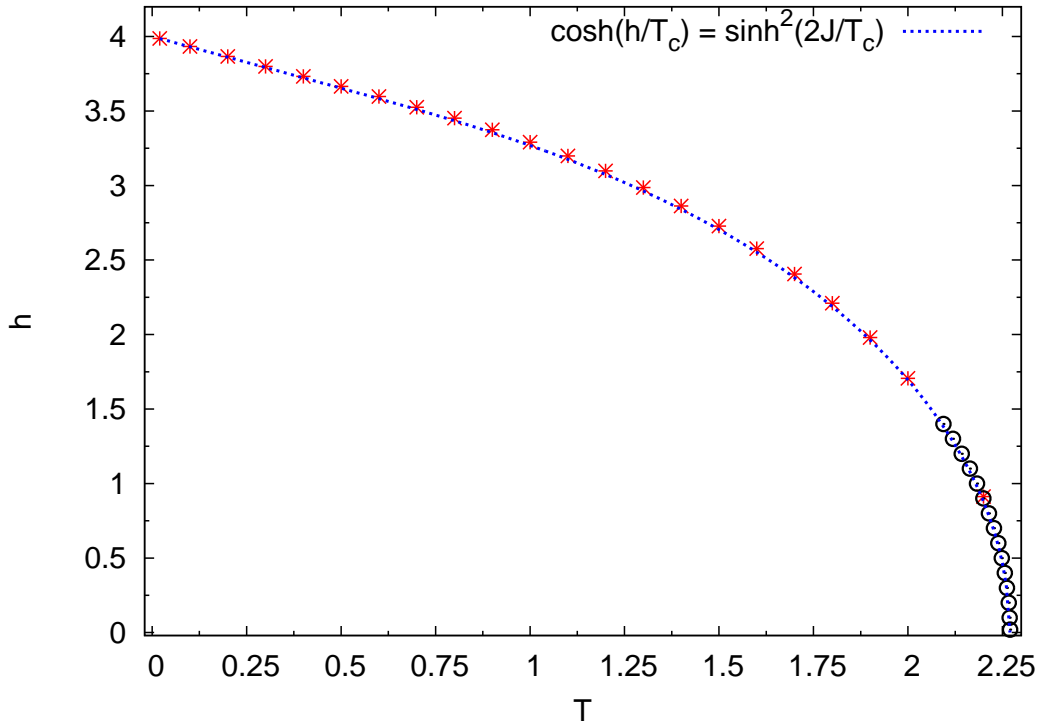


Figura 5.5: Diagrama de fase do modelo de Ising AF na rede quadrada. Comparação entre os dados simulacionais (pontos “*” e “o”) e a expressão teórica da linha crítica (curva pontilhada) obtida por Hartmann e Zittartz [1].

Uma análise do cruzamento do cumulante de Binder para sucessivos pares de tamanho de sistemas fornece uma estimativa do ponto crítico, uma vez que os cruzamentos tendem a ocorrer à um determinado valor de Q_4^ϕ . Apresentamos na Tabela 5.3 os valores calculados dos cruzamentos do cumulante de Binder, Q_x , do parâmetro de ordem à temperatura $T = 0.2$ e os respectivos valores estimamos do campo, $h_c \equiv h_x$, em que os cumulantes se cruzam. Podemos perceber que as incertezas são maiores para os cruzamentos dos sistemas de tamanhos $L = 22$ à 30 , embora os valores de h_x tenham, em geral, uma diferença menor que 0.06% do valor estimado através dos máximos de c e χ_ϕ mostrado na Tabela 5.2. O valor exato do cruzamento dos cumulantes de Binder para a classe de Ising bidimensional é $Q_x^{teor.} = 0.61069$ [30]; podemos perceber que, exceto para as quatro últimas estimativas apresentadas nessa tabela, os valores obtidos diferem no máximo em 0.9% desse valor exato.

