

**Transições de fase em modelos magnéticos
bi-dimensionais com interações dipolares**

Lucas Alvares da Silva Mól

Abril 2009

**Transições de fase em modelos magnéticos bi-dimensionais com interações
dipolares**

Lucas Alvares da Silva Mól

Orientador: Prof. Dr. Bismarck Vaz da Costa

Tese apresentada à Universidade Federal de Minas Gerais como requisito parcial para a
obtenção do grau de Doutor em Física.

Abril 2009

Aos meus pais e a Patrícia.

Agradecimentos

Ao Bismarck pelo apoio, incentivo e orientação.

À Patrícia por estar ao meu lado, me apoiar, incentivar e por me colocar na linha quando necessário.

Aos meus pais que sempre me apoiaram nesta empreitada.

A todos os amigos do departamento pelas discussões e diversões: Mário, Magneto, Faisal, Damião, Pablito, Leo, Popstar, Marquinhos, Lauro, Ara, Miquita, Denis, Antonio, Júlio (os dois), Romero, Barbara, Alexandre, Anna, Bráulio, Daniel, Manah, Marcella, Marcelo, Andreza, Júlia, Pablo, etc... é melhor parar por aqui se não a lista fica maior que a tese. Me desculpem aqueles que por desleixo esqueci de mencionar.

Aos demais professores do departamento, em especial ao Prof. João Plascak, pela grande atenção que me dispensaram.

Aos amigos de Viçosa que mesmo distantes sempre me apoiaram e escutaram minhas chorradeiras nos feriados.

Ao Afranio e Winder com quem consegui manter frutíferas colaborações.

A todos os funcionários do departamento por permitirem que as coisas funcionem de forma tão eficiente.

Ao CNPq e à Fapemig pelo auxílio financeiro.

Resumo

Neste trabalho estudamos a transição entre a fase planar e a fase paramagnética do modelo de Heisenberg anisotrópico com interações dipolares (modelo HA-d). Nosso estudo se concentrou em três sistemas ligeiramente diferentes, o modelo HA-d num sistema bicamada usando um corte no cálculo das interações dipolares, o modelo do Rotor Planar com interações dipolares (d-PR) e o modelo HA-d em uma rede quadrada utilizando a soma de Ewald para levar em conta o real caráter das interações dipolares. Nossos resultados indicam que tal transição pertence a uma nova classe de universalidade caracterizada pela existência de ordem de longo alcance e não divergência do calor específico.

Abstract

In this work we have used the numerical Monte Carlo simulations to simulate the planar to paramagnetic phase transition in the anisotropic Heisenberg model with dipolar interactions (AH-d model). We concentrated our attention in three slightly different models the AH-d model in a bilayer system with a cut-off in the dipolar interactions, the dipolar Planar Rotator model (d-PR) and the HA-d model in a square lattice, using the Ewald summation to evaluate the dipolar interactions. Our results indicate that these models belong to a new universality class with long range order in the low temperature phase and a non-divergent specific heat.

Sumário

Agradecimentos	p. iii
Resumo	p. iv
Abstract	p. v
Preâmbulo	p. 1
1 O modelo de Heisenberg com interações dipolares	p. 3
1.1 A interação de troca	p. 3
1.2 Anisotropia Magnetocristalina	p. 4
1.3 Interação Dipolar	p. 5
1.4 O modelo	p. 6
1.5 O modelo do Rotor Planar com interações dipolares	p. 9
2 Noções sobre transições de fase e efeitos de tamanho finito	p. 10
2.1 Classificação das transições de fase e expoentes críticos	p. 10
2.2 Teoria de escala para sistemas finitos	p. 13
2.3 A transição de Berezinskii-Kosterlitz-Thouless	p. 16
2.4 Uma possível nova classe de universalidade	p. 18
2.5 Objetivos	p. 19
3 Métodos de Simulação	p. 21
3.1 O método de Monte Carlo e o algoritmo de Metropolis	p. 21
3.2 Métodos de análise dos dados: técnicas de histogramas	p. 23

3.3	A soma de Ewald	p. 26
4	Resultados	p. 30
4.1	O modelo HA-d num sistema de duas camadas usando corte na interação dipolar	p. 30
4.2	O modelo do Rotor Planar com interações dipolares	p. 44
4.3	O modelo HA-d numa rede quadrada usando a soma de Ewald	p. 53
5	Conclusões e perspectivas	p. 63
	Apêndice A – Dedução da expressão para soma de Ewald em duas dimensões	p. 66
	Apêndice B – Transformada de Fourier para soma de Ewald	p. 70
	Apêndice C – Determinação dos parâmetros da soma de Ewald	p. 73
	Apêndice D – Trabalho publicado	p. 75
	Referências Bibliográficas	p. 84

Preâmbulo

Fenômenos magnéticos são conhecidos há pelo menos 2500 anos, o que torna o magnetismo uma das áreas mais antigas da Física. De uma forma geral fenômenos eletromagnéticos são bem entendidos, porém, algumas propriedades elétricas e/ou magnéticas de alguns materiais permanecem sem uma explicação convincente, como é o caso da supercondutividade a alta temperatura. Recentemente, o aperfeiçoamento das técnicas de fabricação de materiais magnéticos ampliaram significativamente os horizontes desta interessante área.

Aplicações tecnológicas de fenômenos magnéticos são comuns no dia a dia e vão desde os ímãs de geladeira aos dispositivos de armazenamento de informações como os discos rígidos de computadores. Dados recentes mostram que cerca de 92% da informação gerada é armazenada sob forma magnética [1]. Em 2002 foram produzidos 5 Exabytes de informação nova [1], o que mostra a necessidade de procurarmos meios mais eficazes para armazenar toda esta informação.

As técnicas atuais de fabricação de filmes finos permitem a fabricação de filmes compostos por vários materiais, cada um em uma camada definida, como se fosse um “sanduíche”. Camadas de materiais diferentes podem ter espessuras diversas, variando desde poucas camadas atômicas a alguns micrômetros. Neste caso, efeitos devidos à interface entre camadas de diferentes materiais e os efeitos devidos à drástica redução em uma das dimensões são de fundamental importância nas propriedades físicas dos filmes.

Boa parte dos estudos teóricos atuais envolvendo materiais magnéticos são feitos através de técnicas de Física Estatística [2]. Esta tem como principal objetivo obter informações macroscópicas (termodinâmicas) de sistemas físicos a partir do conhecimento das interações microscópicas presentes. Uma das principais técnicas da Mecânica Estatística é o método de Monte Carlo [2, 3]. Este método, que será exposto em detalhes adiante, é baseado na utilização de números aleatórios (ou pseudo-aleatórios) para calcular as médias termodinâmicas de um sistema físico. A Mecânica Estatística é também uma das principais técnicas utilizadas no estudo das transições de fase.

Neste trabalho, pretendemos estudar através de técnicas de Monte Carlo, as transições de fase que ocorrem em um modelo de spins com interações dipolares. A origem de tal modelo está na descrição de algumas propriedades magnéticas de certos filmes finos ferromagnéticos.

Este estudo justifica-se tanto no que tange a busca de conhecimento relacionado às propriedades magnéticas dos materiais, quanto a um maior entendimento das transições de fase. Em particular, estamos interessados em estudar uma das transições de fase do modelo de Heisenberg anisotrópico com interações dipolares. Como veremos a seguir, o modelo estudado é bastante complexo e apresenta um diagrama de fases muito rico.

Este trabalho está dividido da seguinte forma. No capítulo 1 serão apresentados os modelos utilizados neste estudo. Algumas noções sobre transições de fase e teorias de escala de tamanho finito (*finite size scaling*) serão descritas no capítulo 2, onde também se encontra a delimitação do objetivo deste estudo. As técnicas computacionais utilizadas no estudo serão apresentadas no capítulo 3. No capítulo 4 iremos apresentar nossos resultados e finalmente no capítulo 5 as conclusões e perspectivas. Nos apêndices apresentamos cálculos, que por serem muito técnicos ficariam deslocados no corpo principal do trabalho e um artigo que publicamos no periódico *Physical Review B* [4].

1 *O modelo de Heisenberg com interações dipolares*

Transições de fase constituem um dos mais ricos objetos de estudo da física, com aplicações em várias áreas das ciências. Nosso objetivo neste trabalho não é discutir as aplicações do modelo mas sim suas propriedades em circunstâncias particulares. No que segue, iremos discutir brevemente as origens físicas dos modelos considerados neste estudo.

1.1 A interação de troca

As propriedades magnéticas de materiais com momentos magnéticos localizados deve-se principalmente à interação de troca. Ao contrário do que se poderia pensar, verifica-se que a interação dipolar não é suficiente para produzir ordenamento magnético a temperatura ambiente. Esta seria capaz de causar ordenamento apenas a baixíssimas temperaturas (poucos graus Kelvin), sendo responsável pela formação de domínios magnéticos e outros efeitos [5]. A interação de troca tem origem em efeitos quânticos, mais especificamente, na superposição de funções de onda [5]. Sendo assim, esperamos que esta interação seja relevante apenas a pequenas distâncias, ou seja, que em uma rede cristalina apenas as partículas magnéticas mais próximas estejam acopladas por esta interação. Uma dedução formal da interação de troca pode ser encontrada em vários livros texto (veja por exemplo a Ref. [6]).

Em geral, no estudo das propriedades magnéticas dos materiais substitui-se a integral de troca por uma interação efetiva dada por:

$$H_t = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j, \quad (1.1)$$

onde J_{ij} é chamado de constante de troca (ou *exchange*), o somatório é realizado apenas para primeiros vizinhos em uma rede cristalina e \hat{S}_i é o operador de spin no sítio i . Este hamiltoniano é conhecido como hamiltoniano de Heisenberg, e dá origem ao modelo de Heisenberg que é amplamente utilizado para descrever propriedades de materiais magnéticos [7]. Em alguns

casos, os spins das partículas da rede cristalina são suficientemente grandes, de forma que aproximações semiclássicas podem dar bons resultados. Na aproximação semiclássica, que é amplamente utilizada, os spins das partículas magnéticas são considerados vetores clássicos com suas três componentes conhecidas. A partir de agora, neste trabalho, consideramos esta aproximação. Ou seja, quando forem feitas referências a spins estaremos tratando, a menos que seja dito o contrário, da aproximação descrita acima. Outra aproximação que será utilizada é que a interação entre quaisquer sítios vizinhos da rede cristalina é a mesma, ou seja, que J_{ij} tem um valor constante J . Neste caso, percebe-se que para $J > 0$ os spins tendem a se alinhar paralelamente, levando a um acoplamento ferromagnético, enquanto para $J < 0$ há um acoplamento antiferromagnético.

O modelo de Heisenberg apresenta alto grau de simetria. O sistema é invariante sob quaisquer rotações efetuadas sobre todos os spins da rede. Devido a este fato, sabe-se que este modelo não pode apresentar ordem de longo alcance em duas dimensões em nenhuma temperatura diferente de zero. Este fato foi demonstrado de forma rigorosa por Mermin e Wagner em 1966 [8]. Portanto, sistemas bidimensionais só apresentarão ordem de longo alcance se houverem outras interações ou anisotropias nas integrais de troca.

1.2 Anisotropia Magnetocristalina

Sabemos que além da interação de troca campos internos produzidos pela própria formação da rede cristalina e quebras de simetrias, como a presença de interfaces, podem fazer com que os spins se alinhem em uma direção preferencial, ou seja, o cristal passa a ter uma anisotropia. Esta é chamada de anisotropia magnetocristalina e tem sua origem na interação spin órbita. Esta anisotropia é um efeito localizado dependendo apenas da posição do spin em questão. Na maior parte dos sistemas de interesse, a energia devido à anisotropia magnetocristalina pode ser escrita como [9]:

$$H_{anis} = \sum_i \sum_{\alpha\beta} A_{\alpha\beta} S_i^\alpha S_i^\beta. \quad (1.2)$$

No presente trabalho iremos considerar a existência de uma anisotropia magnetocristalina uniaxial de eixo fácil da forma:

$$H_{anis} = -A \sum_i (S_i^z)^2, \quad (1.3)$$

onde S_i^z é a componente do spin na direção z , o somatório é realizado sobre todos os sítios da

rede cristalina e $A > 0$. Esta anisotropia favorece um alinhamento dos spins na direção do eixo z , não importando se eles se encontram paralelos uns aos outros, ou se estão no sentido positivo ou negativo do eixo. Como ficará claro mais a frente, o sistema que será estudado consiste em uma ou mais camadas bidimensionais acopladas, de forma que a direção z é perpendicular a cada uma das camadas. Sistemas onde esta anisotropia magnetocristalina está presente, juntamente com a interação de troca, favorece configurações onde todos spins estão alinhados perpendicularmente ao plano e foram amplamente estudados [10].

1.3 Interação Dipolar

A interação dipolar, de origem puramente eletromagnética, se deve ao campo magnético dos dipolos do próprio material. Pode-se mostrar que o campo magnético criado por um dipolo magnético \vec{m} , a uma distância \vec{r} deste, é dado por [11]:

$$\vec{B}_{dip}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi r^3} [3(\vec{m} \cdot \hat{r})\hat{r} - \vec{m}], \quad (1.4)$$

onde \hat{r} é um vetor unitário que vai da posição do dipolo \vec{m} ao ponto \vec{r} . Por outro lado, a energia de um dipolo magnético \vec{m}' na presença de um campo magnético \vec{B} é $E = -\vec{m}' \cdot \vec{B}$ [11]. Portanto, se considerarmos que um material magnético real é composto por momentos (dipolos) magnéticos localizados, todos estes momentos magnéticos interagem entre si e a energia resultante desta interação é:

$$E_{dip} = \frac{\mu_0}{4\pi} \sum_{i>j} \frac{\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - 3(\vec{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{r_{ij}^3}, \quad (1.5)$$

onde \vec{m}_i é o momento magnético no sítio i , e \vec{r}_{ij} é um vetor que conecta o sítio i ao sítio j . Além disso o somatório é realizado sobre todos os momentos magnéticos do material, excluindo a auto-interação ($i = j$).

Ao contrário do que acontece na interação de troca e na anisotropia magnetocristalina, prever a configuração do estado fundamental de um sistema com interações dipolares não é uma tarefa trivial. Esta configuração depende de uma forma complicada da posição de cada um dos momentos magnéticos da rede. Mas, em uma rede bidimensional (ou quase-bidimensional), podemos perceber que pode haver uma competição para que os momentos fiquem paralelos ao plano uma vez que os vetores \hat{r}_{ij} não possuem componentes perpendiculares ao plano. Além disso, é fácil perceber que o primeiro termo desta interação favorece um acoplamento antiferromagnético, apesar de não permitir inferir, de uma maneira trivial, sobre o estado fundamental do sistema como um todo.

Os sistemas de interesse deste estudo, como dito anteriormente, consistem em filmes finos magnéticos. Como uma aproximação consideraremos que tais filmes são compostos por partículas magnéticas (íons) idênticos localizados em uma rede cristalina perfeita.

A interação dipolar, devido à sua dependência na posição de cada um dos spins, dá origem a chamada anisotropia de forma. A anisotropia de forma manifesta-se, por exemplo, quando tentamos magnetizar uma agulha. Percebe-se que é mais fácil magnetizá-la ao longo do seu comprimento e este efeito pode ser explicado ao considerarmos interações dipolares. Recentemente, verificou-se que a anisotropia de forma produz efeitos muito interessantes em materiais magnéticos nanoestruturados, como o aparecimento de vórtices em discos magnéticos [12, 13] ou o surgimento de “monopolos magnéticos” em gelos de spin [14, 15], além de ser uma das interações responsáveis pelo aparecimento da transição de reorientação [9]. Quanto aos gelos de spin vale ressaltar que estudamos o surgimento de “monopolos magnéticos” em gelos de spins artificialmente produzidos como uma rede de nanoilhas magnéticas mostrando que a interação entre tais estruturas pode ser descrita por uma fenomenologia que inclui a interação Coulombiana entre as “cargas magnéticas” mais um termo advindo da tensão de *string* entre as cargas [15].

1.4 O modelo

Neste trabalho consideraremos modelos bi e quase-bidimensionais descritos pelo seguinte Hamiltoniano:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + D \sum_{i \neq j} \left[\frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{r_{ij}^3} - \frac{3(\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right] - A \sum_i (S_i^z)^2, \quad (1.6)$$

onde J é a constante de acoplamento de troca, D é a constante de acoplamento dipolar, A é a constante de anisotropia, \vec{r}_{ij} é um vetor que liga o sítio i ao sítio j e $S_i^z = 1$ é o spin do sítio i . A primeira soma na equação acima se restringe a primeiros vizinhos, já a segunda é feita sobre todos os sítios i diferentes de j e a última sobre todos os sítios da rede. Este é o modelo de Heisenberg anisotrópico com interações dipolares (HA-d). Serão considerados apenas os casos em que a anisotropia favorece configurações com os spins apontando perpendicularmente ao plano. Neste caso, surge uma competição entre o termo de anisotropia e a interação dipolar. Dependendo dos valores dos parâmetros, o estado fundamental do sistema pode ser tanto planar quanto não-planar. Além disso, existe uma competição entre o termo de troca e o primeiro termo da interação dipolar. Enquanto um favorece estados ferromagnéticos, o outro favorece configurações antiferromagnéticas. A constante de troca J é maior que a constante de interação

dipolar D , mesmo assim, verifica-se em alguns limites a formação de domínios magnéticos alinhados antiferromagneticamente, como é o caso da ordem de *Stripes* que será descrita com um pouco mais de detalhes a frente. A presença de tantos termos competitivos impõe frustrações ao sistema, o que dificulta enormemente seu estudo.

Nos últimos anos este modelo foi estudado através de técnicas de Monte Carlo. Boa parte dos resultados obtidos podem ser encontrados no artigo *Dipolar effects in magnetic thin films and quasi-two-dimensional systems*[9].

Para termos uma idéia das principais características do modelo HA-d, na figura 1.1 apresentamos um esboço do diagrama de fases da versão ferromagnética para $J = A = 1$ e vários valores de D , obtidos com base no trabalho recente de Rapini *et al.* [16]. Este diagrama apresenta três fases distintas, uma caracterizada por uma magnetização resultante perpendicular ao plano (fase Ising), uma segunda fase caracterizada pela preferência dos spins em se alinharem paralelamente ao plano e uma terceira fase paramagnética. Neste trabalho, os autores utilizaram o algoritmo de Metropolis [17] em redes quadradas ($L \times L$) com L entre 10 e 80, e a interação dipolar foi calculada utilizando um corte no potencial em 5 espaçamentos de rede. Os resultados obtidos mostram que a transição entre a fase Ising e a fase planar é de primeira ordem. A transição entre a fase Ising e a fase paramagnética pertence à classe de universalidade do modelo de Ising. Já a transição entre a fase planar e a fase paramagnética foi caracterizada como sendo uma transição do tipo Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (*BKT*). Um fato que merece nota neste trabalho é que sabe-se que quando se considera o real caráter de longo alcance das interações dipolares o sistema apresenta ordem de longo alcance [18, 19]. Desta forma, acreditamos que a caracterização da linha c no trabalho de Rapini *et al.* [16] como sendo uma transição *BKT* não representa o real caráter de tal linha para o modelo dipolar sem corte na interação.

Em outro trabalho recente Carubelli *et al.* [21] estudaram o modelo HA-d ferromagnético para $J = 3$, $D = 1$ e valores de A entre 5 e 8, usando o algoritmo de Metropolis e a soma de Ewald para a interação dipolar. Para estes valores dos parâmetros, a fase com magnetização perpendicular é caracterizada pela presença de *Stripes*, “listras” de spins com magnetizações em sentidos opostos. O diagrama de fases obtido neste trabalho é mostrado na figura 1.2. Nesta figura também são mostradas configurações típicas da fase de *Stripes* e da fase tetragonal, que é similar à paramagnética por ser desordenada, porém apresenta uma certa simetria.

Note que nos dois trabalhos mencionados acima a estrutura geral do diagrama de fases é a mesma. De fato, experimentalmente observa-se fenômenos similares [9, 22, 23, 24]. Por exemplo, em filmes de ferro sobre cobre [22, 24] e de cobalto sobre ouro [23], onde observa-se que ao aumentar a temperatura da amostra, a magnetização passa de um estado perpendicular ao plano

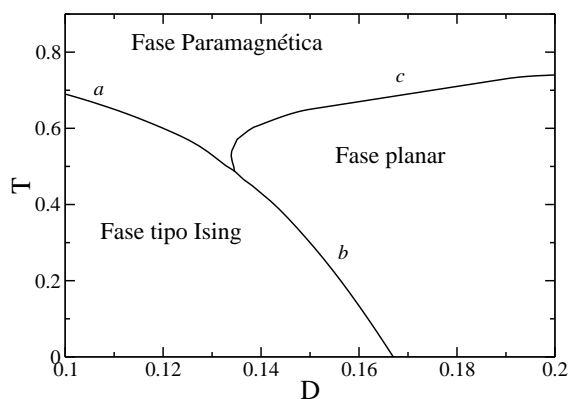


Figura 1.1: Esboço do diagrama de fases do modelo HA-d para $J = A = 1$ e vários valores de D . A linha a representa uma transição que pertence à classe de universalidade do modelo de Ising, a linha b representa uma transição de primeira ordem e a linha c representa uma transição do tipo BKT . Este diagrama foi baseado nas Ref. [16, 20].

para um estado com magnetização paralela ao plano e posteriormente para uma fase paramagnética. A esta transição (entre a fase com magnetização perpendicular ao plano e a fase planar) é dado o nome de transição de reorientação. Como pudemos perceber, o modelo de Heisenberg anisotrópico com interações dipolares é capaz de reproduzir este resultado experimental.

Um fato recorrente que é verificado nos estudos do modelo HA-d ferromagnético por Monte Carlo é a falta de análises criteriosas dos efeitos de tamanho finito, o que impede a determinação das classes de universalidade. Em geral os autores escolhem um determinado tamanho de rede e variam alguns parâmetros, como pode ser verificado nos artigos[21, 25, 26, 20, 27, 28, 29], entre outros. Nestes casos, o principal objetivo dos autores não é caracterizar as transições de fase presentes no modelo mas caracterizar a geometria das fases do modelo. Em alguns casos, os autores chegam a estudar mais de um tamanho de rede porém os resultados não são tratados com a teoria de escala de tamanho finito (*finite size scaling*) para determinar o real caráter das transições de fase. Mesmo nos estudos através de teorias de campo médio [30] os autores concentram os esforços no estudo da geometria da fase fora do plano, enquanto o estudo do caráter da transição entre a fase planar e a fase fora do plano é deixada de lado. No caso dos estudos por campo médio isto é justificável, uma vez que este tratamento não fornece os expoentes críticos corretos. Nas pesquisas bibliográficas feitas até o momento, com exceção do trabalho de Rapini [16], não verificamos nenhuma tentativa de caracterização das transições de fase através de técnicas de Monte Carlo. Existem duas possíveis explicações para este fato: (1) o grande tempo computacional necessário para obter dados confiáveis para tal análise; e (2) o fato do maior interesse estar na transição de reorientação, que consensualmente é de primeira ordem.

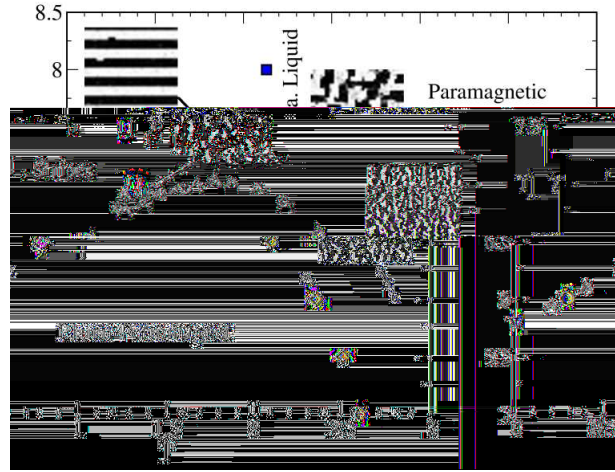


Figura 1.2: Esboço do diagrama de fases do modelo HA-d para $J = 3$ $D = 1$ e vários valores de A (η na notação dos autores). No interior da figura são mostradas configurações típicas dos spins na fase de *stripes* e na fase paramagnética (tetragonal e não tetragonal). Os pontos pretos e brancos correspondem a spins apontando no sentido positivo e negativo do eixo z respectivamente. Retirado de [21].

1.5 O modelo do Rotor Planar com interações dipolares

O modelo de Heisenberg anisotrópico com interações dipolares pode ser simplificado para descrever filmes finos na região onde os spins apresentam uma grande tendência de se alinharem paralelamente ao plano. Neste caso, podemos desprezar a existência da componente z do spin e tratá-lo como um vetor bidimensional de módulo unitário. Desta forma, obtemos o modelo do Rotor Planar com interações dipolares, definido pelo seguinte Hamiltoniano:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + D \sum_{i \neq j} \left[\frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{r_{ij}^3} - \frac{3(\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right], \quad (1.7)$$

onde J é a constante de acoplamento de troca, D é a contante de acoplamento dipolar, \vec{r}_{ij} é um vetor que liga o sítio i ao sítio j e $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y)$ é o spin do sítio i ¹. A primeira soma na equação acima se restringe a primeiros vizinhos, já a segunda é feita sobre todos os sítios i diferentes de j . Por ter somente dois graus de liberdade o espaço de fase do modelo é reduzido. Desta forma, seu estudo através de técnicas de Monte Carlo consome menos recursos computacionais, permitindo um estudo mais detalhado. As propriedades termodinâmicas deste modelo foram estudadas recentemente através de técnicas do grupo de renormalização [31], e serão discutidas no próximo capítulo.

¹Na literatura, frequentemente este modelo é chamado de modelo XY, porém devemos estar atentos para a existência ou não de três componentes no spin. Em geral, é mais conveniente chamar o modelo que tem uma interação do tipo $S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y$ e cujo spin têm três componentes de modelo XY, enquanto, se existem apenas duas componentes, de modelo do rotor planar.

2 *Noções sobre transições de fase e efeitos de tamanho finito*

Neste capítulo faremos uma breve revisão sobre transições de fase e sobre a teoria de escala de tamanho finito (*finite size scaling*).

2.1 **Classificação das transições de fase e expoentes críticos**

Transições de fase são caracterizadas por mudanças bruscas ou descontínuas nas propriedades termodinâmicas do sistema como resposta a variações contínuas de alguma condição externa, como temperatura, campo magnético, pressão, etc [32]. Ehrenfest [33] classificou as transições de fase como sendo de ordem n quando a n -ésima derivada da energia livre é descontínua. Uma classificação mais pertinente se deve a Fisher [34]. De acordo com tal classificação uma transição de fase é dita de primeira ordem se a primeira derivada da energia livre é descontínua, ou seja, quando há descontinuidades, por exemplo, na energia interna e/ou na magnetização do sistema. Talvez o melhor exemplo para uma transição deste tipo seja a transição da água entre os estados sólido e líquido, onde percebe-se a coexistência de fases e uma descontinuidade na energia interna do sistema. Ainda de acordo com a classificação de Fisher[34], transições contínuas ou críticas (muitas vezes chamadas de segunda ordem) são aquelas que apresentam a primeira derivada da energia livre contínua e sua segunda derivada descontínua ou infinita. Um exemplo deste tipo de transição é a sofrida por alguns materiais magnéticos. Abaixo de uma determinada temperatura crítica o sistema encontra-se magnetizado. À medida que a temperatura aumenta, percebe-se que a magnetização diminui continuamente até atingir um valor nulo na temperatura crítica. Ao mesmo tempo observa-se uma divergência na susceptibilidade magnética do sistema.

Uma característica comum em transições de fases é a existência de parâmetros que têm um valor não nulo em uma temperatura abaixo da temperatura crítica e que se anulam continuamente na temperatura crítica. Tal parâmetro é conhecido como parâmetro de ordem, e foi

Grandeza	Expoente crítico	Lei de potência	Condições
Calor específico	α	$c \sim t^{-\alpha}$	$H = 0$
Magnetização	β	$m \sim (-t)^\beta$	$H = 0$
	δ	$m \sim H^{1/\delta}$	$T = T_c$
Susceptibilidade	γ	$\chi \sim t^{-\gamma}$	$H = 0$
Comprimento de correlação	ν	$\xi \sim t^{-\nu}$	$H = 0$
Função de correlação	η	$\Gamma(r) \sim r^{-(d-2+\eta)}$	$T = T_c, H = 0$

Tabela 2.1: Definição de alguns expoentes críticos para um sistema magnético com dimensão espacial d [35, 36]. T_c é a temperatura crítica, H é o campo magnético externo e $t = (T - T_c)/T_c$ é a temperatura reduzida.

inicialmente introduzido por Lev Landau. Em alguns casos, a identificação do parâmetro de ordem não é trivial, podendo ocorrer deste não ser um escalar e/ou ter que ser descrito por números complexos.

No estudo de transições de fases estamos interessados em estudar o comportamento do sistema em regiões próximas ao ponto crítico. Resultados experimentais e teóricos indicam que o comportamento das propriedades do sistema podem, em geral, ser descritas por leis de potência simples, caracterizando um conjunto de expoentes críticos. O expoente crítico λ associado a uma grandeza termodinâmica A pode ser obtido de [35]:

$$\lambda \equiv \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{\ln |A(t)|}{\ln |t|}, \quad (2.1)$$

onde $t = (T - T_c)/T_c$ é a temperatura reduzida. Desprezando correções, o comportamento singular da grandeza A é dado por:

$$A(t) \sim t^\lambda. \quad (2.2)$$

Em algumas situações os expoentes podem ser distintos à esquerda e à direita do ponto crítico, $t \rightarrow 0^+$ e $t \rightarrow 0^-$. Este não é o caso presente, e não entraremos em detalhes a respeito.

