

**Estudo de filmes magnéticos ultrafinos pelo**

**método de Monte Carlo**

**MARCELLA RAPINI BRAGA**

Julho 2006

**Estudo de filmes magnéticos ultrafinos pelo método de  
Monte Carlo**

Marcella Rapini Braga

Orientador: Prof. Dr. Bismarck Vaz da Costa

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

Julho 2006

*Aos meus pais Anne e Romeu,  
ao meu querido Elton.*

# Agradecimentos

A Deus, pela vida, saúde e oportunidade de aprender cada vez mais.

Aos meus pais Anne e Romeu, pelo amor, compreensão, incentivo e apoio em todas as horas e circunstâncias.

Ao Elton, pelo seu amor, pela paciência e presença tão marcante em minha vida.

À minha irmã Rafa, pela amizade e todas as confusões.

Ao chefe Bismarck, pela orientação e confiança depositada em mim.

Aos companheiros de laboratório e amigos Anderson (e Tatiana), Flávio, Rodrigo, Mól, Júlio César e Marcelo pelas discussões filosóficas e conversas fiadas.

Aos meus amigos da física, em especial Fred, Juliana, Francisco, Sílvia, Pierre, Vagner, Ed e Silvinha.

Aos professores que contribuíram para a minha formação.

A todos que de alguma forma contribuíram para a realização desse trabalho.

Ao CNPq, pela concessão da bolsa.

# Resumo

Neste trabalho estudamos um modelo de spins em rede para filmes magnéticos de uma camada atômica através de simulações de Monte Carlo (MC) e utilizamos técnicas de correção para sistemas finitos (FSS) para a análise dos dados. O modelo utilizado apresenta um diagrama de fases rico do qual três tipos de transições de fase foram caracterizados: uma de segunda ordem, uma de primeira ordem e outra Berezinskii-Kosterlitz-Thouless.

# Abstract

In this work we have studied a classical spin model of ultrathin magnetic films with one monolayer through Monte Carlo simulations (MC) and we have used Finite Size Scaling (FSS) techniques to analyze the data. This model has a very rich phase diagram and we have characterized three different types of phase transitions: one of second order, one of first order and the other of Berezinskii-Kosterlitz-Thouless type.

# Conteúdo

<b>Agradecimentos</b>	<b>ii</b>
<b>Resumo</b>	<b>iii</b>
<b>Abstract</b>	<b>iv</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Noções gerais sobre transições de fases e fenômenos críticos</b>	<b>3</b>
2.1 Teoria de Landau . . . . .	6
2.2 Modelos de spin e transições de fases . . . . .	8
2.2.1 O modelo de Ising . . . . .	9
2.2.2 O modelo de Heisenberg . . . . .	11
2.2.3 O modelo do rotor planar e a transição de Berezinskii-Kosterlitz-Thouless . . . . .	12
2.3 Expoentes críticos e universalidade . . . . .	17
2.4 Efeitos de tamanho finito . . . . .	24
2.4.1 A Teoria de Escala para sistemas críticos . . . . .	24

2.4.2	A transição <i>BKT</i> . . . . .	27
2.4.3	Transições de primeira ordem . . . . .	30
<b>3</b>	<b>O Método de Monte Carlo</b>	<b>36</b>
3.1	Cadeias markovianas . . . . .	38
3.1.1	A equação mestra e o balanço detalhado . . . . .	39
3.2	Algoritmo de Metropolis . . . . .	41
3.2.1	Efeitos de relaxação . . . . .	42
<b>4</b>	<b>Simulação de um filme ultrafino</b>	<b>45</b>
4.1	O modelo . . . . .	45
4.1.1	A interação de troca . . . . .	46
4.1.2	A anisotropia cristalina de superfície . . . . .	50
4.1.3	A interação dipolar . . . . .	51
4.2	Detalhes da simulação . . . . .	54
4.2.1	Equilíbrio . . . . .	54
4.2.2	Cálculo de valores médios e erros . . . . .	57
4.2.3	Quantidades termodinâmicas . . . . .	59
4.3	Explorando o espaço de parâmetros . . . . .	62
4.3.1	Caso $D = 0.10$ . . . . .	62
4.3.2	Caso $D = 0.20$ . . . . .	65
4.3.3	Caso $D = 0.15$ . . . . .	69
<b>5</b>	<b>Análise de tamanho finito e expoentes críticos</b>	<b>75</b>



5.1	Caso $D = 0.10$ . . . . .	76
5.1.1	Determinação da temperatura crítica . . . . .	76
5.1.2	Análise dos expoentes críticos . . . . .	78
5.2	Análise da transição $BKT$ . . . . .	82
5.3	Análise da transição de primeira ordem no caso $D = 0.15$ . . . . .	89
<b>6</b>	<b>Conclusões e perspectivas</b>	<b>91</b>
<b>A</b>	<b>Programas</b>	<b>99</b>
<b>B</b>	<b>Artigo</b>	<b>100</b>

# Lista de Figuras

2.1	Diagrama de fases simplificado de um líquido comum. . . . .	4
2.2	Gráficos esquemáticos da dependência da energia livre e da energia interna com a temperatura para um sistema que apresenta uma transição de fases de primeira ordem (acima) e segunda ordem (embaixo). . . . .	5
2.3	Energia livre em uma transição de segunda ordem. . . . .	7
2.4	Energia livre em uma transição de primeira ordem. . . . .	8
2.5	Projeção do diagrama de fases do ferromagneto de Ising (esquerda) e gráficos de $m$ em função de $T$ e $H$ . . . . .	10
2.6	Configurações de um vórtice (esquerda) e um antivórtice (direita) de cargas unitárias[23].	15
2.7	Par vórtice-antivórtice [23]. . . . .	16
4.1	Energia por spin e magnetização para $D = 0.10$ e $T = 1.2$ em função dos passos de monte carlo. . . . .	55
4.2	Energia por spin para um sistema com temperatura crítica conhecida e $D = 0.10$ em duas temperaturas diferentes: $T \sim T_c$ e $T < T_c$ . . . . .	56
4.3	Energia por spin para dois tamanhos de rede diferentes: $L = 30$ e $L = 50$ . . . . .	57

4.4	Erro da energia por spin em função do número de feixes para configurações correlacionadas e descorrelacionadas. . . . .	59
4.5	Magnetização fora do plano $M_z$ (esquerda) e no plano $M_{xy}$ (direita) em função da temperatura para vários tamanhos de rede. . . . .	62
4.6	Calor específico $c$ (esquerda) e susceptibilidade $\chi_z$ (direita) em função da temperatura para vários tamanhos de rede. . . . .	63
4.7	Cumulante de Binder da magnetização em $z$ para vários tamanhos de rede. . . . .	64
4.8	Densidade de vórtices no plano do filme em função da temperatura para vários tamanhos de rede. . . . .	64
4.9	Magnetização na direção $z$ (símbolos fechados) e no plano (símbolos abertos) para $D = 0.20$ . . . . .	66
4.10	Calor específico (esquerda) e susceptibilidade no plano (direita) para $D = 0.20$ . . . . .	66
4.11	Densidade de vórtices para $D = 0.20$ . . . . .	67
4.12	Configurações da rede $L = 30$ em $T = 0.7$ (esquerda) e $T = 0.8$ (direita). Vórtices e antivórtices são quadrados e esferas respectivamente. . . . .	68
4.13	Cumulante de Binder da magnetização no plano $xy$ para $D = 0.20$ . . . . .	69
4.14	Magnetização por spin no caso $D = 0.15$ para vários tamanhos de rede, componente $z$ (símbolos abertos) e componente no plano (símbolos fechados). . . . .	70
4.15	Energia por spin (esquerda) e o cumulante da energia (direita) para $D = 0.15$ . . . . .	71
4.16	Calor específico no caso $D = 0.15$ . . . . .	71
4.17	Susceptibilidade no plano (esquerda) e fora do plano (direita) para $D = 0.15$ . . . . .	72
4.18	Cumulante de Binder da magnetização no plano (esquerda) e da magnetização fora do plano (direita) em função da temperatura para $D = 0.15$ . . . . .	72

4.19	Densidade de vórtices no plano $xy$ para $D = 0.15$ . . . . .	73
4.20	Configurações da rede $L = 30$ em $T = 0.6$ (esquerda) e $T = 0.7$ (direita). Vórtices e antivórtices são quadrados e esferas respectivamente. . . . .	73
5.1	Temperatura crítica em função do inverso do comprimento linear $L$ para o calor específico, a susceptibilidade no eixo $z$ e o cumulante de Binder do parâmetro de ordem $M_z$ . . . . .	77
5.2	Logaritmo do calor específico $c$ , da susceptibilidade $\chi_z$ e da magnetização $M_z$ em função do logaritmo de $L$ . . . . .	79
5.3	Magnetização vezes $L^{\beta/\nu}$ em função de $tL^{1/\nu}$ para todas as redes. . . . .	80
5.4	Susceptibilidade vezes $L^{-\gamma/\nu}$ em função de $tL^{1/\nu}$ para todas as redes. . . . .	81
5.5	Calor específico vezes o inverso de $\ln L$ em função de $tL^{1/\nu}$ para todas as redes ( $T > T_c$ (esquerda) e $T < T_c$ (direita)). . . . .	82
5.6	Temperatura crítica em função do inverso do comprimento linear $L$ para a susceptibilidade $xy$ no sistema com $D = 0.15$ . No ajuste linear desprezou-se os pontos para $L = 10$ e $L = 20$ . . . . .	83
5.7	Temperatura crítica em função do inverso do comprimento linear $L$ para a susceptibilidade $xy$ no sistema com $D = 0.20$ . No ajuste linear desprezou-se os pontos para $L = 10$ e $L = 20$ . . . . .	84
5.8	Calor específico em função de $\ln L$ para os três casos estudados. . . . .	85
5.9	Susceptibilidade reduzida no caso $D = 0.15$ (esquerda) e $D = 0.20$ (direita). . . . .	86
5.10	Susceptibilidade reduzida sobre $L^{\frac{7}{4}}$ em função de $L$ para $D = 0.15$ (esquerda) e $D = 0.20$ (direita). . . . .	87

5.11	Função correlação da componente do spin no plano $xy$ para $T = 0.89$ (esquerda), $T = 0.69$ (centro) e $T = 0.61$ (direita). . . . .	87
5.12	Logaritmo da densidade de vórtices para $D = 0.15$ (esquerda) e $D = 0.20$ (direita). . . . .	88
5.13	Gráficos da temperatura de transição efetiva $T^L$ para a susceptibilidade no eixo $z$ (esquerda), a susceptibilidade no plano $xy$ (centro) e o calor específico (direita). . . . .	89
6.1	Esboço do diagrama de fases para o modelo de um filme ultrafino no espaço $D \times T$ com $A$ e $J$ constante. A fase I é ferromagnética, a fase II é uma fase $XY$ enquanto a fase III é paramagnética. . . . .	92

# Lista de Tabelas

5.1	Temperatura crítica $T_c^\infty$ para a susceptibilidade, o calor específico e o cumulante de quarta ordem. . . . .	77
5.2	Valor máximo do calor específico para todas as redes com $D = 0.15$ e $D = 0.20$ . . . . .	84
5.3	Temperatura de transição no limite termodinâmico $T^\infty$ . . . . .	90

# Capítulo 1

## Introdução

Vários efeitos de superfície são responsáveis por fenômenos interessantes em sistemas de baixa dimensão como filmes finos e aglomerados (clusters). O magnetismo de filmes [1, 2, 3, 4, 5] tem sido estudado através de diversas técnicas experimentais e com o auxílio da técnica de Epitaxia de Feixe Molecular (MBE), que permite o controle em escala atômica do crescimento de materiais de alta qualidade.

Modelos magnéticos contínuos e isotrópicos em duas dimensões não apresentam ordem de longo alcance em temperaturas finitas [6] e portanto o ferromagnetismo em duas dimensões é regido por anisotropias. A anisotropia cristalina de superfície é devida à quebra de simetria translacional na direção perpendicular ao plano de um filme magnético ultrafino. A anisotropia de forma tem sua origem nas propriedades magnetostáticas da matéria, mais especificamente nas interações clássicas entre dipolos magnéticos. A anisotropia de superfície pode dominar a anisotropia de forma tal que observa-se uma magnetização espontânea perpendicular ao plano do filme [7, 8].

Estudos teóricos sugerem que quando a anisotropia de forma compensa a de superfície, a magnetização passa de perpendicular para paralela ao plano do filme em uma temperatura  $T_R$  menor que a temperatura de Curie  $T_C$ . Esse fenômeno já foi observado em diversos tipos de filme, como por exemplo, Fe sobre Cu(100)[1, 2], Fe sobre Ag(100)[3] e foi denominado transição de reorientação. A transição também ocorre com o aumento da espessura do filme, por exemplo em Ni sobre Cu(001)[9].

O objetivo desse trabalho é estudar um modelo de tais filmes utilizando a técnica de simulação de Monte Carlo e caracterizar as transições que estão presentes em seu diagrama de fases.

No segundo capítulo serão desenvolvidas idéias gerais sobre transições de fases, principalmente em sistemas magnéticos. Como os efeitos de tamanho finito são cruciais na análise de dados obtidos de simulações, eles serão discutidos no final do capítulo.

O método de Monte Carlo será apresentado no terceiro capítulo, juntamente com o algoritmo de Metropolis, aplicado nas simulações realizadas no trabalho.

No quarto capítulo, o modelo utilizado será discutido e os resultados das simulações serão apresentados. No quinto capítulo está a análise de tamanho finito dos sistemas estudados. Finalmente, no capítulo de conclusão constarão uma síntese das discussões contidas nos dois capítulos anteriores e as perspectivas quanto à continuação desse projeto.



## Capítulo 2

# Noções gerais sobre transições de fases e fenômenos críticos

O estudo de transições de fases tem sido um tópico de grande interesse em várias áreas científicas e essencial em diversos campos da Física [10]. Além disso, fenômenos envolvendo transições de fases estão presentes no cotidiano das pessoas como, por exemplo, as mudanças de fases da água: ebulição, condensação, congelamento, fusão e sublimação.

Uma transição de fases é caracterizada por mudanças agudas ou descontinuidades nas propriedades termodinâmicas do sistema como resposta a variações contínuas em alguma condição externa, por exemplo, temperatura, pressão, etc.

O conjunto de pontos nos quais ocorrem transições de fases no espaço de campos termodinâmicos constitui o limite entre fases. O gráfico desse espaço com os limites e fases do sistema é chamado de diagrama de fases. Como exemplo, um

líquido comum apresenta o seguinte diagrama de fases projetado no plano de pressão e temperatura[11].

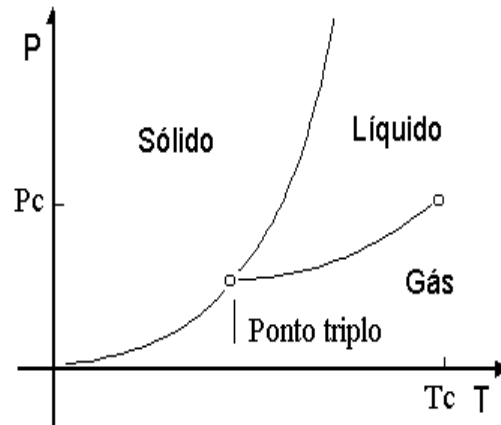


Figura 2.1: Diagrama de fases simplificado de um líquido comum.

A obtenção de diagramas de fases de sistemas atômicos ou moleculares a partir das interações microscópicas entre os constituintes é um dos objetivos da Mecânica Estatística.

Para um sistema em equilíbrio, a equação fundamental expressa como a energia depende dos parâmetros extensivos do sistema em consideração. Porém, dependendo das condições externas do sistema, se torna mais conveniente realizar uma transformação de Legendre nessa função e escrever explicitamente a dependência com os parâmetros externos. Por exemplo, quando em contato com um reservatório térmico de temperatura  $T$ , utiliza-se a energia livre de Helmholtz  $F(T, N, V, \dots)$  onde  $V$  é o volume e  $N$  é o número de partículas. Todas as quantidades termodinâmicas macroscópicas são obtidas por diferenciação dessa função [12].

De acordo com Ehrenfest [13], as transições de fases são classificadas em ordem  $i$  se a  $i$ -ésima derivada da energia livre (ou função similar) é descontínua. No entanto, essa classificação não considera as divergências que podem ocorrer, tornando-se inapropriada. Uma classificação mais recente é devida a Fisher [14]. A transição é de primeira ordem se a primeira derivada é descontínua. Se essa derivada é contínua mas a segunda derivada é descontínua ou infinita, a transição recebe o nome de contínua ou crítica. Na figura 2.2 estão os gráficos esquemáticos da energia livre e uma de suas derivadas para os dois tipos de transição de fases [10].

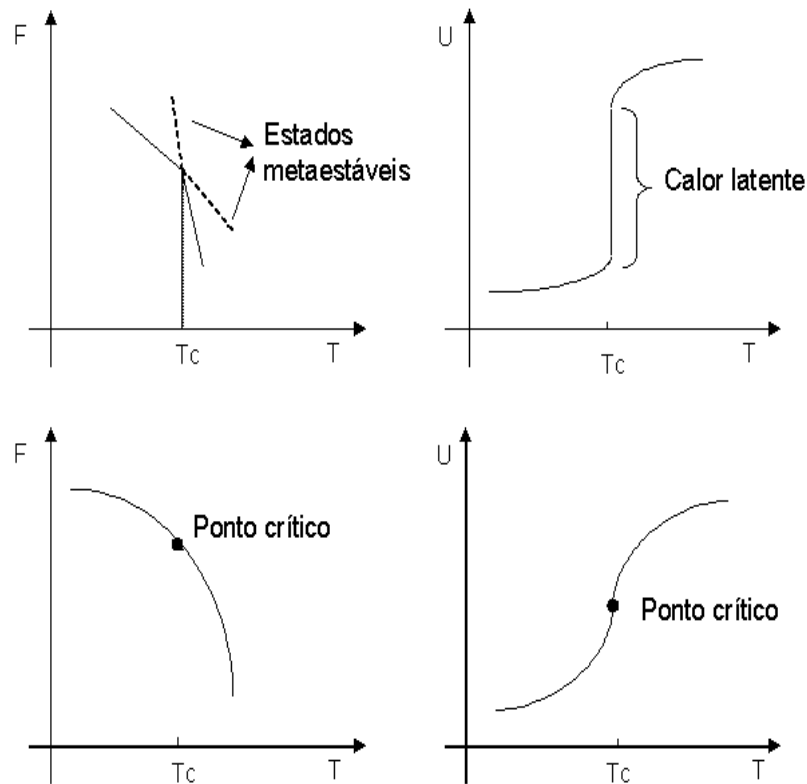


Figura 2.2: Gráficos esquemáticos da dependência da energia livre e da energia interna com a temperatura para um sistema que apresenta uma transição de fases de primeira ordem (acima) e segunda ordem (embaixo).

A existência de uma quantidade que é não-nula abaixo do ponto crítico e zero

acima desse é comum em sistemas que apresentam transições de fases e caracteriza o grau de ordem nesse sistema. Tal quantidade é conhecida como parâmetro de ordem e pode ser um escalar ou ter mais componentes (mesmo complexas). Esse parâmetro é definido de forma diferente para cada sistema em particular e sua identificação nem sempre é trivial. No sistema líquido-gás, por exemplo, a diferença de densidade das fases líquida e gasosa é tomada como parâmetro de ordem.

## 2.1 Teoria de Landau

A teoria de Landau para transições de fases é uma teoria de campo médio, ou seja, as flutuações existentes no sistema são ignoradas e as quantidades relevantes são valores médios.

No caso de uma sistema magnético, supõe-se que a energia livre de Gibbs  $G(m, T)$  em  $T$  próximo de  $T_c$  possa ser expandida em uma série de Taylor no parâmetro de ordem, a magnetização  $m$ , e somente termos compatíveis com a simetria do sistema são mantidos[15].

Para um ferromagneto simples com simetria de inversão e em campo externo nulo obtém-se

$$G(m, T) = G_0(T) + \frac{1}{2}a_2(T)m^2 + \frac{1}{4}a_4(T)m^4 + \dots \quad (2.1)$$

No equilíbrio, a energia livre deve ser mínima. Considere  $a_4(T) > 0$  e o truncamento da equação acima em seu termo de quarta ordem. Minimizando  $G$  em relação à magnetização com  $T$  fixo,

$$\frac{\partial G}{\partial m} = a_2(T)m + a_4(T)m^3 = 0. \quad (2.2)$$

Logo, existem três soluções

$$\begin{aligned} m_1 &= 0 \\ m_{2,3} &= \pm \sqrt{\frac{-a_2(T)}{a_4(T)}} \end{aligned} \quad (2.3)$$

onde  $a_2 = a(T - T_c)$  porque a condição  $a_2 < 0$  para temperaturas menores que  $T_c$  assegura que  $m = 0$  não seja um mínimo nessa região.

Logo, a solução  $m_1 = 0$  ocorre para  $T > T_c$  e existem duas soluções para  $T < T_c$ , ou seja, há uma degenerescência dos estados abaixo da temperatura de transição. A figura 2.3 mostra um desenho esquemático da energia livre.

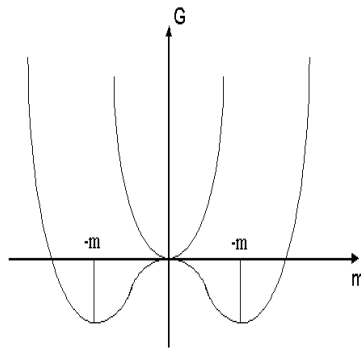


Figura 2.3: Energia livre em uma transição de segunda ordem.

Se o termo de sexta ordem for mantido na expressão para a energia livre,  $a_4(T) < 0$  e  $a_6(T) > 0$ , uma transição de fases de primeira ordem é descrita. Nesse caso, as equações de minimização de  $G$  são

$$\frac{\partial G}{\partial m} = m(a_2 + a_4 m^2 + a_6 m^4) = 0 \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial^2 G}{\partial m^2} \geq 0.$$

A discussão das condições acima pode ser visualizada na figura 2.4. Para  $T > T_2 = T_c + \frac{a_4^2}{4a_6a_2}$  somente a fase I, correspondendo a  $m = 0$ , é estável. Em  $T = T_2$  a fase metaestável II ( $m \neq 0$ ) surge, sinalizada por um mínimo secundário na curva  $G(m)$ .

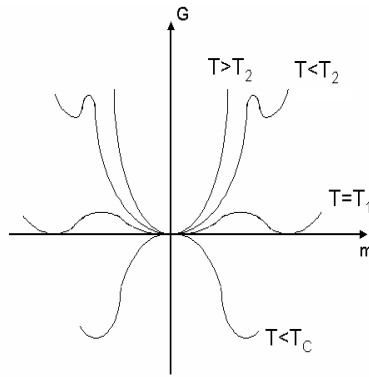


Figura 2.4: Energia livre em uma transição de primeira ordem.

Com a diminuição da temperatura, a estabilidade da fase II aumenta até que em  $T_1 = T_c + \frac{3a_4^2}{16a_6a_2}$  as duas fases coexistem. Abaixo de  $T_1$ , a fase II se torna mais estável que a fase I até que em  $T = T_c$  ela é o estado de equilíbrio.