Tabela 5.3: Cruzamento do cumulante de Binder do parâmetro de ordem para sucessivos pares de tamanhos de sistemas à temperatura $T = 0.2$.

| L, L' | h_{\times} | Q_{\times} |
|---------|--------------|--------------|
| 10, 12 | 3.8661(3) | 0.6139(8) |
| 12, 14 | 3.8661(8) | 0.614(2) |
| 14, 16 | 3.8666(5) | 0.612(1) |
| 16, 18 | 3.8653(1) | 0.616(3) |
| 18, 20 | 3.8661(6) | 0.613(2) |
| 20, 22 | 3.8657(7) | 0.615(3) |
| 22, 24 | 3.868(1) | 0.604(8) |
| 24, 26 | 3.867(2) | 0.61(1) |
| 26, 28 | 3.864(2) | 0.62(1) |
| 28, 30 | 3.866(2) | 0.61(1) |

5.3 Propriedades Críticas

Ao longo da linha crítica do diagrama de fase do modelo de Ising AF no plano $h - T$ o sistema sofre uma transição de fase contínua, exceto no ponto $(T_c = 0, h_c = 4)$, onde a transição é descontínua. Como vimos na Seção 5.1, o calor específico por sítio, c , e a susceptibilidade alternada por sítio, χ_{ϕ} , possuem picos cujos posição e amplitude dependem do tamanho, L , da rede. Tendo isso em vista realizamos uma análise de escala de tamanho finito em três regiões distintas da linha crítica, as quais estão em destaque na Figura 5.6, e estimamos os expoentes críticos.

Pela análise de escala de tamanho finito [28] o calor específico por sítio, c , o parâmetro de ordem por sítio, ϕ , e a susceptibilidade alternada por sítio, χ_{ϕ} , obedecem às seguintes relações de escala na região crítica:

$$c(T, h) \sim c_0 \ln(L) \quad (5.11)$$

$$\ln[\phi(T, h)] \sim \frac{\beta}{\nu} \ln(L) \quad (5.12)$$

$$\ln[\chi_{\phi}(T, h)] \sim \frac{\gamma}{\nu} \ln(L). \quad (5.13)$$

Com isso, calculamos os valores médios de c , ϕ e χ_{ϕ} nos pontos críticos $(T_c = 0.02, h_c = 3.98665)$, $(T_c = 0.2, h_c = 3.8664)$ e $(T_c = 2, h_c = 1.713)$ e então realizamos um ajuste linear de c versus $\ln(L)$, $\ln(\phi)$ versus $\ln(L)$ e $\ln(\chi_{\phi})$ versus $\ln(L)$. Assim, obtivemos estimativas de c_0 , β/ν e γ/ν nesses três pontos da linha crítica. Esses resultados estão mostrados na Tabela 5.4. Os grandes valores de c_0 à baixas temperaturas se devem ao

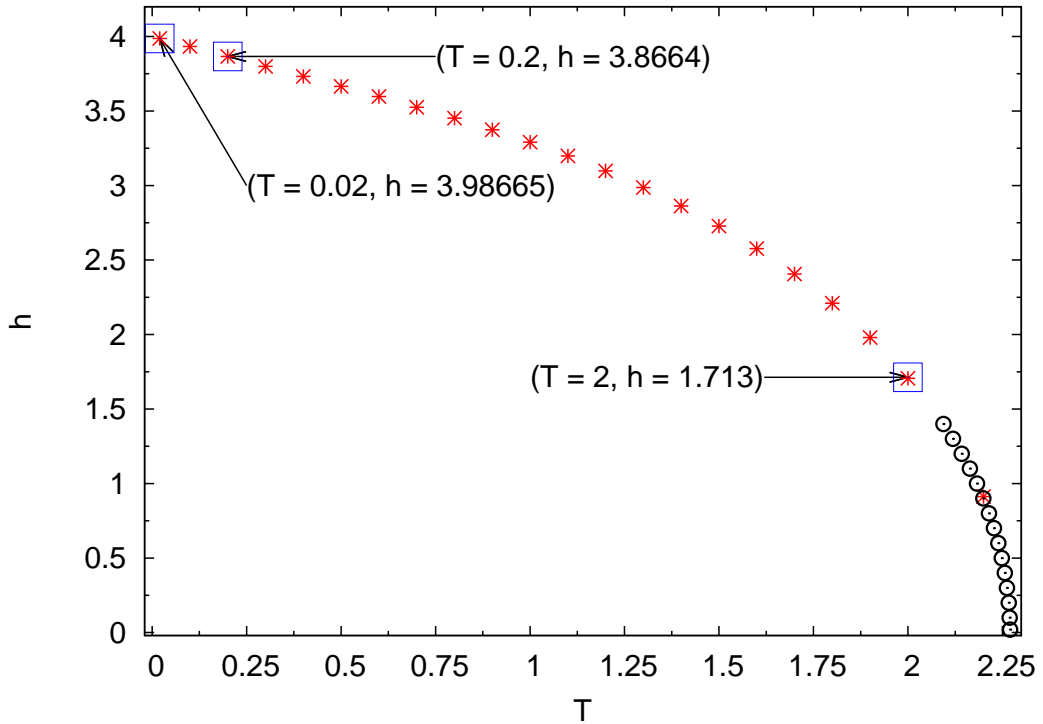


Figura 5.6: Pontos ao longo da linha crítica nos quais são calculados os expoentes críticos.

fato de o calor específico ser da forma $c \sim T^{-2}$.