Para sistemas magnéticos são seis os expoentes mais utilizados. Na tabela 2.1 a definição de tais expoentes é apresentada. As duas últimas linhas da tabela estão ligadas à função de correlação spin-spin, que é definida por:

$$\Gamma(\vec{r}_{ij}) \equiv \langle (\vec{S}_i - \langle \vec{S}_i \rangle) \cdot (\vec{S}_j - \langle \vec{S}_j \rangle) \rangle, \quad (2.3)$$

onde $\langle \dots \rangle$ denota médias termodinâmicas. Esta função mede a correlação entre spins da rede separados por uma distância \vec{r}_{ij} . Em sistemas com simetria translacional, esta função depende apenas do módulo da distância entre os spins (r) e espera-se que na maioria dos casos ela se

Universalidade	d	n	α	β	γ	δ	ν	η
Campo médio	todas	todas	0	1/2	1	3	1/2	0
Ising	2	1	0(ln)	1/8	7/4	15	1	1/4
Potts	2	q=3	1/3	1/9	13/9	14	5/6	4/15
Potts	2	q=4	2/3	1/12	7/6	15	2/3	1/4
Esférico	3	∞	-1	1/2	2	5	1	0
Ising	3	1	0,110(5)	0,325(2)	1,241(2)		0,630(2)	0,031(4)
XY	3	2	-0,007(6)	0,3455(20)	1,316(3)		0,669(2)	0,033(4)
Heisenberg	3	3	-0,115(9)	0,3645(25)	1,386(4)		0,705(3)	0,033(4)

Tabela 2.2: Valores dos expoentes críticos para várias classes de universalidade, retirado de [36]. Nas 5 primeiras linhas são apresentados resultados exatos, enquanto os das três últimas são resultados de teorias de campos. d é a dimensão do sistema e n é a dimensionalidade do parâmetro de ordem.

comporte assintoticamente como expresso na fórmula de Ornstein-Zernike[35]:

$$\Gamma(r) \sim r^{-p} \exp\left(\frac{-r}{\xi}\right). \quad (2.4)$$

Aqui p é um número real e ξ é definido como o comprimento de correlação. Longe da temperatura crítica espera-se que a função correlação tenha um comportamento predominantemente exponencial, com um valor de ξ finito. Próximo da temperatura crítica no entanto, o comprimento de correlação ξ diverge, levando a um decaimento da função correlação predominantemente por lei de potência.

Percebe-se que existem grupos de sistemas caracterizados pelo mesmo conjunto de expoentes críticos, apesar das temperaturas críticas serem, em geral, diferentes. Desta forma, podemos definir classes de universalidades, que são conjuntos de sistemas que possuem os mesmos expoentes críticos [35]. Os expoentes críticos dependem apenas da dimensão espacial do sistema (d), da simetria e dimensionalidade do parâmetro de ordem (n) e do alcance das interações [37]. As classes de universalidade permitem que através do estudo de sistemas mais simples possamos obter importantes propriedades de sistemas mais complexos. Em geral, as classes de universalidade recebem o nome do modelo mais simples para o qual um determinado conjunto de expoentes críticos é observado. Na tabela 2.1 apresentamos algumas classes de universalidades e seus respectivos expoentes.

Partindo de argumentos termodinâmicos é possível obter relações rigorosas entre os expoentes críticos [35]. Entre estas estão a inequação de Rushbrooke,

$$\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2 \quad (2.5)$$

e a inequação de Griffiths,

$$\alpha + \beta(1 + \delta) \geq 2. \quad (2.6)$$

Observa-se que para alguns modelos com solução exata estas relações são de fato igualdades, como pode ser verificado para o modelo de Ising bidimensional.

Outra forma de se obter relações entre os expoentes críticos é através da hipótese de escala[35, 36]. Em tal hipótese assume-se que próximo do ponto crítico o único comprimento característico do sistema é o comprimento de correlação (ξ). Como no ponto crítico o comprimento de correlação diverge, o sistema deve ser invariante sob transformações de escala. Conclui-se então que a parte singular da energia livre de Gibbs ($G_s(t, h)$), o comprimento de correlação e a função correlação devem ser funções homogêneas generalizadas de t e h e, no caso da função correlação, também de r , i.e.,

$$G_s(t, h) = l^{-d} G_s(l^y t, l^x h), \quad (2.7a)$$

$$\xi(t, h) = l \xi(l^y t, l^x h), \quad (2.7b)$$

$$\Gamma(r, t, h) = l^{2(x-d)} \Gamma(l^{-1} r, l^y t, l^x h), \quad (2.7c)$$

onde $h \equiv H/k_B T$ é o campo reduzido, l é um fator arbitrário de transformação muito maior que 1 e muito menor que ξ e x e y são números reais. Partindo destas expressões é possível chegar às seguintes igualdades:

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2, \quad (2.8a)$$

$$\gamma = \nu(2 - \eta), \quad (2.8b)$$

$$\gamma = \beta(\delta - 1), \quad (2.8c)$$

$$\nu d = 2 - \alpha. \quad (2.8d)$$

Estas equações são conhecidas como relações de escala quando não envolvem a dimensão do sistema e relações de superescala ou hiper-escala, quando dependem da dimensão do sistema.

2.2 Teoria de escala para sistemas finitos

Como dito anteriormente, transições de fase são caracterizadas por descontinuidades ou divergências nas grandezas termodinâmicas, tais descontinuidades e divergências só ocorrem se a energia livre do sistema tiver uma parte singular. Porém, em sistemas finitos a energia livre é sempre uma função não singular dos parâmetros externos. Desta forma, transições de

fase só podem ocorrer no limite termodinâmico [2]. Em sistemas finitos as divergências são substituídas por máximos arredondados e a posição do máximo é deslocada do valor no ponto crítico [38].

A teoria de escala de tamanho finito ou *finite size scaling* destina-se a descrever a relação entre o comportamento de um sistema finito e seu equivalente no limite termodinâmico. Portanto, o conhecimento de tal teoria é de fundamental importância na análise de resultados obtidos para sistemas finitos como os estudados por simulações computacionais [3].

Como dito anteriormente o único comprimento característico do sistema próximo à criticidade é o comprimento de correlação. Em sistemas finitos, tal comprimento é limitado pela dimensão linear do sistema (L). Espera-se portanto que efeitos de tamanho finito não sejam relevantes quando $L \gg \xi$, porém, quando $L \ll \xi$ os efeitos de tamanho finito são determinantes nas propriedades do sistema. Os efeitos de tamanho finito dependem portanto da relação entre L e ξ . Próximo ao ponto crítico o comprimento de correlação diverge através de uma lei de potência simples:

$$\xi \sim t^{-\nu}. \quad (2.9)$$

Espera-se, portanto, que os efeitos de tamanho finito se manifestem no sistema com uma combinação de escala do tipo $L/t^{-\nu}$. De acordo com a teoria [38], para um sistema suficientemente grande em uma temperatura T próxima o suficiente da temperatura crítica, T_c , a energia livre é dividida em uma parte singular (g_s) e uma não singular (g_{ns}):

$$g(t, h, L) = g_s(t, h, L) + g_{ns}(t, h, L), \quad (2.10)$$

onde h é um campo externo. Em um sistema com condições de contorno periódicas, espera-se que a parte não singular da energia livre seja independente do tamanho do sistema (L). Por outro lado, usamos o seguinte *ansatz* para a parte singular [38, 36]:

$$g_s(t, h, L) \approx L^{-d} Y(atL^\nu, bhL^x), \quad (2.11)$$

onde Y é uma função universal e a e b são fatores que dependem do sistema e descrevem suas particularidades. Com este *ansatz*, todas as leis de escala continuam válidas e as propriedades de escala podem ser obtidas através de manipulações da expressão acima. Desta forma, a magnetização, a susceptibilidade e o calor específico apresentam a seguinte dependência com o

tamanho da rede L e com a temperatura reduzida t :

$$m \approx L^{-\beta/\nu} \mathcal{M}(tL^{1/\nu}), \quad (2.12a)$$

$$\chi \approx L^{\gamma/\nu} \mathcal{X}(tL^{1/\nu}), \quad (2.12b)$$

$$c \approx c_\infty(t) + L^{\alpha/\nu} \mathcal{C}(tL^{1/\nu}), \quad (2.12c)$$

onde as funções de escala \mathcal{M} , \mathcal{X} e \mathcal{C} são derivadas de Y . Uma evidência dos efeitos de tamanho finito é, portanto, que a altura dos picos do calor específico ($t = 0$) e da susceptibilidade variam através de uma lei de potência com o tamanho da rede L e que a posição deste pico está deslocada de uma quantidade proporcional a $L^{1/\nu}$ da temperatura crítica no limite termodinâmico, ou seja, a temperatura de transição numa rede finita $T_c(L)$, em função da temperatura crítica no limite termodinâmico T_∞ , é dada por:

$$T_c(L) = T_\infty + wL^{-1/\nu}. \quad (2.13)$$

A princípio, utilizando as relações de escala de tamanho finito descritas acima é possível obter os expoentes críticos e a temperatura crítica de uma transição de fase de segunda ordem, porém, utilizando apenas estas quantidades esta tarefa nem sempre é fácil. Para se obter resultados mais precisos e de uma maneira mais eficaz, definimos os seguintes momentos da magnetização [36, 39],

$$V_1 \equiv 4[m^3] - 3[m^4], \quad (2.14a)$$

$$V_2 \equiv 2[m^2] - [m^4], \quad (2.14b)$$

$$V_3 \equiv 3[m^2] - 2[m^3], \quad (2.14c)$$

$$V_4 \equiv (4[m] - [m^4])/3, \quad (2.14d)$$

$$V_5 \equiv (3[m] - [m^3])/2, \quad (2.14e)$$

$$V_6 \equiv 2[m] - [m^2], \quad (2.14f)$$

onde,

$$[m^n] \equiv \ln \left| \frac{\partial \langle m^n \rangle}{\partial T} \right|. \quad (2.15)$$

Substituindo a expressão para magnetização da Eq. (2.12) nas definições acima é fácil mostrar que estas funções seguem a seguinte forma de escala:

$$V_j \approx (1/\nu) \ln L + \mathcal{V}_j(tL^{1/\nu}), \quad (2.16)$$

para $j = 1, 2, \dots, 6$. Na temperatura crítica, as funções \mathcal{V}_j devem ser constantes independentes do

tamanho da rede. Portanto, para obtermos os valores de ν e T_∞ , podemos fazer ajustes lineares e observar quando as seis grandezas acima, como função de $\ln L$, apresentam a mesma inclinação. Assim, pode-se obter a temperatura crítica e o expoente ν com grande precisão.

Outra grandeza muito útil na determinação da temperatura crítica é o cumulante reduzido de quarta ordem do parâmetro de ordem, ou simplesmente cumulante de Binder [40, 3]. Tal grandeza é definida, quando os momentos ímpares do parâmetro de ordem m são nulos, pela seguinte expressão:

$$U_4 = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2}. \quad (2.17)$$

No limite $L \rightarrow \infty$, $U_4 \rightarrow 0$ para $T > T_c$ e $U_4 \rightarrow 2/3$ para $T < T_c$. No entanto, U_4 tende a um ponto fixo U^* em $T = T_c$. Desta forma, em um gráfico de U_4 em função de T para vários tamanhos de rede, as curvas se interceptam no ponto fixo U^* , e a localização deste ponto é outra forma de se obter a temperatura crítica. Espera-se também que próximo do ponto crítico a dependência do cumulante de Binder com o tamanho da rede seja da seguinte forma [41]:

$$U_4 \approx \mathcal{U}_4(tL^{1/\nu}). \quad (2.18)$$

É importante ressaltar que as leis de escala (2.12), (2.13), (2.16) e (2.18) incluem correções quando se está longe da temperatura crítica e/ou para redes pequenas.

Em transições de primeira ordem os máximos do calor específico e da susceptibilidade em sistemas finitos escalam com o volume do sistema [38], ou seja, escalam com L^d . Além disso, a temperatura crítica varia assintoticamente da seguinte forma:

$$T_c(L) \approx T_\infty + a_q L^{-d}. \quad (2.19)$$

Novamente correções adicionais estão presentes para redes pequenas e/ou longe da temperatura de transição.

2.3 A transição de Berezinskii-Kosterlitz-Thouless

O teorema de Mermin-Wagner [8] demonstra que sistemas unidimensionais e bidimensionais com simetria global contínua e interações de curto alcance não apresentam ordem de longo alcance em nenhuma temperatura diferente de zero. Como uma extensão dos resultados de Mermin e Wagner Bruno [42] demonstrou que a inexistência de ordem de longo alcance em sistemas 1D e 2D pode ser também estendida alguns sistemas com interações de longo alcance.

Porém, observa-se que o modelo do rotor planar em duas dimensões, que tem tal simetria e que será definido a frente, tem uma transição de fase em temperatura finita. Esta transição não se encaixa na classificação de Fisher [34] e atualmente existem duas fenomenologias para explicá-la [43, 44, 45], que serão expostas brevemente mais a frente. Apenas para manter uniformidade de linguagem usaremos a terminologia transição de Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) neste trabalho. Nesta seção será feita uma breve revisão sobre esta transição.

O modelo do rotor planar é definido pelo seguinte Hamiltoniano:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (2.20)$$

onde J é a constante de acoplamento de troca, $\langle i, j \rangle$ indica que o somatório é realizado apenas para primeiros vizinhos e $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y)$ é um vetor bidimensional com $\vec{S}_i^2 = 1$. Observe que o sistema é invariante sobre rotações de todos os spins, e como as interações são de curto alcance, este modelo obedece ao teorema de Mermin-Wagner [8]. Desta forma, a magnetização do modelo do rotor planar é zero em qualquer temperatura diferente de zero. Vale ressaltar no entanto que em sistemas finitos, como os estudados por simulações computacionais, tal grandeza é finita. De fato, espera-se que ao estudar sistemas finitos, observe-se uma significativa diminuição do valor da magnetização do sistema ao se aumentar seu tamanho. Este fato será de grande importância no decorrer deste trabalho.

No modelo do rotor planar uma expansão em altas temperaturas [46] mostra que a função correlação spin-spin decai exponencialmente, como era de se esperar. Porém expansões em baixas temperaturas [47] mostram que tal decaimento é por lei de potência. Esta mudança de comportamento na função correlação indica a existência de uma transição de fase. Além disso, pelo fato de a baixas temperaturas o comprimento de correlação ser infinito, pode-se esperar uma espécie de linha de pontos críticos abaixo da temperatura de transição, uma vez que o comportamento do sistema seria equivalente ao que ocorre no ponto crítico de uma transição de segunda ordem. Observa-se nesta transição que o calor específico não diverge. De fato, há apenas um pequeno máximo que está deslocado da temperatura de transição em aproximadamente 10% [48, 49, 50, 51]. Além disso, tanto o comprimento de correlação (ξ) quanto a susceptibilidade são infinitos abaixo da temperatura de transição (T_{BKT}). Acima desta, estas grandezas decaem exponencialmente, i.e., aproximando-se de T_{BKT} por temperaturas maiores que T_{BKT} , a susceptibilidade e o comprimento de correlação divergem seguindo a seguinte relação:

$$\xi \sim a_\xi e^{b_\xi (T - T_{BKT})^{-1/2}}, \quad (2.21)$$

$$\chi \sim a_\chi e^{b_\chi (T - T_{BKT})^{-1/2}}, \quad (2.22)$$

e permanecem infinitos para $T < T_{BKT}$.

A fenomenologia mais aceita na descrição desta transição baseia-se no desligamento de pares vórtice-antivórtice [44, 45]. Vórtices são excitações topológicas que surgem no sistema devido à excitação térmica. A baixas temperaturas o sistema é dominado por ondas de spin e vórtices isolados são pouco prováveis aparecendo apenas em pares. No entanto, pares vórtice-antivórtice desordenam o sistema apenas localmente, e portanto a função correlação decai lentamente (lei de potência). Com o aumento da temperatura, os pares começam a se desligar, até que na temperatura de transição surgem vórtices livres, que desordenam significativamente o sistema, fazendo com que a função correlação decaia exponencialmente.

Uma outra fenomenologia para descrever esta transição se deve a Patrascioiu e Seiler [43]. Estes autores argumentam que o mecanismo responsável pela transição é uma polimerização de paredes de domínio. Segundo tal descrição, a altas temperaturas paredes de domínio de tamanho finito estão presentes em todo sistema. Tais paredes são facilmente deformadas e são pouco rígidas, o que faz com que a função correlação decaia exponencialmente. Ao diminuir a temperatura, espera-se que haja uma espécie de polimerização destas paredes de domínio, o que dá ao sistema uma certa ordem local, fazendo com que a função de correlação decaia por lei de potência.

2.4 Uma possível nova classe de universalidade

Em um trabalho recente, Maier e Schwabl [31] estudaram, através de técnicas de grupo de renormalização, o modelo do rotor planar com interações dipolares (d-PR) em duas dimensões. Tal modelo é descrito pela Eq. (1.7):

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + D \sum_{i \neq j} \left[\frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{r_{ij}^3} - \frac{3(\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right].$$

Maleev [18] demonstrou que o modelo do rotor planar com interações dipolares (d-PR) apresenta ordem de longo alcance se $D \neq 0$. O resultado de Maleev [18] aplica-se também ao modelo de Heisenberg com interações dipolares. Maier e Shwabl [31] demonstraram que no modelo d-PR o comprimento de correlação ξ diverge exponencialmente quando $T \rightarrow T_c$, como

$$\xi \propto \exp(b/\sqrt{t}), \quad (2.23)$$

onde $t = |T - T_c|/T_c$ e b é uma constante não universal. A forma com que o comprimento de correlação diverge é a mesma esperada para a transição BKT, porém, ao contrário desta transição, no modelo d-PR o valor da constante b não assume um valor universal e há ordem de longo alcance a baixa temperatura. Os autores calcularam os expoentes que caracterizam a divergência das grandezas termodinâmicas em termos do comprimento de correlação e obtiveram:

$$M \propto \xi^{-\tilde{\beta}} \quad (2.24a)$$

$$\chi \propto \xi^{\tilde{\gamma}} \quad (2.24b)$$

$$c_V \propto \xi^{\tilde{\alpha}}, \quad (2.24c)$$

onde $\tilde{\beta} = 1/2$, $\tilde{\gamma} = 1$ e $\tilde{\alpha} = -2$, indicando que o calor específico não apresenta divergências, assim como acontece na transição BKT. Em um sistema finito, o comprimento de correlação é limitado pelo tamanho do sistema. Desta forma, espera-se que a magnetização e a susceptibilidade se comportem, próximo à temperatura crítica, de forma similar a esperada em uma transição de segunda ordem, isto é, esperamos que o comportamento do máximo da susceptibilidade para diferentes tamanhos de rede (L) seja uma lei de potência de L ($\chi_{max} \propto L^{\tilde{\gamma}}$) e que a magnetização na temperatura crítica decaia por uma lei de potência de L ($m_{T_c} \propto L^{-\tilde{\beta}}$). Esperamos também que o comportamento do calor específico seja similar ao de uma transição BKT apresentando apenas um pequeno máximo que praticamente não depende do tamanho da rede. No entanto, o comportamento destas grandezas nas imediações do ponto crítico provavelmente não pode ser descrito pelas técnicas usuais de *finite size scaling*, uma vez que as divergências nas proximidades do ponto crítico, nesta classe de universalidade, são exponenciais e na teoria apresentada de *finite size scaling* considerou-se divergências algébricas. Os resultados de Maier e Schwabl sugerem portanto que o modelo d-PR pertença a uma nova classe de universalidade e, como espera-se que o modelo do rotor planar com interações dipolares descreva o modelo HA-d no limite de baixas anisotropias, onde as configurações planares são mais favoráveis, pode-se esperar *a priori* que o modelo HA-d também pertença a esta nova classe de universalidade.

2.5 Objetivos

Como vimos nos capítulos 1 e 2, a transição entre a fase planar e a fase paramagnética no modelo de Heisenberg anisotrópico com interações dipolares (HA-d) não é bem entendida. De fato, pudemos observar que os resultados de Rapini *et al.* [16] não concordam com as previsões de Maier e Schwabl [31]. É provável que a introdução de um corte na interação dipolar cause o desaparecimento da ordem de longo alcance. Neste contexto, o objetivo principal deste trabalho será o de explorar em mais detalhes esta transição de fase. Para isto, iremos estudar através

de técnicas de Monte Carlo, descritas no próximo capítulo, três modelos similares ao descrito acima, esperando que nos dêem uma visão mais ampla do cenário envolvido nesta transição. Em um primeiro passo, iremos explorar as possíveis diferenças na transição entre a fase planar e paramagnética para um sistema composto por duas camadas interagentes e considerando um corte nas interações dipolares. Neste caso, espera-se *a priori* que os resultados sejam consistentes com os obtidos por Rapini *et al.* uma vez que o sistema permanece bidimensional em essência. Iremos então estudar o modelo do rotor planar com interações dipolares (d-PR) sem corte. Finalmente, exploraremos o modelo de Heisenberg anisotrópico com interações dipolares. Nossos resultados serão comparados com os de Rapini *et al.* [16] e com os de Maier e Schwabl [31].

3 *Métodos de Simulação*

Neste capítulo descreveremos os principais métodos de simulação utilizados neste estudo. Na primeira seção será exposto o método de Monte Carlo e o algoritmo de Metropolis. Na segunda, será feita a descrição do método de histogramas que é um poderoso método para se obter as funções termodinâmicas. A soma de Ewald será apresentada na terceira seção.

3.1 O método de Monte Carlo e o algoritmo de Metropolis

As propriedades termodinâmicas de um sistema podem ser obtidas das interações microscópicas presentes neste através da função de partição do sistema, definida da seguinte forma no ensemble canônico [2]:

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp(-\beta E_{\sigma}), \quad (3.1)$$

onde $\beta = 1/k_B T$, k_B é a constante de Boltzmann, T é a temperatura e E_{σ} é a energia de um estado σ qualquer. No somatório, $\{\sigma\}$ indica que a soma é feita sobre todos os estados microscópicos acessíveis ao sistema. A conexão com a termodinâmica é feita através da energia livre do sistema que está relacionada à função de partição pela seguinte relação:

$$f = -k_B T \ln Z. \quad (3.2)$$

Desta forma, as propriedades termodinâmicas podem ser recuperadas através de derivadas da energia livre. Por exemplo, o valor esperado para a energia do sistema é dado por:

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_{\{\sigma\}} E_{\sigma} \exp(-\beta E_{\sigma})}{\sum_{\{\sigma\}} \exp(-\beta E_{\sigma})}. \quad (3.3)$$

Podemos identificar na expressão acima o termo

$$\frac{\exp(-\beta E_{\sigma})}{\sum_{\{\sigma\}} \exp(-\beta E_{\sigma})}, \quad (3.4)$$

como sendo a probabilidade do estado σ ocorrer, isto é, se em algum processo de medida o microestado σ puder ser obtido, e esta medida for feita um número suficientemente grande de vezes, um estado particular σ_1 será obtido com probabilidade

$$P(\sigma_1) = \frac{\exp(-\beta E_{\sigma_1})}{\sum_{\{\sigma\}} \exp(-\beta E_{\sigma})}. \quad (3.5)$$

Como pode-se perceber, basta calcular a função de partição do sistema para se obter todas as informações termodinâmicas. Porém, esta tarefa se mostra extremamente complicada. Apenas em poucos sistemas simples consegue-se calcular a função de partição do sistema analiticamente. Além disso, poderíamos pensar em calcular numericamente a função de partição. Mas um cálculo deste tipo é proibitivo, já que o número de estados acessíveis a um sistema é imenso. Para se ter uma idéia do número de estados de um sistema de interesse, considere o modelo de Ising. Este modelo têm o mesmo Hamiltoniano do modelo de Heisenberg (Eq. (1.1)), porém os spins podem assumir apenas os valores 1 e -1 . Em uma comterdo 1sp355vtis vh341 pour19(o-]TJ-20

otrmodinâmicas.-222(de)-272(dnteresse,-272(d351)-212(

Iodas ass-269(comt002cgruções)-269(e)scolhdadseiz-2ir

5. Calcule $\exp(-\beta\Delta E)$ e compare com um número aleatório r escolhido uniformemente entre 0 e 1.
 - Se $r < \exp(-\beta\Delta E)$ aceite a alteração proposta para o spin e faça $E_i = E_f$.
 - Caso contrário, continue com a mesma configuração.
6. Volte ao passo 3 e repita o procedimento.

Quando este processo é repetido um número N de vezes, onde N é o número de sítios da rede, dizemos que foi dado um passo de Monte Carlo, que é usado como uma medida do “tempo” de simulação. Este processo gera uma cadeia Markoviana que obedece as condições de balanço detalhado e portanto, para um número suficientemente grande de configurações geradas, podemos afirmar que este procedimento gera estados seguindo a distribuição de Boltzmann [3, 2]. Durante os passos iniciais, ou seja, para as primeiras configurações geradas, há um transiente inicial onde a distribuição de probabilidades não é a desejada, o qual chamamos de tempo de termalização. Neste caso, devemos **sempre** descartar um determinado número de configurações para assegurar que o sistema esteja em equilíbrio. A determinação correta do número de passos de Monte Carlo necessários para que o sistema atinja o equilíbrio é de fundamental importância em qualquer simulação onde pretende-se obter resultados confiáveis.

3.2 Métodos de análise dos dados: técnicas de histogramas

Uma desvantagem da maioria dos algoritmos de Monte Carlo é a necessidade de se repetir a simulação, incluindo o processo de termalização para cada temperatura que se deseja estudar. Isto torna as simulações muito longas. Porém, o uso de técnicas de repesagem, ou técnicas de histogramas, permite obter informações do sistema para um determinado intervalo de temperatura ΔT com uma única simulação feita em uma temperatura T_0 . Este método consiste em fazer uma repesagem das probabilidades das configurações geradas. A probabilidade de um determinado estado σ_1 ser visitado em uma simulação de Monte Carlo é dada pela equação (3.5). Porém em alguns casos é mais conveniente trabalhar com a probabilidade de um estado com energia E ocorrer em uma temperatura T_0 , que é dada por [2]:

$$P_{\beta_0}(E) = \frac{g(E) \exp(-\beta_0 E)}{Z(\beta_0)}, \quad (3.6)$$

onde $\beta_0 = 1/k_B T_0$ e

$$g(E) = \sum_{\{\sigma\}} \delta_{E, E_\sigma}, \quad (3.7)$$

é o número de estados com energia E , ou densidade de estados, e δ é a função delta de Kronecker. Note que ao contrário da função de partição $Z(\beta_0)$ e da distribuição de probabilidades $P_{\beta_0}(E)$, $g(E)$ independe da temperatura.

Em uma simulação de Monte Carlo feita em uma temperatura T_0 , cada valor de energia será visitado com probabilidade $P_{\beta_0}(E)$. Se durante a simulação construirmos um histograma da energia, isto é, se colocarmos em um vetor $H(E)$ o número de vezes que cada valor de energia foi visitado, ao final da simulação, $H(E)/M$, onde M é o número de passos de Monte Carlo realizados, nos dá uma estimativa para $P_{\beta_0}(E)$ e portanto podemos escrever [52]:

$$H(E) \approx \frac{M}{Z(\beta_0)} g(E) \exp(-\beta_0 E). \quad (3.8)$$

Com esta expressão, podemos estimar o valor de $g(E)$ como sendo:

$$g(E) \approx \frac{Z(\beta_0)}{M} H(E) \exp(\beta_0 E). \quad (3.9)$$

A distribuição de probabilidade em uma temperatura β qualquer é dada por:

$$P_\beta(E) = \frac{g(E) \exp(-\beta E)}{\sum_E g(E) \exp(-\beta E)}. \quad (3.10)$$

Substituindo a expressão de $g(E)$ da equação (3.9) na equação acima, obtemos:

$$P_\beta(E) \approx \frac{H(E) \exp(-\Delta\beta E)}{\sum_E H(E) \exp(-\Delta\beta E)}, \quad (3.11)$$

onde $\Delta\beta = \beta - \beta_0$. Com esta expressão, podemos calcular o valor esperado de uma função da energia, $A(E)$ em uma temperatura T , da seguinte forma:

$$\langle A(E) \rangle_\beta \approx \sum_E A(E) P_\beta(E) = \frac{\sum_E A(E) H(E) \exp(-\Delta\beta E)}{\sum_E H(E) \exp(-\Delta\beta E)}. \quad (3.12)$$

Portanto, ao realizarmos uma simulação em uma temperatura T_0 , podemos obter o valor esperado de qualquer grandeza termodinâmica do sistema em uma temperatura T próxima a T_0 , bastando para isso calcular o histograma $H(E)$ e as médias microcanônicas das grandezas de interesse. A média microcanônica da magnetização $\bar{m}(E)$, por exemplo, pode ser estimada numa simulação onde foram realizados M passos de Monte Carlo da seguinte forma:

$$\bar{m}(E) = \frac{\sum_{i=1}^M \vec{m}_i \delta_{E, E_i}}{\sum_{i=1}^M \delta_{E, E_i}}. \quad (3.13)$$

Nesta exposição consideramos que o espectro de energias é discreto porém, no modelo de Heisenberg anisotrópico com interações dipolares, o espectro é contínuo. Uma dedução

similar pode ser feita para um espectro contínuo de energias considerando a probabilidade de um estado com energia entre E e $E + dE$ ocorrer. Neste caso, as principais diferenças são que as somas seriam substituídas por integrais e que $H(E)$ passaria a ser uma função contínua de E . Teríamos, portanto, duas formas de calcular as grandezas; discretizando o espectro de energias, ou integrando as funções. No entanto, o processo de discretização pode introduzir desvios sistemáticos nos resultados, e para integrar as médias usando o espectro contínuo, seria necessário conhecer a forma analítica da função $H(E)$. Para evitar tais complicações, durante a simulação, os valores de energia e magnetização de cada configuração são gravados em uma lista. No final da simulação, esta lista é lida e a medida que isto é feito, calculamos

$$a = \sum A \exp(-\Delta\beta E) \quad (3.14)$$

e

$$b = \sum \exp(-\Delta\beta E), \quad (3.15)$$

onde A é uma grandeza qualquer, como magnetização ou E^2 , e desta forma os valores esperados são obtidos diretamente calculando a/b . Observe que neste método cada valor de energia aparece apenas uma vez, e portanto, $H(E) = 1, \forall E$.