## 2.2 Modelos de spin e transições de fases

No estudo de sistemas magnéticos, os modelos clássicos mais simples utilizados pertencem à classe dos modelos de rede. Cada sítio da rede  $d$ -dimensional recebe uma variável de spin  $\vec{S}_i$  de dimensão  $n$  e comprimento  $S$ . Para modelar um cristal tem-se  $d = 3$ ;  $d = 2$  para uma monocamada de spins e  $d = 1$  para uma cadeia de spins[16].

Os modelos mais conhecidos para descrever materiais magnéticos apresentam o seguinte hamiltoniano

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \vec{H} \cdot \sum_i \vec{S}_i, \quad (2.5)$$

onde  $N$  é o número de spins da rede.

No primeiro termo, a soma é efetuada sobre primeiros vizinhos e representa a energia de interação de curto alcance entre os spins. A constante  $J$  é estimada pela energia de troca entre spins vizinhos. Se  $J > 0$ , o alinhamento paralelo dos spins diminui a energia e tem-se um ferromagneto. Se  $J < 0$ , o alinhamento antiparalelo é favorecido e o sistema é antiferromagnético. O segundo termo do hamiltoniano representa a interação com um campo magnético externo homogêneo  $\vec{H}$ .

De acordo com a simetria das variáveis de spin  $O(n)$ , definem-se diversos modelos:  $n = 1$  (Ising),  $n = 2$  (X-Y),  $n = 3$  (Heisenberg), ...,  $\infty$  (esférico).

### 2.2.1 O modelo de Ising

No modelo de Ising, a variável de spin pode receber somente dois valores,  $S_i = \pm 1$ , spin "para cima" ou "para baixo", e portanto para  $J > 0$  descreve um material ferromagnético uniaxial. Esse modelo foi estudado em 1925 por Lenz e Ising [17], os quais mostraram que ele não apresenta transição de fases em uma dimensão para  $T > 0$ .

O modelo em duas dimensões foi resolvido exatamente por Onsager em 1944 para uma rede quadrada com campo nulo [18] e apresenta dois tipos de transição de

fases: uma de primeira ordem, conduzida pelo campo externo e outra contínua com a temperatura, conhecida também como do tipo ordem-desordem.

Na figura 2.5 há a projeção do diagrama de fases do ferromagneto de Ising no plano  $TH$  além dos gráficos de  $m$  em função de  $T$  e  $H$  onde  $m$  é a magnetização do sistema, ou seja, a diferença entre o número de spins para cima e o de spins para baixo.

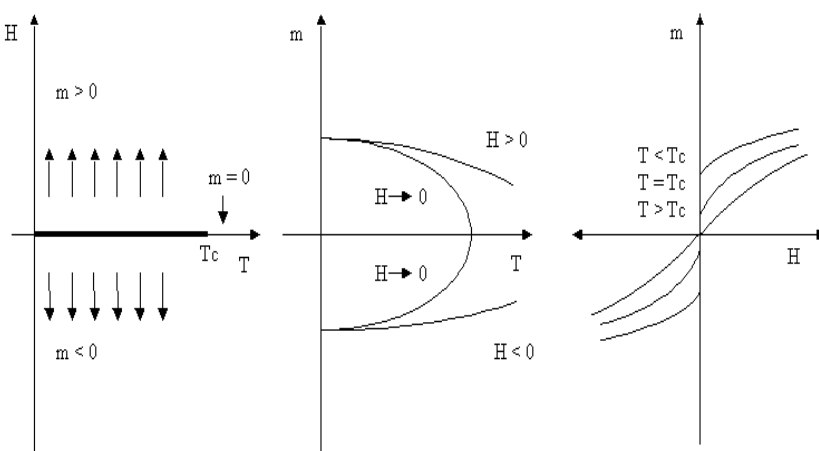


Figura 2.5: Projeção do diagrama de fases do ferromagneto de Ising (esquerda) e gráficos de  $m$  em função de  $T$  e  $H$ .

No diagrama  $TH$  observa-se duas fases distintas para temperaturas baixas. Para  $H > 0$ , os spins tendem a apontar para cima e  $m > 0$ . Ao contrário, quando  $H < 0$  eles tendem a apontar para baixo e  $m < 0$ . Então o valor da magnetização sofre uma descontinuidade em  $H = 0$ , como pode ser visto no gráfico de  $m \times H$ . No entanto, essa descontinuidade diminui com o aumento da temperatura até que em  $T = T_c$  ela desaparece. Portanto tem-se uma linha de primeira ordem em  $H = 0$  separando duas fases distintas para  $T < T_c$  onde  $T_c$  é denominado ponto crítico.

Nessa linha de campo nulo existe uma magnetização espontânea que decresce



com a temperatura até que para  $T \geq T_c$  o sistema torna-se desordenado e  $m = 0$ , como mostrado no gráfico de  $m \times T$ . Então pode-se afirmar que há ordem de longo alcance para  $T < T_c$ . A magnetização espontânea pode ser positiva ou negativa visto que o modelo apresenta simetria de inversão de spins. Essa é uma transição de fases contínua porque a derivada da magnetização em relação ao campo e a derivada da energia em relação à temperatura apresentam divergências em  $T_c$ . Para o campo externo diferente de zero, a magnetização decresce suavemente a partir de seu valor saturado.

### 2.2.2 O modelo de Heisenberg

O modelo de Heisenberg tem simetria contínua, isto é, as variáveis  $\vec{S}_i$  podem apontar em qualquer direção do espaço tridimensional e a energia do sistema é invariante à rotação de todos os spins por um ângulo arbitrário  $\theta$  quando o campo é nulo. Com campo externo, o hamiltoniano ainda é invariante a rotações dos spins no plano perpendicular a  $\vec{H}$ .

Essa simetria de rotação é quebrada espontaneamente quando existe ordem de longo alcance. É intuitivo pensar que em caso de simetria contínua, as flutuações térmicas conseguem destruir essa ordem mais facilmente quando comparado com um sistema que tenha simetria discreta (ferromagneto de Ising). Então o aumento da entropia devido ao maior número de estados do sistema deve ser compensado por um aumento também na energia para que haja ordem de longo alcance para  $T > 0$ . Um modo de conseguir isso é aumentando o número de vizinhos de cada spin, ou seja, a dimensão da rede.

Uma análise detalhada seguindo esse raciocínio [6] mostra que ocorre a transição tipo ordem-desordem em modelos de simetria contínua somente quando  $d > 2$ , por exemplo, no modelo de Heisenberg em 3 dimensões.

### 2.2.3 O modelo do rotor planar e a transição de Berezinskii-Kosterlitz-Thouless

No modelo do rotor planar, os spins são vetores clássicos contidos no plano  $S_x - S_y$  e podem ser especificados pelo ângulo  $\phi_i$  ( $0 \leq \phi_i \leq 2\pi$ ) com respeito a um eixo arbitrário nesse plano (por exemplo, o eixo  $S_x$ ). O modelo possui o seguinte hamiltoniano (na ausência de campo externo)

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} (S_{ix}S_{jx} + S_{iy}S_{jy}) = -J \sum_{\langle ij \rangle} \cos(\phi_i - \phi_j), \quad (2.6)$$

onde  $|\vec{S}_i| = 1$ .

O hamiltoniano acima tem simetria contínua: a transformação  $\phi_i \rightarrow \phi_i + \phi_0$  para todo  $i$  deixa-o invariante. Então como o modelo de Heisenberg, o rotor planar em duas dimensões não exibe ordem de longo alcance[6]. No entanto, esse sistema sofre uma transição de fases a uma temperatura finita  $T_{BKT}$ . Essa transição é conhecida como Berezinskii-Kosterlitz-Thouless[19, 20]. Examinando a função correlação spin-spin no regime de altas e baixas temperaturas, observa-se dois comportamentos distintos. A função correlação é escrita como

$$\langle \vec{S}(0) \cdot \vec{S}(r) \rangle = \langle \exp[i(\phi_0 - \phi_r)] \rangle. \quad (2.7)$$

Em temperaturas altas, essa função pode ser estimada usando uma expansão em temperaturas altas[21]. O primeiro termo não-nulo que contribui para a expansão é de ordem  $(J/k_B T)^{|r|}$ . Logo,

$$\langle \exp\{i[\phi_0 - \phi_r]\} \rangle \simeq (J/k_B T)^{|r|} = \exp\{-|r|\ln(k_B T/J)\}, \quad (2.8)$$

onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann e a função correlação decai exponencialmente com a distância entre os spins,  $r$ .

No regime de baixas temperaturas, a falta de flutuações térmicas significativas sugere que  $\phi_r$  varia de forma lenta e suave com a posição na rede. Então o cosseno na equação 2.6 pode ser expandido até segunda ordem

$$H \approx \frac{1}{2} J \sum_{\langle ij \rangle} (\phi_i - \phi_j)^2. \quad (2.9)$$

Nesse caso a função correlação pode ser avaliada facilmente porque contém somente integrais gaussianas e obtém-se o seguinte resultado[22]

$$\langle \vec{S}(0) \cdot \vec{S}(r) \rangle \sim \left( \frac{1}{|r|} \right)^{\frac{k_B T}{2\pi J}} = |r|^{-\eta}. \quad (2.10)$$

Esta é uma clara indicação de que o sistema sofre uma transição de fases em que a função de correlação muda seu comportamento, de exponencial a alta temperatura, para lei de potência a baixa temperatura. Como o expoente crítico  $\eta$  depende da temperatura, tem-se uma linha de pontos críticos. Isto é, o modelo é crítico para  $T < T_{BkT}$ .

De acordo com o trabalho de Berezinskii, Kosterlitz e Thouless [19, 20], essa transição de fases é causada por um mecanismo de desligamento de pares vórtice-antivórtice. Um vórtice (antivórtice) é uma excitação topológica na qual os spins em um caminho fechado ao redor do centro da excitação giram por um múltiplo inteiro de  $2\pi(-2\pi)$  no mesmo sentido. Para entender a origem dos vórtices, considere a versão contínua da eq. 2.9

$$H = \frac{1}{2}J \int [\vec{\nabla}\phi(\vec{r})]^2 d^2r. \quad (2.11)$$

Minimizando o hamiltoniano em relação a  $\phi$  tem-se a equação de movimento

$$\nabla^2\phi = 0. \quad (2.12)$$

As soluções da equação de movimento são indexadas pelo número  $Q$ , a carga topológica do vórtice

$$\oint \vec{\nabla}\phi \cdot d\vec{l} = 2\pi Q, \quad (2.13)$$

onde  $Q$  é um inteiro positivo ou negativo.

Por exemplo, a configuração  $\phi = \arctan(y/x)$  é uma solução com  $Q = 1$  e representa um vórtice de carga topológica unitária na origem. Um vórtice com carga negativa é um antivórtice. As configurações de um vórtice e um antivórtice de cargas unitárias estão dispostas na figura a seguir (fig. 2.6).

A energia de um vórtice (antivórtice) pode ser calculada inserindo a solução

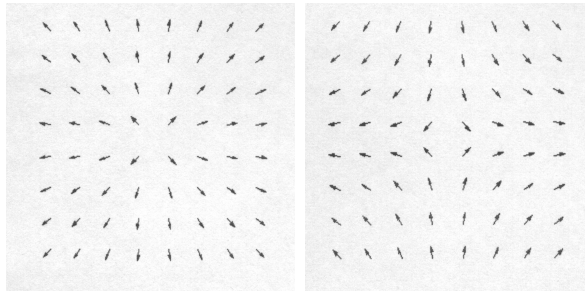


Figura 2.6: Configurações de um vórtice (esquerda) e um antivórtice (direita) de cargas unitárias[23].

$\phi = \arctan(y/x)$  no hamiltoniano (2.6), fornecendo

$$E \simeq \pi J \ln \left( \frac{L}{a} \right), \quad (2.14)$$

onde  $L$  é a dimensão linear do sistema e  $a$  é o parâmetro de rede. Observa-se que a energia de um vórtice isolado é infinita no limite termodinâmico.

A equação 2.13 é análoga à lei de Ampère para a indução magnética devida a uma distribuição de corrente

$$\oint_C \vec{B} \cdot d\vec{l} = \mu I \quad (2.15)$$

onde  $I$  é a corrente envolvida pelo contorno  $C$ . O equivalente de  $\vec{B}$  é  $\vec{\nabla}\phi$ ,  $I = 2\pi QJS^2$ ,  $\mu = 1/JS^2$ . Através dessa analogia, a energia de interação de um par de vórtices de cargas  $Q_1$  e  $Q_2$  é obtida como

$$E_{par}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -2\pi JS^2 Q_1 Q_2 \ln \left| \frac{\vec{r}_1 - \vec{r}_2}{a} \right| \quad (2.16)$$

onde a energia de vórtices que são primeiros vizinhos é definida como zero. Nota-se

que o estado de mínima energia para um par vórtice-antivórtice é o estado ligado em que eles são primeiros vizinhos. Abaixo está uma configuração do sistema com um par vórtice-antivórtice.

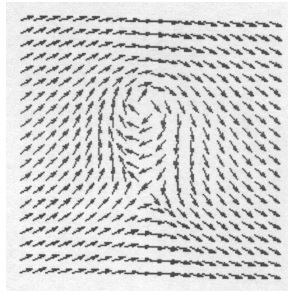


Figura 2.7: Par vórtice-antivórtice [23].

Um vórtice é uma excitação global enquanto pares vórtice-antivórtice são locais (compare Fig. 2.6 e Fig. 2.7).

Com a finalidade de explicitar o papel dessas excitações na transição, a energia livre de um sistema com um vórtice será analisada

$$F = E - TS \tag{2.17}$$

onde  $S$  é a entropia. Como  $S$  é igual ao logaritmo da multiplicidade de configurações e o vórtice é especificado pela localização de seu centro na rede,

$$S = k_B \ln \left( \frac{L}{a} \right)^2. \tag{2.18}$$

Logo,

$$F = (\pi J - 2k_B T) \ln\left(\frac{L}{a}\right). \quad (2.19)$$

Em baixas temperaturas, o termo de energia domina a energia livre ( $\pi J > 2k_B T$ ) e a probabilidade de um vórtice livre surgir é pequena. Em temperaturas altas, o termo entrópico é o mais relevante e vórtices livres são formados. Na temperatura crítica, a energia livre se anula e

$$T_{BKT} = \frac{\pi J}{2k_B}. \quad (2.20)$$

Concluindo, em baixas temperaturas as ondas de spin são as excitações relevantes e a função correlação decai suavemente com a distância. Vórtices livres não são encontrados mas podem ocorrer pares de vórtice-antivórtice que por seu efeito local não desordenam o sistema. Com o aumento de  $T$ , o tamanho das ligações vórtice-antivórtice crescem até que em  $T = T_{BKT}$  ele diverge, culminando com a formação de excitações livres e a transição de fases. O sistema torna-se desordenado e a função correlação decai exponencialmente.

## 2.3 Expoentes críticos e universalidade

Resultados experimentais e soluções exatas para alguns modelos sugerem que propriedades termodinâmicas próximas a um ponto crítico podem ser descritas por um conjunto de leis de potência e portanto, por um conjunto de índices denominados expoentes críticos. O expoente crítico  $\lambda$  associado à variável termodinâmica  $f$  pode

ser obtido como o limite da derivada logarítmica [24, 25]

$$\lambda \equiv \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{\ln|f(t)|}{\ln|t|}, \quad (2.21)$$

onde  $t$  é a temperatura reduzida

$$t \equiv \frac{T - T_c}{T_c} = \frac{T}{T_c} - 1. \quad (2.22)$$

De forma mais geral, espera-se que  $f$  tenha uma dependência com  $t$  da seguinte forma

$$f(t) = At^\lambda(1 + Bt^\theta + \dots), \quad (2.23)$$

onde  $A$  é a amplitude crítica,  $B$  é a correção principal na amplitude e  $\theta > 0$  é a correção principal no expoente. Portanto, quando  $t \rightarrow 0^+$

$$f(t) \sim t^\lambda. \quad (2.24)$$

Ao calcular o limite no sentido oposto  $t \rightarrow 0^-$ , o expoente  $\lambda'$  é definido de forma similar e do ponto de vista teórico  $\lambda = \lambda'$ . No entanto, as amplitudes geralmente não são as mesmas.

O comportamento crítico de um sistema suficientemente grande pode ser obtido através da dependência da função energia livre à temperatura  $T$  e campo reduzido  $h = H/k_B T$ . Essa função pode ser dividida em duas partes, uma porção singular  $G_s$  e outra que não apresenta singularidades  $G_{ns}$ [24]



$$G(t, h) = G_s(t, h) + G_{ns}(t, h), \quad (2.25)$$

onde  $t$  é a temperatura reduzida (2.22).

De acordo com a hipótese de escala, a função  $G_s$  é descrita pelo seguinte *ansatz*[24]

$$G_s(t, h) = \Lambda G_s(\Lambda^a t, \Lambda^b h), \quad (2.26)$$

onde  $\Lambda$  é um parâmetro arbitrário e  $a$  e  $b$  são expoentes cujos valores são dependentes do sistema. Portanto,  $G_s$  é uma função homogênea generalizada <sup>1</sup> das variáveis  $t$  e  $h$ .

Escolhendo  $\Lambda$  tal que  $\Lambda^a t = 1$ , ou seja,  $\Lambda = t^{-1/a}$ , obtém-se

$$G_s(t, h) = t^{-1/a} G_s(1, t^{-b/a} h). \quad (2.27)$$

Para um sistema magnético, o parâmetro de ordem  $M$ , o calor específico a campo externo constante  $C$  e a susceptibilidade  $\chi$  podem ser obtidos por derivação da energia livre. Por exemplo,

$$M = -\frac{1}{N} \frac{\partial G}{\partial H} \Big|_T \propto t^{-(1+b)/a} G'_s(1, t^{-b/a} h), \quad (2.28)$$

onde a linha significa derivação com relação a  $y \equiv t^{-b/a} h$  e  $N$  é o número de partículas.

Em campo nulo,

---

<sup>1</sup>Uma função homogênea generalizada de duas variáveis satisfaz à equação  $f(\lambda^a x, \lambda^b y) = \lambda f(x, y)$  para todo  $\lambda$ . Uma propriedade importante desse tipo de função é a possibilidade de ser escrita como  $y^p$  vezes uma função de  $x/y$  onde  $p$  depende de  $a$  e  $b$ .

$$M \propto -(t)^{-(1+b)/a} G'_s(1, 0) = M_0(t)^{-\beta}, \quad (2.29)$$

onde  $\beta \equiv (1 + b)/a$  e  $T < T_c$ .

De forma análoga,

$$\begin{aligned} \chi &= -\frac{1}{N} \left( \frac{\partial^2 G}{\partial H^2} \right)_T = \chi_0 t^{-\gamma}, \\ C &= -\frac{T}{N} \left( \frac{\partial^2 G_s}{\partial T^2} \right)_H = C_0 t^{-\alpha}. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Sobre a isoterma crítica ( $T = T_c$ ) é definido outro expoente para um ferromagneto

$$M = DH^{\frac{1}{\delta}}, \quad (2.31)$$

onde  $H$  é a intensidade de um campo magnético externo e uniforme.

A função correlação espacial entre spins  $\Gamma(\vec{r})$  mede a correlação entre dois spins  $i$  e  $j$  separados pelo vetor  $\vec{r} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$ , onde  $\vec{r}_i$  é o vetor posição do spin  $i$

$$\Gamma(\vec{r}) \equiv (\vec{S}_i - \langle \vec{S}_i \rangle) \cdot (\vec{S}_j - \langle \vec{S}_j \rangle) \quad (2.32)$$

e o símbolo  $\langle \dots \rangle$  significa média térmica.

Para um sistema invariante à translação, a função correlação depende somente de  $|\vec{r}| = r$  e acima de  $T_c$  espera-se uma dependência da forma Ornstein-Zernike[24]

$$\Gamma(r) \sim r^{-p} \exp\left(\frac{-r}{\xi}\right) \quad (2.33)$$

onde  $p$  é um número real e  $\xi$  é definido como comprimento de correlação. Quando

o sistema está distante do ponto crítico, o comprimento de correlação é finito e o decaimento dessa função é predominantemente exponencial. Em  $T_c$  o comprimento de correlação torna-se infinito seguindo uma lei de potência e  $\Gamma$  decai mais lentamente como a seguir

$$\begin{aligned}\Gamma &= \Gamma_0 r^{-(d-2-\eta)} \\ \xi &= \xi_0 t^{-\nu}\end{aligned}\tag{2.34}$$

onde  $d$  é a dimensão da rede;  $\eta$  e  $\nu$  são outros expoentes críticos.

Para propriedades dinâmicas, a singularidade próximo ao ponto crítico é descrita em termos de um expoente adicional. Para tal, é definida a função de correlação temporal  $\Phi(t_s)$  análoga a  $\Gamma(r)$

$$\Phi(t_s) \equiv \frac{\langle K(0)K(t_s) \rangle - \langle K \rangle^2}{\langle K^2 \rangle - \langle K \rangle^2},\tag{2.35}$$

onde  $K$  é uma grandeza termodinâmica como, por exemplo, a magnetização e  $t_s$  é o tempo.

A dependência temporal de  $\Phi(t_s)$  geralmente pode ser expressa pela seguinte soma[26]

$$\Phi(t_s) = \sum_i a_i \exp(-t_s/\tau_i),\tag{2.36}$$

onde  $\{\tau_i\}$  é o conjunto do inverso dos autovalores do operador de Liouville do modelo cinético e os  $a_i$  são coeficientes não-negativos.

O menor autovalor governa o comportamento de  $\Phi(t_s)$  para tempos longos e nesse regime, a função de correlação temporal decai exponencialmente com um tempo

de correlação característico  $\tau$

$$\tau = \int_0^{\infty} \Phi(t_s) dt_s. \quad (2.37)$$

Finalmente, a relação entre o tempo de correlação acima e o comprimento de correlação envolve o expoente crítico dinâmico  $z$

$$\tau \sim \xi^z. \quad (2.38)$$

No ponto crítico,  $\xi$  é infinito e o tempo de correlação cresce indefinidamente. Este efeito é conhecido como "Critical Slowing Down" [10].

Apesar da temperatura crítica depender dos detalhes do sistema, os expoentes apresentam universalidade pois variam com poucos fatores fundamentais. Os sistemas que possuem o mesmo conjunto de expoentes são agrupados em conjuntos, as classes de universalidade [27].

Os expoentes estáticos, relacionados com as propriedades determinadas pela distribuição de equilíbrio do sistema, dependem dos seguintes fatores: a dimensão  $d$  do sistema, a simetria e dimensão  $n$  do parâmetro de ordem, o alcance das interações microscópicas e a presença de campos externos capazes de quebrar algum tipo de simetria. Já os expoentes dinâmicos também dependem das leis de conservação que se aplicam [28]. Por exemplo, o modelo de Ising ferromagnético com interação de primeiros vizinhos nas redes quadrada e triangular têm expoentes estáticos idênticos e portanto pertencem à mesma classe de universalidade.

Essa classificação facilita o estudo de sistemas complexos pois é possível utilizar

expoentes conhecidos para sistemas mais simples pertencentes à mesma classe. Por esse motivo, cada classe recebe o nome do sistema mais simples contido nela, como ilustrado na tabela abaixo [29].