Tabela 5.4: **Propriedades críticas**

| T_c | h_c | c_0 | β/ν | γ/ν |
|-------|------------|----------|-------------|--------------|
| 0.002 | 3.98665(1) | 6661(75) | 0.1260(4) | 1.787(4) |
| 0.02 | 3.8664(2) | 63.4(9) | 0.1260(5) | 1.785(5) |
| 2.0 | 1.713(3) | 0.641(2) | 0.1204(2) | 1.753(2) |

É importante frisarmos que essas estimativas dos expoentes críticos foram obtidas utilizando cinco iterações para simular os sistemas de tamanhos $L = 10$ à 20 , dez iterações para os tamanhos de $L = 22$ à 26 , enquanto utilizamos quinze iterações para simular os sistemas de tamanhos $L = 28$ e 30 . Com isso conseguimos obter melhores estimativas das médias de c , ϕ e χ_ϕ para os sistemas maiores, de modo que o ajuste linear fosse o melhor possível. Na Figura 5.7 plotamos $\ln(\chi_\phi)$ versus $\ln(L)$ em $(T = 2.0, h = 1.713)$; a linha tracejada é o ajuste linear, através do qual obtivemos $\gamma/\nu = 1.753(2)$.

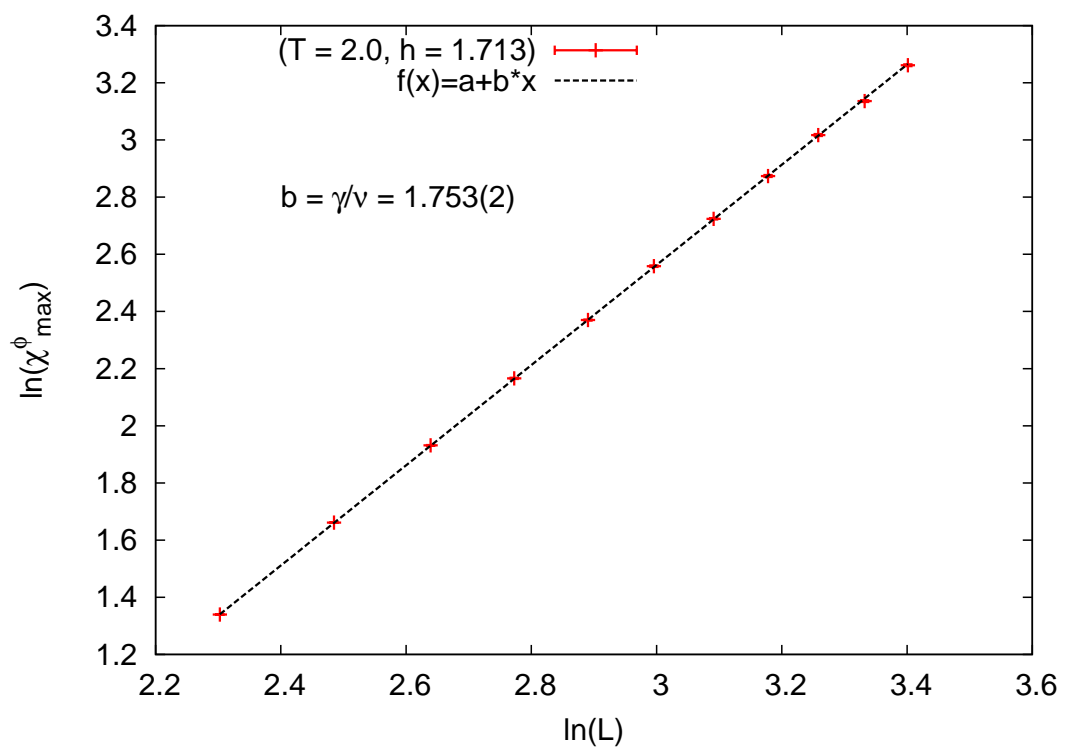


Figura 5.7: Gráfico log-log do valor máximo de χ_ϕ para cada tamanho L . A inclinação da reta feita por ajuste linear fornece a estimativa de γ/ν .