Ao utilizar histogramas, deve-se ter em mente que a estimativa para $H(E)$, em geral, não é muito precisa em todo o intervalo de energia. Suponha que na temperatura T_0 a probabilidade de um estado com energia E_1 seja, por exemplo, $3,5 \times 10^{-8}$. Se na simulação foram realizados 10^6 passos de Monte Carlo, muito provavelmente os estados com energia E_1 não sejam visitados. Por outro lado, em uma temperatura T_1 , a probabilidade dos estados com energia E_1 pode ser bem maior, digamos 0,3. Com isto, ao tentarmos obter os valores esperados em T_1 através da técnica de histogramas, estaremos obtendo um valor diferente do esperado, já que para o histograma construído em T_0 , $H(E_1) = 0$ e portanto os estados com energia E_1 , que são muito relevantes na temperatura T_1 , estarão sendo subestimados! De fato, estaríamos considerando que a probabilidade deste estado ocorrer é zero ao invés de ser 0,3 (veja a Eq. (3.10))! Verifica-se com isto que o intervalo de temperatura no qual os resultados obtidos pela técnica de histogramas é válido é muito pequeno e, portanto, muito cuidado deve ser tomado ao utilizar esta técnica.

Em 1989, A.M. Ferrenberg e R.H. Swendsen[53], propuseram um método capaz de combinar histogramas de simulações realizadas em diferentes temperaturas, desde que haja uma superposição das distribuições de probabilidades, o que tornou possível obter estimativas das funções termodinâmicas em um intervalo maior de temperaturas usando o método de histogra-

mas. A idéia central do método está baseada no fato de que em cada simulação, temos uma estimativa para a densidade de estados $g(E)$. No entanto, a precisão de tal estimativa não é a mesma em cada simulação uma vez que determinados valores de energia são mais ou menos prováveis em cada temperatura e que esta também depende do número de passos de Monte Carlo usados em cada temperatura. A forma mais adequada, portanto, para estimarmos a densidade de estados e por sua vez as grandezas de interesse é minimizar os erros estatísticos em cada uma das estimativas da densidade de estados [53]. Fazendo isto, pode-se mostrar que a maneira mais adequada de utilizar os resultados de histogramas obtidos em diferentes simulações é dada pelas seguintes relações:

$$\langle A(E) \rangle_\beta \approx \sum_E \overline{A(E)} \exp(-\beta E - f) \frac{\sum_{i=1}^R H_i(E)}{\sum_{i=1}^R n_i \exp[(\beta - \beta_i)E - f_i]}, \quad (3.16)$$

onde

$$\exp(f) = \sum_E \frac{\sum_{i=1}^R H_i(E)}{\sum_{i=1}^R n_i \exp[(\beta - \beta_i)E - f_i]} \quad (3.17)$$

e

$$\exp(f_k) = \sum_E \frac{\sum_{i=1}^R H_i(E)}{\sum_{i=1}^R n_i \exp(\beta_k - \beta_i E - f_i)}. \quad (3.18)$$

Nestas expressões, f_i é uma estimativa da “energia livre” e deve ser obtido iterando-se a equação (3.18). Consideramos aqui que foram realizadas R simulações nas temperaturas $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_R$ e que em cada uma destas simulações foram utilizados n_i passos de Monte Carlo. $H_i(E)$ é o histograma construído na temperatura i e $\overline{A(E)}$, indica a média microcanônica da grandeza A .

3.3 A soma de Ewald

Os sistemas considerados em simulações de Monte Carlo são muito menores que os sistemas reais que se pretende estudar. No caso deste trabalho, pretendemos obter propriedades de filmes finos magnéticos que têm da ordem de 10^6 - 10^9 átomos presentes, enquanto o número de sítios da rede simulada é da ordem de milhares. Além disso, estamos interessados em propriedades no limite termodinâmico e, por estes fatos, devemos tentar minimizar os efeitos causados pelo tamanho finito do sistema. Uma forma de minimizar alguns destes efeitos é a inclusão de condições periódicas de contorno. Em um modelo onde estão presentes apenas interações de curto alcance, a inclusão de condições periódicas de contorno é trivial. Por outro lado, em sistemas com interações de longo alcance, cuidado especial deve ser tomado.

Para que possamos aplicar de forma adequada condições de contorno periódicas em siste-

mas com interações dipolares devemos nos lembrar que neste caso as cargas imagem devem ser levadas em conta. A forma mais simples que poderíamos pensar para se fazer isto é fazer um número infinito de réplicas do sistema em todas as direções. No entanto, isto seria equivalente a simular um sistema infinito, tornando-se inviável. Poderíamos então pensar em considerar um número finito de réplicas, até um determinado raio máximo n_c . Matematicamente, temos o seguinte:

$$H_{dip} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \sum_{\vec{n}=0}^{n_c}{}' \left\{ \frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{(\vec{r}_{ij} + \vec{n}L)^3} - 3 \frac{[\vec{S}_i \cdot (\vec{r}_{ij} + \vec{n}L)][\vec{S}_j \cdot (\vec{r}_{ij} + \vec{n}L)]}{(\vec{r}_{ij} + \vec{n}L)^5} \right\}, \quad (3.19)$$

onde a linha no somatório em $\vec{n} = (n_x, n_y, n_z)$ indica que para $n = 0$ o termo $i = j$ não é considerado e n_α é um número inteiro. Poderíamos ainda melhorar esta estimativa fazendo o cálculo para vários cortes n_c e extrapolando o resultado para $n_c \rightarrow \infty$. Porém um cálculo deste tipo é proibitivo devido ao grande tempo computacional envolvido.

Uma forma apropriada de considerarmos corretamente condições de contorno periódicas em sistemas com interações dipolares é a soma de Ewald [54, 55, 56]. Este método consiste em separar a interação dipolar em dois termos, um de curto e outro de longo alcance, e realizar a soma dos termos de longo alcance no espaço recíproco. No apêndice A apresentamos uma dedução para a expressão final da soma de Ewald. Tal expressão é dada por:

$$H_{Ewald} = H_{re} + H_{four} + H_{surf} + H_{self}, \quad (3.20)$$

onde H_{re} é a parte da soma efetuada no espaço real, H_{four} é a parte efetuada no espaço recíproco (ou espaço de Fourier), H_{surf} considera os termos de superfície e H_{self} é o termo de auto-interação. Estes termos são dados por:

$$H_{re} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \sum_{\vec{n}}{}' \left\{ B(|\vec{r}_{ij} + \vec{n}L|) \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + C(|\vec{r}_{ij} + \vec{n}L|) [\vec{S}_i \cdot (\vec{r}_{ij} + \vec{n}L)][\vec{S}_j \cdot (\vec{r}_{ij} + \vec{n}L)] \right\}, \quad (3.21)$$

$$H_{four} = \frac{\pi}{A} \sum_{\vec{G} \neq 0} h_1(\vec{G}) F_{||}(\vec{G}) F_{||}^*(\vec{G}) + \frac{\pi}{A} \sum_{\vec{G} \neq 0} h_2(\vec{G}) F_{\perp}(\vec{G}) F_{\perp}^*(\vec{G}), \quad (3.22)$$

$$H_{surf} = \frac{2\sqrt{\pi}\alpha}{A} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N S_i^z S_j^z, \quad (3.23)$$

$$H_{self} = -\frac{2\alpha^3 N}{3\sqrt{\pi}}, \quad (3.24)$$

onde a linha na soma sobre $\vec{n} = (n_x, n_y)$, com n_x e n_y inteiros, significa que o termo $i = j$ é

omitido quando $\vec{n} = 0$. Nestas expressões N é o número total de sítios na rede, $A = L^2$ é a área da rede, $\vec{G} = (2\pi/L)\vec{n}$ é o vetor de onda, $erfc$ é a função erro complementar,

$$B(r) = -\frac{erfc(\alpha r)}{r^3} - \frac{2\alpha \exp(-\alpha^2 r^2)}{\sqrt{\pi} r^2}, \quad (3.25)$$

$$C(r) = 3\frac{erfc(\alpha r)}{r^5} + \frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{3}{r^2} + 2\alpha^2 \right) \frac{\exp(-\alpha^2 r^2)}{r^2} \quad (3.26)$$

$$h_1(\vec{G}) = \frac{erfc(G/2\alpha)}{G} \quad (3.27)$$

$$h_2(\vec{G}) = \left[\frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{G^2}{4\alpha^2}\right) - G erfc\left(\frac{G}{2\alpha}\right) \right] \quad (3.28)$$

e

$$F_{\parallel}(\vec{G}) = \sum_{i=1}^N (\vec{G} \cdot \vec{S}_i) \exp(i\vec{G} \cdot \vec{r}_i) \quad (3.29)$$

$$F_{\perp}(\vec{G}) = \sum_{i=1}^N S_i^z \exp(i\vec{G} \cdot \vec{r}_i), \quad (3.30)$$

com $F_{\parallel}^*(\vec{G})$ e $F_{\perp}^*(\vec{G})$ sendo os conjugados complexos de $F_{\parallel}(\vec{G})$ e $F_{\perp}(\vec{G})$, respectivamente. Observando as expressões da soma de Ewald, percebe-se a existência de um termo arbitrário α que deve ser escolhido de forma a minimizar o erro na energia. Vale ressaltar que o resultado acima incorpora duas somas infinitas, a soma em \vec{n} e a soma em \vec{G} . Com as somas desta forma, o resultado é exato independentemente do valor de α . A função do parâmetro arbitrário α é de regular a convergência das somas em \vec{n} e \vec{G} , de forma que ambas possam ser truncadas e ainda assim fornecerem bons resultados. Uma forma conveniente de escolher os parâmetros é exposta no apêndice C.

Uma forma computacionalmente eficiente e rápida de calcular o termo no espaço recíproco é fazer

$$F_{\parallel}(\vec{G}) = \sum_{i=1}^N (\vec{G} \cdot \vec{S}_i) [\cos(\vec{G} \cdot \vec{r}_i) + i \sin(\vec{G} \cdot \vec{r}_i)], \quad (3.31)$$

de modo que

$$F_{\parallel}(\vec{G})F_{\parallel}^*(\vec{G}) = \left[\sum_{i=1}^N (\vec{G} \cdot \vec{S}_i) \cos(\vec{G} \cdot \vec{r}_i) \right]^2 + \left[\sum_{i=1}^N (\vec{G} \cdot \vec{S}_i) \sin(\vec{G} \cdot \vec{r}_i) \right]^2, \quad (3.32)$$

e equivalentemente para $F_{\perp}(\vec{G})F_{\perp}^*(\vec{G})$. Outra prática que torna o código mais eficiente é tabelar os valores de $B(r)$, $C(r)$ e as demais funções erros, exponenciais, senos e cossenos que aparecem nas expressões da soma de Ewald, evitando desta forma o cálculo de funções que demandam muito tempo computacional.

4 Resultados

Este capítulo contém os resultados de nossas simulações. Na primeira seção apresentamos os resultados para o modelo de Heisenberg anisotrópico com interações dipolares (HA-d) num sistema composto por duas camadas interagentes onde foi usado um corte no cálculo das interações dipolares. Na seção 4.2 tratamos o modelo do rotor planar com interações dipolares (d-PR) onde as interações dipolares foram calculadas usando a soma de Ewald e finalmente na seção 4.3 serão apresentados os resultados para o modelo HA-d usando a soma de Ewald. Em todos os casos, os parâmetros do modelo (A e D) são dados em termos de J e as temperaturas em termos de JS^2/k_B .

4.1 O modelo HA-d num sistema de duas camadas usando corte na interação dipolar

O sistema estudado consiste em uma rede cúbica simples com dimensões $L \times L \times 2$, ou seja, duas redes quadradas de dimensões $L \times L$ sobrepostas e interagentes. Em cada sítio da rede definimos um spin $\vec{S}_i = S_i^x, S_i^y, S_i^z$ com módulo unitário. As interações são dadas pela Eq. (1.6):

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + D \sum_{i \neq j} \left[\frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{r_{ij}^3} - \frac{3(\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right] - A \sum_i (S_i^z)^2.$$

No cálculo das interações dipolares consideramos que apenas os sítios i e j para os quais $|\vec{r}_{ij}| \leq 5a$, onde a é o espaçamento de rede, interagem. Isto significa que desprezamos todas as interações para distâncias maiores. Para otimizar o cálculo da energia, todos os pares de spins interagentes foram tabelados no começo do programa em vetores, assim como os valores dos vetores unitários \hat{r}_{ij} e de $1/r_{ij}^3$. O ganho computacional proporcionado por este tipo de prática é imenso, e se tais técnicas não fossem empregadas dificilmente teríamos recursos computacionais para realizar este estudo. Condições periódicas de contorno foram aplicadas nas direções x e y , enquanto na direção do eixo z usamos condições de contorno abertas (a direção z foi considerada como sendo a direção perpendicular ao plano do filme).

Como dito anteriormente, utilizamos o algoritmo de Metropolis em nossas simulações. Em cada simulação os $100 \times L^2$ primeiros passos de Monte Carlo (MCS) foram descartados para efeito de termalização. Este número se mostrou suficiente mesmo nas proximidades do ponto crítico. As principais grandezas calculadas foram as seguintes[3]:

- Energia:

$$E = \langle H \rangle / N, \quad (4.1)$$

onde H é dado pela equação (1.6).

- Magnetização planar:

$$M_{xy} = \frac{1}{N} \langle m \rangle, \quad (4.2)$$

onde

$$m = \sqrt{\left(\sum_{i=1}^N S_i^x \right)^2 + \left(\sum_{i=1}^N S_i^y \right)^2} \quad (4.3)$$

- Magnetização fora do plano:

$$M_z = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N S_i^z \right\rangle \quad (4.4)$$

- Calor específico:

$$c_v = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B N T^2} \quad (4.5)$$

- Susceptibilidade planar:

$$\chi_{xy} = \frac{\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2}{k_B N T} \quad (4.6)$$

- Cumulante de Binder da magnetização planar:

$$U_4 = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3 \langle m^2 \rangle^2}. \quad (4.7)$$

- Os cumulantes de ordem superior dados pelas equações (2.14).

Para que possamos calcular o valor médio do calor específico, por exemplo, que depende do valor médio do quadrado da energia e do valor médio da energia, o número total de observações

(MCS) foi dividido em subconjuntos, ou feixes. Assim, em cada um destes feixes, calculamos $\langle E^2 \rangle$ e $\langle E \rangle$ e desta forma o valor do calor específico neste feixe é calculado. O valor médio do calor específico pode então ser obtido como uma média aritmética simples. Os erros estatísticos contidos nos valores médios de uma grandeza A , qualquer, foram calculados através da seguinte relação:

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{n-1} (\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2)}, \quad (4.8)$$

onde n é o número de observações utilizadas no cálculo do valor esperado de A (número de feixes).

Em todas simulações os valores de energia e magnetização, em cada passo de Monte Carlo, foram gravados em uma lista para que pudessem ser utilizados na construção de histogramas como descrito no capítulo anterior. Quando usamos histogramas, além das quantidades descritas acima, também calculamos as grandezas descritas nas equações (2.14), que são úteis na determinação do expoente ν e da temperatura crítica. Como teste para nosso código reproduzimos os resultados de Rapini *et al.* [32, 16] considerando o problema com apenas uma camada.

Em um conjunto preliminar de simulações exploramos o espaço de parâmetros para escolher os valores de D , sempre mantendo os valores de J e A fixos em 1, para os quais são observadas configurações planares. Percebemos neste conjunto de simulações um deslocamento das curvas no digrama de fases quando comparados com os resultados para o modelo bidimensional (figura 4.1). Outra mudança observada foi a presença de estruturas moduladas na fase

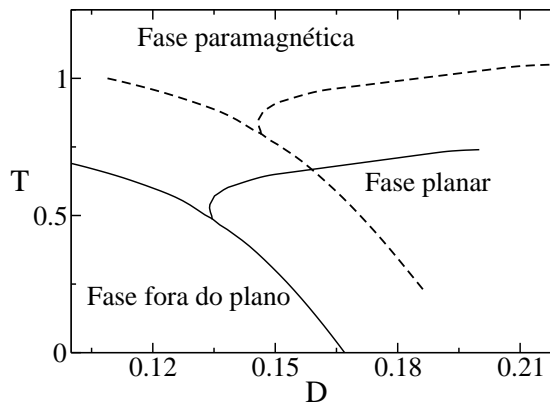


Figura 4.1: Representação esquemática do diagrama de fases para o sistema bicamada comparado com os resultados para o sistema bidimensional. A linha tracejada representa as linhas de fase do sistema bicamada enquanto a linha sólida representa as linhas do sistema bidimensional.

fora do plano no sistema bicamada como mostra a figura 4.2. Em simulações para o sistema bidimensional, utilizando um corte no cálculo das interações dipolares, tais estruturas não fo-

ram observadas para nenhum valor de D e para nenhuma temperatura dentre as mostradas no diagrama da figura 4.1. Tais estruturas são conhecidas na literatura como *stripes* e já foram encontradas em sistema bidimensionais usando a soma de Ewald (veja [21] e referências).

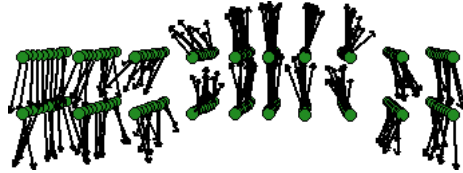


Figura 4.2: Esta figura mostra uma das configurações de equilíbrio obtida para o sistema bicamada para $L = 10$ e $T = 0.1$. Note que os spins apontam preferencialmente para fora do plano e que pode-se perceber a presença de listras com magnetização em sentidos opostos. A estas estruturas é dado o nome de *stripes*.

Baseados nestas simulações preliminares escolhemos $J = A = 1$ e $D = 0.3$, valores para os quais observamos apenas configurações planares em todo intervalo de temperatura empregado, de forma que analisaremos apenas a transição entre a fase planar e a fase paramagnética. Em um primeiro conjunto de simulações estudamos redes com $20 \leq L \leq 60$ utilizando o algoritmo de Metropolis. A intenção deste conjunto de simulações é o de estimar as temperaturas nas quais serão feitas simulações mais longas para a construção de histogramas. Nas figuras 4.3, 4.5, 4.6 e 4.7, mostramos os resultados para a magnetização planar, calor específico, susceptibilidade planar e cumulante de Binder da magnetização planar. Na figura 4.4 é mostrada a magnetização planar obtida por Rapini *et al.*[32]. Note que ao contrário do observado nesta figura, a magnetização para o sistema bicamada (fig. 4.3) não diminui significativamente, como esperado para um sistema BKT, à medida que o tamanho da rede é aumentado. Este é um indício que no sistema bicamada existe ordem de longo alcance a baixa temperatura. Poderia-se pensar em fazer um gráfico da magnetização em função de $1/L$ nos dois casos e verificar que no limite $L \rightarrow \infty$ nossos resultados convergem para um valor finito enquanto os de Rapini tendem a zero. No entanto, devemos nos lembrar que é esperado que a magnetização se comporte como $m \approx L^{-\beta/\nu} \mathcal{M}(tL^{1/\nu})$, de forma que deveríamos conhecer $\mathcal{M}(tL^{1/\nu})$ e os expoentes β e ν para fazer um estudo desta natureza.

De posse desses resultados um novo conjunto de simulações foi feito nas temperaturas onde estão localizados os máximos do calor específico e da susceptibilidade, $T_m^c(L)$ e $T_m^\chi(L)$, para $20 \leq L \leq 120$. Nesta fase de simulações pelo menos 2×10^7 configurações foram geradas em pelo menos 3 simulações distintas e utilizadas na construção de histogramas. Este procedimento tornou possível obter com maior precisão a localização e a altura dos máximos do calor específico e da susceptibilidade. Também foram feitas simulações em temperaturas

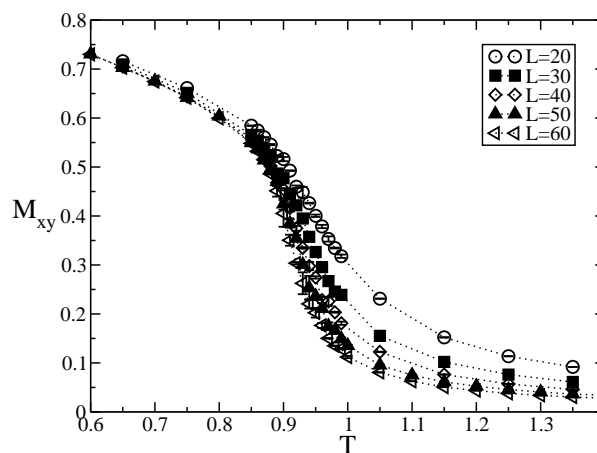


Figura 4.3: Magnetização planar como função da temperatura para $20 \leq L \leq 60$. Note que à medida que aumentamos o tamanho da rede a magnetização praticamente não se altera a baixas temperaturas.

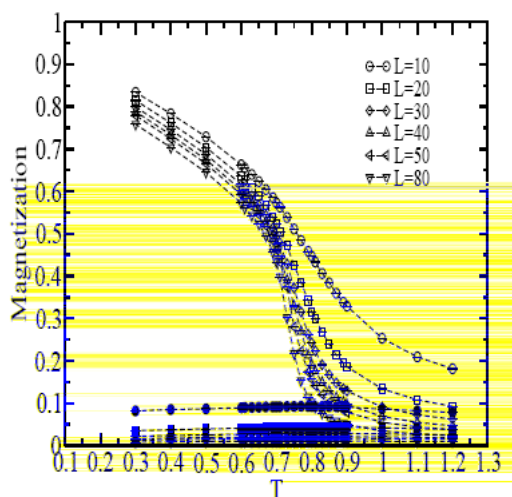


Figura 4.4: Magnetização planar, símbolos abertos, e fora do plano, símbolos fechados para o modelo HA-d em um sistema monocamada para $J = A = 1$ e $D = 0.2$. (Retirado de [32].)

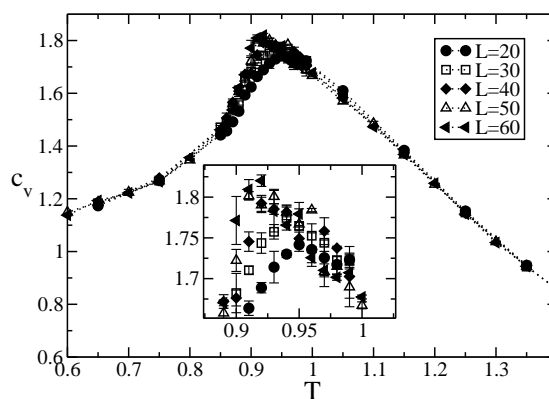


Figura 4.5: Calor específico como função da temperatura para $20 \leq L \leq 60$. No *inset* mostramos um *zoom* próximo ao máximo das curvas.

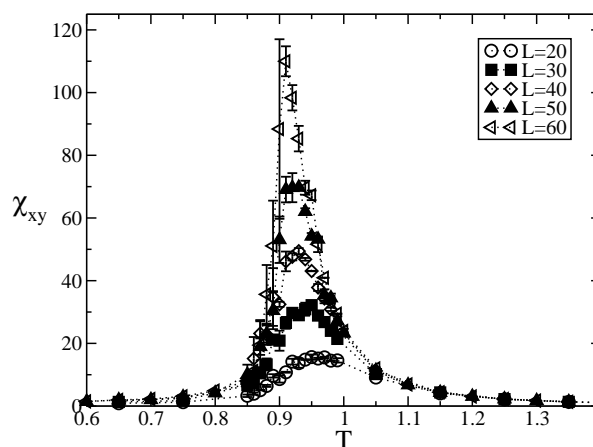


Figura 4.6: Susceptibilidade como função da temperatura para $20 \leq L \leq 60$. Ao contrário do calor específico neste caso podemos observar efeitos pronunciados quando o tamanho do sistema é aumentado.

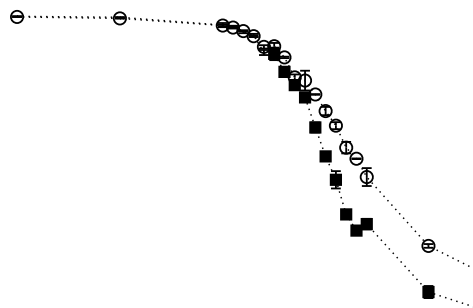


Figura 4.7: Cumulante de Binder como função da temperatura. O *inset* mostra um *zoom* na região onde há o cruzamento das curvas para diferentes tamanhos de rede.

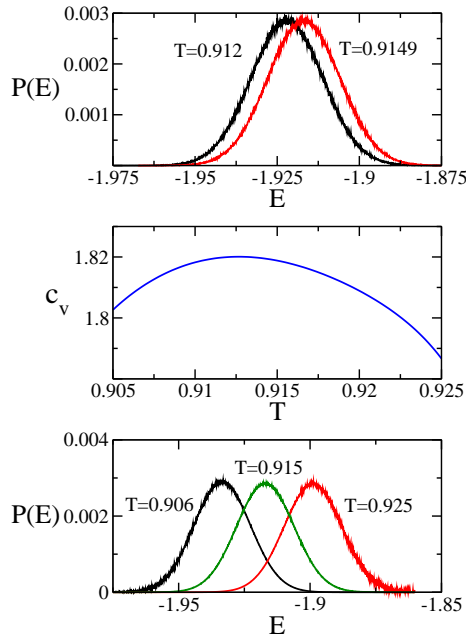


Figura 4.8: **Parte de cima:** Histograma normalizado obtido em duas simulações distintas feitas em $T = 0.912$ e $T = 0.9149$. Em cada simulação 10^7 configurações foram usadas para construir os histogramas. **Parte do meio:** Calor específico calculado usando a técnica de histogramas múltiplos. **Parte de baixo:** Distribuição de probabilidades da energia em $T = 0.906$, $T = 0.915$ e $T = 0.925$ obtidos usando a técnica de histogramas múltiplos.

próximas da temperatura na qual as curvas do cumulante de Binder se interceptam, ou seja, na primeira estimativa para a temperatura crítica. Na figura 4.8 exemplificamos o uso da técnica de histogramas. No topo desta figura, mostramos o histograma normalizado da energia, $P(E)$ em duas temperaturas próximas. Na parte do meio, é mostrada a curva de calor específico obtida pela técnica de histogramas múltiplos enquanto na parte de baixo mostramos as distribuições de probabilidades reconstruídas pela técnica de histogramas, $P(E)$, em três temperaturas distintas.

Na figura 4.9 mostramos em uma escala log-log a dependência do máximo da susceptibilidade (χ_{xy}^m) com o tamanho da rede L para $L = 20, 40, 60, 80$ e 120 . Note que os dados são bem descritos por uma lei de potência, fornecendo após um ajuste linear o expoente $\gamma/\nu = 1.71(2)$.

Na figura 4.10, mostramos a dependência do máximo do calor específico com o tamanho da rede. Note que este resultado é similar ao esperado para uma transição BKT, isto é, o calor específico cresce aproximando-se de um valor assintótico. Esta figura indica portanto a possibilidade do calor específico ser não divergente. Uma análise mais rigorosa, mostrada na figura 4.11 corrobora esta hipótese. Como pode ser visto na figura, uma divergência logarítmica não é capaz de descrever nossos dados em todo o intervalo de tamanhos de rede usados. Além disso, no gráfico externo (escala log-log), podemos perceber que a medida que desconsideramos

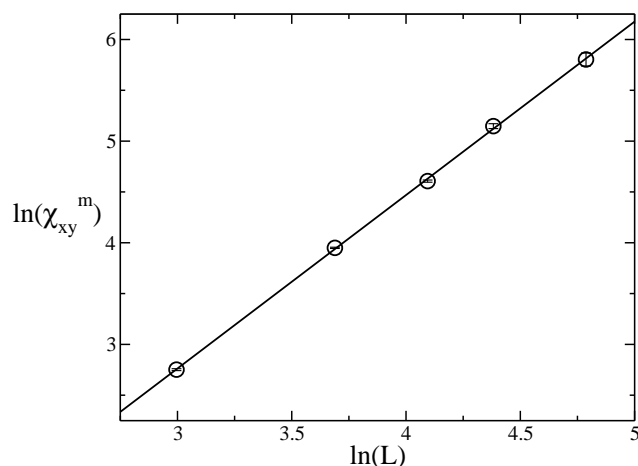


Figura 4.9: Gráfico em escala log-log da dependência do máximo da susceptibilidade planar com o tamanho da rede. A linha sólida representa o melhor ajuste linear, o que fornece o expoente $\gamma/\nu = 1.71(2)$.

os pontos para as redes menores, a inclinação da reta que representa um ajuste linear diminui, indicando portanto que no limite de redes muito grandes o calor específico tende a um valor constante. No *inset* da figura, mostramos os mesmos dados em uma escala semi-log. Note que o comportamento é similar àquele observado na escala log-log. De fato, como mostrado no capítulo 2, esperamos que o máximo do calor específico se comporte como $c_v^m = aL^{\alpha/\nu} + c_\infty$ numa transição de segunda ordem. Através de uma análise simples, poderíamos pensar que esta expressão contempla apenas divergências porém, podemos perceber que se o valor de a e o valor de α forem negativos teríamos uma saturação através de uma lei de potência do valor máximo do calor específico. Temos portanto, três possíveis comportamentos para o calor específico: (i) uma divergência por lei de potência ($\alpha > 0$ e $a > 0$); (ii) uma divergência logarítmica como na classe de universalidade do modelo de Ising ($\alpha = 0$); ou (iii) um comportamento por lei de potência onde o calor específico satura em um valor c_∞ ($\alpha < 0$ e $a < 0$). Na figura 4.10, mostramos um ajuste não linear considerando uma lei de potência não divergente (linha sólida) e uma divergência logarítmica (linha pontilhada). Observamos que os valores de χ^2 para estes ajustes são: 2.8×10^{-6} para a lei de potência não divergente e 2.4×10^{-5} para a divergência logarítmica. Também ajustamos uma lei de potência divergente aos nossos dados (não mostrado no gráfico) que fornece um ajuste ruim e um valor de χ^2 bem maior que os obtidos para a lei de potência não divergente e para a divergência logarítmica. Somos então levados a concluir que neste caso o calor específico comporta-se através de uma lei de potência não divergente. Obtivemos no ajuste mostrado $\alpha/\nu = -0.45(9)$.