Universalidade	d	n	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	$\delta$	$\nu$	$\eta$
Ising	2	1	0	1/8	7/4	15	1	1/4
	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)
Esférico	3	$\infty$	-1	1/2	2	5	1	0

Tabela 2.1: Valores de expoentes críticos para algumas classes de universalidade de modelos clássicos. Os resultados da primeira e última linhas são exatos [29] enquanto os demais são derivados de teoria de campos[30].

Através de um conjunto de argumentos termodinâmicos, mostra-se a existência de relações entre os expoentes críticos chamadas relações de escala.

Entre essas relações estão a *inequação de Rushbrooke*

$$\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2, \quad (2.39)$$

e a *inequação de Griffiths*

$$\alpha + \beta(1 + \delta) \geq 2. \quad (2.40)$$

Observa-se que para alguns modelos com solução exata, tais como o modelo de

Ising bidimensional, as relações acima são igualdades.

## 2.4 Efeitos de tamanho finito

De acordo com a Mecânica Estatística [31, 32], o comportamento singular da energia livre ocorre somente no limite termodinâmico. Em sistemas finitos, a energia livre é uma função regular e rigorosamente pode-se afirmar que não existem transições de fase em tais sistemas. Observa-se que onde haveria singularidades há máximos arredondados e que o ponto crítico é deslocado de seu valor no limite termodinâmico[33].

A teoria de escala ou "Finite Size Scaling" tem como objetivo descrever como fenômenos coletivos de larga escala associados com o aparecimento de flutuações próximos a pontos críticos, transições de primeira ordem, etc, se manifestam em pequenas amostras[33]. O conhecimento sobre efeitos de tamanho finito é crucial para a análise correta dos resultados de simulações pois essas são sempre realizadas em uma rede finita[10].

### 2.4.1 A Teoria de Escala para sistemas críticos

Para sistemas próximos do ponto crítico, o único tamanho característico importante é o comprimento de correlação  $\xi$ . Em sistemas finitos, esse comprimento de correlação é limitado pela dimensão linear do sistema  $L$  e portanto é plausível afirmar que os efeitos de tamanho finito relevantes dependem da comparação entre  $L$  e o comprimento de correlação no limite termodinâmico. Se  $L \gg \xi$ , não são observados efeitos significativos. Entretanto, no caso em que  $L \ll \xi$ , as correlações de longo alcance serão excluídas e

as singularidades substituídas por curvas suaves.

Considerando que o comprimento linear do sistema é a medida importante e a partir da relação para o comprimento de correlação (equação 2.34) tem-se

$$\begin{aligned} t &\sim \xi^{-1/\nu} \\ \xi &\sim L. \end{aligned} \tag{2.41}$$

Logo,

$$t \sim L^{-1/\nu}. \tag{2.42}$$

Com  $\Lambda^a = L^{1/\nu}$  na equação 2.26 e  $t = L^{-1/\nu}$  nas equações para a magnetização, a susceptibilidade e o calor específico, obtém-se a dependência dessas quantidades com o tamanho da rede em  $T$  próximo de  $T_c$

$$\begin{aligned} M &\approx L^{-\beta/\nu} M^0(tL^{1/\nu}) \\ \chi &\approx L^{\gamma/\nu} \chi^0(tL^{1/\nu}) \\ C &\approx L^{\alpha/\nu} C^0(tL^{1/\nu}) \end{aligned} \tag{2.43}$$

onde  $M^0$ ,  $C^0$  e  $\chi^0$  são derivadas de  $G_s$ .

No limite  $T \rightarrow T_c$  as quantidades acima exibem leis de potência em função de  $L$  determinadas pelos expoentes da rede infinita. No limite contrário,  $tL^{1/\nu} \rightarrow \infty$  e  $T \neq T_c$ , a dependência com  $L$  é cancelada e tem-se então a dependência usual com  $t$  descrita na secção anterior. Correções devem ser incluídas no caso de sistemas pequenos e para  $T$  longe de  $T_c$ [31].

A divergência do tempo de correlação em um processo dinâmico também

depende de  $L$ . Como  $\tau \sim \xi^z$  e  $\xi \sim L$ , logo

$$\tau \sim L^z. \quad (2.44)$$

Além das quantidades acima, várias funções de momentos de ordem maior da distribuição de probabilidade da energia ou do parâmetro de ordem podem ser analisadas como, por exemplo, o cumulante reduzido de quarta ordem  $U_4$  do parâmetro de ordem definido a seguir[29]

$$U_4 = \frac{3 \langle (m - \langle m \rangle)^2 \rangle^2 - \langle (m - \langle m \rangle)^4 \rangle}{3 \langle m^2 \rangle^2}. \quad (2.45)$$

Expandindo a equação acima

$$U_4 = \frac{-[\langle m^4 \rangle - 3 \langle m^2 \rangle^2 - 4 \langle m \rangle \langle m^3 \rangle + 12 \langle m^2 \rangle \langle m \rangle^2 - 6 \langle m \rangle^4]}{3 \langle m^2 \rangle^2}. \quad (2.46)$$

Para um sistema em que os momentos ímpares são nulos, o cumulante tem a seguinte expressão

$$U_4 = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3 \langle m^2 \rangle^2}. \quad (2.47)$$

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, em  $T = T_c$  o cumulante tende para um ponto fixo  $U^*$  para uma transição crítica. Em um gráfico de  $U_4$  em função da temperatura para diferentes tamanhos de rede,



as curvas devem ter a intersecção  $U^*$  em  $T = T_c$  e esse fato pode ser utilizado para estimar o valor da temperatura crítica. Se as redes são muito pequenas, termos de correção impedirão que haja uma intersecção comum a todas as curvas mas observa-se uma variação sistemática das intersecções na direção do ponto fixo com o crescimento de  $L$ .

Um outro método para estimar o valor de  $T_c$  utiliza o comportamento da temperatura de transição efetiva de cada rede  $T_c(L)$ . Através da relação abaixo obtém-se a temperatura crítica para a rede infinita

$$T_c(L) = T_c + wL^{-1/\nu}. \quad (2.48)$$

Portanto, com o auxílio do cumulante de Binder e da relação acima para a temperatura de transição efetiva é possível extrapolar o valor da temperatura de transição do sistema no limite termodinâmico.

### 2.4.2 A transição *BKT*

Nessa secção serão discutidas algumas propriedades da transição *BKT* além do efeito de tamanho finito em sistemas que apresentam essa transição.

Em uma transição *BKT*, o sistema não apresenta magnetização finita na ausência de um campo externo, mesmo abaixo da temperatura em que ocorre a transição  $T_{BKT}$

$$\langle \vec{m} \rangle = 0 \quad T \neq 0. \quad (2.49)$$

Na prática, devido ao decaimento muito lento da função correlação com a distância, observa-se que a magnetização é não-nula mesmo em sistemas na escala macroscópica.

Tanto o comprimento de correlção  $\xi$  quanto a susceptibilidade no plano  $\chi_{xy}$  divergem exponencialmente quando  $T$  se aproxima de  $T_{BKT}$  no sentido de altas temperaturas[34]

$$\xi \sim a_\xi e^{b_\xi(T-T_{BKT})^{-1/2}} \quad (2.50)$$

$$\chi_{xy} \sim a_\chi e^{b_\chi(T-T_{BKT})^{-1/2}} \quad (2.51)$$

e permanecem infinitas para todas as temperaturas  $T < T_{BKT}$ . No entanto, pelo mesmo motivo que a magnetização decai lentamente com o tamanho do sistema, para sistema finitos  $\chi_{xy}$  diverge no limite  $T \rightarrow T_{BKT}$  de altas ou baixas temperaturas.

A função correlação da componente dos spins no plano decai exponencialmente acima de  $T_{BKT}$  e como uma lei de potência abaixo dessa temperatura

$$\langle s_i^x s_{i+r}^x + s_i^y s_{i+r}^y \rangle \sim e^{-r/\xi} \quad T > T_{BKT} \quad (2.52)$$

$$\langle s_i^x s_{i+r}^x + s_i^y s_{i+r}^y \rangle \sim \frac{1}{r^\eta} \quad T \leq T_{BKT} \quad (2.53)$$

onde o expoente  $\eta$  é uma função da temperatura e tem o valor  $\eta = 1/4$  em  $T_{BKT}$ .

O calor específico não apresenta divergências como no caso de uma transição de

segunda ordem mas apenas um máximo localizado um pouco acima da temperatura de transição (em  $T \simeq 1.1T_{BKT}$  para o modelo planar [35]). Além disso, o calor específico é uma grandeza que apresenta pequenos efeitos de tamanho finito tal que a posição do máximo e sua altura dependem fracamente de  $L$ .

De acordo com a teoria de escala descrita na seção anterior, quando o comprimento de correlação  $\xi$  se torna comparável ou maior que  $L$ , o tamanho da rede é o comprimento relevante e substitui  $\xi$  nas relações. Portanto, para  $T \leq T_{BKT}$ , observa-se que

$$\xi \propto L, \tag{2.54}$$

$$\chi_{xy} \propto L^{2-\eta}. \tag{2.55}$$

A equação 2.55 permite avaliar a função  $\eta(T)$  e também estimar o valor da temperatura crítica, na qual  $\eta = 1/4$ .

O cumulante de Binder  $U_4$  é outra quantidade importante na caracterização da transição  $BKT$ . Como todos os pontos para  $T < T_{BKT}$  são críticos,  $U_4$  não pode depender de  $L$  nessa região e portanto as curvas para diferentes tamanhos de rede se sobrepõem nesse intervalo. Em  $T = T_{BKT}$  elas se separam e tendem a zero no limite  $T \gg T_{BKT}$ .

Geralmente utiliza-se o comportamento acima para a identificação da temperatura crítica. A vantagem desse procedimento é o fato que somente quantidades diretamente mensuráveis na simulação são necessárias para o cálculo de  $U_4$ . Logo,

não é preciso utilizar ajustes. Por outro lado, momentos de maior ordem da distribuição de probabilidade do parâmetro de ordem são mais afetados por erros estatísticos, sendo necessário um número maior de configurações para obter erros dentro de um padrão aceitável.

### 2.4.3 Transições de primeira ordem

Nessa secção serão analisados os efeitos de tamanho finito em transições de primeira ordem com a variação da temperatura com base em uma teoria fenomenológica[36].

Considere o sistema que apresenta a transição como uma "caixa preta" de onde é retirado um valor de sua energia interna por sítio  $E$  em intervalos regulares. Esses valores de  $E$  seguem uma distribuição de probabilidade  $P_L(E)$  onde  $L$  é a dimensão linear do sistema. Em uma primeira aproximação, essa distribuição é considerada como uma Gaussiana centrada na energia para a rede infinita  $E_0(T)$  com largura proporcional ao calor específico no limite termodinâmico  $C$ , ou seja,

$$P_L(E) = \frac{A}{(C)^{1/2}} \exp \left[ \frac{-(E - E_0)^2 L^d}{2k_B T^2 C} \right] \quad (2.56)$$

onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann,  $A$  é a constante de normalização e  $d$  é a dimensão do sistema.

Essa aproximação pode ser justificada utilizando-se o resultado fundamental da mecânica estatística que para  $L \rightarrow \infty$ , a distribuição de probabilidade do parâmetro de ordem  $\psi$  é igual a

$$\bar{P}_L(\psi) \propto \exp \left[ \frac{-L^d F(\psi)}{k_B T} \right] \quad (2.57)$$

onde  $F$  é a densidade de energia livre. Como a energia livre dos estados ordenado (energia  $E_-$ ) e desordenado (energia  $E_+$ ) são iguais na temperatura de transição  $T_c$ ,  $P_L(\psi)$  apresenta  $q + 1$  picos de mesma altura em  $T_c$  onde  $q$  é o número de estados ordenados coexistindo com o estado desordenado. Considerando pequenos desvios da posição dos picos, a função  $F$  pode ser expandida em torno desses e  $\bar{P}_L(\psi)$  se torna uma soma de gaussianas.

Como  $P_L(\psi)$  contém  $q + 1$  picos de mesma altura em  $T_c$ , a distribuição de energia correspondente deve apresentar 2 picos em  $E = E_-$  e  $E = E_+$  com  $P_L(E_-) = qP_L(E_+)$ .

De agora adiante, todas as quantidades com subscrito  $+$  referem-se à fase de alta temperatura e com subscrito  $-$  referem-se à fase de baixa temperatura. Como nessa análise o sistema está muito próximo da temperatura crítica, pode-se aproximar os calores específicos  $C_+$  e  $C_-$  por constantes nessa região. Se  $\Delta T \equiv T - T_c$ , as gaussianas estão centradas em  $E_+ + C_+ \Delta T$  e  $E_- + C_- \Delta T$ . Logo,  $P_L(E)$  pode ser escrita como

$$P_L(E) = A \frac{a_+}{(C_+)^{1/2}} \exp \left[ \frac{-(E - (E_+ + C_+ \Delta T))^2 L^d}{2k_B T^2 C_+} \right] + A \frac{a_-}{(C_-)^{1/2}} \exp \left[ \frac{-(E - (E_- + C_- \Delta T))^2 L^d}{2k_B T^2 C_-} \right] \quad (2.58)$$

onde  $a_+ = \sqrt{C_+}e^x$ ,  $a_- = \sqrt{C_-}qe^x$ ,  $x = \frac{-\Delta FL^d}{2k_B T}$  e  $\Delta F$  é a diferença de energia livre entre as fases de alta e baixa temperatura.

A equação 2.58 foi contruída tal que o primeiro momento e o segundo momento da distribuição exata possam ser corretamente avaliados enquanto os momentos de ordem mais alta não são descritos corretamente. Logo, o primeiro e segundo momentos podem ser encontrados facilmente e têm os seguintes valores

$$\langle E \rangle_L = \frac{a_+ E_+ + a_- E_-}{a_+ + a_-} + \frac{(a_+ C_+ + a_- C_-) \Delta T}{a_+ + a_-} \quad (2.59)$$

$$\langle E^2 \rangle_L = \frac{a_+ (E_+ + C_+ \Delta T)^2 + a_- (E_- + C_- \Delta T)^2}{a_+ + a_-} + \frac{k_B T^2 (a_+ C_+ + a_- C_-)}{L^d (a_+ + a_-)} \quad (2.60)$$

Portanto, tem-se a seguinte expressão para o calor específico

$$C_L = \frac{a_+ C_+ + a_- C_-}{a_+ + a_-} + \frac{a_+ a_- L^d [(E_+ - E_-) + (C_+ - C_-) \Delta T]^2}{k_B T^2 (a_+ + a_-)^2}. \quad (2.61)$$

A seguir, a quantidade  $x$  definida acima será aproximada quando  $F_+$  e  $F_-$  são expandidas ao redor de  $T_c$  em ordem  $O(\Delta T)$ . Ao considerar que  $F_+(T_c) = F_-(T_c)$ , obtém-se

$$\Delta F = \frac{-(E_+ - E_-) \Delta T}{T_c}. \quad (2.62)$$

Logo,

$$x = \frac{(E_+ - E_-)\Delta T L^d}{2k_B T T_c} \approx \frac{(E_+ - E_-)\Delta T L^d}{2k_B T_c^2}. \quad (2.63)$$

Para  $\Delta T > 0$  e  $L \rightarrow \infty$ ,  $a_+ \rightarrow \infty$  e  $a_- \rightarrow 0$ . Se  $\Delta T < 0$ ,  $a_+ \rightarrow 0$  e  $a_- \rightarrow \infty$  no mesmo limite. Portanto, a energia interna apresenta o seguinte comportamento

$$\langle E \rangle_{L \rightarrow \infty} \begin{cases} E_+ + C_+ \Delta T, & L \rightarrow \infty, T > T_c, \\ E_- + C_- \Delta T, & L \rightarrow \infty, T < T_c. \end{cases} \quad (2.64)$$

Com a restrição  $a_+ = a_- = a$ ,

$$\langle E \rangle_L \approx \frac{E_+ + E_-}{2} \quad (2.65)$$

onde  $T = T_c(L)$ . Da definição de  $a_+$  e  $a_-$  com a equação 2.63,

$$e^{2x} = q(C_-/C_+)^{1/2} \quad (2.66)$$

e

$$\frac{T_c(L) - T_c}{T_c} = \frac{k_B T_c \ln[q(C_-/C_+)^{1/2}]}{(E_+ - E_-)L^d}. \quad (2.67)$$

Da equação acima conclui-se que ocorre um deslocamento em  $T_c$  de ordem  $L^{-d}$ .

No limite  $x \ll 1$ , obtém-se

$$\langle E \rangle_L \approx \frac{E_+ + E_-}{2} + \frac{(E_+ - E_-)^2 L^d (T_c - T_c(L))}{4k_B T_c^2}. \quad (2.68)$$

O desvio da energia com relação a  $\langle E \rangle_L$  no limite  $L \rightarrow \infty$  se manifesta na

suavidade da curva  $\langle E \rangle_L \times T$ .

Pode-se estimar também a ordem de suavização das curvas notando que a largura da região de transição para redes finitas corresponde a  $x \sim 1$ . Então

$$\frac{\Delta T_{round}}{T_c} \approx \frac{2k_B T_c}{(E_+ - E_-) L^d}. \quad (2.69)$$

As duas equações anteriores demonstram que o arredondamento é da mesma ordem que o desvio da temperatura crítica.

Analisando o calor específico, observa-se da equação 2.61 que

$$C_L \rightarrow C_+, \quad L \rightarrow \infty, \quad T > T_c, \quad (2.70)$$

$$C_L \rightarrow C_-, \quad L \rightarrow \infty, \quad T < T_c$$

enquanto o valor máximo de  $C_L$  é

$$C_L^{max} \approx \frac{C_+ + C_-}{2} + \frac{(E_+ - E_-)^2 L^d}{4k_B T_c^2}. \quad (2.71)$$

Logo, o máximo do calor específico também escala com o volume do sistema.

Outra quantidade que pode ser analisada é

$$V_L = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle_L}{3 \langle E^2 \rangle_L^2}. \quad (2.72)$$

Longe da transição,  $P_L(E)$  é uma gaussiana e no limite termodinâmico tem-se  $\langle E^4 \rangle = U_{\pm}^4$  e  $\langle E^2 \rangle = U_{\pm}^2$  onde  $U_{\pm} = E_{\pm} + C_{\pm} \Delta T$ . Então o valor de  $V_L$  tomado nessa região é  $2/3$ . Quando  $P_L(E)$  é descrita por duas gaussianas de mesmo peso (o



que ocorre em  $T = T_c$ ), obtém-se um limite não trivial

$$V_L^{min} = 1 - \frac{2(E_+^4 + E_-^4)}{3(E_+^2 + E_-^2)^2} \quad (2.73)$$

quando  $L \rightarrow \infty$ . Para  $L$  finito, observa-se que o valor de  $V_L^{min}$  varia linearmente com  $L^{-d}$ . Nesse tratamento fenomenológico, a temperatura onde ocorre o mínimo de  $V_L$  é igual à temperatura  $T_L^C$  onde está o máximo do calor específico. No entanto, se outros termos na expansão da energia livre forem adicionados, essas duas temperaturas não irão coincidir e  $V_L^{min}$  terá um termo de correção de ordem  $L^{-d}$ . Portanto, a extrapolação correta de  $V_L^{min}$  para o limite termodinâmico também ocorre linearmente com  $L^{-d}$ .

A teoria fenomenológica discutida acima foi desenvolvida para o estudo de sistemas magnéticos tipo Ising ou Potts, nos quais o spin tem um número discreto de estados e flutuações como ondas de spin não existem. Alguns trabalhos sobre efeitos de tamanho finito foram feitos com sistemas de simetria contínua, por exemplo, o modelo de Heisenberg[29, 37, 38]. Nesses casos, são considerados efeitos de ondas de spin e a interferência entre as singularidades usuais e devidas a essas excitações. No entanto, observa-se nesses sistemas que as quantidades avaliadas acima apresentam o mesmo comportamento com o volume  $L^d$  e termos de correção.

# Capítulo 3

## O Método de Monte Carlo

O Método de Monte Carlo é o método numérico mais utilizado para se estudar problemas no escopo da Mecânica Estatística. Nesse contexto, a idéia básica do método é simular as flutuações aleatórias nos estados de um sistema quando este está em contato com um ou mais reservatórios (por exemplo, um reservatório térmico, um reservatório de partículas, etc) ou isolado do exterior.

Considere um sistema em contato com um reservatório térmico cuja temperatura é  $T$ . A distribuição de equilíbrio dos estados do sistema no ensemble canônico é a distribuição de Boltzmann [31, 32]

$$P_i^{eq} = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} \quad (3.1)$$

onde  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ ,  $k_B$  é a constante de Boltzmann,  $E_i$  é a energia do estado  $i$  e  $Z$  é a função partição do sistema.

A função partição é escrita como

$$Z = \sum_i e^{-\beta E_i} \quad (3.2)$$

onde a soma é realizada sobre todos os estados do sistema. Essa função é muito importante porque a partir dela pode-se obter diversas grandezas termodinâmicas de interesse.

O valor esperado de qualquer grandeza  $K$  é obtida pela média em todos os estados do sistema com o peso dado pela distribuição de Boltzmann

$$\langle K \rangle = \frac{1}{Z} \sum_i K_i e^{-\beta E_i}. \quad (3.3)$$

O símbolo  $\langle .. \rangle$  representa a média no ensemble. Se o sistema apresenta graus de liberdade contínuos, a soma acima será substituída por uma integral.

Em simulações de Monte Carlo, a média no ensemble (equação 3.3) é aproximada pela soma  $\bar{K}$  em um subconjunto de  $M$  estados tomados com probabilidade  $P_i$  onde  $i$  enumera os estados. À medida que  $M$  cresce, tem-se uma estimativa cada vez melhor de  $\langle K \rangle$  [10, 39]

$$\langle K \rangle \approx \bar{K} = \frac{\sum_{i=1}^M K_i P_i^{-1} e^{-\beta E_i}}{\sum_{i=1}^M P_i^{-1} e^{-\beta E_i}}. \quad (3.4)$$

Em simulações de amostragem simples (simple sampling),  $P_i = 1$  para qualquer estado  $i$ . Todavia, uma grande parte das configurações possíveis contribuem pouco para a soma acima devido à probabilidade de ocorrência  $P_i^{eq}$  ser pequena.

Para que o cálculo de  $\bar{K}$  seja otimizado, os estados significativos devem ter maior probabilidade de serem escolhidos dentre o número total. Essa técnica recebe o nome de amostragem seletiva (importance sampling) [10, 39].

Uma escolha natural e simples para  $P_i$  é a distribuição de Boltzmann e o cálculo de  $\bar{K}$  se transforma em uma média aritmética

$$\bar{K} = \frac{\sum_{i=1}^M K_i}{M}. \quad (3.5)$$

### 3.1 Cadeias markovianas

Grande parte das simulações de Monte Carlo utilizam processos markovianos como geradores do conjunto de estados de um sistema. Com a finalidade de definir um processo markoviano, considere um processo estocástico para um sistema de número finito de estados  $S_i$  e no qual o tempo pode ser discretizado [10, 40]. Para tal tem-se a seguinte probabilidade condicional do sistema ocupar o estado  $S_{i_n}$  no tempo  $t_n$

$$P(X_{t_n} = S_{i_n} | X_{t_{n-1}} = S_{i_{n-1}}, X_{t_{n-2}} = S_{i_{n-2}}, \dots, X_{t_1} = S_{i_1}) \quad (3.6)$$

onde  $X_t$  designa o estado ocupado no tempo  $t$ .