Capítulo 6

Considerações Finais

Nesse trabalho utilizamos um novo método de amostragem entrópica, *tomographic entropic sampling* (amostragem entrópica tomográfica) [17], para realizar a simulação computacional do modelo de Ising antiferromagnético na presença de um campo externo na rede quadrada. Como vimos, o algoritmo de amostragem entrópica tomográfica se propõe a realizar um passeio completo por *todo* espaço de configurações, sem a utilização de janelas, a fim de obter boas estimativas do número de configurações, $\Omega(n, m)$, das classes de configurações do sistema em estudo.

Devido ao fato de utilizarmos um novo algoritmo de amostragem, precisávamos ter total certeza de que *todo* espaço configuracional fosse visitado durante a amostragem – o que é exatamente ao que o algoritmo se propõe. Tendo isso em vista, estudamos e definimos algumas classes de configurações fundamentais da rede quadrada. Tais classes de configurações formam um conjunto básico e fundamental de configurações, das quais *todas* classes de configurações possíveis fazem parte.

Em nossas simulações utilizamos a estimativa final da simulação de $\Omega_N(n, m, L)$ (ao final da N -ésima iteração) para interpolarmos o valor inicial de $\Omega_0(n, m, L')$ ($L' > L$) do novo sistema a ser simulado. Isso foi feito primeiramente extrapolando $\Omega_N(n, m, L)$ da rede menor para que todos os pontos (classes de configurações), no espaço (n, m) , da rede maior fossem envoltos por quatro pontos próximos dessa rede menor; com isso obtivemos a estimativa inicial $\Omega_0(n, m, L')$ da rede maior através de uma interpolação linear bidimensional de $\Omega_N(n, m, L^{est})$, da rede menor estendida. Essa metodologia nos possibilitou obter boas estimativas de $\Omega_0(n, m, L')$. Como foi discutido, isso só foi possível pois conhecíamos quais eram todas as classes de configurações acessíveis aos sistemas, o

que foi obtido através da análise das classes de configurações.

Com as estimativas de $\Omega(n, m, L)$ e das médias microcanônicas de ϕ e de seus segundos e quarto momentos em mãos, calculamos as médias canônicas das quantidades termodinâmicas de interesse. Lançamos mão da análise de escala de tamanho finito para estimar alguns pontos ao longo da linha crítica no plano h - T . Comparamos esses resultados obtidos com uma aproximação teórica que fornece uma expressão analítica para a linha crítica do modelo de Ising AF em um campo externo. Pudemos observar que nossos resultados simulacionais concordam com a estimativa teórica em questão.

Além disso, em três pontos distintos ao longo da linha crítica, estimamos os expoentes críticos associados ao calor específico, c , ao parâmetro de ordem, ϕ , e à susceptibilidade alternada (associada ao parâmetro de ordem), χ_ϕ . Até onde sabemos, não encontramos na literatura algum trabalho, anterior a esse, que tenha estimado tais expoentes ao longo da linha crítica.

Uma das principais dificuldades encontradas pelo método utilizado foi a ineficácia da amostragem quando estimamos $\Omega_0(n, m, L')$ por interpolação de $\Omega_N(n, m, L)$ quando $L' - L > 2$. Nesses casos, os espaços de configurações dos sistemas maiores não foram completamente amostrados. Esse fato nos impossibilitou de prosseguirmos com estudos em redes maiores que $L = 30$ e $\Delta L > 2$. Contudo, essa falta de amostragem só foi identificada devido ao fato de conhecermos previamente todo o espaço (n, m) para cada tamanho de rede.

Embora tenhamos simulado sistemas de tamanhos relativamente pequenos, nossos resultados mostraram que o algoritmo de amostragem entrópica tomográfica foi bastante eficiente. Isso se deve também ao método de interpolação para estimar $\Omega_0(n, m, L)$, que utilizamos para realizar as estimativas de $\Omega(n, m, L)$. As simulações para sistemas de tamanhos maiores já estão em andamento, uma vez que precisamos verificar quais fatores associados ao algoritmo de amostragem em si podem ser modificados de modo a obtermos melhores resultados para tais sistemas.

Consideramos que, de um modo geral, através dos estudos realizados até o momento, o método de amostragem entrópica tomográfica tem se mostrado bastante útil e eficiente no estudo simulacional de sistemas em rede. Em trabalhos futuros poderemos estudar e explorar novos modelos através do método de amostragem entrópica e, conseqüentemente, obtermos melhor conhecimento das propriedades intrínsecas desse novo método.