Na figura 4.12 mostramos o cumulante de Binder obtido usando a técnica de histogramas múltiplos nas simulações feitas na região da temperatura crítica, estimada pelo cruzamento

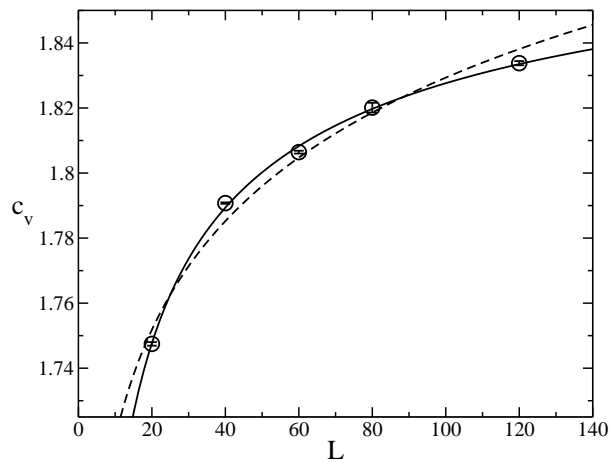


Figura 4.10: Máximo do calor específico como função do tamanho da rede para $L = 20, 40, 60, 80$ e 120 . A linha sólida representa o ajuste de uma lei de potência não divergente ($c_v^m = -aL^{-b} + c$ com a, b e c números reais positivos) enquanto a linha tracejada representa o ajuste de uma divergência logarítmica ($c_v^m = a \ln(L) + b$).

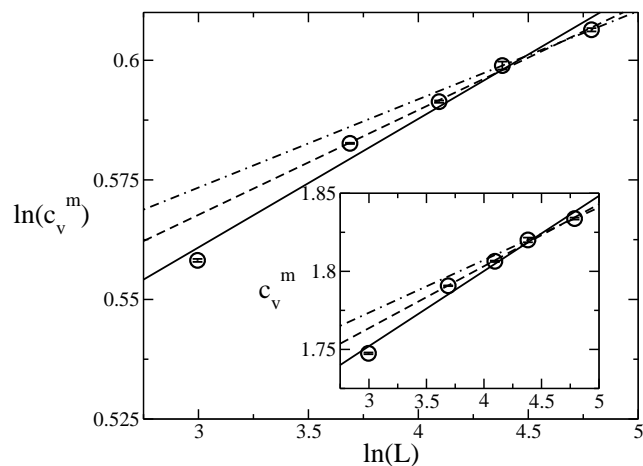


Figura 4.11: Gráfico log-log da dependência do calor específico com o tamanho da rede. A linha sólida representa um ajuste linear utilizando todos os tamanhos de rede enquanto a linha tracejada representa o ajuste ao desconsiderarmos o menor tamanho de rede $L = 20$ e a linha pontilhada e tracejada representa o melhor ajuste usando apenas $L = 80$ e 120 . O *inset* mostra os mesmos resultados em uma escala semi-log. Os símbolos e as linhas são os mesmos do gráfico exterior. Note que a inclinação das retas diminui à medida que as redes menores são excluídas. As barras de erro são mostradas dentro dos símbolos.

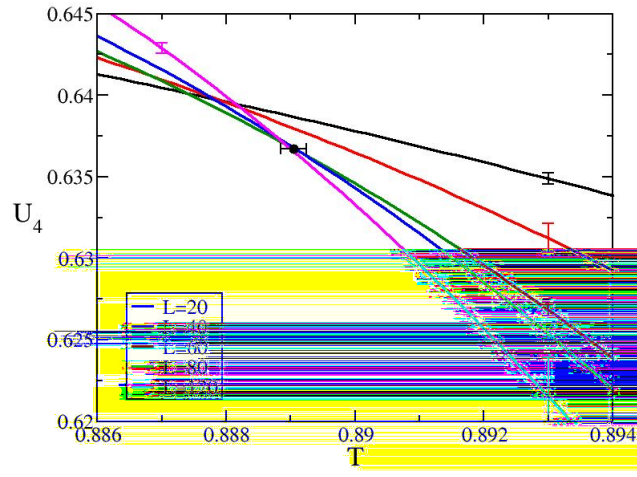


Figura 4.12: Cumulante de Binder obtido usando a técnica de histogramas múltiplos. O ponto representa a nossa estimativa para a temperatura crítica usando o cruzamento das curvas para as redes maiores. Apenas algumas barras de erro são mostradas por clareza.

das curvas do cumulante de Binder da figura 4.7. Com estes resultados é possível obter uma primeira estimativa precisa da temperatura crítica ao considerarmos o cruzamento das curvas. Usando este procedimento obtivemos $T_c^{U_4} = 0.889(2)$.

Usando os seis momentos da magnetização definidos nas equações (2.14) (V_j), é possível obter outra estimativa para a temperatura crítica e também uma estimativa para o expoente ν . Para tal, devemos verificar em qual temperatura as seis quantidades, quando *plotadas* como função de $\ln(L)$, apresentam um comportamento linear e que além disso todas tenham a mesma, ou aproximadamente a mesma, inclinação. Espera-se que a temperatura na qual tal fenômeno ocorra seja a temperatura crítica e que a inclinação da reta seja $1/\nu$. Na figura 4.13, mostramos os valores dos seis momentos V_j como função de $\ln(L)$ em $T = 0.8928$. Note que todas as quantidades têm aproximadamente a mesma inclinação. Na figura 4.14, mostramos as inclinações $1/\nu$ para cada uma das quantidades em algumas temperaturas. Usando este método obtivemos outra estimativa para temperatura crítica $T_c^{V_j} = 0.893(1)$ e uma estimativa para o expoente $\nu = 1.22(9)$.

Com o valor do expoente ν em mãos, podemos utilizar as temperaturas pseudo-críticas, obtidas pela localização da posição do máximo do calor específico ($T_c^{\epsilon_v}(L)$) e do máximo da susceptibilidade ($T_c^{\chi}(L)$) para uma rede de tamanho L , para obter uma nova estimativa da temperatura crítica. Este procedimento é feito ao *plotarmos* $T_c(L) \times L^{-1/\nu}$ e extrapolarmos para $L \rightarrow \infty$ ($x \rightarrow 0$ no gráfico). Na figura 4.15, mostramos os gráficos de $T_c(L) \times L^{-1/\nu}$. Usando este método, obtivemos duas novas estimativas para a temperatura crítica: $T_c^{\epsilon_v} = 0.890(3)$ e $T_c^{\chi} = 0.888(2)$. Nossa melhor estimativa para a temperatura crítica é portanto a médias das

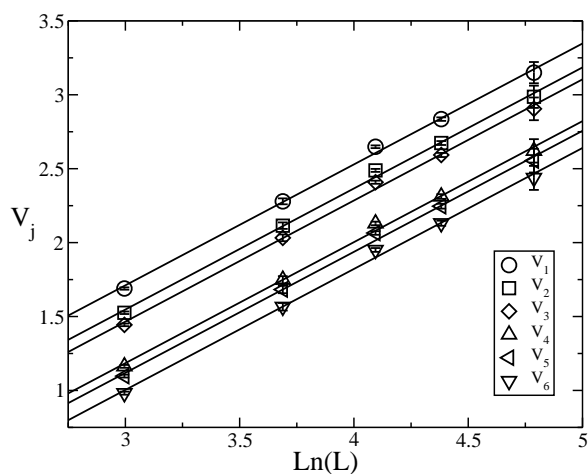


Figura 4.13: Momentos da magnetização (V_j) como função de $\ln(L)$ em $T = 0.8928$. Note que nesta temperatura as seis quantidades têm praticamente a mesma inclinação.

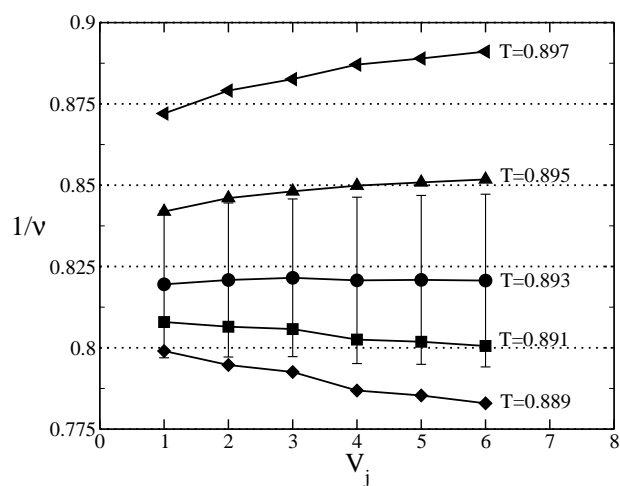


Figura 4.14: Nesta figura mostramos os valores de $1/v$, obtidos através de ajustes lineares das curvas $V_j \times \ln(L)$ para cada uma das seis quantidades j em algumas temperaturas próximas a $T = 0.893$.

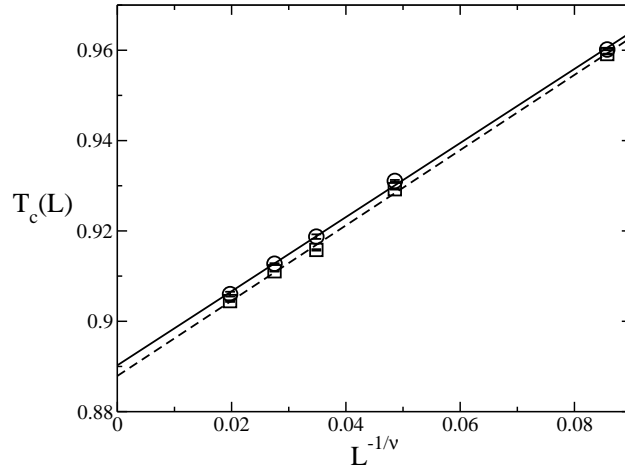


Figura 4.15: Temperatura pseudo-crítica como função de $L^{-1/\nu}$ para $1/\nu = 0.82$. Os círculos representam $T_c^{c_v}(L)$ e os quadrados $T_c^{\chi}(L)$. As linhas sólida e pontilhada são os melhores ajustes lineares para $T_c^{c_v}(L)$ e $T_c^{\chi}(L)$ respectivamente. Os pontos de intersecção são $T_c^{c_v} = 0.890(3)$ e $T_c^{\chi} = 0.888(2)$ para o calor específico e para a susceptibilidade respectivamente.

quatro estimativas anteriores: $T_c^{U_4}$, $T_c^{V_j}$, $T_c^{c_v}$ e T_c^{χ} , o que fornece $T_c = 0.890(4)$. Note que neste caso, a inclusão ou não do valor da temperatura crítica obtida usando a localização do máximo do calor específico, não altera nosso resultado para a temperatura crítica. Portanto, mesmo que o calor específico não seja uma grandeza crítica para este sistema, nossa melhor estimativa para a temperatura crítica continua sendo $T_c = 0.890(4)$.

De posse do valor da temperatura crítica é possível obter o expoente β ao *plotarmos* em uma escala log-log o valor da magnetização na temperatura crítica como função do tamanho do sistema. Na figura 4.16 mostramos tal gráfico, de onde obtivemos $\beta/\nu = 0.15(4)$.

Sumarizando, até o momento fomos capazes de obter a temperatura crítica $T_c = 0.890(4)$ e os expoentes críticos $\nu = 1.22(9)$, $\gamma = 2.1(2)$, $\beta = 0.18(5)$ e $\alpha = -0.55(15)$. Para verificar de forma “independente” a validade destes resultados, mostramos nas figuras 4.17, 4.18 e 4.19, gráficos de escala. Para entender tais figuras, basta lembrar que espera-se que a magnetização, a susceptibilidade e o cumulante de Binder se comportem da seguinte forma:

$$m \approx L^{-\beta/\nu} \mathcal{M}(tL^{1/\nu}), \quad (4.9)$$

$$\chi \approx L^{\gamma/\nu} \mathcal{X}(tL^{1/\nu}), \quad (4.10)$$

$$U_4 \approx \mathcal{U}_4(tL^{1/\nu}). \quad (4.11)$$

Como $\mathcal{M}(x)$, $\mathcal{X}(x)$ e $\mathcal{U}(x)$ são funções universais, espera-se que ao *plotar* $mL^{\beta/\nu} \times tL^{1/\nu}$,

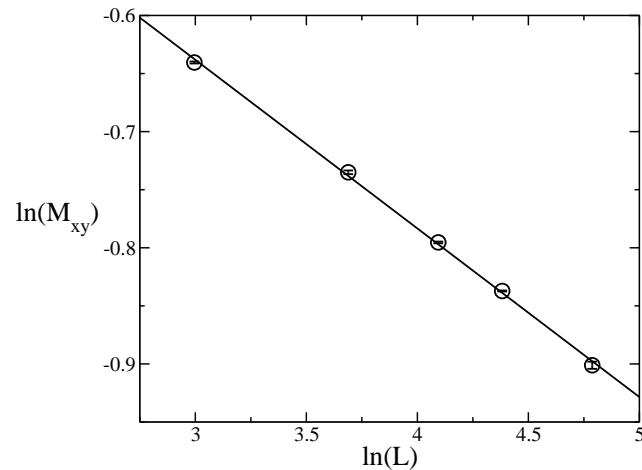


Figura 4.16: $\ln(M_{xy})$ versus $\ln(L)$ em $T = T_c$. A linha sólida representa o melhor ajuste linear e sua inclinação é $\beta/\nu = 0.15(4)$.

$\chi L^{-\gamma/\nu} \times t L^{1/\nu}$ e $U_4 \times t L^{1/\nu}$, as curvas para sistemas de diferentes tamanhos colapsem em uma única curva, que por sua vez representa as funções $\mathcal{M}(x)$, $\mathcal{X}(x)$ e $\mathcal{U}(x)$ se os valores corretos dos expoentes e da temperatura crítica são usados. Observe que nas figuras 4.17, 4.18 e 4.19, os resultados obtidos por simulações convencionais de Monte Carlo para $L = 20, 30, 40, 50$ e 60 , colapsam em uma única curva ao serem usados os valores obtidos anteriormente para a temperatura crítica e para os expoentes. Vale ressaltar que tais figuras foram feitas usando apenas os valores obtidos por outros métodos e que nenhum ajuste de expoentes e temperaturas foi usado para fazê-las.

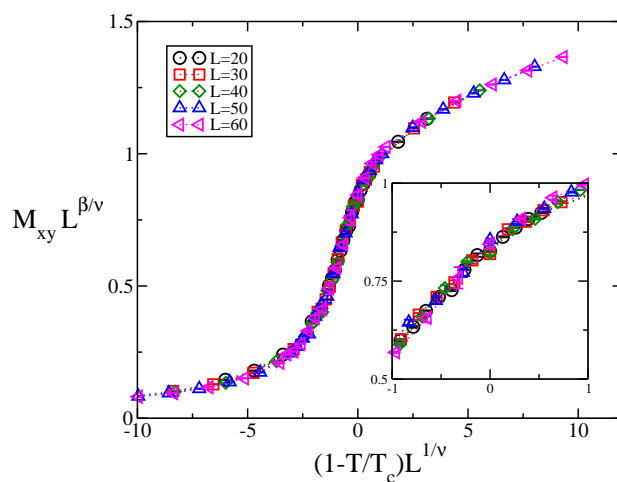


Figura 4.17: Gráfico de escala da magnetização feito usando $T_c = 0.890$, $1/\nu = 0.82$ e $\beta/\nu = 0.15$ (veja Eq. (2.12)). O *inset* mostra um zoom próximo a $T = T_c$. Note que as curvas para diferentes tamanhos de rede colapsam em uma única curva.

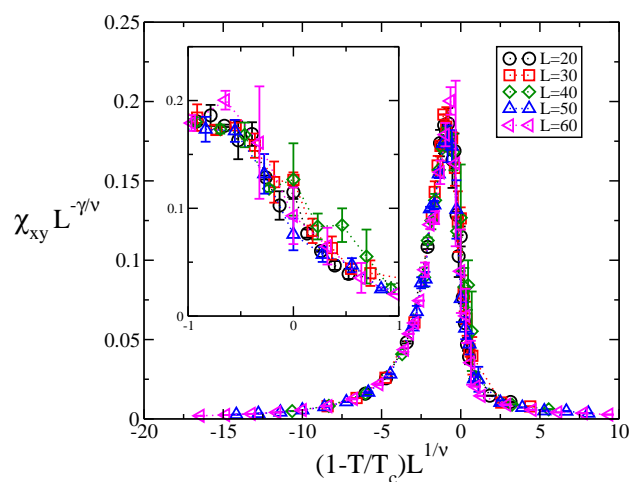


Figura 4.18: Gráfico de escala da susceptibilidade feito usando $T_c = 0.890$, $1/\nu = 0.82$ e $\gamma/\nu = 1.71$ (veja Eq. (2.12)). O *inset* mostra um zoom próximo a $T = T_c$. Note que as curvas para diferentes tamanhos de rede colapsam em uma única curva.

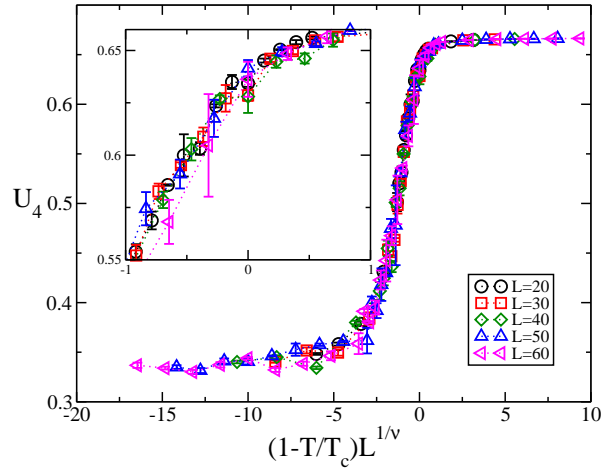


Figura 4.19: Gráfico de escala do cumulante de Binder feito usando $T_c = 0.890$ e $1/\nu = 0.82$ (veja Eq. (2.18)). O *inset* mostra um zoom próximo a $T = T_c$. Note que as curvas para diferentes tamanhos de rede colapsam em uma única curva.

4.2 O modelo do Rotor Planar com interações dipolares

Nesta seção serão apresentados os resultados para o modelo do Rotor Planar com interações dipolares (d-PR). O método de estudo foi o mesmo empregado para o modelo HA-d no sistema bicamada, e será esboçado de forma bem breve. Para mais detalhes, recomendamos a leitura da seção 4.1. Definimos uma rede quadrada com dimensões $L \times L$ e em cada sítio i da rede define-se um spin $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y)$ de módulo unitário. As interações são dadas pela Eq. (1.7):

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + D \sum_{i \neq j} \left[\frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{r_{ij}^3} - \frac{3(\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right].$$

Neste estudo, fixamos o valor de $J = 1$ e $D = 0.1$. Para estes valores dos parâmetros do modelo, apenas configurações ferromagnéticas foram observadas a baixa temperatura. Utilizamos o algoritmo de Metropolis, e as grandezas calculadas foram as mesmas do modelo HA-d bicamada (com exceção é claro da magnetização fora do plano). Como anteriormente, $100 \times L^2$ passos de Monte Carlo foram usados para levar o sistema ao equilíbrio.

Em um conjunto preliminar de simulações estudamos sistemas com $20 \leq L \leq 50$. Nas figuras 4.20, 4.21, 4.22 e 4.23, mostramos os resultados para a magnetização, calor específico, susceptibilidade e cumulante de Binder da magnetização. Não se observa um decréscimo significativo da magnetização ao aumentarmos o tamanho da rede, indicando a possível existência de ordem de longo alcance a baixas temperaturas. De fato, a existência de ordem de longo alcance neste sistema é esperada, como demonstrado por Maleev [18].

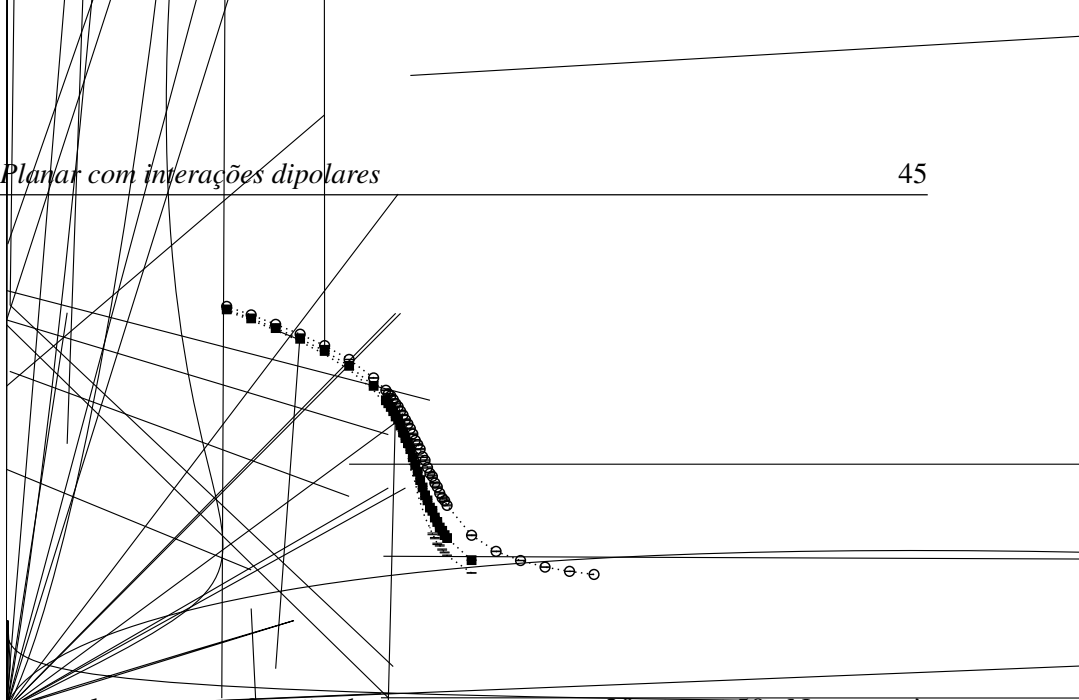


Figura 4.20: Magnetização planar como função da temperatura para $20 \leq L \leq 50$. Note que à medida que aumentamos o tamanho da rede a magnetização praticamente não se altera a baixas temperaturas.

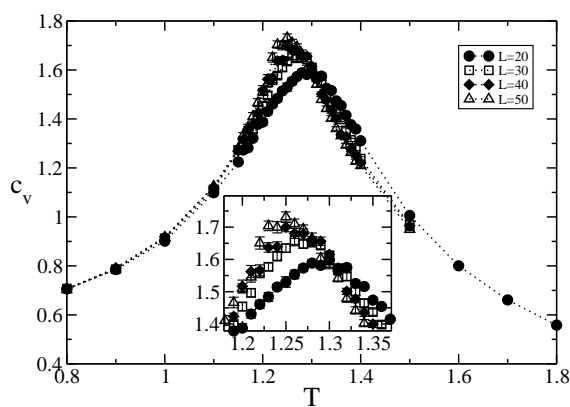


Figura 4.21: Calor específico como função da temperatura para $20 \leq L \leq 50$. O *inset* mostra um zoom próximo à região do máximo.

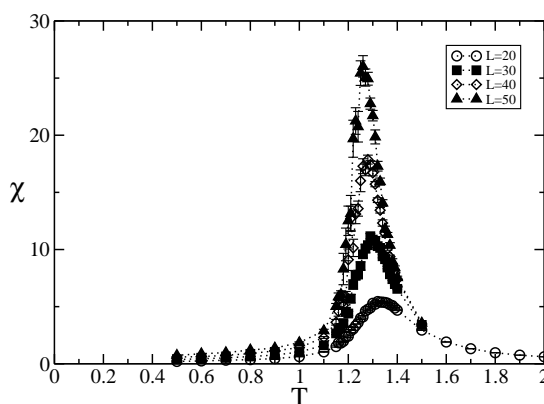


Figura 4.22: Susceptibilidade como função da temperatura para $20 \leq L \leq 50$. Ao contrário do calor específico neste caso podemos observar efeitos pronunciados quando o tamanho do sistema é aumentado.

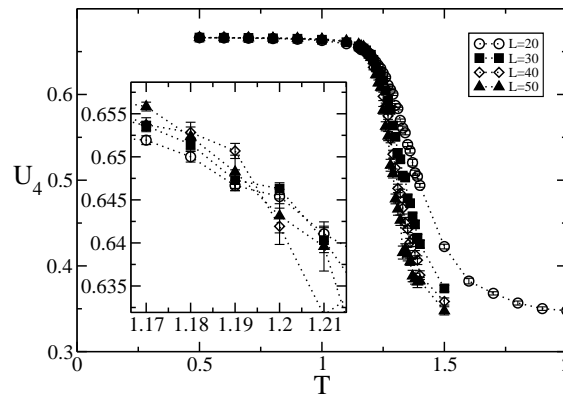


Figura 4.23: Cumulante de Binder como função da temperatura. O *inset* mostra um zoom na região onde há o cruzamento das curvas para diferentes tamanhos de rede.

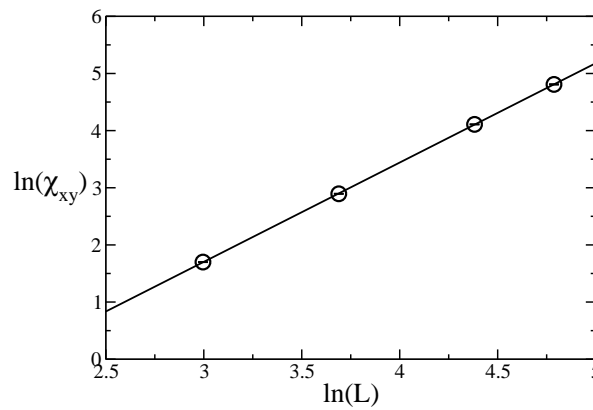


Figura 4.24: Gráfico em escala log-log da dependência do máximo da susceptibilidade planar com o tamanho da rede. A linha sólida representa o melhor ajuste linear, o que fornece o expoente $\gamma/\nu = 1.737(1)$.

De posse desses resultados um novo conjunto de simulações foi feito nas temperaturas onde estão localizados os máximos do calor específico e da susceptibilidade, $T_m^c(L)$ e $T_m^\chi(L)$, para $20 \leq L \leq 120$. Nesta fase de simulações pelo menos 2×10^7 configurações foram geradas em pelo menos 3 simulações distintas e então utilizadas na construção de histogramas. Este procedimento tornou possível obter com maior precisão a localização e a altura dos máximos do calor específico e da susceptibilidade. Também foram feitas simulações em temperaturas próximas da temperatura na qual as curvas do cumulante de Binder se interceptam, ou seja, na primeira estimativa para a temperatura crítica.

Na figura 4.24 mostramos em uma escala log-log a dependência do máximo da susceptibilidade (χ_{xy}^m) com o tamanho da rede L para $L = 20, 40, 80$ e 120 . Note que assim como no modelo HA-d bicamada, nossos dados são bem descritos por uma lei de potência, fornecendo após um ajuste linear o expoente $\gamma/\nu = 1.737(1)$ (muito próximo do valor $\gamma/\nu = 1.71(2)$ para

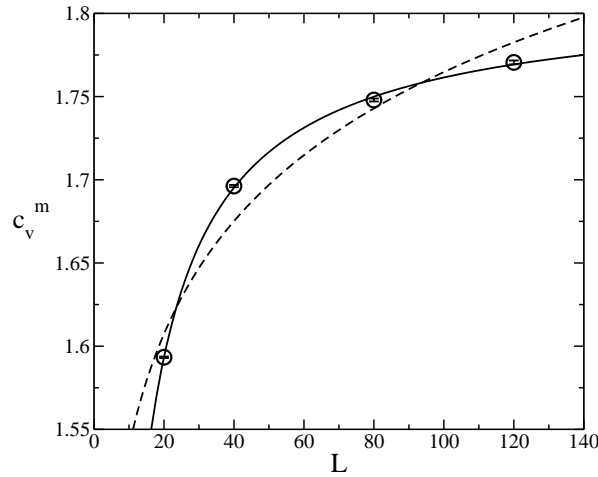


Figura 4.25: Máximo do calor específico como função do tamanho da rede para $L = 20, 40, 80$ e 120 . A linha sólida representa um ajuste de uma lei de potência não divergente e a linha tracejada um ajuste de uma divergência logarítmica.

o sistema bicamada).