Se essa probabilidade depende somente do estado no sistema em  $t_{n-1}$ , ou seja,  $P = P(X_{t_n} = S_{i_n} | X_{t_{n-1}} = S_{i_{n-1}})$ , esse processo é denominado markoviano. Então a sequência de estados  $\{X_t\}$  é uma cadeia de Markov e a probabilidade definida acima é a probabilidade de transição entre os estados  $i$  e  $j$

$$W(S_i \rightarrow S_j) \equiv P(X_{t_n} = S_j | X_{t_{n-1}} = S_i). \quad (3.7)$$

As probabilidades de transição têm que satisfazer as seguintes condições

$$W(S_i \rightarrow S_j) \geq 0 \quad (3.8)$$

$$\sum_j W(S_i \rightarrow S_j) = 1. \quad (3.9)$$

Para que o processo markoviano gere estados cujas frequências de ocorrência sigam a distribuição de Boltzmann, duas condições devem ser obedecidas: a condição de ergodicidade e a condição de balanço detalhado.

De acordo com a condição de ergodicidade, deve ser possível para o processo markoviano gerar qualquer estado  $S_i$  a partir de qualquer outro  $S_j$  contanto que  $t_n$  seja suficientemente grande. Essa condição é necessária porque cada estado tem uma probabilidade diferente de zero de acordo com a distribuição de Boltzmann.

### 3.1.1 A equação mestra e o balanço detalhado

A equação mestra define a evolução temporal da probabilidade  $P(X_{t_n} = S_j) = P(S_j, t)$  do sistema estar em  $S_j$  em  $t = t_n$  (aqui o tempo é tratado como uma variável contínua)[10]

$$\frac{dP(S_j, t)}{dt} = \sum_i W(S_i \rightarrow S_j)P(S_i, t) - \sum_i W(S_j \rightarrow S_i)P(S_j, t). \quad (3.10)$$

Quando em equilíbrio, as taxas em que o sistema realiza transições para o estado  $j$  e fora dele devem ser iguais, ou seja,

$$\sum_i W(S_i \rightarrow S_j)P(S_i, t) - \sum_i W(S_j \rightarrow S_i)P(S_j, t) = 0. \quad (3.11)$$

Usando a equação 3.9

$$P(S_j, t) = \sum_i W(S_i \rightarrow S_j)P(S_i, t). \quad (3.12)$$

Note que para uma distribuição de equilíbrio,  $\frac{dP(S_j, t)}{dt} = 0$ , já que o lado direito da equação mestra é zero. Então para qualquer conjunto  $\{W(S_i \rightarrow S_j)\}$  que satisfaça a equação 3.12,  $P(S_j, t)$  tenderá para uma distribuição de equilíbrio.

No entanto, para que  $P$  convirja para essa distribuição a partir de qualquer estado inicial do processo markoviano é necessário exigir a condição de balanço detalhado[39]

$$W(S_j \rightarrow S_i)P(S_j) = W(S_i \rightarrow S_j)P(S_i). \quad (3.13)$$

Dado que a distribuição de equilíbrio é a distribuição de Boltzmann, tem-se da equação acima e da equação 3.1 que

$$\frac{W(S_i \rightarrow S_j)}{W(S_j \rightarrow S_i)} = \frac{P(S_j)}{P(S_i)} = e^{-\beta(E_j - E_i)}. \quad (3.14)$$

Portanto qualquer conjunto de probabilidades de transição que satisfaça a equação acima pode ser utilizado em uma simulação de Monte Carlo. Algumas escolhas são conhecidas por funcionar bem em diversos casos, como por exemplo o famoso algoritmo de Metropolis proposto por Metropolis e colaboradores em 1953 [41].

## 3.2 Algoritmo de Metropolis

De acordo com prescrição de Metropolis [41], as probabilidades de transição são dadas por

$$W(S_j \rightarrow S_i) = \begin{cases} e^{-\beta(E_i - E_j)} & \text{se } \Delta E > 0 \\ 1 & \text{se } \Delta E < 0 \end{cases} \quad (3.15)$$

onde  $\Delta E = E_i - E_j$ . Como  $W(S_j \rightarrow S_i)$  é uma grandeza diferente de zero para todos estados  $S_i$  e  $S_j$ , a condição de ergodicidade é obedecida.

Em sistemas de spins, o algoritmo se desenvolve da seguinte forma. Primeiramente o tipo de rede e as condições de contorno usadas na simulação devem ser escolhidas.

Na sequência

1. Uma configuração inicial para os spins é especificada. As duas configurações iniciais mais comuns são aquelas com os spins completamente ordenados ou desordenados.

2. Um sítio da rede é escolhido (aleatoriamente ou sequencialmente).
3. Calcula-se a variação de energia  $\Delta E$  resultante da mudança do valor do spin.
4. Sorteia-se um número aleatório  $r$  uniformemente distribuído entre zero e um.
5. Se  $r < e^{-\beta\Delta E}$ , o spin é alterado para o novo valor. Senão, o spin não é modificado.
6. Um novo sítio é escolhido e retorna-se ao item 3.

O intervalo entre duas configurações sucessivas geradas pelo algoritmo é no mínimo de um passo de Monte Carlo por sítio (1 MC step/site), definido como o tempo necessário para se percorrer a rede inteira.

### 3.2.1 Efeitos de relaxação

Em uma simulação é necessário descartar um número  $\Delta u$  de configurações iniciais porque a probabilidade média de ocupação leva um certo tempo para atingir sua forma de equilíbrio em um processo markoviano. Considerando a medida de tempo usual (o passo de Monte Carlo por sítio), define-se o tempo de relaxação como o tempo necessário para equilibrar o sistema na temperatura desejada.

Examinando o processo de evolução do sistema a partir de uma configuração de não-equilíbrio [39], observa-se que  $\langle K(t) \rangle - \langle K(\infty) \rangle \neq 0$  onde  $K$  é uma grandeza termodinâmica,

$$\langle K(t) \rangle \approx \frac{1}{M} \sum_{l=1}^M K^l(t) \quad (3.16)$$



e  $K^l(t)$  é a grandeza medida no tempo  $t$  na  $l$ -ésima realização do algoritmo.

Então a função de relaxação não-linear é definida como

$$\Phi_K^l(t) = \frac{\langle K(t) \rangle - \langle K(\infty) \rangle}{\langle K(0) \rangle - \langle K(\infty) \rangle}. \quad (3.17)$$

Em  $t = 0$ ,  $\Phi_K^l = 1$  e essa função tem um comportamento assintótico de forma exponencial em tempos longos.

Associado à função de relaxação não-linear tem-se o tempo de relaxação

$$\tau_K^l = \int_0^\infty \Phi_K^l(t) dt. \quad (3.18)$$

Essa grandeza determina a escala de tempo típica de decaimento da função de relaxação não-linear. O sistema estará em equilíbrio se a condição abaixo for satisfeita

$$t_0 \gg \tau_K^l \quad (3.19)$$

onde  $t_0$  é o tempo esperado para o sistema evoluir para estados de equilíbrio na simulação.

Apesar de ser amplamente utilizado, o algoritmo de Metropolis tem duas desvantagens principais. Primeiramente, configurações sucessivas são altamente correlacionadas. Portanto uma sequência maior de estados tem que ser gerada para que um número grande de configurações independentes seja considerado no cálculo de médias.

Finalmente, quando o sistema estudado encontra-se em uma região crítica, as correlações espaciais e temporais crescem. No limite termodinâmico, o tempo de

correlação diverge em  $T = T_c$  e de acordo com a teoria de *Finite Size Scaling*[33] discutida no capítulo anterior

$$\tau \sim L^z \tag{3.20}$$

onde  $\tau$  é o tempo de correlação,  $L$  é a dimensão linear da rede e  $z$  é um expoente dinâmico.

O valor do expoente  $z$  depende por exemplo das leis de conservação que se aplicam ao sistema durante a dinâmica estocástica[28] e portanto do algoritmo utilizado (no caso de algoritmos de troca local como Metropolis  $z \approx 2$  [26, 42]). Portanto, o efeito de Critical Slowing Down (*CSD*) torna-se mais relevante com o crescimento de  $L$ . Outros algoritmos foram desenvolvidos para diminuir esse efeito como, por exemplo, o algoritmo de Metropolis com superrelaxação [43, 44] e algoritmos de clusters[45].

# Capítulo 4

## Simulação de um filme ultrafino

### 4.1 O modelo

Um modelo clássico de spins que descreve um filme magnético ultrafino consiste do seguinte hamiltoniano

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - A \sum_i S_i^{z2} + D \sum_{ij} \left[ \frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ij}) \cdot (\vec{S}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right]. \quad (4.1)$$

O primeiro termo é a interação de troca entre spins onde  $J$  é a constante de acoplamento diferente de zero para interações entre primeiros vizinhos. Se  $J > 0$  tem-se um ferromagneto e se  $J < 0$ , um antiferromagneto. A segunda soma constitui um termo de anisotropia cristalina. O último termo é uma interação dipolar magnetostática.

### 4.1.1 A interação de troca

A interação de troca tem origem puramente quântica e é devida à superposição das funções de onda eletrônicas do cristal. Considere, por exemplo, um sistema de  $N$  elétrons ligados a  $M$  átomos de mesma espécie [46].

Sejam as autofunções de um elétron ligado ao átomo número 1 quando esse átomo está isolado denotadas por  $\phi_i(\vec{\rho}_1)$  onde  $\vec{\rho}_1$  contém as coordenadas espaciais e de spin. Como todos os átomos são iguais, se o átomo 2 é isolado, um elétron ligado a ele terá o mesmo conjunto de autofunções na coordenada  $\vec{\rho}_2$  e esse raciocínio segue para os demais átomos.

Assumindo que os  $M$  átomos no cristal não estão muito próximos e que a interação entre eles é pequena, as mudanças nos níveis atômicos com relação aos níveis de um átomo isolado poderão ser desprezadas em uma primeira aproximação. Então a função que descreve o estado do cristal e obedece ao princípio de exclusão de Pauli pode ser escrita como

$$\Psi = \frac{\det[\phi_k]}{\sqrt{N!}} \quad (4.2)$$

onde

$$\det[\phi_k] = \begin{bmatrix} \phi_1(\vec{\rho}_1) & \phi_1(\vec{\rho}_2) & \dots & \phi_1(\vec{\rho}_N) \\ \phi_2(\vec{\rho}_1) & \phi_2(\vec{\rho}_2) & \dots & \phi_2(\vec{\rho}_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \phi_N(\vec{\rho}_1) & \phi_N(\vec{\rho}_2) & \dots & \phi_N(\vec{\rho}_N) \end{bmatrix} \quad (4.3)$$

e as funções  $\phi_i$  formam um conjunto ortonormal.

Tomando os elétrons mais internos de cada átomo e seu respectivo núcleo como um íon que cria um potencial coulombiano na posição do  $i$ -ésimo elétron mais externo, o hamiltoniano desse sistema é escrito como

$$H = \sum_{i=1}^N H_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \frac{e^2}{r_{ij}} + H_c \quad (4.4)$$

onde  $H_c$  é o termo relacionado com os íons,  $r_{ij}$  é a distância entre os elétrons  $i$  e  $j$  e o segundo somatório obedece à condição  $i \neq j$ . Além disso,  $H_i$  é o hamiltoniano do elétron  $i$ , ou seja,

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 + V_i. \quad (4.5)$$

A energia do sistema é

$$\varepsilon = \int \Psi^* H \Psi d\rho_1 d\rho_2 \dots d\rho_N. \quad (4.6)$$

onde a integral é realizada nas coordenadas espaciais e de spin.

Como o operador  $H$  é linear, a energia acima pode ser reescrita como

$$\varepsilon = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \varepsilon_{ij} + \varepsilon_c \quad (4.7)$$

onde

$$\varepsilon_i = \frac{1}{N!} \int \det[\phi_{k'}^*] H_i \det[\phi_k] d\rho_1 d\rho_2 \dots d\rho_N \quad (4.8)$$

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{N!} \int \det[\phi_{k'}^*] \frac{e^2}{r_{ij}} \det[\phi_k] d\rho_1 d\rho_2 \dots d\rho_N \quad (4.9)$$

$$\varepsilon_c = \frac{1}{N!} \int \det[\phi_{k'}^*] H_c \det[\phi_k] d\rho_1 d\rho_2 \dots d\rho_N. \quad (4.10)$$

Calculando o termo de interação  $\varepsilon_{ij}$ , observa-se que ele envolve as coordenadas de dois elétrons. Então para cada termo em  $\det[\phi_k]$  existem dois termos em  $\det[\phi_{k'}]$  com os quais a integral não se anula pela condição de ortonormalidade. Nesses termos não-nulos estão presentes as funções  $\phi_k(\vec{\rho}_i)$  e  $\phi_{k'}(\vec{\rho}_j)$  além de seus complexos conjugados. Logo,

$$\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \varepsilon_{ij} = \frac{1}{2N!} \sum_{i,j=1}^N \sum_{k,k'=1}^N \int |\phi_k(\vec{\rho}_i)|^2 \frac{e^2}{r_{ij}} |\phi_{k'}(\vec{\rho}_j)|^2 d\rho_i d\rho_j \quad (4.11)$$

$$- \sum_{k,k'=1}^N \int \phi_k^*(\vec{\rho}_i) \phi_{k'}^*(\vec{\rho}_j) \frac{e^2}{r_{ij}} \phi_k(\vec{\rho}_j) \phi_{k'}(\vec{\rho}_i) d\rho_i d\rho_j. \quad (4.12)$$

As integrais em  $\vec{\rho}_i$  e  $\vec{\rho}_j$  para  $k$  e  $k'$  fixos são iguais, independente dos índices  $i$  e  $j$ . Portanto,

$$\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{k,k'=1}^N \int |\phi_k(\vec{\rho}_1)|^2 \frac{e^2}{r_{ij}} |\phi_{k'}(\vec{\rho}_2)|^2 d\rho_1 d\rho_2 \quad (4.13)$$

$$- \frac{1}{2} \sum_{k,k'=1}^N \int \phi_k^*(\vec{\rho}_1) \phi_{k'}^*(\vec{\rho}_2) \frac{e^2}{r_{ij}} \phi_k(\vec{\rho}_2) \phi_{k'}(\vec{\rho}_1) d\rho_1 d\rho_2. \quad (4.14)$$

As integrais no segundo somatório recebem o nome de integrais de troca e a soma dessas integrais é a energia de troca.

No entanto, observa-se que as integrais de troca contêm somas nas funções de spin. Como essas funções são ortogonais, a integral será nula para spins que não são paralelos. Portanto, a integral de troca representa a diferença de energia entre o estado com dois spins paralelos e o estado com dois spins antiparalelos.

No estudo de propriedades magnéticas dos materiais, a interação de troca escrita da forma acima é substituída por um hamiltoniano efetivo  $H_{eff}$ . Como a diferença de energia entre os estados de dois spins paralelos e antiparalelos é dada pela integral de troca, algo que contenha uma soma de termos proporcionais a  $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$  será necessário. Como resultado

$$H_{eff} = - \sum_{i,j=1}^M J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j. \quad (4.15)$$

onde

$$J_{ij} = 2 \int \phi_i^*(\vec{r}_1) \phi_j^*(\vec{r}_2) \frac{e^2}{r_{ij}} \phi_i(\vec{r}_2) \phi_j(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (4.16)$$

e  $\vec{S}_i$  é o spin total de todos elétrons ligados ao íon  $i$ .

Observa-se que  $J_{ij} = J_{ji}$  e o hamiltoniano efetivo pode ser escrito como

$$H_{eff} = -2 \sum_{i>j}^M J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j. \quad (4.17)$$

Esse é o hamiltoniano de Heisenberg sem campo externo mencionado no capítulo

2. No modelo estudado aqui (e na maioria dos casos encontrados na literatura) são consideradas somente interações entre primeiros vizinhos. Como a integral (4.16) envolve a superposição de funções de onda, o seu valor deve decrescer rapidamente com a distância entre os íons. Logo, o valor de  $J$  é desprezível no caso de elétrons em átomos mais distantes.

### 4.1.2 A anisotropia cristalina de superfície

O termo de anisotropia cristalina de superfície tem sua origem microscópica na interação spin-órbita. Essa interação permite que os spins percebam o potencial microscópico da rede cristalina e a quebra de simetria que ocorre na superfície de um filme ou na interface do filme com seu substrato.

O termo de interação spin-órbita tem a seguinte forma

$$V_{SO} = \xi \vec{L} \cdot \vec{S} \quad (4.18)$$

onde  $\vec{L}$  é o momento angular orbital e  $\xi$  é a constante de acoplamento.

O uso de teoria de perturbação é uma escolha natural para analisar a influência de  $V_{SO}$  nos níveis de energia dos spins. Considere então um filme fino, composto de poucas camadas atômicas, e um spin na superfície ou na primeira camada logo acima do substrato. Assuma também que o sistema apresenta uma estrutura periódica nos planos do filme (planos paralelos ao  $xy$ ). Então a direção  $z$ , normal à superfície, não é equivalente às direções  $x$  e  $y$  no plano do filme.

O resultado da teoria de perturbação em segunda ordem é [47]



$$\Delta E^{(2)} = \frac{\xi^2}{\Delta E}([\gamma_d - \gamma_e]S_z^2 + \gamma_e(S_x^2 + S_y^2 + S_z^2)) \quad (4.19)$$

onde  $\Delta E$  é um termo de energia que aparece na teoria enquanto  $\gamma_d$  e  $\gamma_e$  são duas constantes adimensionais.

Se o coeficiente de  $S_z^2$  é negativo, o eixo normal ao plano do filme é um eixo fácil e o termo de anisotropia induz a orientação dos spins perpendicularmente à superfície. Se esse coeficiente é positivo, o eixo normal é chamado o eixo de difícil magnetização e o vetor magnetização está contido no plano.

Em prática, ambos os casos são encontrados na natureza. No artigo de *Gay e Richter* [7], a anisotropia de superfície é calculada para monocamadas de *Fe*, *Ni* e *V*. No caso de *Fe* e *V*, o eixo preferencial de magnetização é perpendicular ao plano do filme mas no sistema com *Ni*, esse eixo está no plano.

### 4.1.3 A interação dipolar

O último termo do hamiltoniano 4.1 é a interação entre dipolos que tem sua origem na eletrodinâmica clássica[48]. Considerando que no sítio  $i$  da rede cristalina existe o dipolo  $\vec{\mu}_i$ , a energia de interação desse com um campo externo  $\vec{h}_i$  é escrita como

$$U = -\vec{\mu}_i \cdot \vec{h}_i. \quad (4.20)$$

A soma dos campos efetivos no sítio  $i$  devido a todos os dipolos da rede é

$$\vec{h}_i = \sum_j \left[ -\frac{\vec{\mu}_j}{|\vec{r}_{ij}|^3} + \frac{3(\vec{\mu}_j \cdot \vec{r}_{ij})\vec{r}_{ij}}{|\vec{r}_{ij}|^5} \right]. \quad (4.21)$$

Logo,

$$U = \frac{1}{2} \sum_{ij} \left[ \frac{\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j}{|\vec{r}_{ij}|^3} - \frac{3(\vec{\mu}_j \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{\mu}_i \cdot \vec{r}_{ij})}{|\vec{r}_{ij}|^5} \right] \quad (4.22)$$

para  $i \neq j$ .

O primeiro termo na interação dipolar favorece o ordenamento antiferromagnético enquanto o segundo causa um ordenamento no plano no caso de um filme de uma camada. Observa-se também que essa é uma interação de longo alcance já que há um decaimento com o inverso do cubo da distância entre os sítios.

Depois de discutidos os fundamentos de cada termo do hamiltoniano 4.1, nota-se que no caso de um material ferromagnético ( $J > 0$ ), o modelo apresenta os seguintes limites:

- $D = 0$

Para  $D = 0$  o modelo de Heisenberg anisotrópico é recuperado. Enquanto o caso isotrópico ( $A = 0$ ) não apresenta transição de fase em duas dimensões, para  $A > 0$  o modelo está na classe de universalidade Ising, apresentando uma transição de ordem-desordem. Para  $A < 0$ , o modelo está na classe  $XY$  e apresenta uma transição Berezinskii-Kosterlitz-Thouless ( $BKT$ ).

- $D \neq 0$

Para  $D$  não-nulo, existe uma competição entre os termos dipolar e anisotrópico.

Se  $D$  é pequeno quando comparado com  $A$ , é esperado um comportamento do sistema como Ising. Para  $D$  grande, configurações com spins fora do plano  $xy$  se tornam instáveis tal que o sistema diminui a sua energia se os spins estão no plano. No caso intermediário, pode-se esperar uma transição de spins fora do plano para configurações no plano com o crescimento da temperatura ou da espessura do filme.

Nesse trabalho foram estudados três sistemas particulares de uma camada mantendo-se  $J = 1.0$  e  $A = 1.0$  para os seguintes valores do parâmetro dipolar:  $D = 0.10, 0.15, 0.20$ . Foi introduzido um corte na interação dipolar em  $r_c = 5a$  onde  $a$  é o parâmetro de rede. Esse corte exclui efeitos devido ao longo alcance dessa interação mas vários fenômenos interessantes ainda podem ser observados e algumas das propriedades magnéticas importantes de filmes ultrafinos são descritas por esse modelo. Foi escolhido  $r_c = 5a$  porque alguns trabalhos encontrados na literatura [49] sugerem que a partir desse valor não se observa modificações qualitativas nos resultados.

Para a simulação desse sistema foram implementadas condições periódicas de contorno no plano  $xy$ , excluindo-se portanto efeitos de borda. A energia foi medida em unidades de  $JS^2$  e a temperatura em unidades de  $JS^2/k_B$ , onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann.

Nas próximas duas seções serão discutidos mais detalhes da simulação e os resultados obtidos.

## 4.2 Detalhes da simulação

### 4.2.1 Equilíbrio

Como argumentado na secção sobre efeitos de relaxação (secção 3.2.1), é necessário aguardar que o sistema estudado em uma simulação de Monte Carlo à temperatura  $T$  atinja o equilíbrio térmico antes que medidas de quantidades termodinâmicas sejam realizadas. A convergência para configurações de equilíbrio depende de alguns fatores como o tipo de sistema (interações, dimensionalidade da rede e dos spins), temperatura (distância à temperatura crítica), algoritmo utilizado, etc.

Existem vários procedimentos para estimar o número  $\Delta u$  de configurações que devem ser descartadas antes das medidas serem realizadas. Formalmente, o tempo de relaxação  $\tau_K^l$  (equação 3.18) pode ser determinado através da função de relaxação não-linear e o equilíbrio é assumido para  $\Delta u \gg \tau_K^l$  onde cada configuração corresponde a um passo de Monte Carlo por spin.

No entanto, o método mais utilizado para estimar o valor de  $\Delta u$  é fazer um gráfico de algumas quantidades de interesse (magnetização, energia total) em função dos passos de Monte Carlo. Observando esse gráfico,  $\Delta u$  é estimado em cada curva como o momento em que a grandeza começa a flutuar em torno de um valor fixo. Como cada grandeza tem seu tempo de relaxação característico, toma-se o maior valor de  $\Delta u$  como o mínimo de passos necessários para atingir o equilíbrio.