Referências Bibliográficas

- [1] E. Müller-Hartmann and J. Zittartz. Interface Free Energy and Transition Temperature of the Square-Lattice Ising Antiferromagnet at Finite Magnetic Field. *Zeitschrift für Physik B*, (27):261–266, 1977.
- [2] M.E.J Newman and G.T. Barkema. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Oxford University Press, New York, 2001.
- [3] D.P Landau and K. Binder. *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. Cambridge University Press, New York, 2005.
- [4] R.B. Potts. Some Generalized Order-Disorder Transformations. *Mathematical Proceedings of the Cambridge of Phylosophical Society*, 48(1):106–109, 1952.
- [5] F.Y. Wu. The Potts model. *Reviews of Modern Physics*, 54:235–268, 1982.
- [6] R. Skomski. *Simple Models of Magnetism*. Oxford University Press, New York, 2008.
- [7] M. Plischke and B. Bergersen. *Equilibrium Statistical Physics*. World Scientific Publishing, Singapore, 1994.
- [8] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, and A.H. Teller. Equation of State Calculations by Fast Computing Machines. *The Journal of Chemical Physics*, 21(6), 1953.
- [9] U. Wolff. Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems. *Physical Review Letters*, 62(4), 1989.
- [10] R.H. Swendsen and J-S. Wang. Nonuniversal Critical Dynamics in Monte Carlo Simulations. *Physical Review Letters*, 58(2), 1987.

- [11] F. Wang and D.P. Landau. Efficient, Multiple-Range Random Walk Algorithm to Calculate the Density of States. *Physical Review Letters*, 86(10), 2001.
- [12] F. Wang and D.P. Landau. Determining the density of states for classical statistical models: A random walk algorithm to produce a flat histogram. *Physical Review E*, 63(056101), 2001.
- [13] L. Onsager. Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition. *Physical Review*, 65:117–149, 1944.
- [14] R.P. Millane, A. Goyal, and R.C. Penney. Ground states of the antiferromagnetic Ising model on finite triangular lattices of simple shape. *Physics Letters A*, 311:347–352, 2003.
- [15] K. Binder. Ordering of the Face-Centered-Cubic Lattice with Nearest-Neighbor Interaction. *Physical Review Letters*, 45(10):811–814, 1980.
- [16] A.D. Beath and D.H. Ryan. Thermodynamics properties of the fcc Ising antiferromagnet obtained from precision density of states calculations. *Physical Review B*, 73, 2006.
- [17] R. Dickman and A.G. Cunha-Netto. Complete high-precision entropic sampling. *Physical Review E*, 84(026701), 2011.
- [18] J.L. Monroe. Systematic approximatin method for the critical properties of lattice spin systems. *Physical Review E*, 64(016126), 2001.
- [19] S.J. Penney, V.K. Cumyn, and D.D. Betts. A new method for the $S = 1/2$ antiferromagnetic Ising model's properties at any temperature and any magnetic field on the infinite square lattice. *Physica A*, 330:507–518, 2003.
- [20] Mário José de Oliveira. *Termodinâmica*. Livraria da Física, São Paulo, 2005.
- [21] H. Eugene Stanley. *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*. Oxford University Press, London, 1971.
- [22] H. Gould, J. Tobochnik, and W. Chrisitan. *An Introduction to Computer Simulation Methods*. Addison Wesley, San Francisco, 3 edition, 2007.

- [23] K. Binder and D. Heermann. *Monte Carlo Simulations in Statistical Physics: An Introduction*. Springer, Berlin, 5 edition, 2010.
- [24] D. Frenkel and B. Smit. *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications*. Academic Press, London, 2002.
- [25] T. Tomé and M.J. de Oliveira. *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade*. Edusp, São Paulo, 2001.
- [26] Antônio Gonçalves da Cunha Netto. Algoritmo das janelas adaptáveis no método de wang-landau. Dissertação de mestrado, Universidade Federal de Goiás, Brasil, 2008.
- [27] A.G. Cunha-Netto, R. Dickman, and A.A. Caparica. Two-dimensional lattice polymers: Adaptive windows simulations. *Computer Physics Communications*, (180):583–586, 2009.
- [28] V. Privman. *Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems*. World Scientific, London, 1990.
- [29] K. Binder. Finite size scaling analysis of Ising model block distribution. *Zeitschrift für Physik B*, 43(2):119–140, 1981.
- [30] G. Kamieniarz and H.W.J. Blöte. Universal ratio of magnetization moments in two-dimensional Ising models. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 26:201–212, 1993.