Os resultados para o máximo do calor específico são mostrados nas figuras 4.25 e 4.26. O comportamento neste caso é muito semelhante ao obtido para o modelo HA-d bicamada, indicando novamente a possibilidade deste ser não divergente. Novamente, na figura 4.25, a linha sólida representa um ajuste por uma lei de potência não divergente enquanto a linha tracejada representa um ajuste por uma divergência logarítmica. Neste caso obtivemos $\chi^2 = 6.5 \times 10^{-6}$ para o ajuste de lei de potência não divergente e $\chi^2 = 4.1 \times 10^{-4}$ para o ajuste de uma divergência logarítmica. Neste caso obtivemos $\alpha/\nu = -0.89(9)$.

Na figura 4.27 mostramos o cumulante de Binder obtido usando a técnica de histogramas múltiplos nas simulações feitas na região da temperatura crítica, estimada pelo cruzamento das curvas do cumulante de Binder da figura 4.23. Com estes resultados é possível obter uma primeira estimativa precisa da temperatura crítica ao considerarmos o cruzamento das curvas do cumulante de Binder para as maiores redes. Usando este procedimento obtivemos $T_c^{U_4} = 1.203(1)$.

Usando os seis momentos da magnetização definidos nas equações (2.14) (V_j), obtivemos as seguintes estimativas para a temperatura crítica e para o expoente ν : $T_c^{V_j} = 1.2000(2)$ e $1/\nu = 0.783(2)$. Os dados utilizados para obter estas estimativas são mostrados nas figuras 4.28 e 4.29.

Com o valor do expoente ν em mãos, podemos utilizar as temperaturas pseudo-críticas, obtidas pela localização da posição do máximo do calor específico ($T_c^{c_v}(L)$) e do máximo da

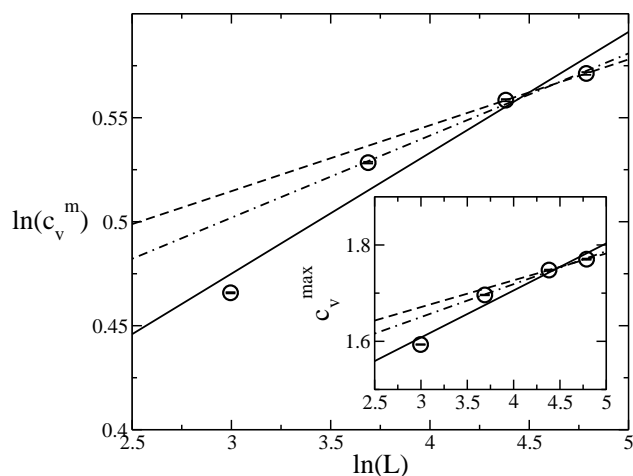


Figura 4.26: Gráfico log-log da dependência do calor específico com o tamanho da rede. A linha sólida representa um ajuste linear utilizando todos os tamanhos de rede enquanto a linha pontilhada e tracejada representa o ajuste ao desconsiderarmos o menor tamanho de rede $L = 20$ e a linha tracejada representa o melhor ajuste usando apenas $L = 80$ e 120 . O *inset* mostra os mesmos resultados em uma escala semi-log. Os símbolos e as linhas são os mesmos do gráfico exterior. Note que a inclinação das retas diminui à medida que as redes menores são excluídas. As barras de erro são mostradas dentro dos símbolos.

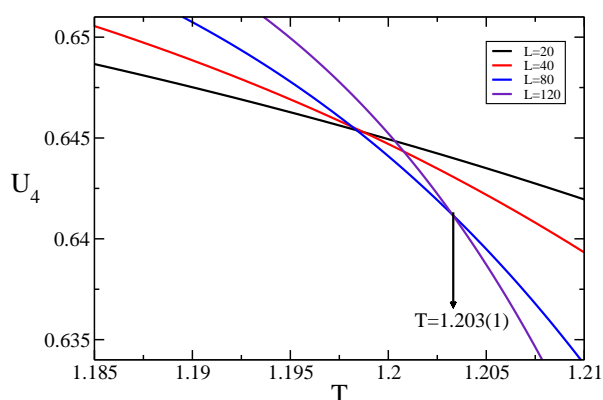


Figura 4.27: Cumulante de Binder obtido usando a técnica de histogramas múltiplos. A estimativa para a temperatura crítica usando o cruzamento das curvas para as redes maiores está mostrada na figura.

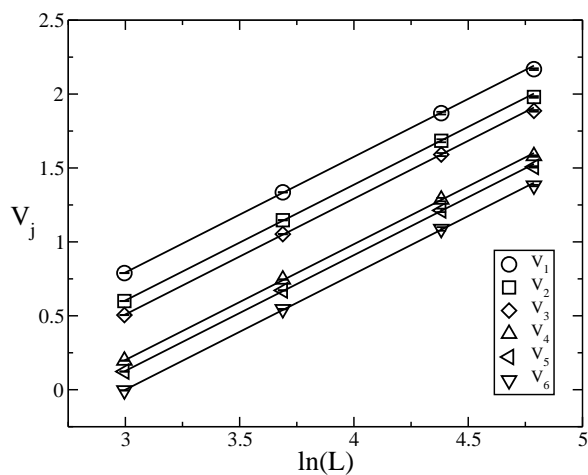


Figura 4.28: Momentos da magnetização (V_j) como função de $\ln(L)$ em $T = 1.2000$. Note que nesta temperatura as seis quantidades têm praticamente a mesma inclinação.

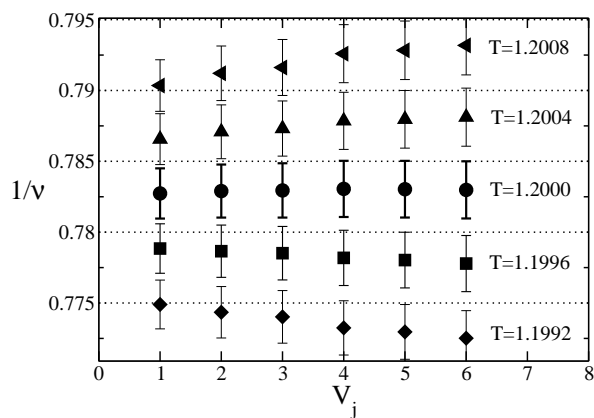


Figura 4.29: Nesta figura mostramos os valores de $1/v$, obtidos através de ajustes lineares das curvas $V_j \times \ln(L)$ para cada uma das seis quantidades j em algumas temperaturas próximas a $T = 1.2000$.

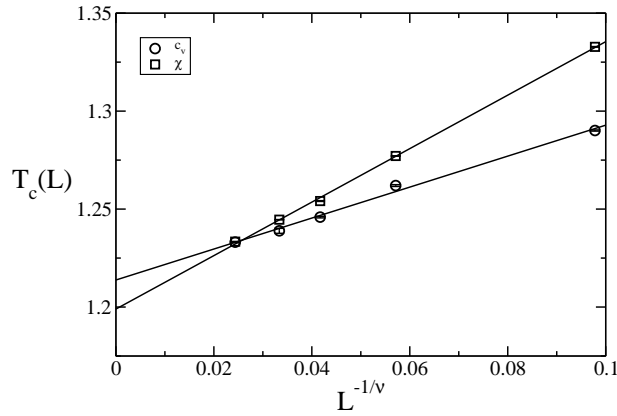


Figura 4.30: Temperatura pseudo-crítica como função de $L^{-1/\nu}$ para $1/\nu = 0.783$. Os círculos representam $T_c^{c_v}(L)$ e os quadrados $T_c^{\chi}(L)$. As linhas sólida e pontilhada são os melhores ajustes lineares para $T_c^{c_v}(L)$ e $T_c^{\chi}(L)$ respectivamente. Os pontos de intersecção são $T_c^{c_v} = 1.2150(3)$ e $T_c^{\chi} = 1.20022(9)$ para o calor específico e para a susceptibilidade respectivamente.

susceptibilidade ($T_c^{\chi}(L)$) para uma rede de tamanho L , para obter uma nova estimativa da temperatura crítica. Na figura 4.30, mostramos os gráficos de $T_c(L) \times L^{-1/\nu}$. Usando este método, obtivemos duas novas estimativas para a temperatura crítica: $T_c^{c_v} = 1.2150(3)$ e $T_c^{\chi} = 1.20022(9)$. Note que a estimativa da temperatura crítica obtida através da localização do máximo do calor específico está claramente acima das estimativas obtidas usando as outras quantidades. Considerando que o calor específico é não divergente, como indica a análise do valor máximo, pode-se argumentar que esta grandeza é não-crítica e portanto, a estimativa da temperatura crítica obtida pela localização do seu máximo não corresponde à temperatura crítica do sistema (como no caso BKT). Baseados nisto, calculamos a temperatura crítica como sendo a média das estimativas obtidas pela localização do máximo da susceptibilidade, pelos momentos da magnetização e pelo cruzamento das curvas do cumulante de Binder. Nossa estimativa é portanto $T_c = 1.201(1)$.

De posse do valor da temperatura crítica é possível obter o expoente β ao *plotarmos* em uma escala log-log o valor da magnetização na temperatura crítica como função do tamanho do sistema. Na figura 4.31 mostramos tal gráfico, de onde obtivemos o seguinte valor $\beta/\nu = 0.1617(2)$.

Em suma, obtivemos a temperatura crítica $T_c = 1.201(1)$ e os expoentes críticos $\nu = 1.277(2)$, $\gamma = 2.218(5)$, $\beta = 0.2065(4)$ e $\alpha = -1.1(1)$. Para verificar de forma “independente” a validade destes resultados, mostramos nas figuras 4.32, 4.33 e 4.34, gráficos de escala para a magnetização, a susceptibilidade e o cumulante de Binder. Observe que nas figuras 4.32, 4.33 e 4.34, os resultados obtidos por simulações convencionais de Monte Carlo para $L = 20, 30, 40$ e 50, colapsam em uma única curva ao serem usados os valores obtidos anteriormente para a

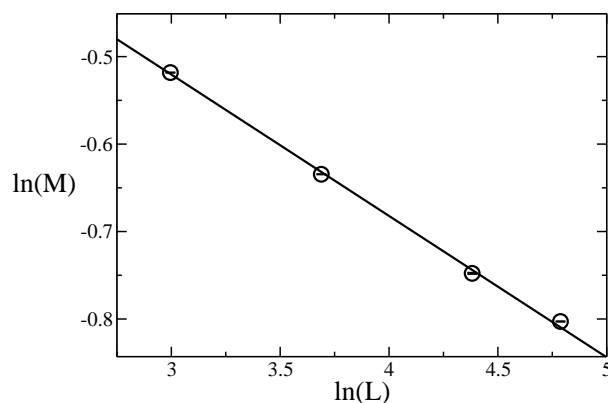


Figura 4.31: $\ln(M_{xy})$ versus $\ln(L)$ em $T = T_c$. A linha sólida representa o melhor ajuste linear e sua inclinação é $\beta/\nu = 0.1617(2)$.

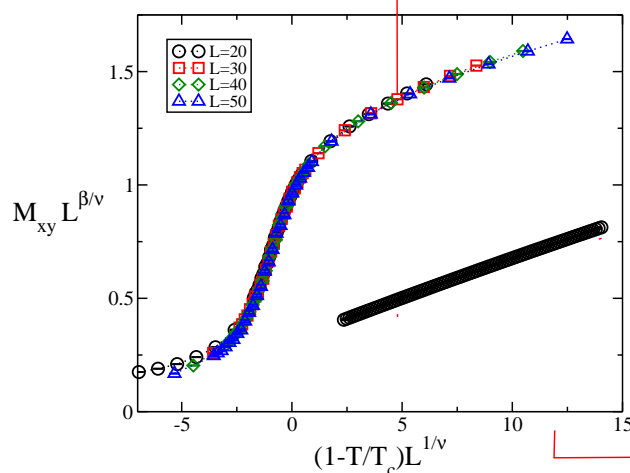


Figura 4.32: Gráfico de escala da magnetização feito usando $T_c = 1.201$, $1/\nu = 0.783$ e $\beta/\nu = 0.1617$ (veja Eq. (2.12)). No *inset* mostramos o mesmo gráfico de escala, porém usando os resultados de histogramas feitos em temperaturas próximas à temperatura crítica para $20 \leq L \leq 120$. Note que as curvas para diferentes tamanhos de rede colapsam em uma única curva.

temperatura crítica e para os expoentes. No *inset* das mesmas figuras, mostramos os gráficos de escala obtidos com os resultados obtidos por histogramas feitos próximos à temperatura crítica para $L = 20, 40, 80$ e 120 . Vale ressaltar que tais figuras foram feitas usando apenas os valores obtidos por outros métodos e que nenhum ajuste de expoentes e temperaturas foi usado para fazê-las.

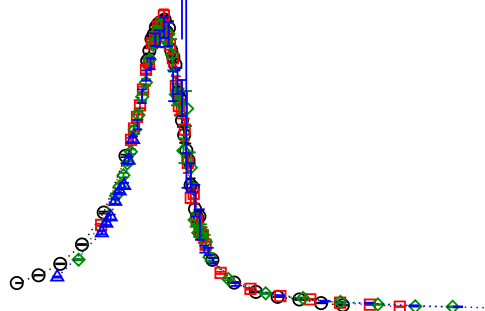


Figura 4.33: Gráfico de escala da susceptibilidade feito usando $T_c = 1.201$, $1/\nu = 0.783$ e $\gamma/\nu = 1.737$ (veja Eq. (2.12)). No *inset* mostramos o mesmo gráfico de escala, porém usando os resultados de histogramas feitos em temperaturas próximas à temperatura crítica para $20 \leq L \leq 120$. Note que as curvas para diferentes tamanhos de rede colapsam em uma única curva.

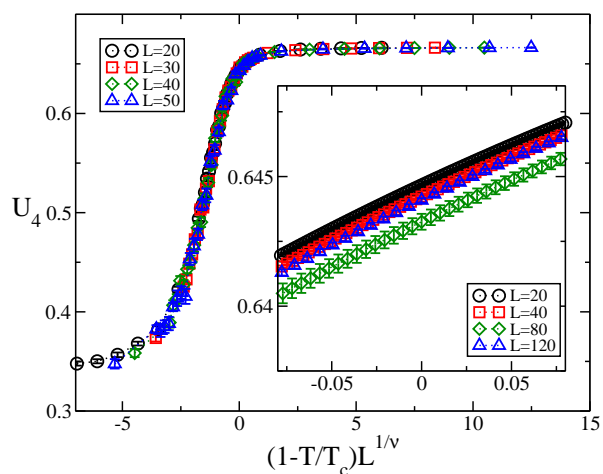


Figura 4.34: Gráfico de escala do cumulante de Binder feito usando $T_c = 1.201$ e $1/\nu = 0.783$ (veja Eq. (2.18)). No *inset* mostramos o mesmo gráfico de escala, porém usando os resultados de histogramas feitos em temperaturas próximas à temperatura crítica para $20 \leq L \leq 120$. Note que as curvas para diferentes tamanhos de rede colapsam em uma única curva.

4.3 O modelo HA-d numa rede quadrada usando a soma de Ewald

Nesta seção iremos apresentar os resultados para o modelo de Heisenberg anisotrópico com interações dipolares (HA-d) em uma rede quadrada usando a soma de Ewald para calcular as interações dipolares. Novamente, utilizamos o mesmo método de estudo usado para o sistema bicamada e para o modelo d-PR.

Em um conjunto preliminar de simulações exploramos o espaço de parâmetros para escolher os valores de D , sempre mantendo os valores de J e A fixos em 1, para os quais são observadas configurações planares. Percebemos neste conjunto de simulações um deslocamento das curvas no digrama de fases, ao comparadas com os resultados de Rapini *et al.*[32], como mostrado esquematicamente na figura 4.35. Assim como observado no sistema bicamada, neste

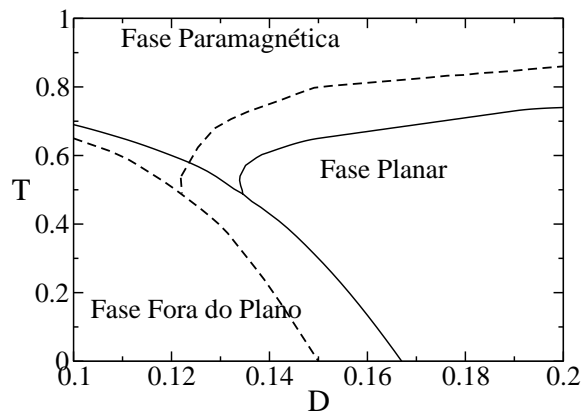


Figura 4.35: Representação esquemática do diagrama de fases para o modelo HA-d usando a soma de Ewald (curva tracejada) comparado com os resultados de Rapini *et al.*[32] (curva sólida), onde foi usado um corte no cálculo das interações dipolares.

caso observamos a presença de stripes na fase fora do plano. Vale lembrar que nas simulações do mesmo sistema utilizando um corte no cálculo das interações dipolares, tais estruturas não foram observadas para nenhum valor de D e para nenhuma temperatura dentre as mostradas no diagrama da figura 4.35.

Baseados nestas simulações preliminares escolhemos $J = A = 1$ e $D = 0.3$, valores para os quais observamos apenas configurações planares em todo intervalo de temperatura empregado, de forma que analisaremos apenas a transição entre a fase planar e a fase paramagnética. De fato, realizamos também simulações para $D = 0.2$ e observamos que os resultados são qualitativamente os mesmos obtidos para $D = 0.3$. A escolha de $D = 0.3$ para simulações mais extensas foi feita para permitir uma comparação melhor com os resultados do sistema bicamada. Em

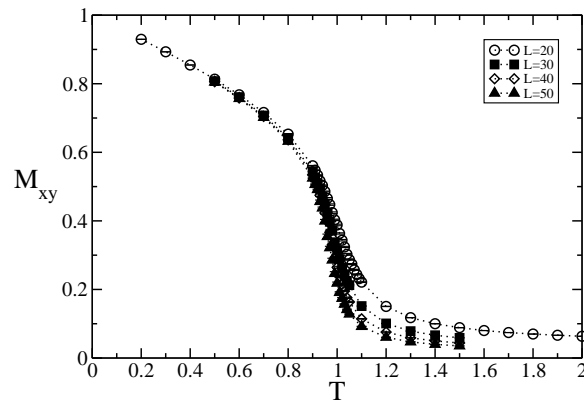


Figura 4.36: Magnetização planar como função da temperatura para $20 \leq L \leq 50$. Note que à medida que aumentamos o tamanho da rede a magnetização praticamente não se altera a baixas temperaturas.

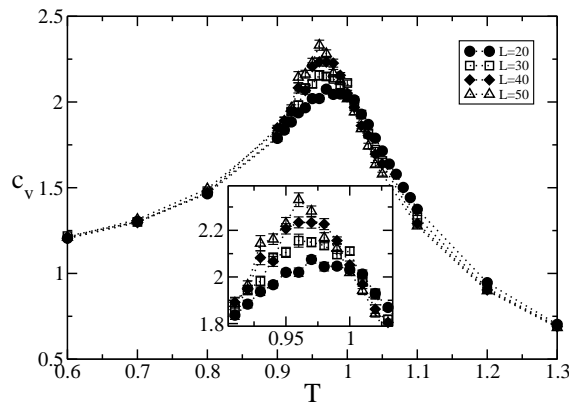


Figura 4.37: Calor específico como função da temperatura para $20 \leq L \leq 50$. O *inset* mostra um zoom próximo à região do máximo.

um primeiro conjunto de simulações estudamos redes com $20 \leq L \leq 50$ utilizando o algoritmo de Metropolis. A intenção deste conjunto de simulações é o de determinar as temperaturas nas quais serão feitas simulações mais longas para a construção de histogramas. Nas figuras 4.36, 4.37, 4.38 e 4.39, mostramos os resultados para a magnetização planar, calor específico, susceptibilidade planar e cumulante de Binder da magnetização planar. Note que ao contrário do observado para o sistema com um corte nas interações dipolares (figura 4.4), não observamos para o sistema com a soma de Ewald um decréscimo significativo das curvas da magnetização planar à medida que aumentamos o tamanho da rede. Este é um indicio que ao considerarmos de forma adequada as interações dipolares, a ordem de longo alcance a baixa temperatura é restabelecida, como previsto por Maleev [18].

De posse desses resultados um novo conjunto de simulações foi feito nas temperaturas onde estão localizados os máximos do calor específico e da susceptibilidade, $T_m^c(L)$ e $T_m^\chi(L)$,

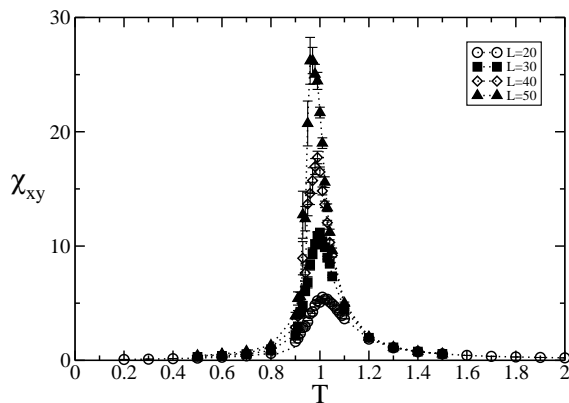


Figura 4.38: Susceptibilidade como função da temperatura para $20 \leq L \leq 50$. Ao contrário do calor específico neste caso podemos observar efeitos pronunciados quando o tamanho do sistema é aumentado.

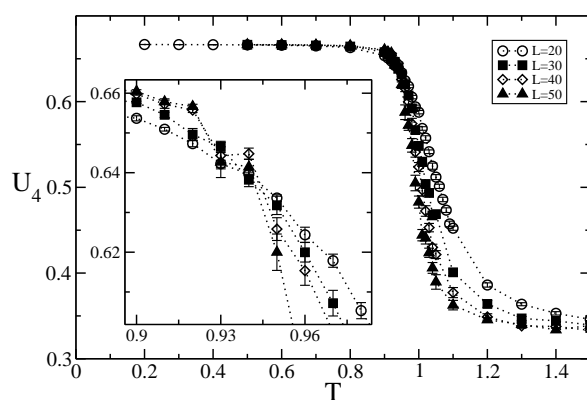


Figura 4.39: Cumulante de Binder como função da temperatura. O *inset* mostra um zoom na região onde há o cruzamento das curvas para diferentes tamanhos de rede.

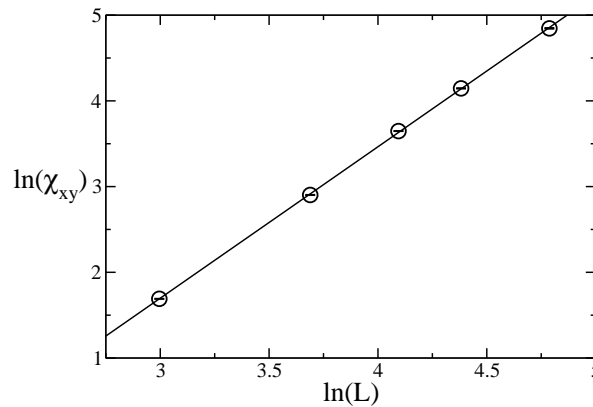


Figura 4.40: Gráfico em escala log-log da dependência do máximo da susceptibilidade planar com o tamanho da rede. A linha sólida representa o melhor ajuste linear, o que fornece o expoente $\gamma/\nu = 1.763(1)$.

para $20 \leq L \leq 120$. Nesta fase de simulações pelo menos 2×10^7 configurações foram geradas em pelo menos 3 simulações distintas e então utilizadas na construção de histogramas. Este procedimento tornou possível obter com maior precisão a localização e a altura dos máximos do calor específico e da susceptibilidade. Também foram feitas simulações em temperaturas próximas da temperatura na qual as curvas do cumulante de Binder se interceptam, ou seja, na primeira estimativa para a temperatura crítica.

Na figura 4.40 mostramos em uma escala log-log a dependência do máximo da susceptibilidade (χ_{xy}^m) com o tamanho da rede, L , para $L = 20, 40, 80$ e 120 . Note que os dados são bem descritos por uma lei de potência, fornecendo após um ajuste linear o expoente $\gamma/\nu = 1.763(1)$, valor este muito próximo do esperado para a classe de universalidade do modelo de Ising.

Para uma transição de fase na classe de universalidade do modelo de Ising, espera-se que o máximo do calor específico divirja logaritmicamente. Portanto, neste tipo de transição esperamos que ao *plotar* o máximo do calor específico como uma função do logaritmo do tamanho da rede tenhamos um comportamento linear. Na figura 4.41 mostramos, em uma escala semilogarítmica, o valor máximo do calor específico como função do tamanho do sistema. Se desconsiderarmos o ponto correspondente à menor rede obtemos um comportamento linear, consistente com a classe de universalidade do modelo de Ising.

Na figura 4.42 mostramos o cumulante de Binder obtido usando a técnica de histogramas múltiplos nas simulações feitas na região da temperatura crítica, estimada pelo cruzamento das curvas do cumulante de Binder da figura 4.39. Com estes resultados é possível obter uma primeira estimativa precisa da temperatura crítica ao considerarmos o cruzamento das curvas do cumulante de Binder para as maiores redes. Usando este procedimento obtivemos $T_c^{U_4} =$

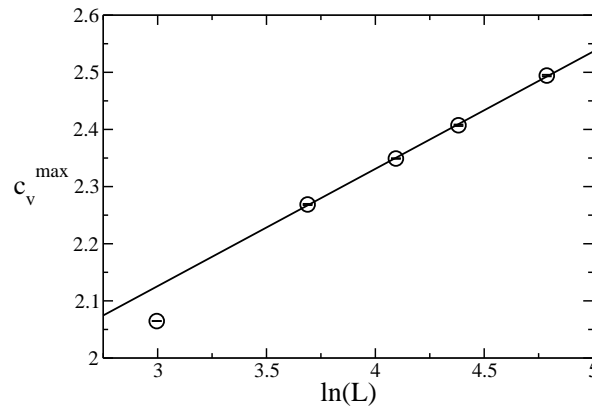


Figura 4.41: Gráfico em escala semilogarítmica da dependência do calor específico com o tamanho da rede. A linha sólida representa um ajuste linear descartando o ponto correspondente à rede com $L = 20$, indicando um comportamento consistente com a classe de universalidade do modelo de Ising. As barras de erro são mostradas dentro dos símbolos.

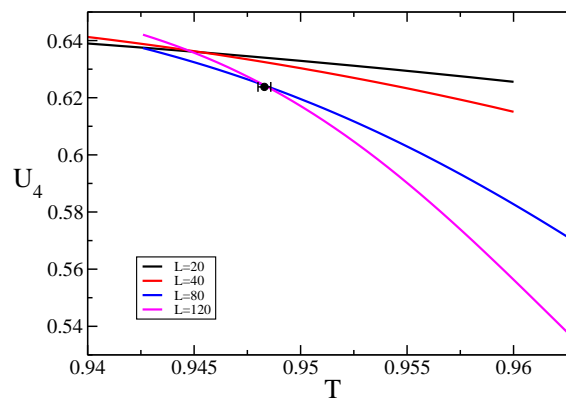


Figura 4.42: Cumulante de Binder obtido usando a técnica de histogramas múltiplos. O ponto representa a nossa estimativa para a temperatura crítica usando o cruzamento das curvas para as redes maiores.

0.9483(7).

Os resultados apresentados acima, são consistentes com uma transição de fase na classe de universalidade do modelo de Ising. Para corroborar esta hipótese, mostramos na figura 4.43 um gráfico da temperatura pseudo-crítica, obtida pela localização do máximo do calor específico e da susceptibilidade, como uma função de L^{-1} , já que para a classe de universalidade do modelo de Ising esperamos $\nu = 1$. Através de ajustes lineares, desprezando o ponto correspondente a $L = 20$, obtivemos duas novas estimativas para a temperatura crítica: $T_c^{\nu} = 0.9471(16)$ e $T_c^{\chi} = 0.9481(2)$.

Podemos então estimar o valor da temperatura crítica como a média dos valores obtidos até o momento. Obtemos então $T_c = 0.948(1)$. Usando este valor para a temperatura crítica,

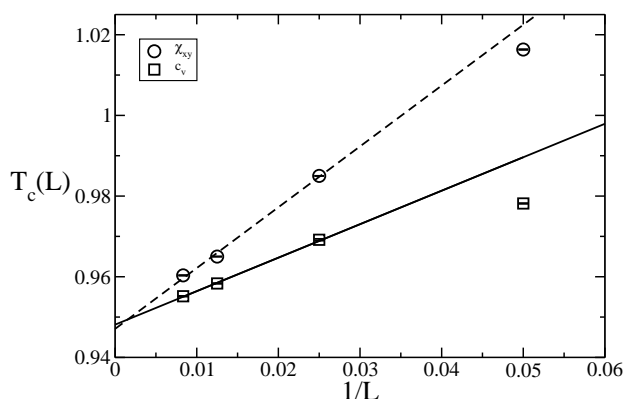


Figura 4.43: Temperatura pseudo-crítica como função de $L^{-1/\nu}$ para $1/\nu = 1$. Os círculos representam $T_c^\chi(L)$ e os quadrados $T_c^{c_v}(L)$. As linhas tracejada e sólida são os melhores ajustes lineares para $T_c^\chi(L)$ e $T_c^{c_v}(L)$ respectivamente. Os pontos de intersecção são $T_c^{c_v} = 0.9471(16)$ e $T_c^\chi = 0.9481(2)$ para o calor específico e para a susceptibilidade respectivamente.