Na figura 4.1 tem-se a energia por spin e a magnetização para  $D = 0.10$  e  $T = 1.2$  em função dos passos de Monte Carlo (para esse sistema  $T_c \simeq 0.7$ ). Observa-se que em aproximadamente  $t = 50$  ambas as curvas descrevem flutuações em torno

de um valor médio.

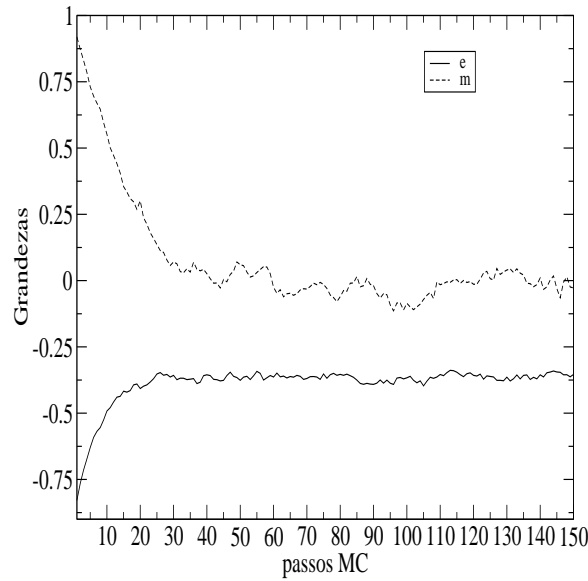


Figura 4.1: Energia por spin e magnetização para  $D = 0.10$  e  $T = 1.2$  em função dos passos de monte carlo.

Uma desvantagem desse método é a possibilidade do sistema encontrar uma região metaestável de seu espaço de configurações e essa ser interpretada como o mínimo global da energia livre. Para prevenir tal fato, geralmente são realizadas várias simulações com estados iniciais e sementes do gerador de números aleatórios diferentes. Quando as curvas para cada simulação atingirem o mesmo valor médio para a magnetização e a energia total, por exemplo, os sistemas estarão em equilíbrio. Esse procedimento torna mais difícil estados metaestáveis serem tomados como estáveis já que se um dos sistemas fica em uma região metaestável, os valores médios da magnetização, por exemplo, serão diferentes.

Para um sistema com temperatura crítica conhecida, quando os gráficos da relaxação são comparados para  $T < T_c$  e  $T \sim T_c$  observa-se o efeito de 'Critical slowing down'. Pode ser visto na figura 4.2 que fora da região crítica o sistema

com  $D = 0.10$  atinge rapidamente o estado de equilíbrio ( $T=0.6$ ) e as flutuações são pequenas enquanto que em  $T = 0.7 \sim T_c$  são observadas flutuações maiores.

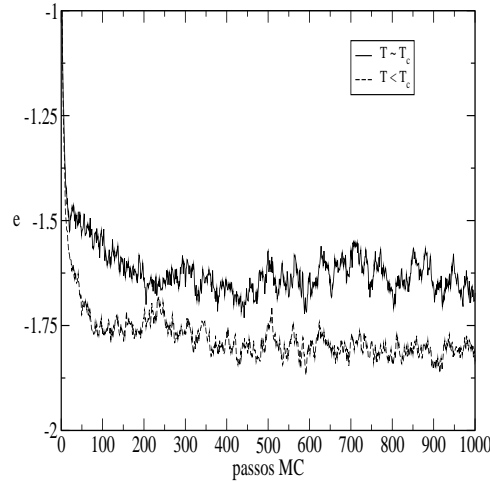


Figura 4.2: Energia por spin para um sistema com temperatura crítica conhecida e  $D = 0.10$  em duas temperaturas diferentes:  $T \sim T_c$  e  $T < T_c$ .

Na figura 4.3 estão os gráficos da energia por sítio para dois tamanhos de rede ( $L = 30$  e  $L = 50$ ) para o sistema com  $D = 0.10$  e em  $T = 1.2$ , valor bem maior que  $T_c$ . Como previsto, nota-se que quanto maior a rede, maior o tempo de correlação e portanto maior o tempo de relaxação.

Uma possível forma de diminuir o número de configurações descartadas é iniciar a simulação com uma configuração próxima das configurações de equilíbrio. Por exemplo, se o estado fundamental do sistema é conhecido *a priori* como magnetizado na direção  $z$ , é conveniente iniciar uma simulação em baixa temperatura com todos os spins ordenados nesse eixo. No regime de alta temperatura, utiliza-se uma configuração em que a orientação dos spins é aleatória.

Nas simulações realizadas nesse trabalho,  $\Delta u = 5 \times 10^5$  para todos os sistemas

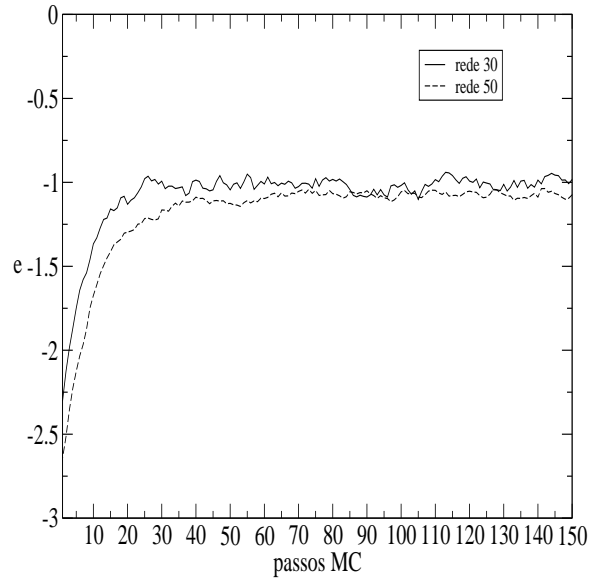


Figura 4.3: Energia por spin para dois tamanhos de rede diferentes:  $L = 30$  e  $L = 50$ .

e temperaturas já que esse é um valor bem maior que o tempo de relaxação mínimo encontrado. Para a maior temperatura estudada, a configuração inicial tem os spins com direções aleatórias. À medida que a temperatura é abaixada, a configuração final da temperatura anterior é utilizada como configuração inicial da seguinte.

#### 4.2.2 Cálculo de valores médios e erros

Após o sistema atingir o equilíbrio, um número  $U$  de configurações é utilizado no cálculo de valores médios de grandezas de interesse. Dessas  $U$  configurações são formados  $v$  grupos ou feixes com  $N_g = \frac{U}{v}$  configurações em cada.

Calculada a quantidade  $A_j$  na configuração  $j$ , obtém-se a chamada média nos feixes como

$$\bar{A}_k = \frac{1}{N_g} \sum_{j=1}^{N_g} A_j \quad (4.23)$$

com  $k = 1, \dots, n$ .

Logo, o valor médio de  $A$  é a média aritmética dos valores  $\bar{A}_k$

$$\langle A \rangle = \frac{1}{v} \sum_{k=1}^v \bar{A}_k. \quad (4.24)$$

Para configurações estatisticamente independentes, o erro estimado para  $\langle A \rangle$  é [39]

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{v-1} (\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2)}. \quad (4.25)$$

Nas simulações de Monte Carlo desse trabalho, as configurações são guardadas sequencialmente para o cálculo das médias e portanto são correlacionadas. No entanto, as configurações foram "embaralhadas", ou seja, a ordem de aparecimento nos feixes foi modificada como artifício para descorrelacioná-las.

A escolha do número de feixes  $v$  foi baseada na análise da figura 4.4 na qual o erro estimado para a energia por spin é função do número de feixes. Observa-se que a partir de  $v = 20$  o erro se estabiliza em torno de certo valor e esse número de feixes foi utilizado para os cálculos. A título de ilustração, é possível comparar a curva anterior com uma curva obtida sem a mistura das configurações, comprovando que o erro é superestimado no último caso.

Concluindo, nesse trabalho  $U = 10^6$  configurações foram divididas em  $v = 20$  feixes e os erros foram estimados com a equação 4.25. Para uma análise geral, utilizou-se o intervalo entre temperaturas  $\delta T = 0.1$  (em unidades de  $JS^2/k_B$ ) e nas regiões críticas esse intervalo foi reduzido para  $\delta T = 0.02$ .



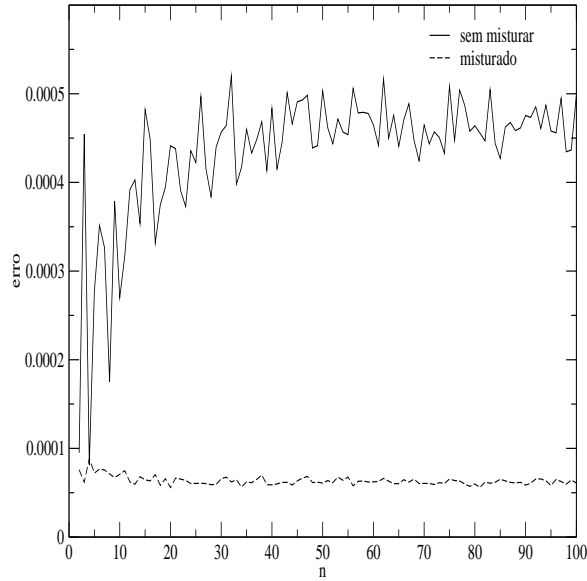


Figura 4.4: Erro da energia por spin em função do número de feixes para configurações correlacionadas e descorrelacionadas.

### 4.2.3 Quantidades termodinâmicas

As quantidades termodinâmicas importantes no estudo de um sistema magnético são a energia total, a magnetização, o calor específico a campo constante, a susceptibilidade magnética e o cumulante de Binder.

A energia total do sistema é dada pelo hamiltoniano

$$E = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - A \sum_i S_i^{z2} + D \sum_{ij} \left[ \frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ij}) \cdot (\vec{S}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right] \quad (4.26)$$

e a energia por spin é escrita como

$$e = \frac{E}{N} \quad (4.27)$$

onde  $N$  é o número de spins da rede.

No sistema estudado, a magnetização é um vetor tridimensional. Entretanto, como o sistema apresenta simetria no plano  $xy$ , foi calculada a função magnetização no plano  $M_{xy}$  definida a seguir

$$M_{xy} = \frac{1}{N} \sqrt{\sum_i (S_i^x)^2 + \sum_i (S_i^y)^2}. \quad (4.28)$$

Como o termo anisotrópico no hamiltoniano 4.1 é função do quadrado das componentes  $S_i^z$ , há uma simetria de inversão de spins com relação ao plano do filme como no modelo de Ising em duas dimensões. Logo, o valor médio da magnetização na direção  $z$  é nulo e é a quantidade  $M_z \equiv |m_z|$  que informa o grau de ordenamento do sistema nessa direção, onde

$$m_z = \frac{1}{N} \sum_i S_i^z. \quad (4.29)$$

O calor específico por spin  $c$  é calculado com a variância da energia

$$c = \frac{1}{k_B N T^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (4.30)$$

onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $T$  é a temperatura.

De acordo com a secção anterior, o valor estimado  $\bar{c}_k$  para o calor específico é

$$\bar{c}_k = \frac{1}{N_g} \sum_{j=1}^{N_g} (\bar{E}_k - E_j)^2 \quad (4.31)$$

e o seu valor médio é

$$\langle c \rangle = \frac{1}{k_B N T^2 v} \sum_{k=1}^v \bar{c}_k. \quad (4.32)$$

A susceptibilidade magnética é calculada com a variância da magnetização. De forma análoga à magnetização, foram medidas a susceptibilidade no eixo  $z$  e a susceptibilidade no plano definidas abaixo

$$\chi_z = \frac{1}{k_B N T} (\langle M_z^2 \rangle - \langle M_z \rangle^2) \quad (4.33)$$

$$\chi_{xy} = \frac{1}{k_B N T} (\langle M_{xy}^2 \rangle - \langle M_{xy} \rangle^2). \quad (4.34)$$

O procedimento para a obtenção do valor médio das susceptibilidades é o mesmo que foi descrito no caso do calor específico.

O cumulante de Binder de quarta ordem da magnetização  $U_4$  é definido como

$$U_4 = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3 \langle M^2 \rangle^2}, \quad (4.35)$$

e suas propriedades foram discutidas anteriormente.

Com relação ao cálculo do número de vórtices de carga topológica unitária, o centro de um vórtice é composto por quatro spins em um quadrado unitário denominado plaqueta. Quando a soma dos ângulos polares relativos nessa plaqueta é igual a  $\pm 2\pi$ , o número de vórtices (antivórtices) é acrescido de uma unidade. Por fim, a densidade de vórtices é definida como o número de vórtices dividido pelo número de spins na rede, ou área,  $L \times L$ .

## 4.3 Explorando o espaço de parâmetros

### 4.3.1 Caso $D = 0.10$

No caso em que  $D = 0.10$ , a contribuição do termo de anisotropia de superfície para a energia do sistema é maior que a contribuição do termo dipolar. Portanto, espera-se que a baixa temperatura o sistema tenda a se ordenar na direção perpendicular ao plano do filme. De acordo com as simulações, comprovou-se que há uma transição de segunda ordem de uma fase ordenada para outra paramagnética com o aumento da temperatura.

As curvas de  $\langle M_z \rangle$  e  $\langle M_{xy} \rangle$  em função da temperatura (veja figura 4.5) indicam que no estado fundamental esse sistema tem todos spins alinhados no eixo  $z$ . Além disso,  $\langle M_z \rangle$  vai para zero em  $T \approx 0.7$ , e portanto a temperatura crítica pode ser estimada em torno desse valor. Como o valor do parâmetro  $D$  é finito, os spins não se apresentam perfeitamente alinhados em  $z$  para temperaturas finitas e menores que a temperatura crítica mas fazem um pequeno ângulo  $\theta$  com essa direção .

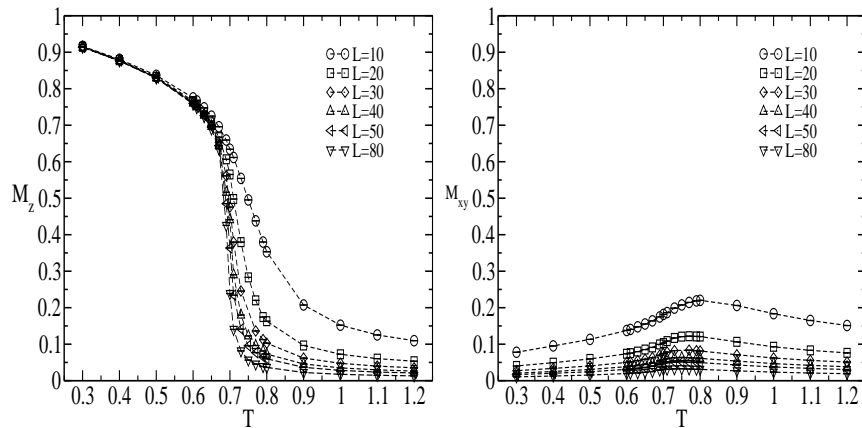


Figura 4.5: Magnetização fora do plano  $M_z$  (esquerda) e no plano  $M_{xy}$  (direita) em função da temperatura para vários tamanhos de rede.

Já que não existe uma orientação preferencial no plano  $xy$ , o valor da magnetização no plano deve tender a zero em todo o intervalo de temperatura. No entanto, as curvas de  $\langle M_{xy} \rangle$  para diferentes tamanhos de rede apresentam um máximo na região crítica cuja altura decresce com  $L$ , indicando que esse é um efeito de tamanho finito e no limite termodinâmico  $\langle M_{xy} \rangle = 0$  em todo o intervalo de temperatura.

A existência de picos acentuados no calor específico e susceptibilidade fora do plano (Fig. 4.6) é uma outra evidência da transição de fases. Esse picos estão presentes devido a grandes flutuações na energia e na magnetização na região crítica como consequência da divergência do comprimento de correlação do sistema nessa região. Com o aumento da rede, a altura dos picos cresce e a largura diminui tal que no limite termodinâmico essas quantidades devem divergir em  $T = T_c$ .

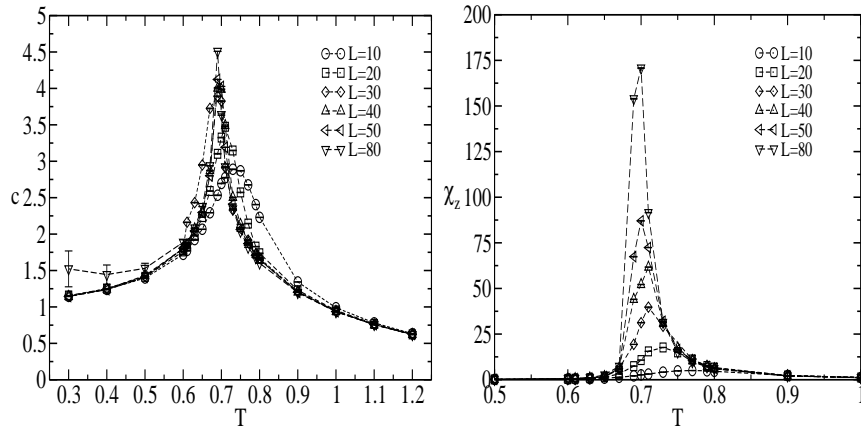


Figura 4.6: Calor específico  $c$  (esquerda) e susceptibilidade  $\chi_z$  (direita) em função da temperatura para vários tamanhos de rede.

Observando o cumulante de Binder da magnetização no eixo  $z$  (Fig. 4.7), nota-se que as curvas para diferentes tamanhos de rede têm um ponto fixo em  $T \approx 0.7$ , outra característica de uma transição de segunda ordem.

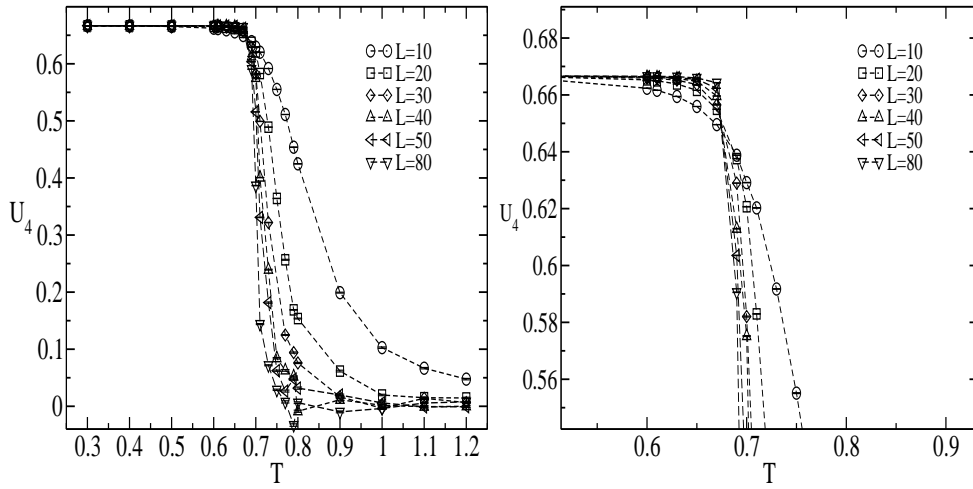


Figura 4.7: Cumulante de Binder da magnetização em  $z$  para vários tamanhos de rede.

A densidade de vórtices no plano  $xy$  foi calculada para os três casos estudados nesse trabalho por questão de completeza já que para  $D = 0.10$  essas excitações não têm um papel importante como nos outros dois casos.

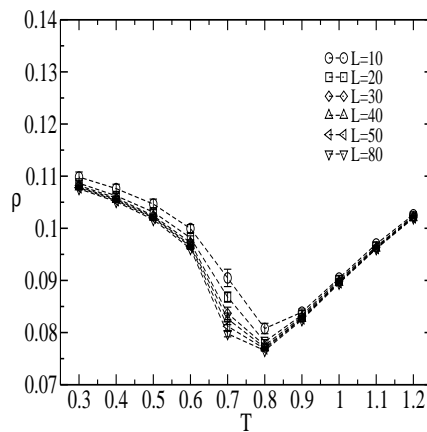


Figura 4.8: Densidade de vórtices no plano do filme em função da temperatura para vários tamanhos de rede.

O número de vórtices detectado no sistema é alto e a curva da densidade

em função da temperatura (Fig. 4.8) apresenta um mínimo na região crítica. O crescimento do número de vórtices com o decréscimo da temperatura está relacionado com a desordem no plano no momento em que os spins estão se alinhando no eixo  $z$ . É necessário ressaltar que para todos os sistemas estudados nesse trabalho, o número total de vórtices e antivórtices são sempre iguais, como é esperado no caso de condições de contorno periódicas devido a argumentos energéticos.

Essa transição de segunda ordem já foi prevista em trabalhos teóricos e envolvendo simulações [50]. Alguns filmes magnéticos sintetizados por epitaxia de feixe molecular (MBE), como o sistema Fe sobre Pd(100)[4], apresentam essa transição de fase.

No capítulo 5 será realizado um estudo de tamanho finito desse sistema e assim serão obtidos os expoentes críticos associados ao parâmetro de ordem, ao calor específico e à susceptibilidade. Além disso, o valor da temperatura crítica para a rede infinita  $T_c^\infty$  será calculado utilizando-se também o cumulante de Binder.

### 4.3.2 Caso $D = 0.20$

Para esse conjunto de parâmetros, a contribuição do termo dipolar para a energia cresce. Como o segundo termo dessa soma  $\frac{-3(\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5}$  é negativo e três vezes maior que o primeiro termo  $\frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{r_{ij}^3}$ , espera-se que os spins sigam para o plano à medida que a temperatura decresce.

De acordo com os gráficos de  $\langle M_z \rangle$  e  $\langle M_{xy} \rangle$  em função de  $T$  (Fig. 4.9), observa-se que os spins não se ordenam no eixo  $z$  em momento algum ( $\langle M_z \rangle \approx 0$  em todo o intervalo de temperatura) mas o valor de  $\langle M_{xy} \rangle$  chega a  $\langle M_{xy} \rangle \approx 0.8$  em  $T = 0.3$ . No entanto, a curva de  $\langle M_{xy} \rangle$  é deslocada para baixo com o aumento

da rede, indicando que no limite termodinâmico a magnetização no plano é nula.

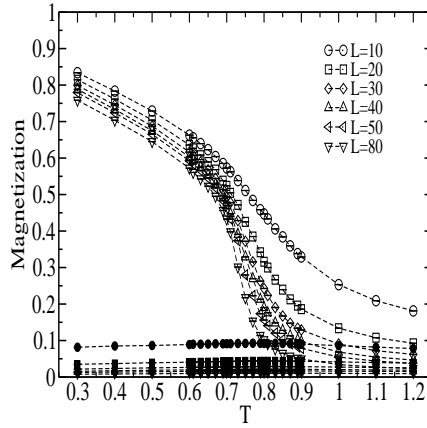


Figura 4.9: Magnetização na direção  $z$  (símbolos fechados) e no plano (símbolos abertos) para  $D = 0.20$ .