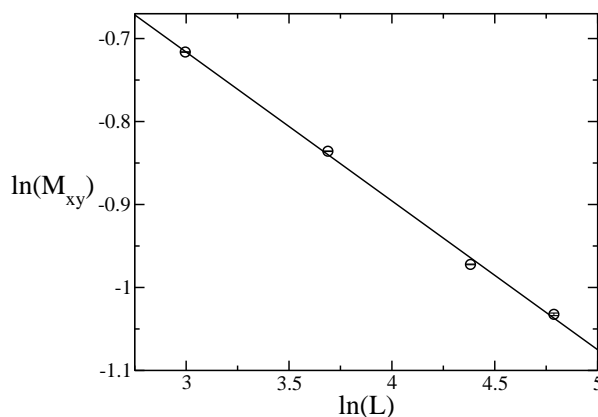


Figura 4.44: $\ln(M_{xy})$ versus $\ln(L)$ em $T = T_c = 0.948$. A linha sólida representa o melhor ajuste linear e sua inclinação é $\beta/\nu = 0.179(5)$.

podemos *plotar* $\ln(M_{xy}) \times \ln(L)$ para obter o expoente β . Tal gráfico é mostrado na figura 4.44, e após um ajuste linear fornece o valor de $\beta/\nu = 0.179(5)$. Observe que este valor é distinto do esperado para a classe de universalidade do modelo de Ising $\beta/\nu = 0.125$.

Ao usar os momentos da magnetização definidos nas equações (2.14) (V_j), obtivemos $1/\nu = 0.817(2)$ e $T_c^{V_j} = 0.9430(3)$. Os gráficos usados na determinação destes valores são mostrados nas figuras 4.45 e 4.46. Note que neste caso, o expoente ν também é distinto do esperado para a classe de universalidade do modelo de Ising, apesar do valor da temperatura crítica ser bem próximo dos obtidos anteriormente. O valor de ν , está mais próximo dos obtidos anteriormente para o sistema bicamada e para o modelo d-PR. Ao usar este valor do expoente ν na análise das temperaturas pseudo-críticas obtidas pela localização dos máximos do calor específico e da susceptibilidade, como mostrado na figura 4.47, obtivemos os seguintes

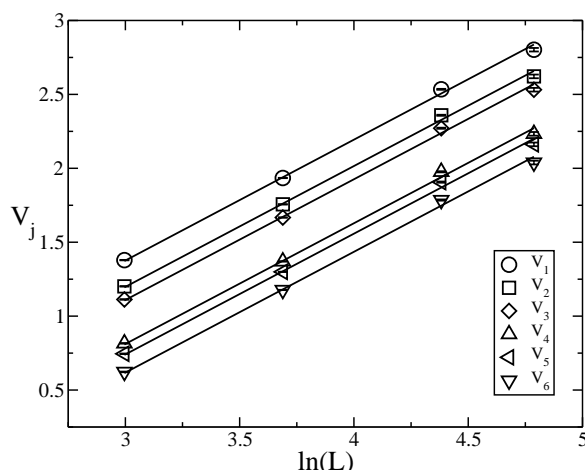


Figura 4.45: Momentos da magnetização (V_j) como função de $\ln(L)$ em $T = 0.9430$. Note que nesta temperatura as seis quantidades têm praticamente a mesma inclinação.

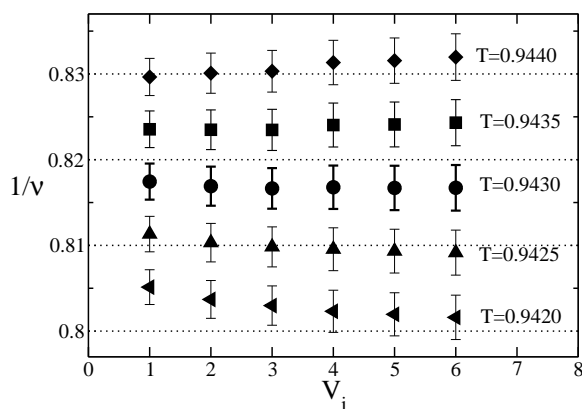


Figura 4.46: Nesta figura mostramos os valores de $1/\nu$, obtidos através de ajustes lineares das curvas $V_j \times \ln(L)$ para cada uma das seis quantidades j em algumas temperaturas próximas a $T = 0.9430(3)$.

resultados para a temperatura crítica, $T_c^v = 0.9451(7)$ e $T_c^\chi = 0.942(1)$ ao usar os resultados para o calor específico e para a susceptibilidade respectivamente. Vale ressaltar que na análise dos resultados para o calor específico desprezamos o ponto correspondente a $L = 20$.

Desta forma, ao considerar $1/\nu = 0.817$, temos como nossa estimativa da temperatura crítica, $T_c = 0.945(2)$ (devido aos erros presentes em nossas estimativas, a inclusão ou não da temperatura crítica obtida através da análise do calor específico não altera este valor). O valor obtido concorda com o obtido anteriormente considerando a classe de universalidade do modelo de Ising dentro das barras de erro. Analisando o comportamento da magnetização nesta temperatura, obtivemos $\beta/\nu = 0.156(7)$. Na tabela 4.1 mostramos os resultados obtidos até o momento e os expoentes esperados para a classe de universalidade do modelo de Ising e os

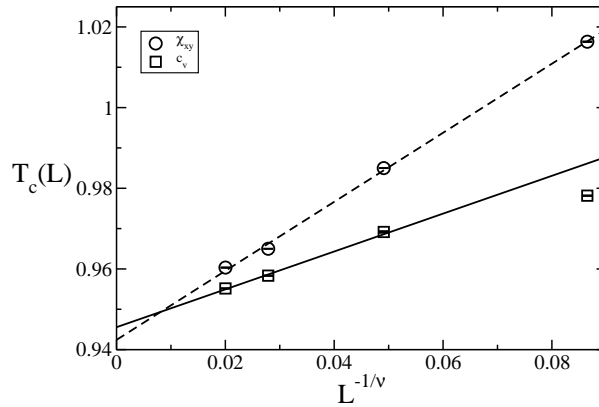


Figura 4.47: Temperatura pseudo-crítica como função de $L^{-1/\nu}$ para $1/\nu = 0.817$. Os círculos representam $T_c^\chi(L)$ e os quadrados $T_c^{c_v}(L)$. As linhas tracejada e sólida são os melhores ajustes lineares para $T_c^\chi(L)$ e $T_c^{c_v}(L)$ respectivamente. Os pontos de intersecção são $T_c^{c_v} = 0.9456(2)$ e $T_c^\chi = 0.9424(12)$ para o calor específico e para a susceptibilidade respectivamente.

Modelo	T_c	ν	γ	β	α
Ising	2.269	1	1.75	0.125	0 (ln)
Maier			1	1/2	-2
HA-d (bicamada)	0.890(4)	1.22(9)	2.1(2)	0.18(5)	-0.55(15)
d-PR	1.201(1)	1.277(2)	2.218(5)	0.2065(4)	-1.1(1)
HA-d	0.945(2)	1.224(1)	2.158(4)	0.191(9)	-0.44(17)

Tabela 4.1: Valores dos expoentes críticos e da temperatura crítica para os modelos estudados, para a classe de universalidade do modelo de Ising e os resultados de Maier e Schwabl [31]. Na linha Maier são mostrados os valores de γ/ν , β/ν e α/ν relativos ao comportamento da susceptibilidade, magnetização e calor específico em termos do comprimento de correlação (vide seção 2.4).

expoentes obtidos por Maier e Schwabl. Por esta tabela podemos perceber que os resultados para o modelo HA-d ao considerarmos $\nu = 0.817(2)$, valor este obtido ao usar os momentos da magnetização, estão bem próximos dos valores obtidos para o modelo HA-d bicamada e para o modelo d-PR.

Os resultados apresentados acima indicam uma aparente contradição. Temos dois cenários possíveis, ou o modelo HA-d pertence à classe de universalidade do modelo de Ising ou, pela proximidade dos resultados, a uma outra classe de universalidade, compatível com a encontrada anteriormente para o modelo d-PR e para o modelo HA-d bicamada. Nas figuras 4.48, 4.49 e 4.50 apresentamos os gráficos de escala para a magnetização, susceptibilidade e cumulante de Binder obtidos com os dados de histogramas considerando dois cenários possíveis; (i) os expoentes do modelo de Ising e $T_c = 0.948$ (gráficos da esquerda); e (ii) os expoentes e a temperatura crítica mostrados na linha HA-d da tabela 4.1 (gráficos da direita). Note que em

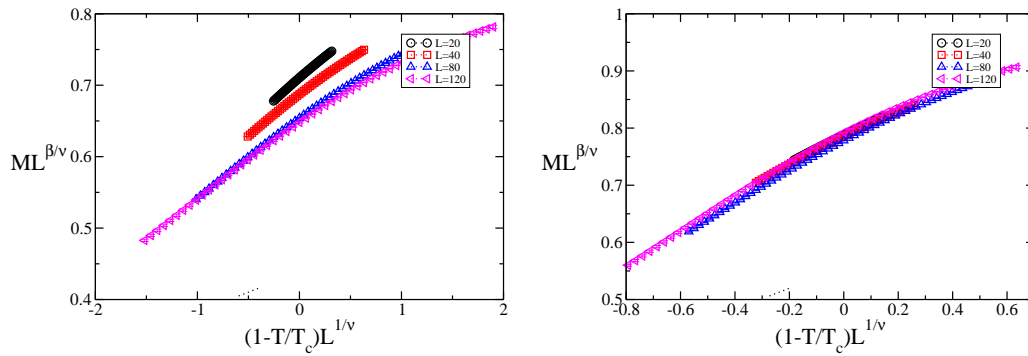


Figura 4.48: **Esquerda:** Gráfico de escala da magnetização considerando a classe de universalidade do modelo de Ising. **Direita:** Gráfico de escala da magnetização considerando os valores da linha HA-d da tabela 4.1.

geral as curvas dos gráficos feitos utilizando os expoentes e a temperatura crítica da linha HA-d da tabela 4.1 estão mais próximas umas das outras que as curvas dos gráficos feitos utilizando os expoentes da classe de universalidade do modelo de Ising. Isto é um indício de que o modelo HA-d pertence de fato a uma nova classe de universalidade compatível com o modelo HA-d bicamada e com o modelo d-PR. De fato, para termos uma compatibilidade maior entre os resultados dos três sistemas deveríamos ter observado que o calor específico é não divergente no modelo HA-d. No entanto, é sabido que para diferenciar uma divergência logarítmica de uma leve divergência por lei de potência ou até mesmo de um comportamento por lei de potência não divergente são necessários várias ordens de grandeza. Na figura 4.51 mostramos os dados para o calor específico ajustados por uma lei de potência não divergente e por uma divergência logarítmica. Os valores de χ^2 para os ajustes são: 4.7×10^{-4} para a divergência logarítmica ($a \ln(x) + b$) e 1.4×10^{-6} para lei de potência não divergente ($-ax^{-b} + c$). Note que neste caso, o melhor ajuste foi obtido ao considerarmos uma lei de potência não divergente, indicando portanto que a melhor descrição para o comportamento do calor específico é que este é não divergente. No ajuste obtivemos $\alpha/\nu = -0.36(14)$.

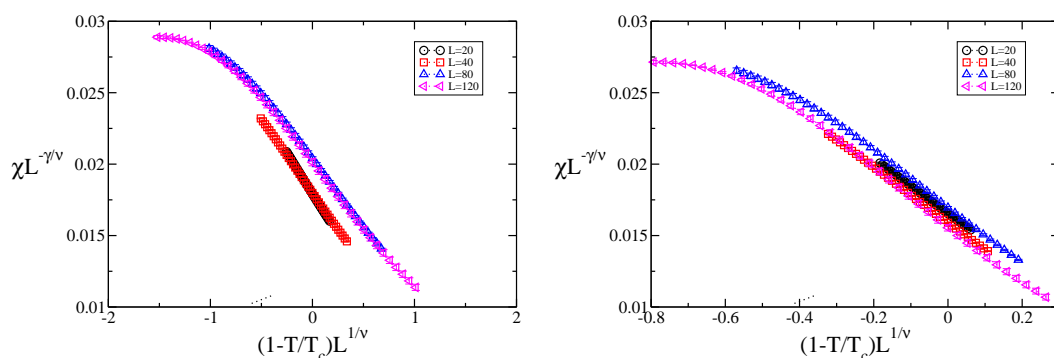


Figura 4.49: **Esquerda:** Gráfico de escala da susceptibilidade considerando a classe de universalidade do modelo de Ising. **Direita:** Gráfico de escala da susceptibilidade considerando os valores da linha HA-d da tabela 4.1.

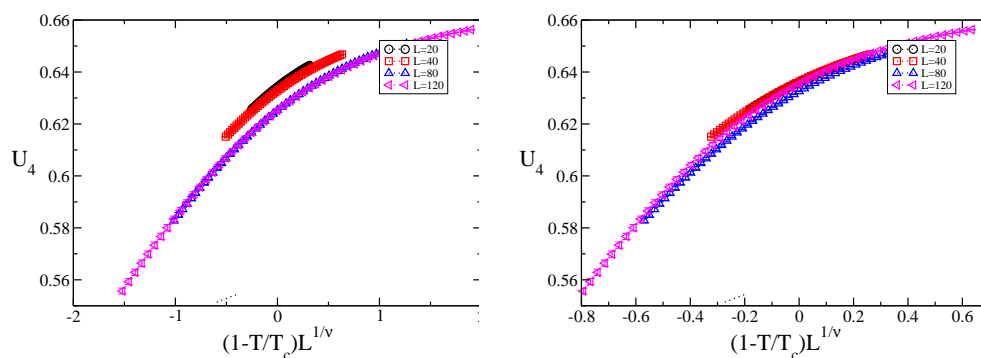


Figura 4.50: **Esquerda:** Gráfico de escala do cumulante de Binder considerando a classe de universalidade do modelo de Ising. **Direita:** Gráfico de escala do cumulante de Binder considerando os valores da linha HA-d da tabela 4.1.

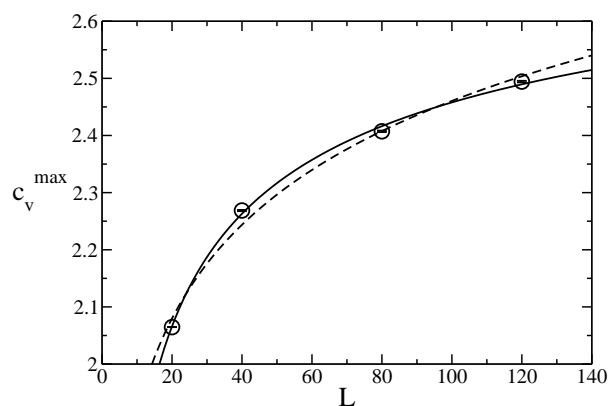


Figura 4.51: Máximo do calor específico como função do tamanho do sistema. A linha sólida representa o ajuste de uma lei de potência não divergente e a linha tracejada o ajuste de uma divergência logarítmica.

5 *Conclusões e perspectivas*

Neste trabalho estudamos de forma extensiva a transição entre a fase planar e a fase paramagnética do modelo de Heisenberg anisotrópico com interações dipolares em duas dimensões (modelo HA-d). Nosso estudo se concentrou em três sistemas ligeiramente diferentes, o modelo HA-d num sistema bicamada usando um corte no cálculo das interações dipolares, o modelo do Rotor Planar com interações dipolares (d-PR) e o HA-d utilizando a soma de Ewald para levar em conta o real caráter das interações dipolares.

Nossos resultados para o modelo HA-d bicamada, apresentados na seção 4.1, são consistentes com uma nova classe de universalidade caracterizada por um calor específico não divergente e pelos expoentes críticos $\nu = 1.22(9)$, $\gamma = 2.1(2)$, $\beta = 0.18(5)$ e $\alpha = -0.55(15)$. A temperatura crítica encontrada foi $T_c = 0.890(4)$. Note que estes resultados satisfazem a relações de escala $\nu d = 2 - \alpha$ e a inequação de Rushbrooke $\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2$, considerando a igualdade como previsto pela hipótese de escala. O mesmo acontece com os resultados do modelo HA-d. Para tal modelo encontramos $T_c = 0.945(2)$, $\nu = 1.224(1)$, $\gamma = 2.158(4)$, $\beta = 0.191(9)$ e $\alpha = -0.44(17)$. No entanto, os resultados encontrados para o modelo d-PR não satisfazem tais relações. Para este modelo encontramos $T_c = 1.201(1)$, $\nu = 1.277(2)$, $\gamma = 2.218(5)$, $\beta = 0.2065(4)$ e $\alpha = -1.1(1)$. Ao comparar os resultados do modelo d-PR com os resultados do modelo HA-d e do modelo HA-d bicamada observamos que o valor de α é bem menor do que o encontrado nestes dois casos. Tal comparação pode ser facilmente feita através da tabela 4.1. Os valores dos demais expoentes são próximos dos obtidos para o modelo HA-d bicamada e para o modelo HA-d.

A possível nova classe de universalidade não é um resultado inesperado. As classes de universalidade dependem apenas da dimensão espacial do sistema (d), da simetria e dimensionalidade do parâmetro de ordem e do alcance das interações [37]. Desta forma, pode-se esperar que a transição entre a fase planar e a fase paramagnética do modelo HA-d e do modelo d-PR pertençam a mesma classe de universalidade, que a princípio seria distinta das classes conhecidas uma vez que em tais modelos as simetrias envolvidas e o alcance das interações não são os mesmos dos modelos de classes de universalidade conhecidas. No entanto, não esperávamos

que os resultados do modelo HA-d bicamada concordassem com os obtidos para os modelos d-PR e HA-d, uma vez que o alcance das interações no sistema é diferente (no sistema bicamada foi utilizado um corte nas interações dipolares, enquanto nos modelos d-PR e HA-d consideramos o real caráter de longo alcance através da soma de Ewald). De fato, esperávamos que os resultados para o sistema bicamada fossem consistentes com os obtidos por Rapini *et al.* [16] (Usando nosso código, reproduzimos todos os resultados de Rapini *et al.*). Uma possível explicação para o comportamento observado é que a anisotropia intrínseca à interação dipolar é o fator realmente determinante na definição do caráter da transição entre a fase planar e a fase paramagnética. Aparentemente a inclusão de uma segunda camada cria uma anisotropia, quebrando a simetria planar do modelo. Isto explicaria a diferença entre os resultados obtidos por Rapini *et al.* e nossos resultados para o sistema bicamada. Um efeito similar a este foi explorado recentemente na referência [57].

Outro ponto que merece destaque é a existência de ordem de longo alcance. Nos três sistemas estudados, percebemos que os resultados são bem descritos por uma teoria de fenômenos críticos que considera a presença de ordem de longo alcance a baixa temperatura. De fato, a teoria usada assume que o comprimento de correlação do sistema diverge através de uma lei de potência nas vizinhanças do ponto crítico e, que para temperaturas diferentes da temperatura crítica o comprimento de correlação é finito. Além disso, percebemos que ao aumentar o tamanho do sistema o valor da magnetização praticamente não se altera. Nesta mesma linha, acreditamos que a divergência exponencial do comprimento de correlação proposta por Maier e Schwabl [31] não está presente nos sistemas estudados, uma vez que nossos resultados são bem descritos por uma teoria que assume uma divergência por lei de potência. Acreditamos que a previsão de Maier e Schwabl para o comportamento do comprimento de correlação não reflete o real comportamento do sistema uma vez que o estudo por técnicas do grupo de renormalização inclui algumas aproximações cujos efeitos no comportamento final do sistema não podem ser previstas.

Como considerações finais, gostaríamos de ressaltar que o objetivo primordial deste estudo não é de dar respostas definitivas e sim de fazer a primeira caracterização através de técnicas de Monte Carlo de transições de fase em sistemas bidimensionais com interações dipolares. Tal estudo se mostrou extremamente dispendioso em termos computacionais devido ao caráter de longo alcance das interações dipolares. Vale ressaltar que para obter uma resposta definitiva para o real caráter da transição entre a fase planar e a fase paramagnética no modelo HA-d seriam necessários estudos teóricos (por exemplo através de técnicas do grupo de renormalização) e simulações em sistemas maiores que os simulados neste trabalho. No entanto, a realização de tal estudo é inviável com os recursos computacionais e as técnicas disponíveis no momento da

realização deste trabalho. Para se ter uma idéia do tempo de simulação envolvido, para obtermos os resultados para a rede com $L = 120$ no modelo HA-d foram necessárias em torno de 30000 horas de computação. Ao aumentarmos o tamanho do sistema o tempo de computação aumenta enormemente, o que torna o estudo de sistemas maiores inviável.

Finalmente, ressaltamos que como resultado deste trabalho publicamos um artigo (*Physical Review B*, **79** 054404 (2009), apresentado no apêndice C), temos outro artigo submetido (*New Journal of Physics*) e dois em fase de preparação.

APÊNDICE A – Dedução da expressão para soma de Ewald em duas dimensões

Neste apêndice e no próximo apresentaremos uma dedução da expressão usada para soma de Ewald em duas dimensões retirada da Ref. [56]. Em primeiro lugar, vamos separar os termos que contém S_i^z dos que contém S_i^x e S_i^y :

$$H_{dip} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \sum_{\vec{n}=0}^{\infty} 'U_D, \quad (\text{A.1})$$

onde a linha no somatório significa que o termo $i = j$ é omitido para $\vec{n} = 0$ e

$$U_D = \frac{1}{|\vec{r}_{ij} - \vec{n}L|^3} \left[\vec{S}_{is} \cdot \vec{S}_{js} - \frac{3}{|\vec{r}_{ij} + \vec{n}L|^2} (\vec{S}_{is} \cdot (\vec{r}_{ij} + \vec{n}L)) (\vec{S}_{js} \cdot (\vec{r}_{ij} + \vec{n}L)) \right] + \frac{S_i^z S_j^z}{|\vec{r}_{ij} + \vec{n}L|^3}, \quad (\text{A.2})$$

com $\vec{S}_{is} = (S_i^x, S_i^y)$. Perceba que se fizermos $q_i = \vec{S}_{is} \cdot \vec{\nabla}_i$ e $q_j = \vec{S}_{js} \cdot \vec{\nabla}_j$ e aplicarmos o operador $q_i q_j$ em $1/r$, onde $r = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2}$

é de longo alcance. Das equações (A.4) e (A.5), temos a seguinte fatorização:

$$H = V_c + V_l, \quad (\text{A.6})$$

onde V_c é o termo de curto alcance, que é dado por:

$$V_c = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \sum_{\vec{n}=0}^{\infty} q_i q_j [1 - \omega_m(\alpha|\vec{r}_{ij} + \vec{n}L|)] \frac{1}{|\vec{r}_{ij} + \vec{n}L|^{2m}}, \quad (\text{A.7})$$

o termo de longo alcance V_l é:

$$\begin{aligned} V_l &= \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \sum_{\vec{n}=0}^{\infty} q_i q_j \frac{\omega_m(\alpha|\vec{r}_{ij} + \vec{n}L|)}{|\vec{r}_{ij} + \vec{n}L|^{2m}} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \sum_{\vec{n}=0}^{\infty} \frac{q_i q_j \omega_m(\alpha|\vec{r}_{ij} + \vec{n}L|)}{|\vec{r}_{ij} + \vec{n}L|^{2m}} - V_s. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Na segunda linha da expressão acima, o termo $i = j$ para $\vec{n} = 0$ foi reincluído na soma e

$$V_s = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N q_i^2 \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\omega_m(\alpha r)}{r^{2m}}, \quad (\text{A.9})$$

é o termo de auto-interação e será simplificado usando a regra de L'Hopital.

Usando as relações,

$$\sum_{\vec{n}} \frac{\omega_m(\alpha|\vec{r}_{ij} + \vec{n}L|)}{|\vec{r}_{ij} + \vec{n}L|^{2m}} = \int \sum_{\vec{n}} \frac{\omega_m(\alpha r)}{r^{2m}} \delta(\vec{r} - \vec{r}_{ij} - \vec{n}L) d\vec{r} \quad (\text{A.10})$$

e

$$\sum_{\vec{n}} \delta(\vec{r} - \vec{r}_{ij} - \vec{n}L) = \frac{1}{L^2} \sum_{\vec{G}} \exp[i\vec{G} \cdot (\vec{r} - \vec{r}_{ij})], \quad (\text{A.11})$$

onde $\vec{G} = (2\pi/L)(n_x \hat{i}, n_y \hat{j})$, pode-se derivar a seguinte relação:

$$\sum_{\vec{n}} \frac{\omega_m(\alpha|\vec{r}_{ij} + \vec{n}L|)}{|\vec{r}_{ij} + \vec{n}L|^{2m}} = \frac{1}{L^2} \sum_{\vec{G}} \int \frac{\omega_m(\alpha r)}{r^{2m}} \exp[i\vec{G} \cdot \vec{r}] d\vec{r} \times \exp[-i\vec{G} \cdot \vec{r}_{ij}]. \quad (\text{A.12})$$

Para sistemas bidimensionais, uma escolha adequada da função $\omega_m(\alpha r)$ é:

$$\omega_m(\alpha r) = \gamma(m, \alpha^2 r^2) / \Gamma(m), \quad (\text{A.13})$$

onde $\gamma(m, \alpha^2 r^2)$ e $\Gamma(m)$ são as funções gama incompleta complementar e a função gama respectivamente. Com esta escolha da função $\omega_m(\alpha r)$ podemos calcular a transformada de Fourier que aparece na equação A.12. A dedução deste termo, juntamente com os termos de auto-interação,

estão no apêndice B e é dado por:

$$\int \frac{\gamma(m, \alpha^2 r^2)}{r^{2m}} \exp(i\vec{G} \cdot \vec{r}) d\vec{r} = \pi \left(\frac{G^2}{4} \right)^{m-1} \Gamma \left(-m + 1, \frac{G^2}{4\alpha^2} \right). \quad (\text{A.14})$$

Algumas relações também são úteis para obtermos uma expressão relativamente simples:

$$\gamma(m, x) = \Gamma(m) - \Gamma(m, x) \quad (\text{A.15})$$

$$\Gamma(1/2, x) = \sqrt{\pi} \operatorname{erfc}(\sqrt{x}) \quad (\text{A.16})$$

e

$$\Gamma(n + 1, x) = n\Gamma(n, x) + x^n \exp(-x). \quad (\text{A.17})$$

Agora, fazendo $q_i = S_i^z$, $q_j = S_j^z$ e $m = 3/2$, temos as seguintes relações para o termo de curto alcance V_c^z , o termo de longo alcance V_l^z e para o termo de auto interação V_s^z :

$$V_c^z = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \sum_{\vec{n}=0}^{\infty} \frac{S_i^z S_j^z}{|\vec{r}_{ij} + \vec{n}L|} \left[\operatorname{erfc}(\alpha |\vec{r}_{ij} + \vec{n}L|) + \frac{2\alpha |\vec{r}_{ij} + \vec{n}L|}{\sqrt{\pi}} \exp(-\alpha^2 |\vec{r}_{ij} + \vec{n}L|^2) \right], \quad (\text{A.18})$$

$$\begin{aligned} V_l^z &= \frac{\pi}{L^2} \sum_{i,j=1}^N \sum_{\vec{G} \neq 0} S_i^z S_j^z \left[\frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{G^2}{4\alpha^2}\right) - \operatorname{Gerfc}\left(\frac{G}{2\alpha}\right) \right] \exp(-i\vec{G} \cdot \vec{r}_{ij}) \\ &+ \frac{2\sqrt{\pi}\alpha}{L^2} \sum_{i,j=1}^N S_i^z S_j^z, \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

$$V_s^z = -\frac{2\alpha^3}{3\sqrt{\pi}} \sum_{i=1}^N (S_i^z)^2. \quad (\text{A.20})$$

Para as componentes planares, a dedução é mais tediosa e complicada devido à aplicação do operador diferencial $(\vec{S}_{is} \cdot \vec{\nabla}_i)(\vec{S}_{js} \cdot \vec{\nabla}_j)$ para $m = 1/2$, mas pode-se mostrar os seguintes resultados para o termo de curto alcance V_c^s , termo de longo alcance V_l^s e para o termo de auto interação V_s^s :

$$V_c^s = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \sum_{\vec{n}=0}^{\infty} \left[B(|\vec{r}_{ij} + \vec{n}L|) \vec{S}_{is} \cdot \vec{S}_{js} - C(|\vec{r}_{ij} + \vec{n}L|) (\vec{S}_{is} \cdot (\vec{r}_{ij} + \vec{n}L)) (\vec{S}_{js} \cdot (\vec{r}_{ij} + \vec{n}L)) \right], \quad (\text{A.21})$$

onde

$$B(r) = \frac{\operatorname{erfc}(\alpha r)}{r^3} + \frac{2\alpha \exp(-\alpha^2 r^2)}{\sqrt{\pi} r^2}, \quad (\text{A.22})$$

e

$$C(r) = \frac{3\operatorname{erfc}(\alpha r)}{r^5} + \frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{3}{r^2} + 2\alpha^2 \right) \frac{\exp(-\alpha^2 r^2)}{r^2}. \quad (\text{A.23})$$

$$V_l^s = \frac{\pi}{L^2} \sum_{i,j=1}^N \sum_{\vec{G} \neq 0} \frac{(\vec{S}_{is} \cdot \vec{G})(\vec{S}_{js} \cdot \vec{G}) \operatorname{erfc}\left(\frac{G}{2\alpha}\right)}{G} \exp(-i\vec{G} \cdot \vec{r}_{ij}). \quad (\text{A.24})$$

$$V_s^s = -\frac{2\alpha^3 \vec{S}_{is}^2}{3\sqrt{\pi}}. \quad (\text{A.25})$$

Combinando as equações acima chega-se à expressão para a soma de Ewald mostrada na seção 3.3.

APÊNDICE B – Transformada de Fourier para soma de Ewald

Neste apêndice mostraremos a prova da seguinte transformada de Fourier:

$$\int \frac{\gamma(m, \alpha^2 r^2)}{r^{2m}} \exp(i\vec{G} \cdot \vec{r}) d\vec{r} = \pi \left(\frac{G^2}{4} \right)^{m-1} \Gamma \left(-m + 1, \frac{G^2}{4\alpha^2} \right), \quad (\text{B.1})$$

onde $\gamma(m, x) = \int_0^x e^{-t} t^{m-1} dt$ e $\Gamma(m, x) = \int_x^\infty e^{-t} t^{m-1} dt$ são as funções gama incompleta complementar e a função gama incompleta respectivamente. A equação (B.1) pode ser reescrita como:

$$\int_0^\infty \int_{-\pi}^\pi \frac{\gamma(m, \alpha^2 r^2)}{r^{2m}} \exp(iGr \cos \theta) r d\theta dr = \pi \left(\frac{G^2}{4} \right)^{m-1} \Gamma \left(-m + 1, \frac{G^2}{4\alpha^2} \right), \quad (\text{B.2})$$

onde a integral interna (parte angular) pode ser expressa em termos da função de Bessel do primeiro tipo, i.e., $J_0(Gr) = \int_{-\pi}^\pi e^{iGr \cos \theta} d\theta$. Portanto, precisamos apenas mostrar a seguinte transformação de Hankel:

$$2 \int_0^\infty \frac{\gamma(m, \alpha^2 r^2)}{r^{2m-1}} J_0(Gr) dr = \left(\frac{G^2}{4} \right)^{m-1} \Gamma \left(-m + 1, \frac{G^2}{4\alpha^2} \right). \quad (\text{B.3})$$

Seja $u = Gr$ e o lado direito e esquerdo da equação (B.3) serem I_L e I_R respectivamente. I_L e I_R podem então serem escritos como:

$$\begin{aligned} I_L(G) &= 2G^{2(m-1)} \int_0^\infty \frac{\gamma \left(m, \frac{\alpha^2 u^2}{G^2} \right)}{u^{2m-1}} J_0(u) du \\ &= G^{2(m-1)} I'_L, \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

e

$$I_R(G) = \left(\frac{G^{2(m-1)}}{4^{m-1}} \right)^{m-1} \Gamma \left(-m + 1, \frac{G^2}{4\alpha^2} \right) = G^{2(m-1)} I'_R. \quad (\text{B.5})$$

A tarefa agora é mostrar que $I'_L = I'_R$.

Para isto, citaremos três relações que serão usadas nesta prova: (i) Um teorema relacionado às funções gama incompletas, que pode ser encontrado na página 942 (Eq. 8.356(4)) da Ref. [58],

$$\frac{d\gamma(m, x)}{dx} = -\frac{d\Gamma(m, x)}{dx} = x^{m-1} e^{-x}; \quad (\text{B.6})$$

(ii) O seguinte resultado para a seguinte integral que pode ser encontrado na página 717 (Eq. 6.631(7)) da Ref. [58] e posteriormente simplificado (por exemplo usando o programa Mathematica[®]):

$$\int_0^\infty x e^{-ax^2} J_0(x) dx = \frac{1}{2a} e^{-1/4a^2}; \quad (\text{B.7})$$

e (iii) Dois limites para as funções gama incompletas, $\gamma(m, 0) = 0$ e $\Gamma(m, \infty) = 0$.

Das equações (B.4), (B.6) e (B.7), temos:

$$\begin{aligned} \frac{dI'_L}{dG} &= -4 \frac{\alpha^{2m}}{G^{2m+1}} \int_0^\infty u e^{-\alpha^2 u^2 / G^2} J_0(u) du \\ &= -2 \frac{\alpha^{2m-2}}{G^{2m-1}} e^{-G^2/4\alpha^2}. \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Por outro lado, das equações (B.5) e (B.6), temos:

$$\frac{dI'_R}{dG} = -2 \frac{\alpha^{2m-2}}{G^{2m-1}} e^{-G^2/4\alpha^2}. \quad (\text{B.9})$$

Então, temos que

$$\frac{dI'_L}{dG} = \frac{dI'_R}{dG}. \quad (\text{B.10})$$

Esta igualdade entre as derivadas de I'_L e I'_R em conjunto com as relações (iii), que fornecem $I'_L|_{G=\infty} = 0$ e $I'_R|_{G=\infty} = 0$, dão origem a $I'_L = I'_R$, e conseqüentemente à Eq. (B.1).

Outro cálculo que deve ser feito é o limite do termo de auto interação:

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{\omega_m(\alpha r)}{r^{2m}} = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\gamma(m, \alpha^2 r^2)}{\Gamma(m) r^{2m}}. \quad (\text{B.11})$$

Aplicando a regra de L'Hopital, temos:

$$\begin{aligned} \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\omega_m(\alpha r)}{r^{2m}} &= \lim_{r \rightarrow 0} \frac{2\alpha^2 r (\alpha^2 r^2)^{m-1} e^{-\alpha^2 r^2}}{2m\Gamma(m) r^{2m-1}} \\ &= \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\alpha^{2m} r^{2m-1} e^{-\alpha^2 r^2}}{m\Gamma(m) r^{2m-1}} \\ &= \frac{\alpha^{2m}}{m\Gamma(m)}. \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

Como $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$ e $\Gamma(1+x) = x\Gamma(x)$, $\Gamma(3/2) = \sqrt{\pi}/2$, temos para $m = 3/2$, o seguinte resultado:

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{\omega_m(\alpha r)}{r^{2m}} = \frac{4\alpha^3}{3\sqrt{\pi}}. \quad (\text{B.13})$$

APÊNDICE C – Determinação dos parâmetros da soma de Ewald

Nas simulações do modelo do rotor planar (d-PR) e também para o modelo de Heisenberg anisotrópico (HA-d) em duas dimensões, utilizamos a soma de Ewald para calcular as interações dipolares. Como dito no capítulo 3, ao introduzir cortes nas somas no espaço real e no espaço de Fourier, estamos introduzindo um erro no cálculo da energia através da soma de Ewald. Este erro pode ser controlado através do parâmetro α . Para calcular o erro relativo contido na soma o procedimento utilizado foi o seguinte:

1. Dez configurações aleatórias foram geradas e a energia de cada configuração foi calculada usando a seguinte expressão:

$$E_i(n) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \sum_{\vec{n}=0}^{n_c} \left\{ \frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{(\vec{r}_{ij} + \vec{n}L)^3} - 3 \frac{[\vec{S}_i \cdot (\vec{r}_{ij} + \vec{n}L)][\vec{S}_j \cdot (\vec{r}_{ij} + \vec{n}L)]}{(\vec{r}_{ij} + \vec{n}L)^5} \right\}, \quad (\text{C.1})$$

com $|\vec{n}| = 10, 11, 12, \dots, 40$. Então, *plotamos* $E_i(n) \times 1/n$ e através de uma regressão linear obtemos o valor de E_i^{ex} ($n \rightarrow \infty$).

2. Para um determinado conjunto de parâmetros (r_c , G_c e α) a energia foi calculada através da soma de Ewald. Calculamos também o erro relativo médio ε para as dez configurações geradas:

$$\varepsilon = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{|E_i^{ew} - E_i^{ex}|}{E_i^{ex}}. \quad (\text{C.2})$$

3. Este procedimento foi repetido para vários parâmetros diferentes. De posse do erro relativo médio o conjunto de parâmetros para os quais o erro é menor que 5×10^{-4} e que fornece o menor tempo computacional foi escolhido, como mostrado na tabela C.1.

Tabela C.1: Parâmetros usados na soma de Ewald para vários tamanhos de rede.

L	r_c	G_c	α	Erros estimados da soma de Ewald (ϵ)
20	10	5	0.30	4.4×10^{-4}
30	10	5	0.23	4.3×10^{-4}
40	10	8	0.24	4.4×10^{-4}
50	10	8	0.21	4.2×10^{-4}
60	12	6	0.16	4.8×10^{-4}
70	18	5	0.11	4.1×10^{-4}
80	20	5	0.10	4.2×10^{-4}
90	15	5	0.105	6.4×10^{-4}
100	20	6	0.10	4.0×10^{-4}
120	15	13	0.14	9.6×10^{-4}

APÊNDICE D – Trabalho publicado

PHYSICAL REVIEW B 79, 054404 (2009)

Anisotropic Heisenberg model with dipolar interactions: Monte Carlo simulations of the planar-to-paramagnetic phase transition in a bilayer system

L. A. S. Mól* and B. V. Costa†

Departamento de Física, Laboratório de Simulação, ICEx, UFMG, Caixa Postal 702, 31270-901 Belo Horizonte, MG, Brazil

(Received 7 October 2008; revised manuscript received 28 November 2008; published 3 February 2009)

In this work we used extensive Monte Carlo simulations and finite-size scaling theory to study the planar-to-paramagnetic phase transition in the dipolar-anisotropic Heisenberg model in a bilayer system. This model is a prototype to describe ferromagnetic thin films. Our results suggest that this is an order-disorder phase transition that might belong to another universality class characterized by a nondivergent specific heat ($\alpha \approx -0.4$) and the critical exponents $\nu=1.22(9)$, $\gamma=2.1(2)$, and $\beta=0.18(5)$.

DOI: 10.1103/PhysRevB.79.054404

PACS number(s): 75.40.Cx

I. INTRODUCTION

Dipolar interactions play an essential role in the magnetic properties of low-dimensional systems. For example, it was experimentally observed that in magnetic nanodisks dipolar interactions induce the formation of a vortex in the system.¹⁻³ In ferromagnetic ultrathin films the interplay between dipolar interactions and magnetocrystalline anisotropies is responsible for a reorientation transition.^{4,5} In this kind of transition the spins are aligned out-of-plane at low temperatures and as the temperature increases a reorientation to an in-plane configuration is observed. Besides that, the existence of ferromagnetic order in two-dimensional systems is a consequence of the presence of anisotropies and/or long-range interactions. Mermin and Wagner⁶ in a seminal paper showed that isotropic ferromagnets with short-range interactions do not present long-range order at any finite temperature in two dimensions. The absence of long-range order in such systems does not imply the absence of a phase transition. It is well known that in the XY model in two dimensions there is a phase transition from a phase with algebraic decaying correlations to a phase with exponentially decaying correlations. The most accepted phenomenology to explain this phase transition is the unbinding of vortex-antivortex pairs.^{7,8} This is the Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) phase transition. In a real magnet, dipolar interactions between magnetic moments are always present. The presence of such interaction is sufficient to stabilize the magnetization as shown by Maleev.⁹ In addition, the presence of interfaces induces the appearance of anisotropies which can also give rise to long-range order. The existence of long-range order in a system with both interactions was analyzed by Bruno.¹⁰

The main features of ferromagnetic ultrathin films of interest to us in this paper is recovered by a model including three different interactions, namely, exchange interactions, single-ion easy-axis anisotropy, and dipolar interactions which can be summarized in the following prototype Hamiltonian:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - A \sum_i (S_i^z)^2 + D \sum_{i \neq j} \left[\frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{r_{ij}^3} - \frac{3(\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right]. \quad (1)$$

Here, $J > 0$ defines a ferromagnetic exchange constant, A

> 0 is an easy-axis anisotropy, and D is the dipolar constant. $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ is a classical spin variable at the site i with $|\vec{S}_i| = 1$ and \vec{r}_{ij} connects sites i and j . $\langle i,j \rangle$ means that the first summation is to be evaluated only for nearest neighbors, the summation in the second term is over the whole lattice sites, and for the dipolar interaction the summation is evaluated over all pairs $i \neq j$. The dipolar-anisotropic Heisenberg (d -AH) model [Eq. (1)] has been studied in connection with the reorientation transition and the stripe and tetragonal phases.¹¹⁻¹⁷ Its phase diagram was first obtained numerically by Santamaria and Diep¹² for $J=1$, $A=2$, and $0.12 < D < 0.17$. They studied the model in a square lattice using a cutoff $r_0=6$ in the dipolar interaction. Rapini *et al.*,¹⁴ using the same approach studied the model for $J=A=1$ and $0.1 \leq D \leq 0.2$. In Fig. 1 we show a sketch of the phase diagram based in their works. The line labeled a is an Ising-type, Z_2 , transition between an ordered ferromagnetic easy-axis phase and a paramagnetic phase. Line b is a first-order transition between the easy-axis and planar phases while the c line was found to be a BKT transition.¹⁴ The found BKT transition seems to be a consequence of the cutoff introduced in the evaluation of dipolar interactions since when full long-range dipolar interactions are considered, the system exhibits long-range order.^{9,10} Another attempt to determine the character of the planar-to-paramagnetic phase transition was done by Maier and Schwabl.¹⁸ In their work, the authors considered

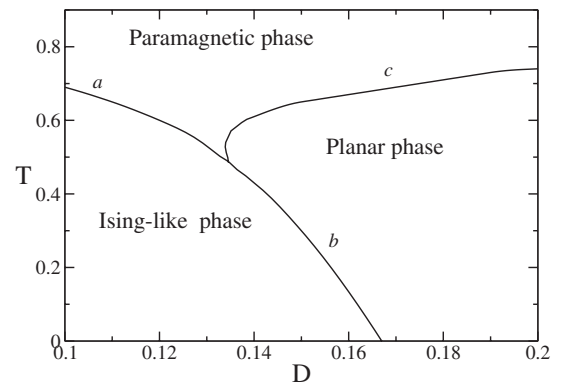


FIG. 1. Phase diagram of Hamiltonian (1) for $J=A=1$ based on the work of Santamaria and Diep (Ref. 12) and of Rapini *et al.* (Ref. 14).

L. A. S. MÓL AND B. V. COSTA

PHYSICAL REVIEW B 79, 054404 (2009)

the XY model (two spin components) with dipolar interactions. Their results should describe the d-AH model in the limit of small anisotropy when spins are expected to lie in plane. Using renormalization group techniques, they discussed the existence of a new universality class with characteristics of BKT and order-disorder transitions as well. They argued that the dipolar XY model exhibit long-range order at low temperature, but the correlation length diverges exponentially as the critical temperature is approached. The specific heat does not present any divergence as in a BKT transition. The susceptibility was expected to diverge as $\chi \propto \xi^{-\tilde{\gamma}}$, where $\tilde{\gamma} = \gamma/\nu = 1$ is the critical susceptibility exponent and ξ is the correlation length. The magnetization approaches zero as $M \propto \xi^{\tilde{\beta}}$, where $\tilde{\beta} = \beta/\nu = 1/2$, and the correlation function exponent was found to be $\tilde{\eta} = \eta/\nu = 1$. In this way, some questions regarding the planar-to-paramagnetic phase transition arise: (i) Is there a cutoff value where the phase transition changes from BKT to that found by Maier? (ii) Does the inclusion of a second layer in the system work as an anisotropy making the transition found by Rapini *et al.* more evident? We mean, is this transition a BKT type, as found by those authors, or is it in another universality class? Our aim in this paper is to answer question (ii). To this end we have performed extensive Monte Carlo simulations to study the model Hamiltonian [Eq. (1)] in a simple cubic lattice with two layers. The outline of the paper is as follows. Section II contains a description of our Monte Carlo procedure and finite-size scaling functions. In Sec. III, we present our numerical results and the analysis of some critical exponents. Finally, Sec. IV is devoted to the discussion of the results and conclusions.

II. MONTE CARLO METHOD AND FINITE-SIZE SCALING THEORY

Our system consists of simple cubic lattices with dimensions $L \times L \times 2$. In our notation the direction perpendicular to the film plane corresponds to the z axis. At each site of the lattice we defined a classical spin variable $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$. The interactions are defined by Eq. (1). In the evaluation of dipolar interactions a cutoff was introduced at $r_0 = 5a$, where a is the lattice spacing, i.e., we have assumed that for $r_{ij} > 5a$ the contribution of the dipolar part for the Hamiltonian is zero. Periodic boundary conditions were applied in the x and y directions, while in z open boundary conditions were used. In all simulations we assumed $J=A=1$ and $D=0.3$, so that we deal with the planar-to-paramagnetic phase transition (see Figs. 1 and 2). In this work the energy is measured in units of JS^2 and the temperature is in units of JS^2/k_B .

Our Monte Carlo scheme was a plain METROPOLIS algorithm^{19,20} since conventional cluster algorithms cannot be used due to the long-range anisotropic character of the dipolar interactions. We define a Monte Carlo step (MCS) as consisting of an attempt to assign a new random direction to each spin in the lattice. To equilibrate the system it was used $100 \times L^2$ MCS which was found to be sufficient to reach equilibrium even in the vicinity of the phase transition. We have performed two sets of simulations. In the first set we

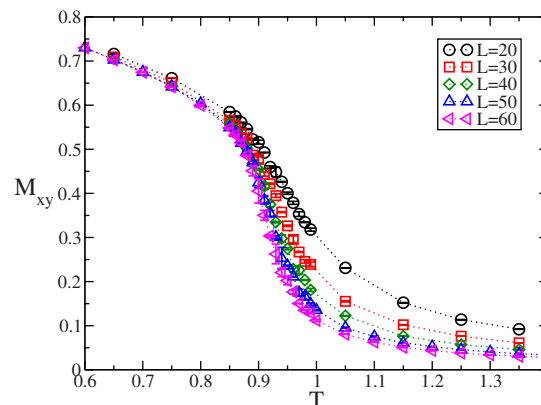


FIG. 2. (Color online) Planar magnetization as a function of temperature for $20 < L < 60$.

preliminarily explore the thermodynamic behavior of the model. A conventional Monte Carlo calculation is done in order to determine the position of the maxima of the specific heat and susceptibilities and the crossings of the fourth-order Binder's cumulant. We used in this first approach lattice sizes in the interval $20 \leq L \leq 60$. Once the possible transition temperature is determined, we refine the results by using the histogram method.^{21,22} We produce the histograms for each lattice size in the interval $20 \leq L \leq 120$. The histograms are built at/close to the temperatures corresponding to the maxima obtained in the first step. With the single-histogram technique it is possible to estimate thermodynamic quantities of interest in a narrow temperature range around the simulated temperature. This technique is very useful to precisely locate the extrema of response functions. Nevertheless, when larger temperature ranges are required, the simple histogram method fails. To improve our results we constructed multiple histograms close to the transition temperature.²² The multiple-histogram technique gives us one tool to improve the estimates of the thermodynamic quantities in a larger temperature range by combining histograms from simulations carried out at several slightly different temperatures. Details of these methods can be found in Refs. 21 and 22. The thermodynamic quantities on which we concentrated our attention were the specific heat, planar magnetization, planar susceptibility, fourth-order Binder's cumulant, and moments of magnetization as described below. The specific heat is defined as

$$c_v = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{Nk_B T^2}, \quad (2)$$

where E is the internal energy of the system [computed using Eq. (1)] and $N = 2 \times L^2$ is the lattice volume. The planar magnetization is

$$M_{xy} = \frac{1}{N} \langle m \rangle, \quad (3)$$

where

ANISOTROPIC HEISENBERG MODEL WITH DIPOLAR...

PHYSICAL REVIEW B 79, 054404 (2009)

$$m = \sqrt{\left(\sum_{i=1}^N S_i^x\right)^2 + \left(\sum_{i=1}^N S_i^y\right)^2}.$$

The planar susceptibility is defined by the planar magnetization fluctuations as

$$\chi_{xy} = \frac{\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2}{Nk_B T}. \quad (4)$$

The fourth-order Binder's cumulant reads

$$U_4 = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2}. \quad (5)$$

In order to calculate the critical exponent ν , we also defined the following moments of the planar magnetization:²³

$$V_1 \equiv 4[m^3] - 3[m^4], \quad (6a)$$

$$V_2 \equiv 2[m^2] - [m^4], \quad (6b)$$

$$V_3 \equiv 3[m^2] - 2[m^3], \quad (6c)$$

$$V_4 \equiv \{4[m] - [m^4]\}/3, \quad (6d)$$

$$V_5 \equiv \{3[m] - [m^3]\}/2, \quad (6e)$$

$$V_6 \equiv 2[m] - [m^2], \quad (6f)$$

where,

$$[m^n] \equiv \ln \left| \frac{\partial \langle m^n \rangle}{\partial T} \right|. \quad (7)$$

In critical phenomena the thermodynamic quantities are expected to behave in the vicinity of the phase transition as^{19,24,25}

$$c_v \sim t^{-\alpha}, \quad (8)$$

$$\chi \sim t^{-\gamma}, \quad (9)$$

$$m \sim t^\beta, \quad (10)$$

$$\xi \sim t^{-\nu}, \quad (11)$$

where $t = |T - T_c|/T_c$ is the reduced temperature, m is the magnetization, ξ is the correlation length, and α , β , γ , and ν are critical exponents. Although the critical temperature depends on the details of the system in consideration, it is observed that the critical exponents are to some extent universal depending only on a few fundamental factors.^{19,24,25} The systems are thus divided in a small number of universality classes. Systems belonging to the same universality class share the same critical exponents. Critical exponents depend only on the spatial dimensionality of the system, the symmetry and dimensionality of the order parameter, and the range of the interactions within the system.

In a finite system as those used in Monte Carlo simulations the divergences in the thermodynamic quantities are replaced by smooth functions. Finite-size effects are there-

fore of great importance in the analysis of the results of Monte Carlo simulations. The theory of finite-size scaling^{19,25} provides one way to extract information concerning the thermodynamic limit properties from results obtained in finite systems. The basic assumption of this theory is that in the vicinity of the phase transition the finite-size effects should depend on the ratio between the linear dimension of the system (L) and the correlation length (ξ). According to such theory, the specific heat, susceptibility, and magnetization for a finite system in the vicinity of the phase transition behave as

$$c_v \approx c_\infty(t) + L^{\alpha/\nu} \mathcal{C}(tL^{1/\nu}), \quad (12a)$$

$$\chi \approx L^{\gamma/\nu} \mathcal{X}(tL^{1/\nu}), \quad (12b)$$

$$m \approx L^{-\beta/\nu} \mathcal{M}(tL^{1/\nu}), \quad (12c)$$

where \mathcal{M} , \mathcal{X} , and \mathcal{C} are proper derivatives of the free energy. At T_c ($t=0$) these functions are constants and the size dependence of specific heat, susceptibility, and magnetization follows a pure power law. The size dependence of the pseudocritical temperature $[T_c(L)]$ is^{19,25}

$$T_c(L) = T_c + wL^{-1/\nu}, \quad (13)$$

where T_c is the critical temperature in the thermodynamic limit. Using the size dependence of the magnetization [Eq. (12)] and the definition of the moments of the magnetization in Eq. (6), one can easily show that such functions behave as

$$V_j \approx (1/\nu) \ln L + \mathcal{V}_j(tL^{1/\nu}), \quad (14)$$

for $j=1, 2, \dots, 6$. At $t=0$ the functions $\mathcal{V}_j(tL^{1/\nu})$ are constants and then the curves for all V_j have the same slope,²³ thus providing a very precise method to determine the critical exponent ν and the critical temperature.

Concerning the fourth-order Binder's cumulant it is expected that for large enough lattice sizes, the curves for $U_4(T)$ should cross at the same point $U^* = U(T=T_c)$. Besides that, its size dependence is expected to be²⁶

$$U_4 \approx \mathcal{U}_4(tL^{1/\nu}). \quad (15)$$

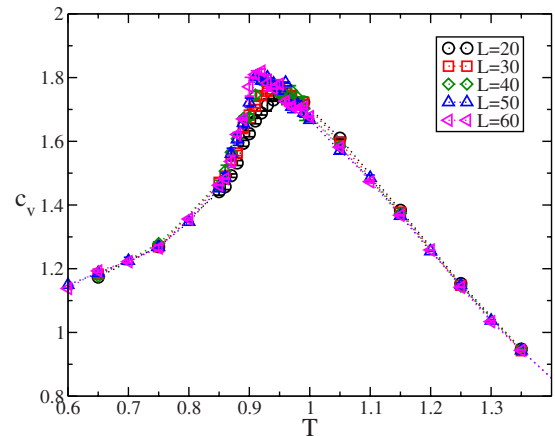


FIG. 3. (Color online) Specific heat as a function of temperature for $20 < L < 60$. Note that it displays small size effects.

L. A. S. MÓL AND B. V. COSTA

PHYSICAL REVIEW B 79, 054404 (2009)

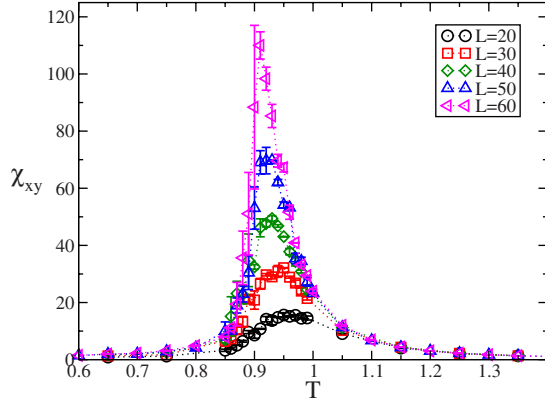


FIG. 4. (Color online) Planar susceptibility as a function of temperature for $20 < L < 60$.

III. RESULTS

Our results were obtained as follows. A preliminary set of simulations was carried out for lattices of sizes $L=20, 30, 40, 50$, and 60 averaging over 10^5 configurations for temperatures between 0.6 and 1.35 . At each temperature the first $100 \times L^2$ MCS were discarded in order to drive the system to thermal equilibrium. The results for the planar magnetization, specific heat, planar susceptibility, and Binder's cumulant are shown in Figs. 2–5, respectively. Once we estimated the position of the specific heat and of the planar susceptibility peaks, $T_m^c(L)$ and $T_m^x(L)$, another set of simulations was carried out using the histogram reweighting techniques^{19,21,22} for $20 \leq L \leq 120$. The histogram temperatures were chosen at the maxima of the susceptibilities and specific heat for each L . At least three simulations using independent random number sequences were used to build the histograms up. Each histogram consists of at least 2×10^7 configurations. For some lattices sizes we also did simulations at slightly different temperatures for using the multiple-histogram techniques²² to put the error bars inside satisfactory levels.

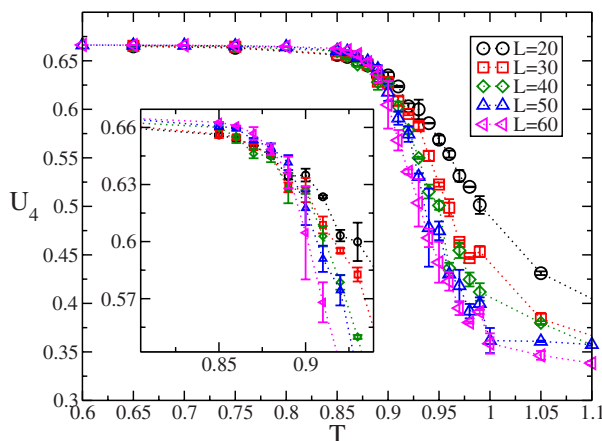


FIG. 5. (Color online) Fourth-order Binder's cumulant of planar magnetization as a function of temperature. The inset shows a zoom in the crossing region.

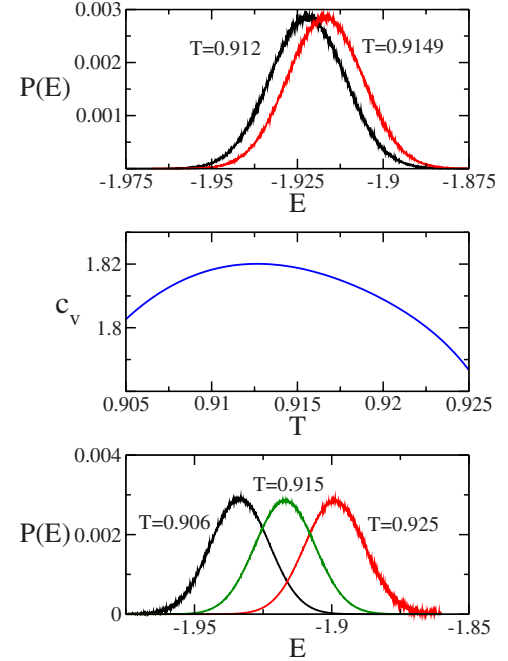


FIG. 6. (Color online) Top: Normalized histograms obtained in two simulations performed at $T=0.912$ and $T=0.9149$. In each simulation 10^7 configurations were used to build these histograms up. Middle: Specific heat calculated by using the multiple-histogram technique. Bottom: Probability distribution of energy at $T=0.906$, $T=0.915$, and $T=0.925$ obtained by using the multiple-histogram technique.

We exemplify the use of the histograms in Fig. 6. The top figure shows the normalized histograms, $P(E)$, obtained in two simulations at temperatures close to the maxima of the specific heat for $L=80$. Using the multiple-histogram technique²² we calculated the specific heat shown in the middle picture of the same figure. At the bottom we show the energy probability distribution $P(E)$ obtained by using the multiple histograms at three different temperatures. In Fig. 7 we show a log-log plot of the maximum value of the planar susceptibility (χ_{xy}^m) as a function of the lattice size for L

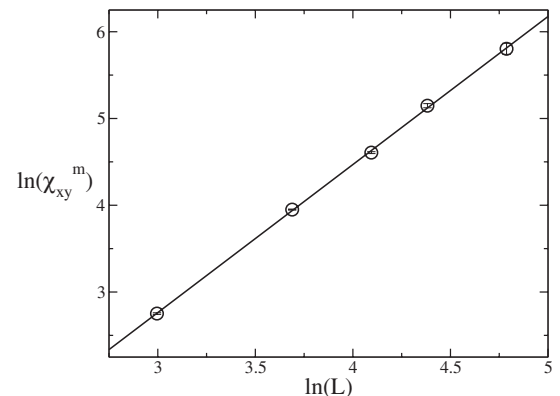


FIG. 7. Log-log plot of size dependence of planar susceptibility at $T_c(L)$. The solid line is the best fit with $\gamma/\nu=1.71(2)$.