Na figura 4.10 tem-se os gráficos do calor específico e da susceptibilidade no plano em função de  $T$ . Observa-se que essas duas grandezas apresentam máximos em  $T \approx 0.75$ , sinalizando a ocorrência de uma transição de fases nessa região. As curvas do calor específico para vários tamanhos de rede se deslocam pouco uma em relação à outra e o valor máximo da curva não se modifica apreciavelmente (exceto para  $L = 10$ ).

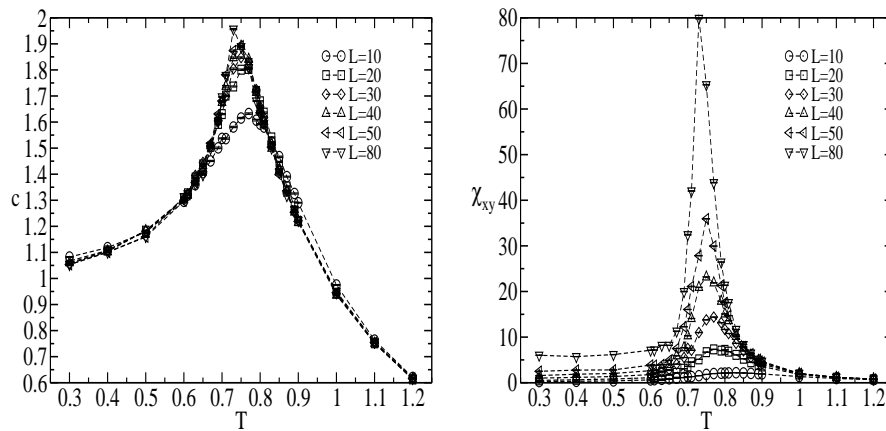


Figura 4.10: Calor específico (esquerda) e susceptibilidade no plano (direita) para  $D = 0.20$ .



As configurações obtidas através das simulações apresentam vórtices e antivórtices no plano do filme e a densidade média dessas excitações está apresentada na figura 4.11.

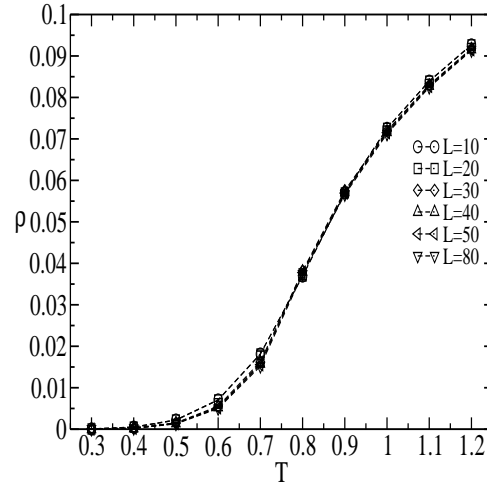


Figura 4.11: Densidade de vórtices para  $D = 0.20$ .

De acordo com os gráficos, conclui-se que a criação desse tipo de excitação é pouco favorável para  $T < 0.5$  mas a partir desse ponto a densidade de vórtices aumenta monotonicamente. Como esperado, o número de vórtices detectados em uma configuração é sempre igual ao número de antivórtices e eles surgem como pares vórtice-antivórtice.

Comparando duas configurações da rede  $L = 30$  em  $T = 0.7$  e  $T = 0.8$  na figura 4.12, observa-se que em  $T = 0.7$  existem pares vórtice-antivórtice fortemente ligados cujo comprimento de ligação é em média de 1 parâmetro de rede. Em  $T = 0.8$  os pares ainda estão presentes mas nota-se o início do processo de dissociação desses, com o crescimento do comprimento de ligação.

O cumulante de quarta ordem da magnetização no plano também foi avaliado (veja a figura 4.13) e observa-se que à medida que o tamanho da rede cresce, as curvas

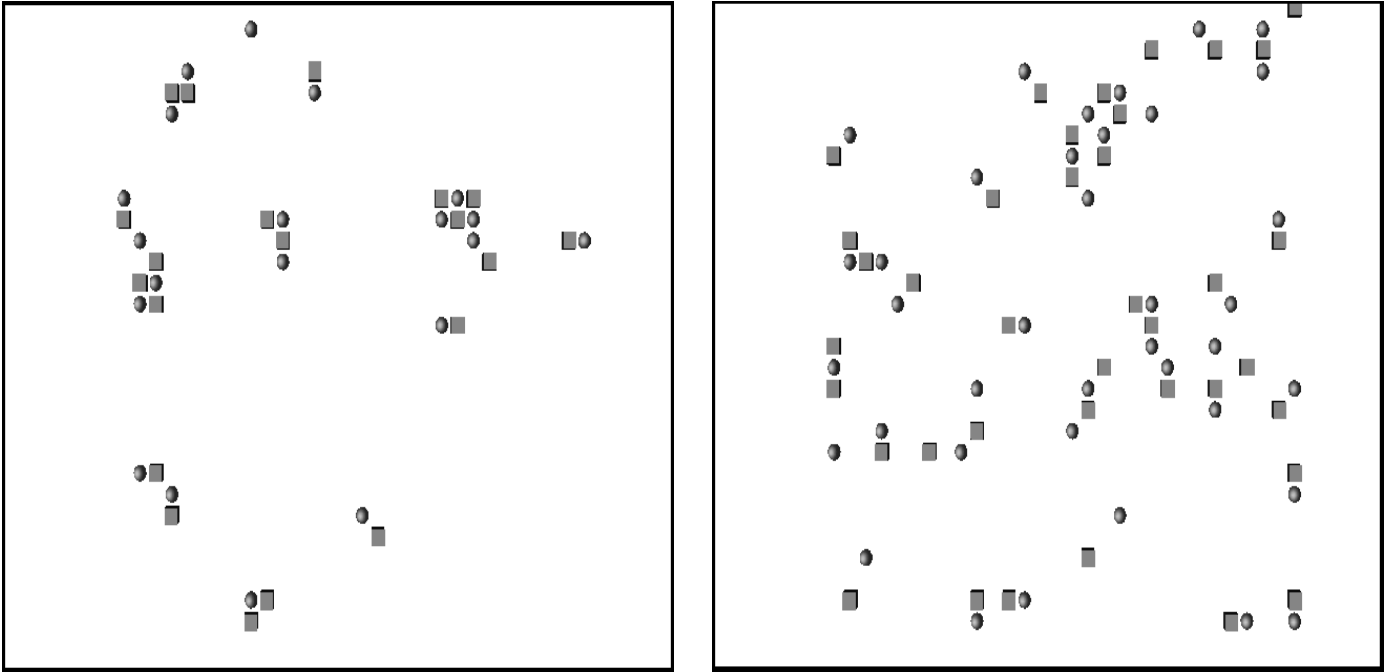


Figura 4.12: Configurações da rede  $L = 30$  em  $T = 0.7$  (esquerda) e  $T = 0.8$  (direita). Vórtices e antivórtices são quadrados e esferas respectivamente.

ficam cada vez mais próximas para  $T < 0.7$  tendendo para o valor saturado  $U_4 = \frac{2}{3}$  e em  $T \approx 0.7$  elas se distanciam umas das outras.

Os resultados discutidos acima apresentam fortes evidências que uma transição do tipo *BKT* está ocorrendo e não de segunda ordem como afirmam alguns trabalhos na literatura [49].

A análise de tamanho finito para esse sistema será discutida no próximo capítulo e baseado nessa análise serão apresentados argumentos quantitativos afim de comprovar a presença da transição *BKT*.

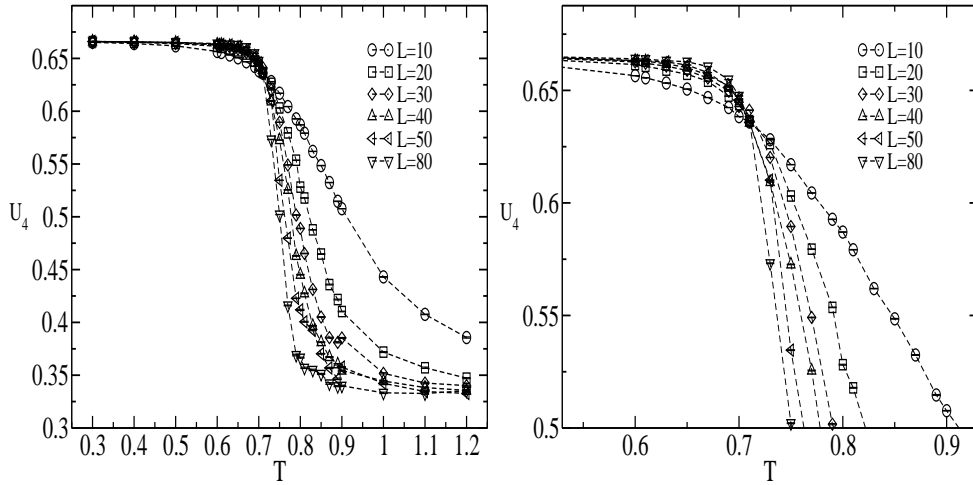


Figura 4.13: Cumulante de Binder da magnetização no plano  $xy$  para  $D = 0.20$ .

### 4.3.3 Caso $D = 0.15$

Nesse caso, os gráficos de  $\langle M_z \rangle$  e  $\langle M_{xy} \rangle$  em função da temperatura indicam claramente uma transição de uma fase ordenada no eixo  $z$  para uma fase com configurações planares (veja Fig. 4.14). Para a rede com  $L = 80$ , a componente  $z$  da magnetização cai para zero em  $T \approx 0.35$  enquanto a magnetização no plano cresce abruptamente, chegando ao valor máximo de  $\langle M_{xy} \rangle = 0.6$ . À medida que a temperatura cresce,  $\langle M_{xy} \rangle$  também decai, se aproximando de zero.

Esse fenômeno já foi observado experimentalmente [1, 2] e recebeu o nome de transição de reorientação. Alguns trabalhos encontrados na literatura[49] sugerem que a transição de reorientação ocorre devido a efeitos entrópicos: o sistema seleciona a fase com máxima entropia quando próximo à região de coexistência de fases. O ordenamento paralelo tem entropia maior a temperaturas mais altas porque a interação dipolar acopla os spins, causa excitações térmicas (ondas de spins) e portanto aumenta a entropia do sistema. A anisotropia de sítio é o termo dominante para baixas

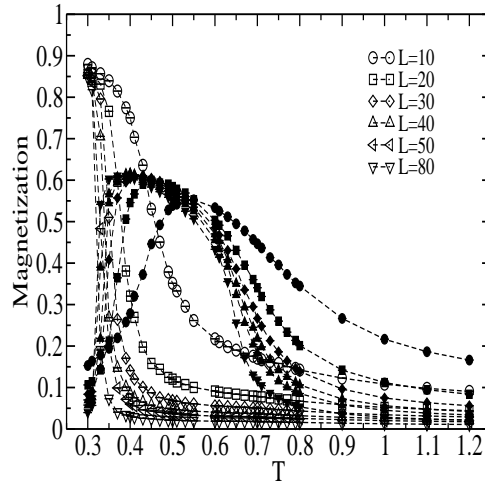


Figura 4.14: Magnetização por spin no caso  $D = 0.15$  para vários tamanhos de rede, componente  $z$  (símbolos abertos) e componente no plano (símbolos fechados).

temperaturas mas não induz esse tipo de excitações para temperaturas maiores. Esse tipo de transição devido ao aumento de entropia é observado em alguns sistemas tridimensionais com competição entre interações [51].

A curva da energia por spin e do cumulante da energia estão dispostas abaixo (Fig. 4.15). Observa-se que o cumulante apresenta um mínimo na temperatura crítica da respectiva rede. Esse comportamento indica que a transição de orientação é de primeira ordem de modo similar a trabalhos anteriores encontrados na literatura [49, 52, 53]. Alguns sistemas compostos por filmes finos exibem a transição de reorientação como por exemplo Fe/Cu(100) [2, 5] e Fe/Ag(100) [3].

O gráfico do calor específico (Fig. 4.16) apresenta dois picos. Um deles é pronunciado e está localizado na região onde ocorre a transição de reorientação. O outro pico é mais suave e parece ser independente do tamanho da rede como no caso  $D = 0.20$  visto na secção anterior.

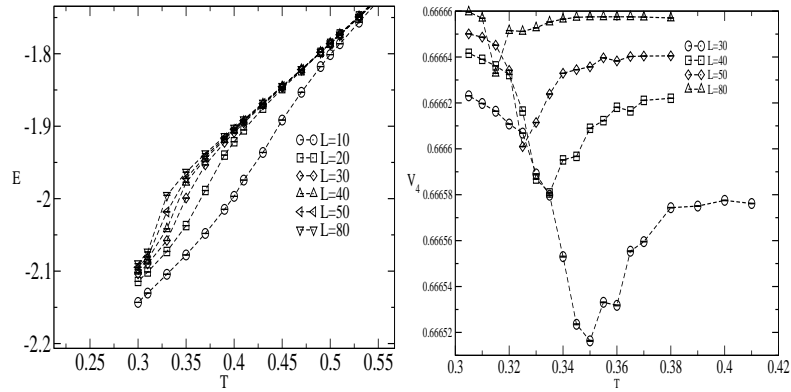


Figura 4.15: Energia por spin (esquerda) e o cumulante da energia (direita) para  $D = 0.15$ .

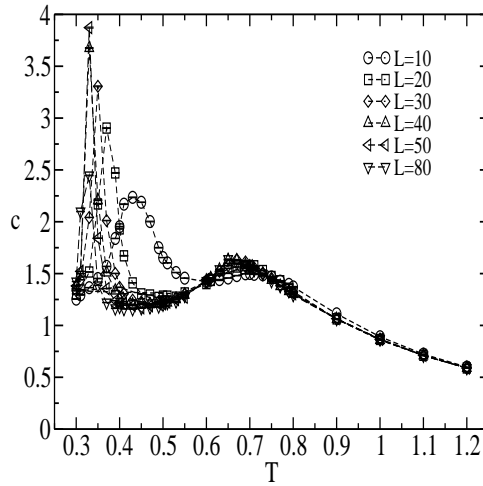


Figura 4.16: Calor específico no caso  $D = 0.15$ .

Na figura 4.17 observa-se as curvas para a susceptibilidade no plano  $\chi_{xy}$  e fora do plano  $\chi_z$ . A quantidade  $\chi_z$  apresenta um pico pronunciado em  $T \approx 0.35$ , como esperado, enquanto que  $\chi_{xy}$  tem dois picos como o calor específico, indicando portanto a ocorrência de outra transição de fases além da transição de reorientação.

Os cumulantes da magnetização também foram calculados e estão dispostos na figura 4.18. Exceto no caso de  $L = 10$ , as curvas para diferentes tamanhos de rede do cumulante do plano  $xy$  se aproximam em baixa temperatura, indicando portanto

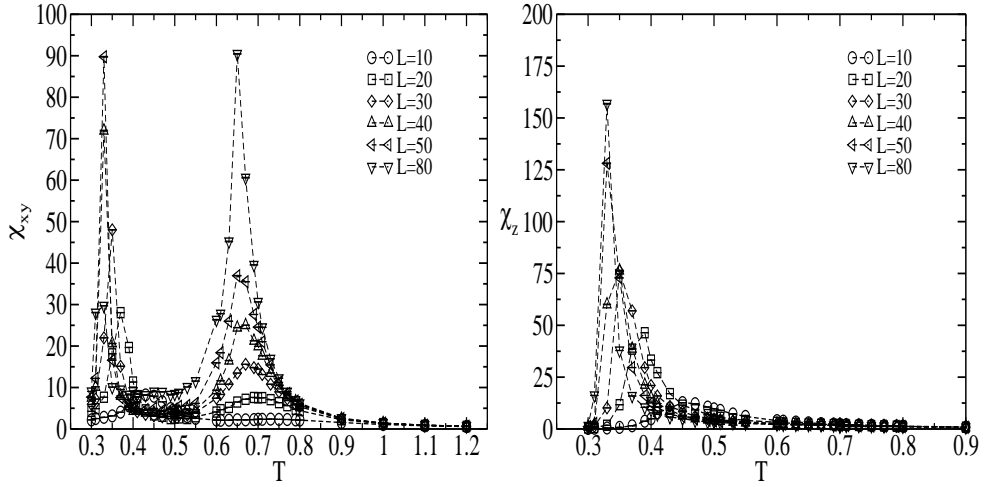


Figura 4.17: Susceptibilidade no plano (esquerda) e fora do plano (direita) para  $D = 0.15$ .

a existência de uma linha *BKT* nessa região do diagrama de fases. Além disso, o cumulante no plano exibe um mínimo em  $T \approx T_1$  característico de uma transição de primeira ordem.

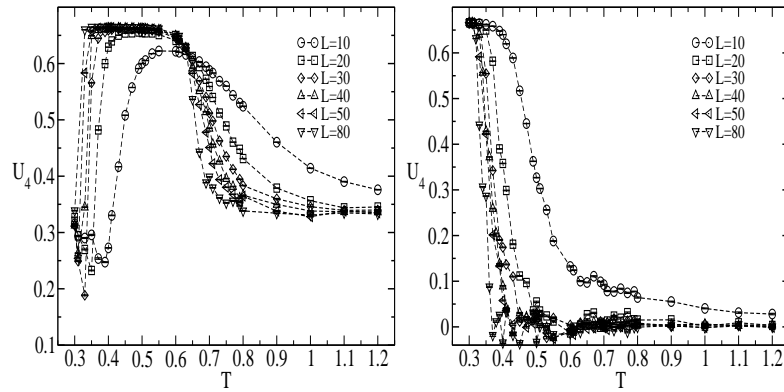


Figura 4.18: Cumulante de Binder da magnetização no plano (esquerda) e da magnetização fora do plano (direita) em função da temperatura para  $D = 0.15$ .

Finalizando, a densidade de vórtices (Fig. 4.19) tem um comportamento similar ao caso  $D = 0.10$ , porém na região de temperaturas altas essa grandeza apresenta um crescimento monotônico como em  $D = 0.20$ . Esse crescimento já era esperado já que acredita-se que a mesma linha *BKT* está sendo cruzada.

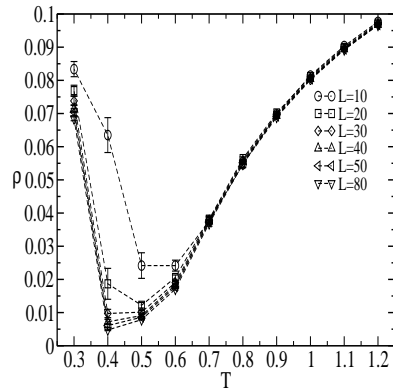


Figura 4.19: Densidade de vórtices no plano  $xy$  para  $D = 0.15$ .

De forma similar ao caso  $D = 0.20$ , as configurações do sistema (Fig. 4.20) para por exemplo  $T = 0.6$  apresentam pares vórtice-antivórtice ligados cujo comprimento de ligação médio é de 1 espaçamento de rede. Para  $T = 0.7$ , o fenômeno de desligamento de pares já é observado, sendo o mecanismo responsável pela transição de fases.

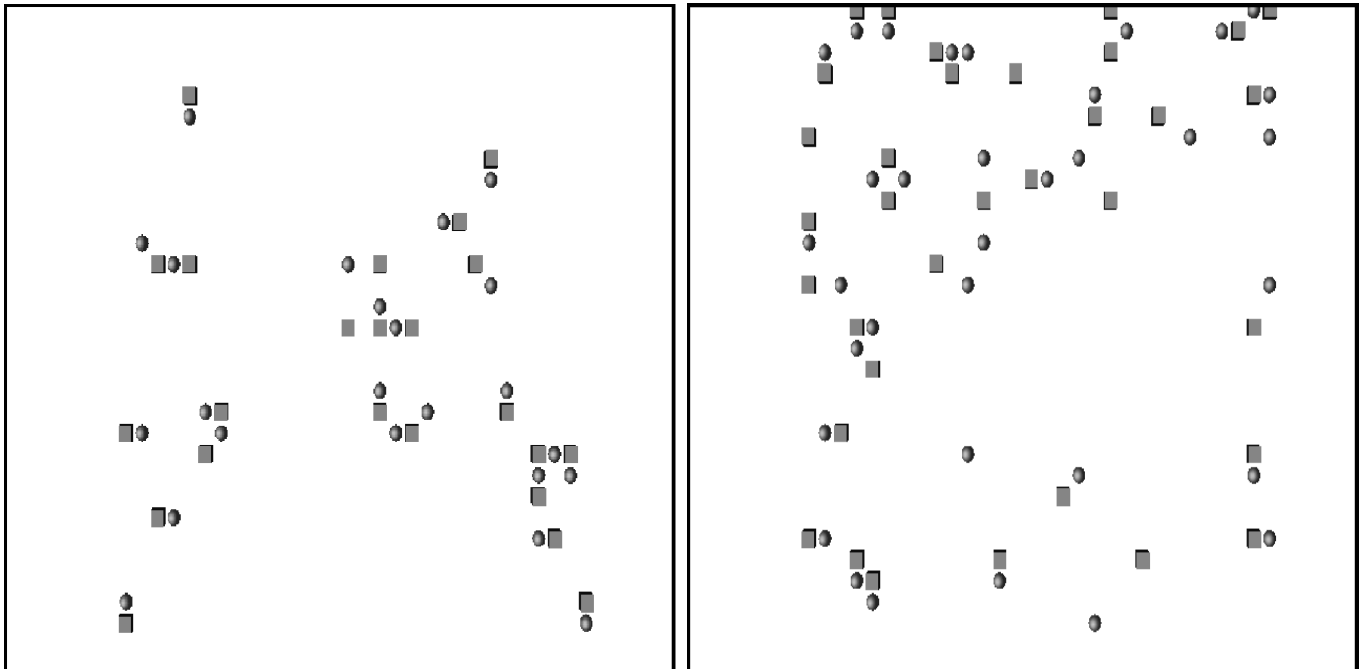


Figura 4.20: Configurações da rede  $L = 30$  em  $T = 0.6$  (esquerda) e  $T = 0.7$  (direita). Vórtices e antivórtices são quadrados e esferas respectivamente.

No capítulo 5 será exposta uma análise de tamanho finito para determinar a temperatura em que ocorre a transição de primeira ordem. Além disso, será discutida a análise de tamanho finito do calor específico e outras quantidades para a segunda transição e baseado nessa análise será apresentado um argumento quantitativo com o objetivo de comprovar que essa transição é do tipo *BKT*.



# Capítulo 5

## Análise de tamanho finito e expoentes críticos

Baseado nos resultados obtidos das simulações, foi realizado um estudo de tamanho finito dos três sistemas apresentados no capítulo anterior.

No caso  $D = 0.10$ , os resultados indicam a ocorrência de uma transição de segunda ordem e portanto a teoria de escala para sistemas críticos foi utilizada para avaliar os expoentes críticos e a temperatura crítica no limite termodinâmico.

Nos casos  $D = 0.15$  e  $D = 0.20$ , o comportamento do calor específico com a dimensão linear da rede  $L$  foi analisado em detalhe e obteve-se uma forte evidência da existência de uma linha  $BKT$  no diagrama de fases para esses dois sistemas.

Também para o caso  $D = 0.15$ , a transição de primeira ordem foi estudada e os resultados foram comparados com a teoria fenomenológica apresentada na última secção do capítulo 2.