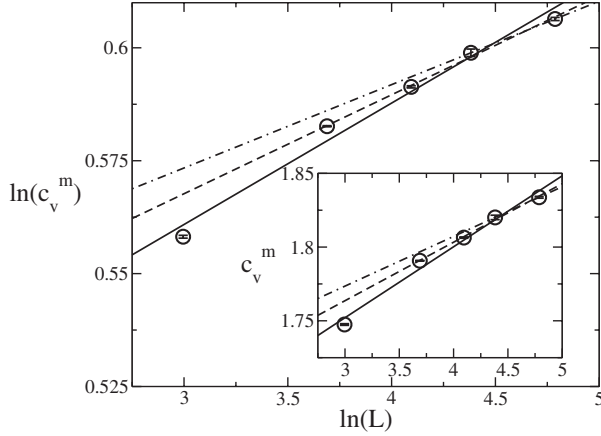


FIG. 8. Log-log plot of the size dependence of the specific heat at $T_c(L)$. The solid line is the best fit using all points while the dashed line is the best fit excluding the smallest lattice size ($L=20$) and the dotted-dashed line is the best fit using only $L=80$ and $L=120$. The inset shows c_v^m versus $\ln(L)$. The symbols and lines are the same as in the outer plot. Note that the slope of the curves diminishes as we exclude smaller lattice. The error bars are shown inside the symbols.

$=20, 40, 60, 80,$ and 120 . From finite-size scaling we expect that $\chi_{xy}^m \propto L^{\gamma/\nu}$ [see Eq. (12)]. Note that as expected the plot of $\ln(\chi_{xy}^m) \times \ln(L)$ is well adjusted by a straight line giving the exponent $\gamma/\nu=1.71(2)$. In critical phenomena it is expected that the specific heat diverges as a power law or logarithmically as in the Ising universality class. In Fig. 8 we show a log-log plot of the maximum value of the specific heat as a function of the lattice size. The inset shows the same results in a semilogarithmic plot. Note that a pure power-law scenario or a logarithmic divergence does not adjust the data points for the entire lattice sizes range. Besides that, as the small lattice sizes are excluded from the adjusted data points the slope diminishes (see Fig. 8), which indicates a nondivergent specific heat. This scenario will be explored in more details in Sec. IV. Using the crossing points of the fourth-

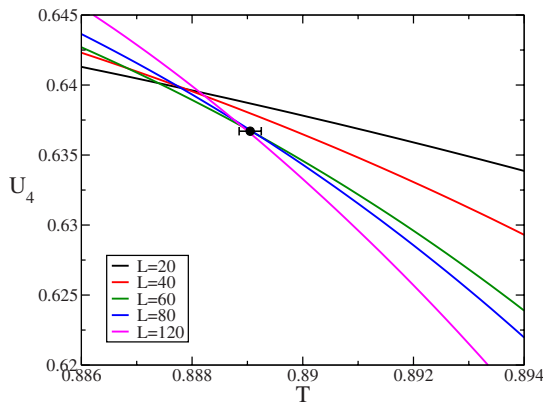


FIG. 9. (Color online) Fourth-order Binder's cumulant obtained using the multiple-histogram techniques. The point represents the estimated critical temperature using the crossing point for the largest lattices. Error bars are not shown for clarity.

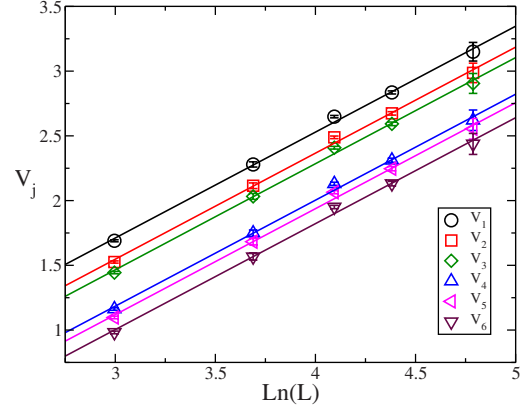


FIG. 10. (Color online) Size dependence of the six moments V_j at $T=0.8928$. It is expected at the critical temperature all quantities to have the same slope $1/\nu$.

order Binder's cumulant of Fig. 5 as a first estimate for the critical temperature T_c , another set of simulations was carried out at temperatures closer to that one for $20 \leq L \leq 120$. Multiple histograms were built up using up to 4×10^7 configurations. In Fig. 9 we show the crossing region of the Binder's cumulant obtained in this new set of simulations. We used the crossing point of the largest lattices sizes to estimate the critical temperature [$T_c^{U_4}=0.889(2)$]. Using the six moments of the magnetization defined in Eq. (6) we obtained another estimate for the critical temperature. The moments were also used to obtain an estimate of the exponent ν . In Fig. 10 we show V_j [see Eq. (6)] as a function of $\ln(L)$ at $T=0.8928$. Note that all quantities have almost the same slope. In Fig. 11 we show the values of $1/\nu$ obtained by using a linear fit of V_j as a function of $\ln(L)$ for temperatures close to $T=0.893$ for each j . Using this method we estimate the critical temperature $T_c^{V_j}=0.893(1)$ and the exponent $\nu=1.22(9)$. Using this value for ν we plotted in Fig. 12 the pseudocritical temperatures $T_c^v(L)$ (temperature at which the maximum of the specific heat occurs for the lattice of size L) and $T_c^X(L)$

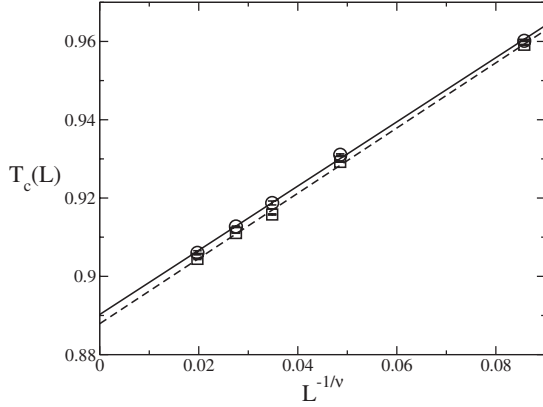


FIG. 12. Pseudocritical temperatures as a function of $L^{-1/\nu}$ for $1/\nu=0.82$. Circles are $T_c^v(L)$ and squares are $T_c^x(L)$. The solid and dashed lines are the best linear fits of $T_c^v(L)$ and $T_c^x(L)$, respectively. The intercepts are $T_c^v=0.890(3)$ and $T_c^x=0.888(2)$ for the specific heat and susceptibility, respectively.

(temperature at the maximum of the planar susceptibility) as a function of $L^{-1/\nu}$. Note that as expected the data in Fig. 12 are well adjusted by a straight line. Using Eq. (13) two other estimates for the critical temperatures, $T_c^v=0.890(3)$ and $T_c^x=0.888(2)$, were obtained. Our best value for the critical temperature is thus the mean value of the previous estimates T_c^U , T_c^V , T_c^c , and T_c^x . It gives $T_c=0.890(4)$. Plotting $\ln(M_{xy})$ versus $\ln(L)$ at T_c (see Fig. 13) it is possible to obtain the exponent β/ν . From a linear adjust we get $\beta/\nu=0.15(4)$.

In summary, we obtained the mean critical temperature $T_c=0.890(4)$ and the critical exponents $\nu=1.22(9)$, $\gamma=2.1(2)$, and $\beta=0.18(5)$. Using these values we can check their validity by using the scaling functions of Eq. (12). In Figs. 14–16 we show the scaling plots of the planar magnetization, planar susceptibility, and fourth-order Binder's cumulant [see Eqs. (12) and (15)]. Note that in all cases we have a very good collapse of the curves for different lattice sizes.

IV. DISCUSSION AND CONCLUSIONS

We performed extensive Monte Carlo simulations to study the planar-to-paramagnetic phase transition in the d-AH

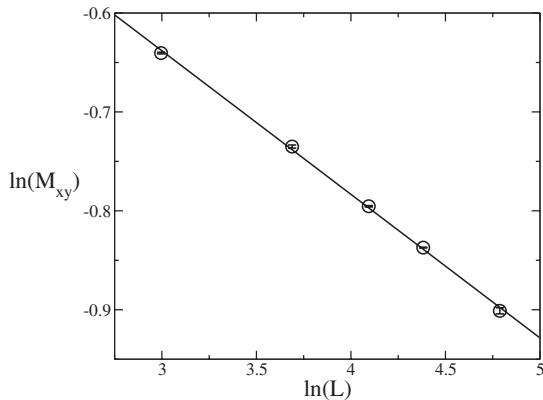


FIG. 13. $\ln(M_{xy})$ versus $\ln(L)$ at $T=T_c$. The solid line is the best fit and the slope is $\beta/\nu=0.15(4)$.

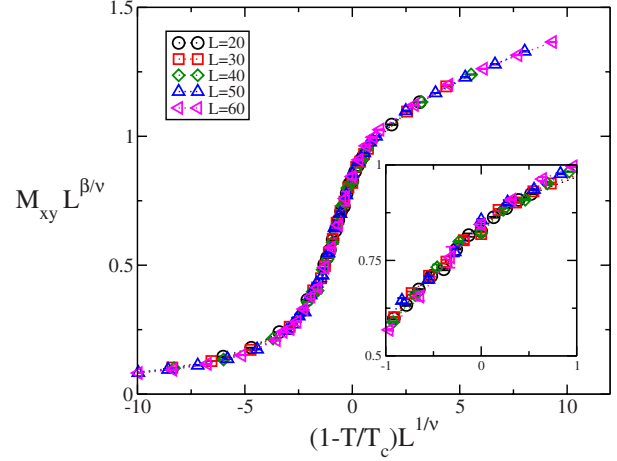
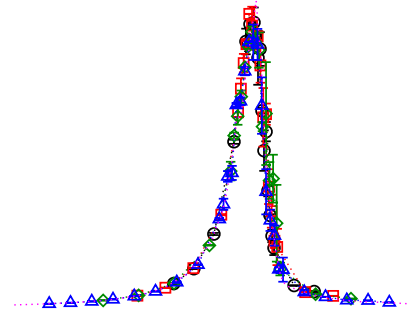


FIG. 14. (Color online) Scaling plot of magnetization using $T_c=0.890$, $1/\nu=0.82$ and $\beta/\nu=0.15$ [see Eq. (12)]. The inset shows a zoom near $T=T_c$. Note that the curves for different lattice sizes collapse into a single curve.

model in a bilayer system. Using the size dependence of the magnetization moments, planar susceptibility, planar magnetization, fourth-order Binder's cumulant, and specific heat, we obtained the critical temperature $T_c=0.890(4)$ and the critical exponents $\nu=1.22(9)$, $\gamma=2.1(2)$, and $\beta=0.18(5)$. The scaling plots of the magnetization, susceptibility, and fourth-order Binder's cumulant are shown in Figs. 14–16, respectively. A very good collapse of the curves for different lattice sizes is obtained for all quantities. This is a strong evidence of the validity of those values.

As can be seen in Fig. 8 a pure power law or logarithmic divergence cannot describe our specific-heat data for the entire lattice sizes range (note the size of the error bars in Fig. 8). As the smaller lattice sizes are discarded the slope of the curve for $\ln(c_v^m)$ versus $\ln(L)$ diminishes indicating a nondivergent specific heat. This hypothesis is corroborated by the



ANISOTROPIC HEISENBERG MODEL WITH DIPOLAR...

PHYSICAL REVIEW B 79, 054404 (2009)

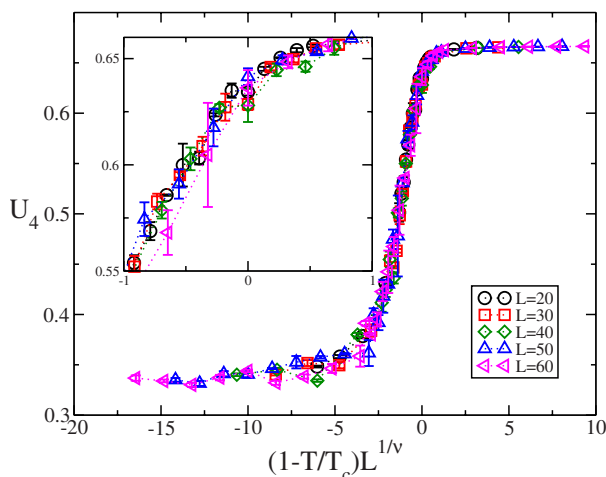


FIG. 16. (Color online) Scaling plot of fourth-order Binder's cumulant using $T_c=0.890$ and $1/\nu=0.82$ [see Eq. (15)]. The inset shows a zoom near $T=T_c$. Note that the curves for different lattice sizes collapse into a single curve.

scaling laws. Using the exponents ν , γ , and β that we obtained and the scaling law^{19,25} $\alpha+2\beta+\gamma=2$ or $\nu d=2-\alpha$, we get $\alpha\approx-0.4$. A negative value for the exponent α indicates that the specific heat does not diverge in the thermodynamic limit. Nevertheless, it does not exclude the possibility of the presence of a finite maximum at T_c . The observed behavior of the specific heat resembles that of a BKT phase transition where the specific heat does not diverge but presents a finite maximum close to T_{BKT} .²⁷ In the BKT phase transition it is observed that the specific heat presents a maximum close to the critical temperature and as the lattice size L increases the height of the specific-heat maximum also increases approaching an asymptotic value c_∞ as $L\rightarrow\infty$. This behavior is very similar to that obtained in this work. The results of Maier and Schwabl¹⁸ for the planar-to-paramagnetic phase transition in the dipolar XY model also predict a nondivergent specific heat. In order to make our data consistent with a negative value of the exponent α we conjecture the existence of a correction to the scaling function. This correction must be an additive analytical term to be included in the scaling function of the specific heat. Our ansatz is a term such as $c_v^m\approx c_\infty+b/\ln(L)+aL^{\alpha/\nu}$. For $\alpha/\nu<0$, c_v^m increases up to the maximum value c_∞ for $L\rightarrow\infty$. In Fig. 17 we show the best fit using the above function where the value of α/ν was fixed to -0.33 as obtained by using our results and scaling laws. It is worthy to note that in order to confirm this conjecture analytical results and simulations in larger systems are needed, but these are beyond the scope of this paper.

Concerning the presence of long-range order in this system some remarks are in order. First, note that the finite-size scaling theory used here is based on a critical phenomenon where at low temperatures the order parameter is nonzero in the thermodynamic limit, i.e., this theory implicitly assumes the presence of long-range order.^{19,25} The finite-size scaling functions of Eq. (12) describe our data with good accuracy for the entire temperature range employed in our simulations.

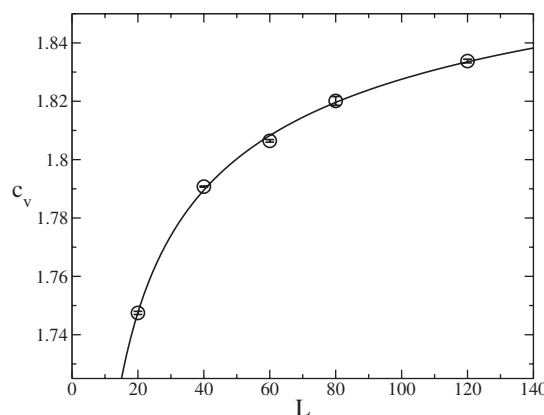


FIG. 17. Nonlinear least-squares fit of c_v^m according to $c_v^m=c_\infty+b/\ln(L)+aL^{-0.33}$. If we use the values of a , b , and c_∞ , obtained in this fit and perform another fit adjusting α/ν , a , b , and c_∞ , we observe that the new value of α/ν is -0.325 and the difference in χ^2 is negligible.

We can thus conclude that since the theory for systems presenting long-range order can describe our results for the entire temperature range, our system should present long-range order. It is notable that the exponents we obtained do not match those of well-known universality classes. Especially the exponent $\nu=1.22>1$ is quite unusual. This could be an indication that the planar-to-paramagnetic phase transition in the d-AH model belongs to another universality class characterized by a nondivergent specific heat and by the exponents $\nu=1.22(9)$, $\gamma=2.1(2)$, and $\beta=0.18(5)$.

In a recent paper Rapini *et al.*¹⁴ also studied the same model (d-AH) in a square lattice using a cutoff at $r_0=5a$. Their results are consistent with a BKT phase transition. Nevertheless, our results for the two-layer system is fully consistent with an order-disorder phase transition as discussed above. One can then conjecture that the inclusion of the second layer in the system may reinforce the transition, exposing its actual character. It may be that the consideration of the entire range of dipole interaction could have a similar effect. However, this is a speculation. This hypothesis cannot be confirmed without a very detailed study of systems with true long-range dipolar interactions. Indeed, if this is the case one could expect obtaining similar results to those of Maier and Schwabl¹⁸ for the dipolar XY model. Nevertheless, the exponents we obtained are clearly distinct from those of Maier and Schwabl and the finite value of ν that we found is a clear indication of an algebraic divergent correlation length instead of an exponential divergence as they found. Moreover, the finite-size scaling theory used is based in a power-law divergence of the correlation length [see Eq. (11)]. On the other hand, Bander and Mills²⁸ showed by using renormalization group arguments that for the Heisenberg model, without dipolar interactions, the existence of an infinitesimal easy-axis anisotropy is sufficient to bring the system to the Ising universality class. In this way the observed order-disorder behavior can be a consequence of the easy-axis anisotropy. Another point that must be raised is that the intrinsic anisotropic character of dipolar interactions can be

L. A. S. MÓL AND B. V. COSTA

PHYSICAL REVIEW B **79**, 054404 (2009)

responsible for the observed behavior instead of the long-range character (a similar behavior was observed recently in Ref. 29). In short, much work has still to be done in order to fully understand the planar-to-paramagnetic phase transition in ferromagnetic thin films where dipolar interactions are important.

ACKNOWLEDGMENTS

We would like to thank D. P. Landau for helpful discussions. Numerical calculation was done in the Linux cluster at Laboratório de Simulação at Departamento de Física–UFMG. We are grateful to CNPq and Fapemig (Brazilian agencies) for financial support.

*lucasmol@fisica.ufmg.br

†bvc@fisica.ufmg.br

- ¹R. P. Cowburn, D. K. Koltsov, A. O. Adeyeye, M. E. Welland, and D. M. Tricker, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 1042 (1999).
- ²W. A. Moura-Melo, A. R. Pereira, R. L. Silva, and N. M. Oliveira-Neto, *J. Appl. Phys.* **103**, 124306 (2008).
- ³S. A. Leonel, I. A. Marques, P. Z. Coura, and B. V. Costa, *J. Appl. Phys.* **102**, 104311 (2007).
- ⁴D. P. Pappas, K.-P. Kämper, and H. Hopster, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 3179 (1990).
- ⁵R. Allenspach and A. Bischof, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 3385 (1992).
- ⁶N. D. Mermin and H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966).
- ⁷J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, *J. Phys. C* **6**, 1181 (1973).
- ⁸V. L. Berezinskii, *Sov. Phys. JETP* **32**, 493 (1971).
- ⁹S. V. Maleev, *Sov. Phys. JETP* **43**, 1240 (1976).
- ¹⁰P. Bruno, *Phys. Rev. B* **43**, 6015 (1991).
- ¹¹K. De’Bell, A. B. MacIsaac, and J. P. Whitehead, *Rev. Mod. Phys.* **72**, 225 (2000).
- ¹²C. Santamaria and H. T. Diep, *J. Magn. Magn. Mater.* **212**, 23 (2000).
- ¹³M. Carubelli, O. V. Billoni, S. A. Pighin, S. A. Cannas, D. A. Stariolo, and F. A. Tamarit, *Phys. Rev. B* **77**, 134417 (2008).
- ¹⁴M. Rapini, R. A. Dias, and B. V. Costa, *Phys. Rev. B* **75**, 014425 (2007).
- ¹⁵M. Rapini, R. A. Dias, D. P. Landau, and B. V. Costa, *Braz. J. Phys.* **36**, 672 (2006).
- ¹⁶A. B. MacIsaac, K. De’Bell, and J. P. Whitehead, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 616 (1998).
- ¹⁷J. P. Whitehead, A. B. MacIsaac, and K. De’Bell, *Phys. Rev. B* **77**, 174415 (2008).
- ¹⁸P. G. Maier and F. Schwabl, *Phys. Rev. B* **70**, 134430 (2004).
- ¹⁹D. P. Landau and K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics* (Cambridge University Press, New York, 2005).
- ²⁰J. M. Thijssen, *Computational Physics* (Cambridge University Press, New York, 1999).
- ²¹A. M. Ferrenberg, in *Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics*, edited by D. Landau, K. Mon, and H. Schüttler (Spring-Verlag, Berlin, 1991), Vol. 3.
- ²²A. M. Ferrenberg and R. H. Swendsen, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1195 (1989).
- ²³K. Chen, A. M. Ferrenberg, and D. P. Landau, *Phys. Rev. B* **48**, 3249 (1993).
- ²⁴H. E. Stanley, *Introduction to Phase Transition and Critical Phenomena* (Clarendon, Oxford, 1971).
- ²⁵*Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems*, edited by V. Privman (World Scientific, Singapore, 1990).
- ²⁶K. Binder, *Phys. Rev. Lett.* **47**, 693 (1981).
- ²⁷A. Cuccoli, V. Tognetti, and R. Vaia, *Phys. Rev. B* **52**, 10221 (1995).
- ²⁸M. Bander and D. L. Mills, *Phys. Rev. B* **38**, 12015 (1988).
- ²⁹J. F. Fernández and J. J. Alonso, *Phys. Rev. B* **76**, 014403 (2007).

Referências Bibliográficas

- [1] LYMAN, P.; VARIAN, H. R. *How Much Information*. [s.n.], 2003. Disponível em: <<http://www.sims.berkeley.edu/how-much-info-2003> em 18/02/2008>.
- [2] SALINAS, S. R. A. *Introdução à Física Estatística*. [S.l.]: Edusp, 1971.
- [3] LANDAU, D.; BINDER, K. *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. New York, NY, USA: Cambridge University Press, 2005. ISBN 0521842387.
- [4] MÓL, L. A. S.; COSTA, B. V. *Phys. Rev. B*, v. 79, p. 054404, 2009.
- [5] ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. *Solid State Physics, International Edition*. [S.l.]: Saunders College Publishing, 1976.
- [6] AHARONI, A. *Introduction to the Theory of Ferromagnetism*. [S.l.]: Clarendon Press - Oxford, 1998.
- [7] DATTA GUPTA, S. *A paradigm called magnetism*. [S.l.]: World Scientific, 2008.
- [8] MERMIN, N. D.; WAGNER, H. *Phys. Rev. Lett.*, v. 17, p. 1133, 1966.
- [9] DE'BELL, K.; MACISAAC, A. B.; WHITEHEAD, J. P. *Rev. Mod. Phys.*, v. 72, p. 225, 2000.
- [10] BANDER, M.; MILLS, D. L. *Phys. Rev. B*, v. 38, p. 12015, 1988.
- [11] GRIFFITHS, D. J. *Introduction to Electrodynamics*. [S.l.]: Prentice-Hall, 1999.
- [12] COWBURN, R. P. et al. *Phys. Rev. Lett.*, v. 83, p. 1042, 1999.
- [13] LEONEL, S. A. et al. *J. Appl. Phys.*, v. 102, p. 104311, 2007.
- [14] CASTELNOVO, C.; MOESSNER, R.; SONDHI, S. L. *Nature*, v. 451, p. 42, 2008.
- [15] MÓL, L. A. S. et al. *arXiv:0809.2105v1 [cond-mat.mtrl-sci]*.
- [16] RAPINI, M.; DIAS, R. A.; COSTA, B. *Phys. Rev. B*, v. 75, p. 014425, 2007.
- [17] METROPOLIS, N. et al. *J. Chem. Phys.*, v. 21, p. 1087, 1953.
- [18] MALEEV, S. V. *Sov. Phys. JETP*, v. 43, p. 1240, 1976.
- [19] BRUNO, P. *Phys. Rev. B*, v. 43, p. 6015–6021, 1991.
- [20] SANTAMARIA, C.; DIEP, H. *J. Magn. Magn. Mater.*, v. 212, p. 23, 2000.
- [21] CARUBELLI, M. et al. *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)*, v. 77, p. 134417, 2008.

- [22] PAPPAS, D. P.; KÄMPER, K. P.; HOPSTER, H. *Phys. Rev. Lett.*, v. 64, p. 3179, 1990.
- [23] ALLENSPACH, R.; STAMPANONI, M.; BISCHOF, A. *Phys. Rev. Lett.*, v. 65, p. 3344, 1990.
- [24] ALLENSPACH, R.; BISCHOF, A. *Phys. Rev. Lett.*, v. 69, p. 3385, 1992.
- [25] SANTAMARIA, C.; DIEP, H. T. *IEEE - Trans. Magn.*, v. 34, p. 1051, 1998.
- [26] SANTAMARIA, C.; DIEP, H. T. *Journ. Magn. Magn. Mater.*, v. 34, p. 1051, 1998.
- [27] MACISAAC, A. B. *Phys. A*, v. 239, p. 147, 1997.
- [28] MACISAAC, A. B. et al. *Phys. Rev. Lett.*, v. 77, p. 739, 1996.
- [29] MACISAAC, A. B.; DE'BELL, K.; WHITEHEAD, J. P. *Phys. Rev. Lett.*, v. 80, p. 616, 1998.
- [30] TAYLOR, M. B.; GYORFFY, B. L. *J. Phys.: Condens. Matter*, v. 5, p. 4527, 1993.
- [31] MAIER, P. G.; SCHWABL, F. *Phys. Rev. B*, v. 70, p. 134430, 2004.
- [32] BRAGA, M. R. *Estudo de Filmes Magnéticos Ultrafinos pelo Método de Monte Carlo*. Dissertação (Mestrado), 2006.
- [33] EHRENFEST, P. *Prog. Amsterdam Acad.*, v. 36, p. 153, 1933.
- [34] FISHER, M. E. *Rev. Mod. Phys.*, v. 46, p. 597, 1974.
- [35] STANLEY, H. E. *Introduction to Phase Transition and Critical Phenomena*. [S.l.]: Clarendon Press - Oxford, 1971.
- [36] CHEN, K. *Computer simulation of Three-dimensional Classical Heisenberg Models*. Tese (Doutorado) — University of Georgia, 1993.
- [37] HOHENBERG, P. C.; HALPERIN, B. I. *Rev. Mod. Phys.*, v. 49, p. 435, 1977.
- [38] PRIVMAN, V. (Ed.). *Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems*. [S.l.]: World Scientific, 1990.
- [39] CHEN, K.; FERRENBURG, A. M.; LANDAU, D. P. *Phys. Rev. B*, v. 48, p. 3249, 1993.
- [40] BINDER, K. *Z. Phys. B*, v. 43, p. 119, 1981.
- [41] BINDER, K. *Phys. Rev. Lett.*, v. 47, p. 693, 1981.
- [42] BRUNO, P. *Phys. Rev. Lett.*, v. 87, p. 137203, 2001.
- [43] PATRASCIOIU, A.; SEILER, E. *Phys. Rev. Lett.*, v. 60, p. 875–878, 1988.
- [44] BEREZINSKII, V. L. *Sov. Phys. JETP*, v. 32, p. 493, 1971.
- [45] KOSTERLITZ, J. M.; THOULESS, D. J. *J. Phys. C*, v. 6, p. 1181, 1973.
- [46] KOSTERLITZ, J. M.; THOULESS, D. J. *Progress in Low Temperature Physics*. Amsterdam: North-Holland, 1977.

- [47] KOGUT, J. B. *Rev. Mod. Phys.*, v. 51, p. 680, 1979.
- [48] CUCCOLI, A.; TOGNETTI, V.; VAIA, R. *Phys. Rev. B*, v. 52, p. 10221, 1995.
- [49] GUPTA, R.; BAILLIE, C. F. *Phys. Rev. B*, v. 45, p. 2883, 1992.
- [50] OLSON, P. *Phys. Rev. Lett.*, v. 73, p. 3339, 1973.
- [51] LIMA, A. B.; COSTA, B. V. *J. Magn. Magn. Mater.*, v. 263, p. 324, 2003.
- [52] FERRENBURG, A. M. Histogram techniques for studying phase transitions. In: LANDAU, D.; MON, K.; SCHÜTTLER, H. (Ed.). *Computer simulation studies in condensed matter physics III*. Heidelberg: Springer-Verlag Berlin, 1991.
- [53] FERRENBURG, A. M.; SWENDSEN, R. H. *Phys. Rev. Lett.*, v. 63, p. 1195, 1989.
- [54] WEIS, J. J. *Jour. Phys.: Condens. Matter*, v. 15, p. S1471, 2003.
- [55] WANG, Z.; HOLM, C. *The Journal of Chemical Physics*, v. 115, p. 6351–6359, 2001.
- [56] GAO, G. T.; ZENG, X. C.; WANG, W. *The Journal of Chemical Physics*, v. 106, p. 3311–3317, 1997.
- [57] FERNÁNDEZ, J. F.; ALONSO, J. J. *Phys. Rev. B*, v. 76, p. 014403, 2007.
- [58] Table of integral, series and products. In: GRADSHTEYN, I.; RYZHIK, I. (Ed.). Orlando: Academic Press, 1980. p. 942 eq. 8.356(4) e pag. 717 eq. 6.631(7). A derivada da função gama se encontra na pag. 942 (eq. 8.356(4)) e a integral da função de Bessel na pag. 717 (eq. 6.631(7)).