## 5.1 Caso $D = 0.10$

### 5.1.1 Determinação da temperatura crítica

De acordo com a seção 2.4.1 sobre a teoria de escala para sistemas críticos, a temperatura crítica  $T_c^L$  segue a seguinte relação

$$T_c^L = T_c^\infty + wL^{-\frac{1}{\nu}} \quad (5.1)$$

onde  $T_c^\infty$  é a temperatura no limite termodinâmico e  $T_c^L$  é a temperatura crítica da rede  $L \times L$ .

Como vários trabalhos afirmam que esse sistema pertence à classe de universalidade de Ising e os resultados expostos no capítulo 4 concordam com a literatura, o expoente  $\nu$  foi tomado como  $\nu = 1$  e as demais quantidades foram analisadas partindo dessa premissa.

O calor específico e a susceptibilidade como funções da temperatura apresentam um ponto de máximo em  $T_c^L$ . Já o cumulante de Binder do parâmetro de ordem tende para um ponto fixo não trivial em  $T = T_c^\infty$ . Portanto, ao serem representados os gráficos de  $U_4 \times T$  para diferentes tamanhos de rede, as curvas terão pontos de intersecção na temperatura crítica.

Na figura 5.1 estão os gráficos da temperatura crítica  $T_c^L$  onde essa grandeza foi obtida para o calor específico, a susceptibilidade no eixo  $z$  e o cumulante de Binder da magnetização  $M_z$ . No caso do cumulante considerou-se a temperatura na qual a curva da rede  $L = 80$  intercepta as demais curvas.

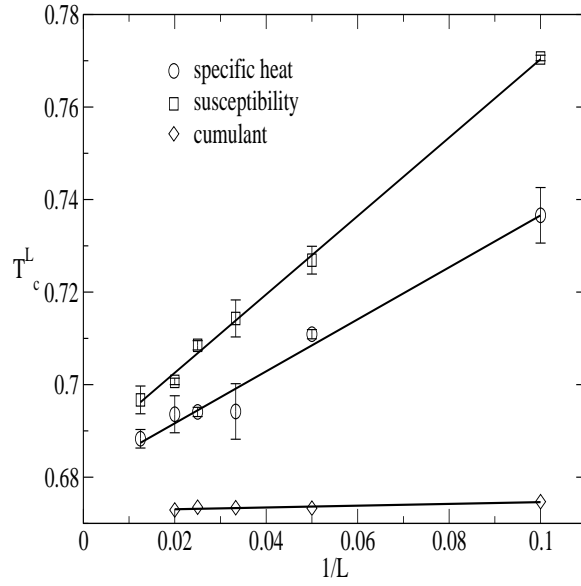


Figura 5.1: Temperatura crítica em função do inverso do comprimento linear  $L$  para o calor específico, a susceptibilidade no eixo  $z$  e o cumulante de Binder do parâmetro de ordem  $M_z$ .

De acordo com a equação 5.1, a temperatura crítica para a rede infinita é igual ao valor do intersepto das curvas com o eixo  $y$ . Logo, foi realizada uma regressão linear nas três curvas acima e obteve-se os seguintes valores para  $T_c^\infty$

Grandeza	$\chi_z$	$C$	$U_4$
$T_c^\infty$	0.680	0.686	0.673

Tabela 5.1: Temperatura crítica  $T_c^\infty$  para a susceptibilidade, o calor específico e o cumulante de quarta ordem.

Com os valores da tabela acima foi calculado o valor médio para a temperatura crítica e o erro foi estimado.

$$T_c^\infty = 0.68 \pm 0.01 \quad (5.2)$$

### 5.1.2 Análise dos expoentes críticos

Um sistema crítico apresenta as seguintes relações de escala para o parâmetro de ordem  $M$ , a susceptibilidade  $\chi$  e o calor específico  $C$  para  $T$  próximo de  $T_c$  e  $L$  suficientemente grande

$$\begin{aligned}M &\sim L^{-\beta/\nu} M^0(tL^{1/\nu}) \\ \chi &\sim L^{\gamma/\nu} \chi^0(tL^{1/\nu}) \\ C &\sim L^{\alpha/\nu} C^0(tL^{1/\nu}).\end{aligned}\tag{5.3}$$

No limite de  $t \rightarrow 0$ , as funções  $M^0$ ,  $\chi^0$  e  $C^0$  podem ser expandidas e em ordem zero obtém-se

$$\begin{aligned}M &\sim L^{-\beta/\nu} \\ \chi &\sim L^{\gamma/\nu} \\ C &\sim L^{\alpha/\nu}.\end{aligned}\tag{5.4}$$

Tomando-se o logaritmo das relações acima, observa-se que as curvas de  $\ln M \times \ln L$ ,  $\ln \chi \times \ln L$  e  $\ln C \times \ln L$  são retas cujas inclinações são razões entre os expoentes críticos. Na figura abaixo (Fig.5.2) estão as curvas de  $\ln M \times \ln L$ ,  $\ln \chi \times \ln L$  e  $\ln C \times \ln L$  e como esperado a relação entre as grandezas é aproximadamente linear.

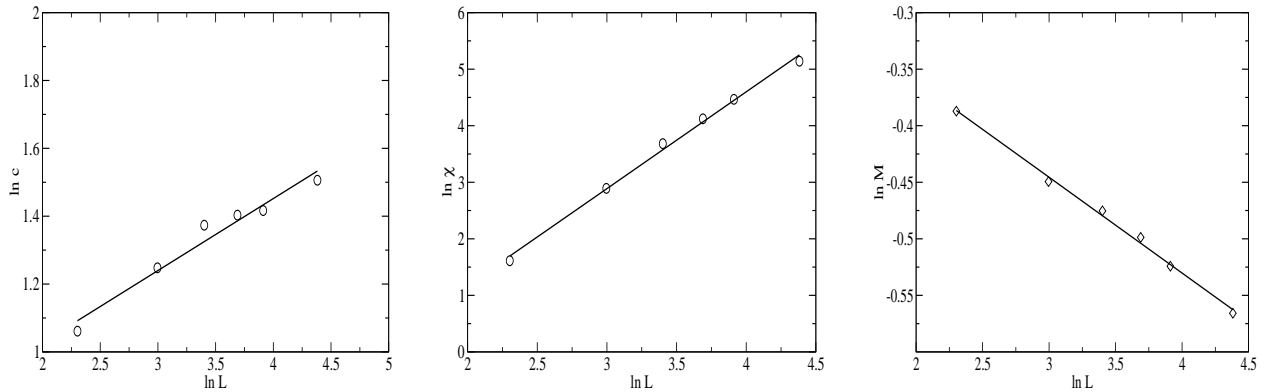


Figura 5.2: Logaritmo do calor específico  $c$ , da susceptibilidade  $\chi_z$  e da magnetização  $M_z$  em função do logaritmo de  $L$ .

Após realizado um ajuste linear desprezando-se as duas menores redes foram obtidos os seguintes valores aproximados para as razões entre os expoentes

$$\begin{aligned}\frac{\alpha}{\nu} &= 0.13 \\ \frac{\gamma}{\nu} &= 1.71 \\ \frac{\beta}{\nu} &= 0.08.\end{aligned}\tag{5.5}$$

Como o número de redes simuladas nesse trabalho não é grande o bastante para a realização de um procedimento direto de obtenção dos expoente críticos com resultados de boa precisão (cálculo da inclinação das curvas acima em cada ponto), foi utilizado um procedimento equivalente mas igualmente eficaz.

Esse procedimento alternativo é baseado nas equações 5.3 e portanto explora uma região pequena próxima ao ponto crítico. Essas relações de escala indicam que as quantidades  $ML^{\beta/\nu}$ ,  $C/L^{\alpha/\nu}$  e  $\chi/L^{\gamma/\nu}$  são funções de  $x = tL^{1/\nu}$  onde  $t = |1 - T/T_c|$ . Portanto, ao representá-las em função de  $x$ , as curvas obtidas devem ser independentes do tamanho da rede.

Logo, uma forma de verificar se os expoentes desse modelo são aqueles da classe Ising bidimensional é fazer um gráfico dessas curvas com os expoentes conhecidos tendo a temperatura crítica como parâmetro e observar se todas elas se colapsam. De forma análoga à análise da temperatura crítica, o valor de  $\nu$  foi fixado em  $\nu = 1$  e o valor da temperatura crítica utilizado foi  $T_c^\infty = 0.68$ .

Na figura 5.3 estão dispostas as curvas de  $ML^{\beta/\nu}$  como função de  $x = tL^{1/\nu}$  onde utilizou-se  $\beta = 1/8$ , ou seja, o expoente crítico no limite termodinâmico. Como esperado, os dados para todos os tamanhos de rede pertencem à mesma curva tanto para  $T > T_c$  como para  $T < T_c$ .

As duas curvas se aproximam de 1 para  $x$  tendendo a zero já que no limite termodinâmico e  $T = T_c$  a função de escala  $M^0$  é de ordem 1. Outro comentário importante é que mesmo a menor rede  $L = 10$  obedece à relação de escala.

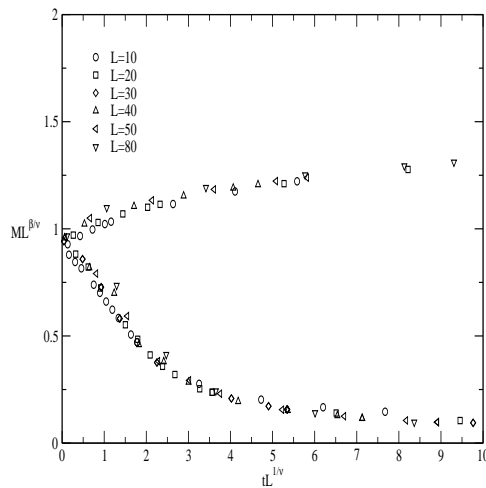


Figura 5.3: Magnetização vezes  $L^{\beta/\nu}$  em função de  $tL^{1/\nu}$  para todas as redes.

Na figura 5.4 estão os resultados de uma análise análoga para a susceptibilidade com  $\gamma = 7/4$  onde  $t = |1 - T/T_c|$  para  $T < T_c$  e  $t = |1 - T_c/T|$  para  $T > T_c$  [54].

Os dados para os vários tamanhos de rede estão aproximadamente na mesma curva, indicando que esse é o expoente crítico correto. Nesse caso, a curva para rede  $L = 10$  não apresentou uma boa concordância com a curva esperada da teoria de escala. Esse fato já era previsto porque a susceptibilidade é uma das funções resposta do sistema e proporcional à função correlação. Como na temperatura crítica o comprimento de correlação  $\xi$  diverge, no caso de sistemas muito pequenos o fato de  $\xi$  ser limitado por  $L$  muda muito a forma da função correlação com relação a sistemas maiores.

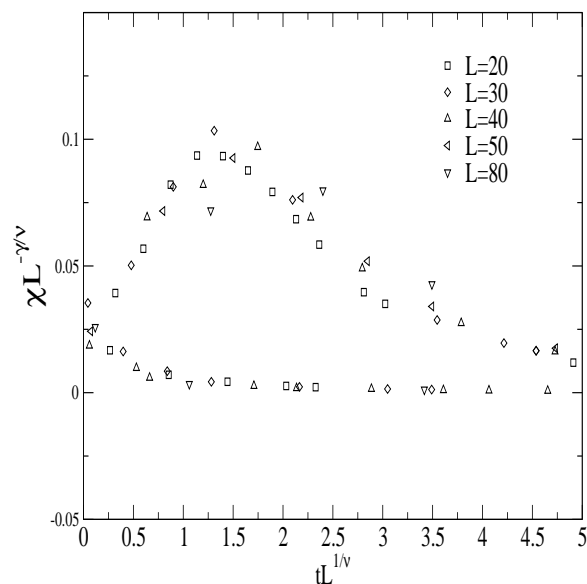


Figura 5.4: Susceptibilidade vezes  $L^{-\gamma/\nu}$  em função de  $tL^{1/\nu}$  para todas as redes.

Finalmente, o comportamento do calor específico foi analisado utilizando esse método alternativo. Do estudo de vários modelos pertencentes à classe de universalidade de Ising  $2d$  é conhecido que o calor específico tem o coeficiente  $\alpha = 0$ , apresentando uma dependência com o logaritmo de  $L$ . Baseado nessa informação, analisou-se o gráfico de  $C/\ln(L)$  em função da variável  $x$  definida anteriormente. À medida que

$L$  cresce, os dados para as diversas redes tendem para a mesma curva em todo o intervalo de temperatura.

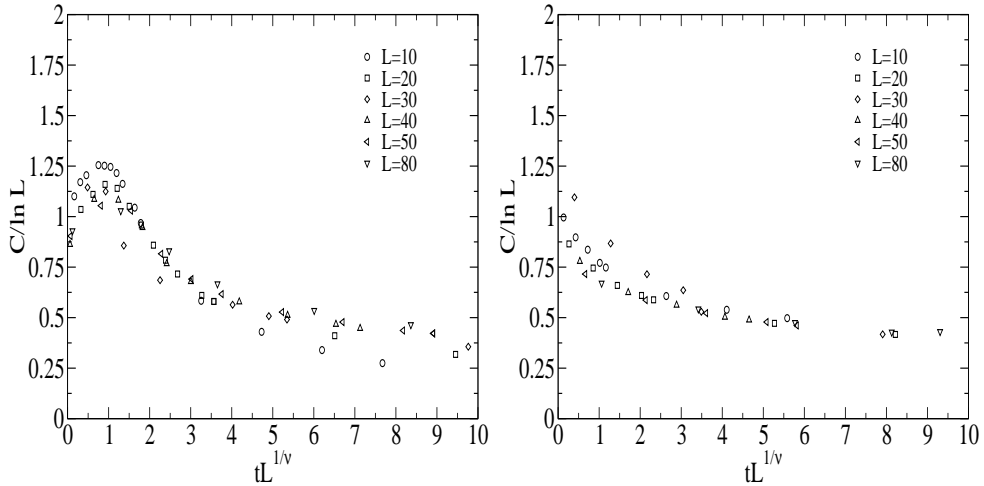


Figura 5.5: Calor específico vezes o inverso de  $\ln L$  em função de  $tL^{1/\nu}$  para todas as redes ( $T > T_c$  (esquerda) e  $T < T_c$  (direita)).

Baseado nos resultados obtidos, podemos concluir que o sistema com  $D = 0.10$  pertence à classe de universalidade de Ising em  $2d$  e o modelo apresenta uma linha de segunda ordem na região de  $D$  pequeno.

## 5.2 Análise da transição $BKT$

No caso  $D = 0.15$  foram observadas duas transições de fase. Os dados apresentados no capítulo anterior claramente indicam que à baixa temperatura a transição é de primeira ordem. No entanto, o sistema na faixa de temperaturas mais altas não apresenta ordem de longo alcance no limite termodinâmico (a magnetização  $xy$  tende para zero nesse limite). No caso  $D = 0.20$ , observa-se também essa falta de ordem de longo alcance e logo conjecturou-se que uma linha  $BKT$  poderia existir no diagrama



de fases.

O primeiro passo na análise dessa hipótese foi obter a temperatura na qual ocorre a transição. No gráfico de  $T^L$  em função de  $1/L$  para  $D = 0.15$  (Fig. 5.6) onde  $T^L$  é a temperatura na qual se encontra o máximo da susceptibilidade no plano, observa-se que a curva apresentada é aproximadamente uma reta para as redes maiores ( $L > 20$ ). Com o objetivo de extrapolar o valor de  $T$  para o sistema infinito, realizou-se um ajuste linear.

Na figura 5.6 está o ajuste linear para  $D = 0.15$  e o valor extrapolado para a temperatura foi  $T^\infty = 0.61 \pm 0.01$ .

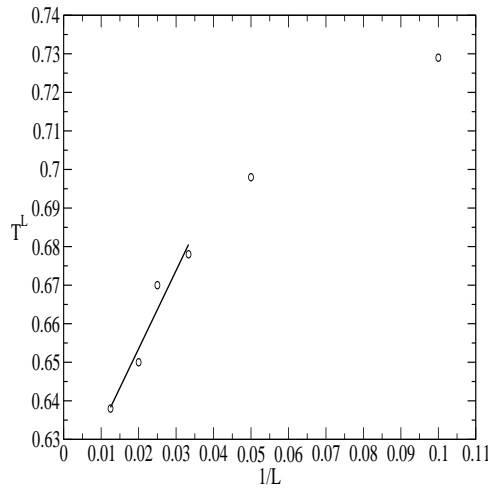


Figura 5.6: Temperatura crítica em função do inverso do comprimento linear  $L$  para a susceptibilidade  $xy$  no sistema com  $D = 0.15$ . No ajuste linear despresou-se os pontos para  $L = 10$  e  $L = 20$ .

Na figura 5.7 está o ajuste linear para  $D = 0.20$  e o valor extrapolado para a temperatura foi  $T^\infty = 0.70 \pm 0.01$ .

O valores máximos do calor específico para cada rede simulada estão dispostos na tabela 5.2. Observa-se que depois de um efeito transiente no caso das redes

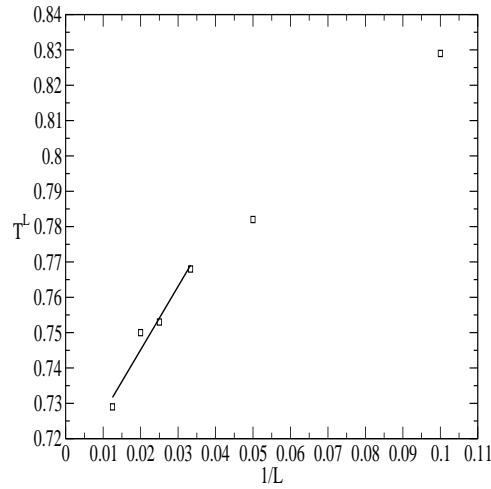


Figura 5.7: Temperatura crítica em função do inverso do comprimento linear  $L$  para a susceptibilidade  $xy$  no sistema com  $D = 0.20$ . No ajuste linear desprezou-se os pontos para  $L = 10$  e  $L = 20$ .

menores ( $L = 10$  e  $L = 20$ ), o máximo tende a um valor constante, ao contrário do comportamento do calor específico para uma transição de segunda ordem. Esse fato é um forte indicativo de uma transição *BKT*.

L	10	20	30	40	50	80
$D = 0.15$	1.5	1.577	1.635	1.636	1.637	1.647
$D = 0.20$	1.633	1.803	1.848	1.892	1.892	1.910

Tabela 5.2: Valor máximo do calor específico para todas as redes com  $D = 0.15$  e  $D = 0.20$ .

Na figura seguinte, estão as curvas do calor específico em função de  $\ln L$  para a transição de segunda ordem do sistema  $D = 0.10$  e os dois sistemas discutidos acima. Nota-se que enquanto  $C \propto \ln L$  na transição de segunda ordem, nos outros dois casos as curvas se aproximam assintoticamente de valores constantes.

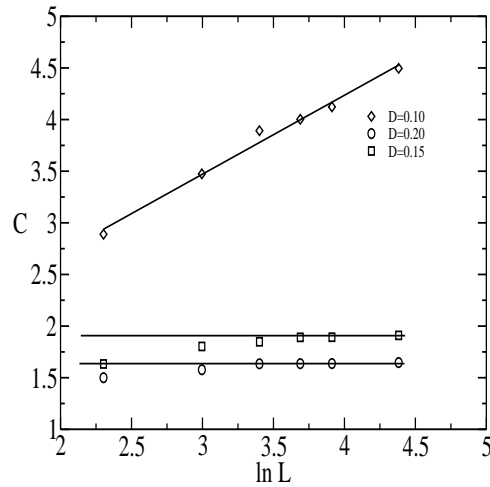


Figura 5.8: Calor específico em função de  $\ln L$  para os três casos estudados.

No capítulo anterior, a susceptibilidade foi calculada do modo usual, ou seja, como uma grandeza proporcional à variância da magnetização. No entanto, como a magnetização média no limite termodinâmico é nula para qualquer temperatura em um sistema com uma transição *BKT*, a susceptibilidade no plano pode ser escrita como

$$\chi_{xy} = \frac{1}{TN} \langle M_{xy}^2 \rangle . \quad (5.6)$$

A relação acima é utilizada no estudo da divergência de  $\chi_{xy}$  também para redes finitas, apesar da magnetização em sistemas que apresentam a transição *BKT* como o modelo *XY*, por exemplo, atingir o limite termodinâmico tão lentamente com o crescimento de  $L$  que seu valor é diferente de zero inclusive para amostras macroscópicas [55].

Na figura 5.9 estão dispostos os gráficos dessa susceptibilidade reduzida em

função da temperatura.

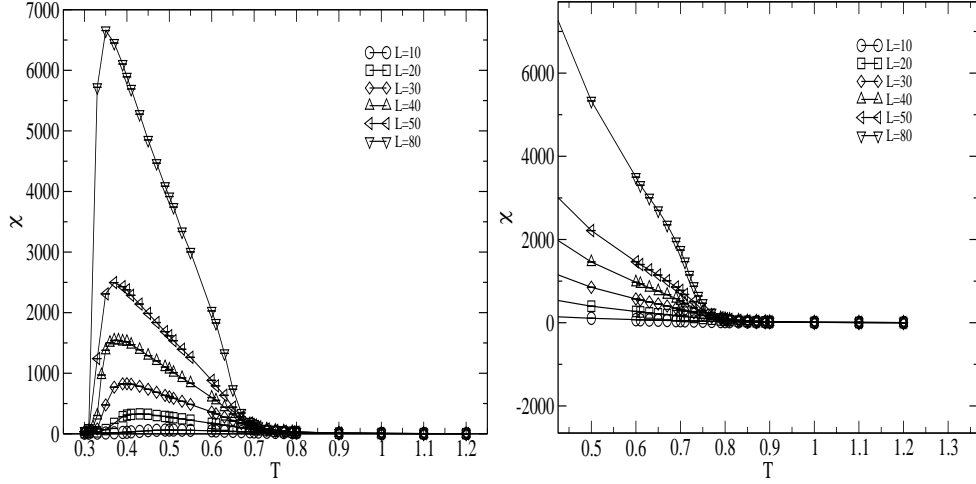


Figura 5.9: Susceptibilidade reduzida no caso  $D = 0.15$  (esquerda) e  $D = 0.20$  (direita).

Como esperado, observa-se que a susceptibilidade diverge exponencialmente quando se tende para  $T_{BKT}$  vindo de temperaturas mais altas. Além disso, para baixas temperaturas ela é uma função crescente de  $L$  enquanto que bem acima de  $T_{BKT}$  as curvas tendem para zero. No limite termodinâmico, a susceptibilidade é infinita para todas as temperaturas  $T \leq T_{BKT}$  e portanto existe uma linha de pontos críticos.

Para  $T \leq T_{BKT}$  temos a seguinte relação de escala para a susceptibilidade

$$\chi_{xy} \propto L^{2-\eta}. \quad (5.7)$$

Essa relação permite que a temperatura  $T_{BKT}$  seja estimada utilizando-se o fato que  $\eta(T_{BKT}) = \frac{1}{4}$ . Na figura abaixo estão os gráficos de  $\chi/L^{\frac{7}{4}}$  em uma escala logarítmica como função de  $L$  e observa-se que os dados estão contidos em retas

para determinadas temperaturas. Portanto estima-se  $T_{BKT} \approx 0.61$  para  $D = 0.15$  e  $T_{BKT} \approx 0.69$  para  $D = 0.20$ . Esses dois valores estão de acordo com a análise para a obtenção das temperaturas  $T_{BKT}$  do início dessa secção.

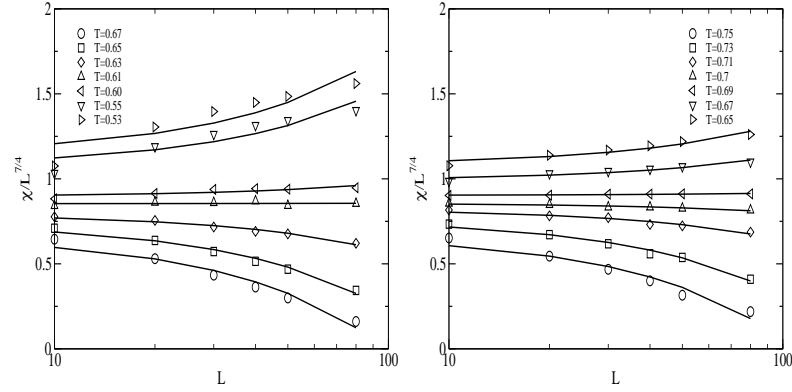


Figura 5.10: Susceptibilidade reduzida sobre  $L^{7/4}$  em função de  $L$  para  $D = 0.15$  (esquerda) e  $D = 0.20$  (direita).

A função correlação da componente no plano  $xy$  dos spins foi calculada utilizando-se 1000 configurações e a rede  $L = 80$  para o caso  $D = 0.20$  no intervalo de temperatura  $T = 0.61$  a  $T = 0.89$  com  $\delta = 0.02$  (Fig.5.11).

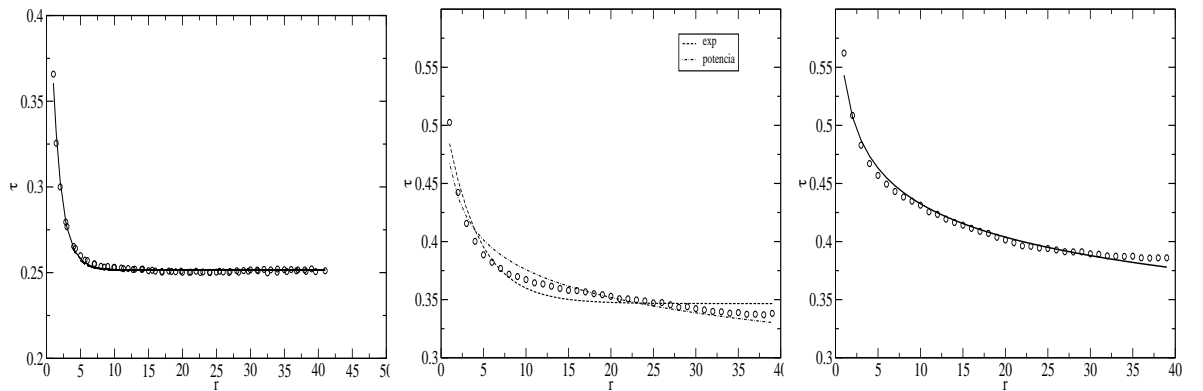


Figura 5.11: Função correlação da componente do spin no plano  $xy$  para  $T = 0.89$  (esquerda),  $T = 0.69$  (centro) e  $T = 0.61$  (direita).

Observou-se que acima de  $T = 0.69$ , a função correlação decai exponencialmente

e abaixo de  $T = 0.67$ , o decaimento segue claramente uma lei de potência. No entanto, em  $T = 0.69$  não é possível distinguir em qual dos dois regimes o sistema se encontra. Portanto, pode-se concluir que abaixo de  $T = 0.67$  existe uma linha de pontos críticos e que  $T_{BKT}$  está próximo de  $T = 0.69$ , como apontado pela análise acima.

Finalmente, por volta de  $T_{BKT}$  a densidade de vórtices segue a seguinte expressão  $\exp(-2\mu/T)$ , onde  $2\mu$  é a energia de criação de um par de vórtices [19, 56, 57, 58]. A figura 5.12 mostra  $-\ln \rho$  em função de  $1/T$  para os dois sistemas em questão.

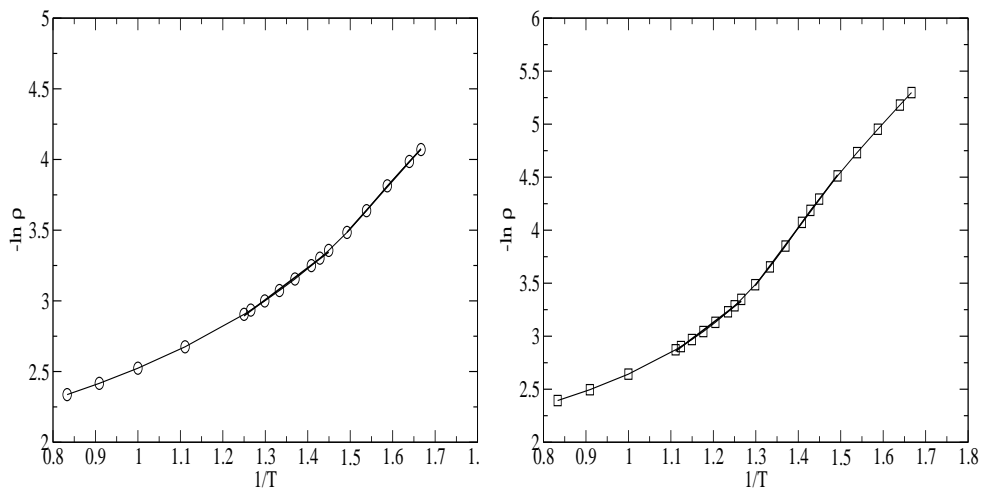


Figura 5.12: Logaritmo da densidade de vórtices para  $D = 0.15$  (esquerda) e  $D = 0.20$  (direita).

Por meio de uma regressão linear na região  $T \approx T_{BKT}$  foram obtidos os valores da energia de ligação  $2\mu = 2.26$  para  $D = 0.15$  e  $2\mu = 3.06$  para  $D = 0.20$ . Como a transição *BKT* é regida pelo desligamento dos vórtices, a energia necessária para a criação de um par deve ser uma função crescente da temperatura  $T_{BKT}$ . Portanto, é esperado que à medida que essa temperatura cresça de um sistema para outro,  $2\mu$  também o faça, o que é observado nesse caso já que  $T_{D=0.15} < T_{D=0.20}$ .

### 5.3 Análise da transição de primeira ordem no caso

$$D = 0.15$$

A seguir estão os gráficos da temperatura efetiva para a susceptibilidade no eixo  $z$ , para a susceptibilidade no plano  $xy$  e também para o calor específico como função do volume.

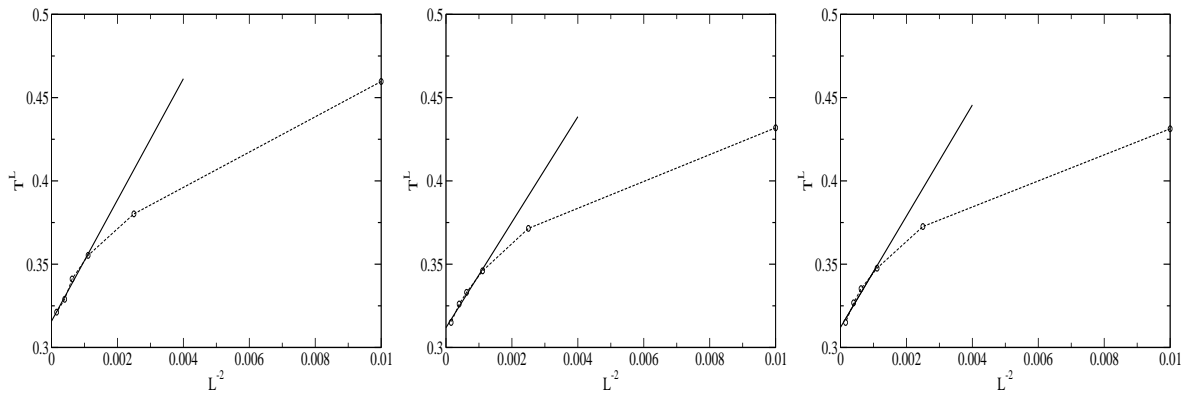


Figura 5.13: Gráficos da temperatura de transição efetiva  $T^L$  para a susceptibilidade no eixo  $z$  (esquerda), a susceptibilidade no plano  $xy$  (centro) e o calor específico (direita).

Cada modelo em particular apresenta uma forma para o deslocamento da temperatura de transição com relação ao seu valor no limite termodinâmico[29]. Nesse caso, observa-se que à medida que o tamanho do sistema cresce, a dependência com o volume se torna aproximadamente linear para as três grandezas. Portanto, através de um ajuste linear foram obtidos os seguintes valores para a temperatura de transição no limite termodinâmico  $T^\infty$ :

Grandeza	$\chi_z$	$\chi_{xy}$	$C$
$T^\infty$	0.316	0.312	0.312

Tabela 5.3: Temperatura de transição no limite termodinâmico  $T^\infty$ .

Logo,

$$T^\infty = 0.31 \pm 0.01 \quad (5.8)$$

A análise de outras quantidades como os máximos da susceptibilidade e do calor específico não pode ser realizada porque não foi possível avaliar o valor dos picos com precisão razoável nessas simulações.



# Capítulo 6

## Conclusões e perspectivas

Neste trabalho foi estudado um modelo magnético clássico para filmes finos utilizando-se o método de Monte Carlo com o algoritmo de Metropolis. O hamiltoniano desse modelo apresenta um termo de troca, outro dipolar e um termo de anisotropia cristalina. Nas simulações foi utilizado um corte na interação dipolar em  $r_c = 5r_0$ , onde  $r_0$  é o parâmetro da rede quadrada. Ao variarmos os parâmetros  $J$ ,  $D$  e  $A$  do hamiltoniano, observa-se um diagrama de fases muito rico e interessante, cuja projeção no plano  $DT$  está esboçada na figura 6.1.

Para  $J = A = 1$  fixo, observou-se que quando  $D = 0.1$  o sistema é tipo Ising, apresentando então uma transição de segunda ordem de uma fase ordenada para outra paramagnética com o crescimento da temperatura (linha c).

Quando  $D = 0.15$  ocorrem duas transições de fase distintas: uma de primeira ordem (linha a) e outra Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (linha b). A transição de primeira ordem é denominada transição de reorientação porque à baixa temperatura

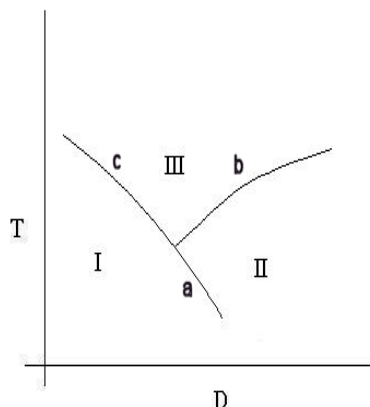


Figura 6.1: Esboço do diagrama de fases para o modelo de um filme ultrafino no espaço  $D \times T$  com  $A$  e  $J$  constante. A fase I é ferromagnética, a fase II é uma fase XY enquanto a fase III é paramagnética.

o sistema se ordena na direção perpendicular ao filme e à medida que a temperatura cresce, os spins se dirigem para o plano. Essa é uma transição de fase observada em diversos filmes ferromagnéticos como, por exemplo, Fe sobre Cu(100). A transição BKT ocorre à temperatura mais alta e foi caracterizada pela análise de tamanho finito de grandezas como o calor específico e a magnetização no plano.

Finalmente, para  $D = 0.20$  observa-se somente a transição *BKT* e o vetor magnetização espontânea está no plano do filme em todo o intervalo de temperatura investigado para os sistemas finitos. No limite termodinâmico espera-se que a magnetização espontânea seja zero. A ausência da transição de primeira ordem nesse caso deve-se a um dos dois motivos: a linha *a* termina à temperatura mais baixa que  $T = 0.3$  ou antes da reta  $D = 0.20$ .

Depois da análise dos resultados, surgem algumas perguntas importantes e que motivam a continuação desse projeto:

1. Existe um limite no alcance da interação dipolar a partir do qual o caráter da

transição passa de  $BKT$  para segunda ordem?

2. Como a linha denominada  $a$  do digrama de fases termina?
3. Qual é o caráter do ponto de intersecção das três linhas?

Sabe-se que aumentando o raio de corte  $r_c$ , a simetria do hamiltoniano é mantida. Logo, espera-se que para valores maiores de  $r_c$  os resultados não mudem de forma qualitativa, exceto quando o alcance da interação é infinito.

Portanto, com o objetivo de responder às três questões acima será realizado um estudo mais detalhado do modelo utilizando a técnica de histograma[10] e variando o valor do corte.

# Referências Bibliográficas

- [1] D. P. Pappas, K. P. Kamper, H. Hopster, Phys. Rev. Lett. **64**, 3179 (1990).
- [2] R. Allenspach, A. Bischof, Phys. Rev. Lett. **69**, 3385 (1992).
- [3] Z. Q. Qiu, J. Pearson, S. D. Bader, Phys. Rev. Lett. **70**, 1006 (1991).
- [4] C. Liu, S. D. Bader, J. Appl. Phys. **67**, 5758 (1990).
- [5] D. P. Pappas, C. R. Brundle, H. Hopster, Phys. Rev. B. **45**, 8169 (1992).
- [6] N. D. Mermin, H. Wagner, Phys. Rev. Lett **17**, 1133 (1966).
- [7] J. G. Gay, R. Richter, Phys. Rev. Lett. **56**, 2728 (1986).
- [8] D. Pescia *et al*, Phys. Rev. Lett. **58**, 2126 (1987).
- [9] B. Schulz, K. Baberschke, Phys. Rev. B. **50**, 13467 (1994).
- [10] D. P. Landau, K. Binder, A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics (Cambridge University Press,2000).
- [11] P. Pfeuty, G. Toulouse, Introduction to the renormalization group and to critical phenomena, (John Wiley & Sons, 1977).

- [12] H. B. Callen, Thermodynamics and an introduction to thermostatistics, (John Wiley & Sons, 1985).
- [13] P. Ehrenfest, Prog. Amsterdam. Acad. **36**, 153 (1933).
- [14] M. E. Fisher, Rev. Mod. Phys. **46**, 597 (1974).
- [15] J. Toledano, P. Toledano, The Landau theory of phase transitions : application to structural, incommensurate, magnetic, and liquid crystal systems (World Scientific, Singapura, 1987).
- [16] S. K. Ma, Modern Theory of Critical Phenomena (Benjamin, London, 1976).
- [17] E. Ising, Z. Physik. **31**, 253 (1925).
- [18] L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
- [19] J. M. Kosterlitz, D. J. Thouless, J. Phys. C. **6**, 1181 (1973).
- [20] V. L. Berezinskii, Zh. Eksp. Teo. Fiz. **61**,1144 (1971).
- [21] J. M. Kosterlitz, D. J. Thouless, "Progress in Low Temperature Physics", Vol. VII b, ed. D. F. Brewer (North-Holand, Amsterdam, 1977) p. 371.
- [22] J. B. Kogut, Rev. Mod. Phys. **51**, 680 (1979).
- [23] L. A. S. Mól, Estudo de materias magnéticos de baixa dimensionalidade dopados com impurezas não magnéticas, dissertação de mestrado (2004).
- [24] H. E. Stanley, Introduction to phase transitions and critical phenomena, (Oxford University Press, 1971).

- [25] N. Goldenfeld, Lectures on phase transitions and the renormalization group, (Addison-Wesley Publishing Company, 1992).
- [26] S. Wansleben, D. P. Landau, Phys. Rev. B. **43**, 6006 (1991).
- [27] M. E. Fisher, Rept. Prog. Phys. **30**, 615 (1967).
- [28] P. C. Hohenberg, B. I. Helperin, Rev. Mod. Phys. **49**, 435 (1977).
- [29] K. Chen, Computer simulations of three-dimensional classical heisenberg models, tese de doutorado (1993).
- [30] J. LeGuillou e J. Zinn-Justin, J. Phys. (Paris) Lett. 46, L137 (1985, Phys. Rev. B **21**, 3976 (1980).
- [31] M. Plischke, Equilibrium Statistical Physics (World Scientific, Singapura,1994).
- [32] S. R. Salinas, Introdução à Física Estatística (EDUSP,1997).
- [33] V. Privman, Finite size scaling and numerical simulation of statistical systems, (World Scientific, 1990).
- [34] A. Cuccoli, V. Tognetti, Phys. Rev. B. **52**, 10221 (1995).
- [35] J. Tobochnik, G. V. Chester, Phys. Rev. B **20**, 3761 (1979).
- [36] M. S. S. Challa, D. P. Landau, Phys. Rev. B **34**, 1841 (1986).
- [37] M. E. Fisher, V. Privman, Phys. Rev. B **32**, 447 (1985).
- [38] S. Singh, R. K. Pathria, Phys. Rev. B **40**, 9238 (1989).

- [39] M. E. J. Newman, G. T. Barkema, Monte Carlo Methods in Statistical Physics (Oxford University Press,1999).
- [40] T. Tomé, M. J. de Oliveira, Dinâmica estocástica e irreversibilidade (EDUSP, 2001).
- [41] N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller, E. Teller, J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953).
- [42] P. Peczak, D. P. Landau, J. Appl. Phys. **67**, 5427 (1990).
- [43] F. R. Brown, T. J. woch, Phys. Rev. Lett. **58**, 2394 (1987).
- [44] M. Creutz, Phys. Rev. D. **36**, 515 (1987).
- [45] R. H. Swendsen, J. S. Wang, Phys. Rev. Lett. **58**, 86 (1987).
- [46] A. Aharoni, Introduction to the Theory of Ferromagnetism, (Clarendon Press, 1998).
- [47] J. A. C. Bland, B. Heinrich, Ultrathin Magnetic Structures I, (Springer-Verlag, 1994).
- [48] J. D. Jackson, Classical Electrodynamics, (John Wiley & Sons,1999).
- [49] C. Santamaria, H. T. Diep, Journ. Mag. Mat. **212**, 23 (2000).
- [50] R. P. Erickson, D. L. Mills, Phys. Rev. B **43**, 11527 (1991).
- [51] H. T. Diep, Magnetic Systems with Competing Interactions, (World Scientific, 1994).

- [52] A. Hucht, A. Moschel, K. D. Usadel, *Journ. Mag. Mag. Mat.* **148**, 32 (1995).
- [53] A. Hucht, K. D. Usadel, *Journ. Mag. Mag. Mat.* **156**, 432 (1996).
- [54] D. P. Landau, *Phys. Rev. B* **13**,2997 (1976).
- [55] S. T. Bramwell, P. C. W. Holdsworth, *Phys. Rev. B* **49**,8811 (1994).
- [56] K. W. Lee, C. E. Lee, *Phys. Rev. B* **72**, 055439 (2005).
- [57] J. Tobochnik, G. V. Chester, *Phys. Rev. B* **20**, 3761 (1979).
- [58] R. Gupta, C. F. Baillie, *Phys. Rev. B* **45**, 2883 (1992)



# Apêndice A

## Programas

Programa em linguagem FORTRAN construído para simular um modelo de filmes magnéticos ultrafinos e o programa de análise dos dados também em FORTRAN.

```

C
C          *****   PROGRAMA MAG_2D   *****
C          *****
C
C
C          **          SIMULACAO DE UM FILME MAGNETICO ULTRAFINO E          **
C          **          ESTUDO DO SISTEMA ATRAVES DO METODO DE MONTE          **
C          **          CARLO COM O ALGORITMO DE METROPOLIS.          **
C          **
C          *****
C
C
C =====
C
C      programa mag_2d
C
C      implicit none
C      double precision sx,sy,sz,xm,ym,zm,pi,zpi,beta,beta2,temper,
C      cdneq,dnboltz,dntotal,dlt,ch,w,hx,hy,hz,an,e
C      real XRAND
C      integer i,l,ll,lz,l3,iep,iem,jep,jem,kep,kem,ijvp,ikvp,jkvp,iops,
C      cIDUM,neq,nboltz,ntotal,nvij_eq,nvik_eq,nvjk_eq,navij_eq,navik_eq,
C      cnavjk_eq,nvij_med,nvik_med,nvjk_med,navij_med,navik_med,
C      cnavjk_med,dime,viz
C      parameter (l=50,ll=(l*1),lz=1,l3=(ll*lz),dime=(1000000))
C
C      dimension sx(l3),sy(l3),sz(l3),xm(l3),ym(l3),zm(l3)
C      dimension iep(l3),iem(l3),jep(l3),jem(l3),kep(l3),kem(l3)
C      dimension ijvp(l3),ikvp(l3),jkvp(l3),viz(200000)
C      dimension nvij_med(lz),navij_med(lz),nvik_med(1),navik_med(1),
C      cnvjk_med(1),navjk_med(1)
C      dimension nvij_eq(dime),navij_eq(dime),nvik_eq(dime),
C      cnavik_eq(dime),nvjk_eq(dime),navjk_eq(dime)
C
C      common/posi/xm,ym,zm
C      common/vizi/iep,iem,jep,jem,kep,kem,ijvp,ikvp,jkvp,viz
C      common/spins/sx,sy,sz
C      common/dble_const/pi,zpi,beta,beta2
C      common/int_const/IDUM,iops
C      common/loops/neq,nboltz,ntotal
C      common/loops_dob/dneq,dnboltz,dntotal
C      common/vort_med/nvij_med,nvik_med,nvjk_med,navij_med,navik_med,
C      cnavjk_med
C      common/extra/dlt
C      common/numb/nvij_eq,nvik_eq,nvjk_eq,navij_eq,navik_eq,navjk_eq
C      common/temp/temper
C      common/potential/ch,w,hx,hy,hz,an
C
C      open(20,file='saidas.out')
C      open(25,file='visual.out')
C      open (30,file='dados.dat')
C      open (90,file='vort.out')
C      open (95,file='antivort.out')
C
C
C.....
C
C      call ent_dad
C.....

```

```

C
C.....
C
    call tabela
C.....
C
C.....
C
    call tabela2
C.....
C
C.....
C
    call posicoes
C.....
C
C.....
C
    call config_zero
C.....
C
C.....
C
    call energy(e,ch,w,hx,hy,hz,an)
C.....
C
C.....
C
    do while (temper.le.0.34d0)
C
    do i=1,lz
        nvi_j_med(i)=0
        navij_med(i)=0
    end do
    do i=1,l
        nvik_med(i)=0
        navik_med(i)=0
        nvjk_med(i)=0
        navjk_med(i)=0
    end do
    do i=1,dime
        nvi_j_eq(i)=0
        navij_eq(i)=0
        nvik_eq(i)=0
        navik_eq(i)=0
        nvjk_eq(i)=0
        navjk_eq(i)=0
    end do
C
    open (40,file='mag.out',access='append')
    open (60,file='energia.out',access='append')
C
    write(40,*)temper
    write(60,*)temper
    beta=1.d0/temper
    beta2=beta*beta
C

```

```

        call equilibrium(e,neq,nboltz,temper)
C.....
C
C.....
C
        close(40,status='keep')
        close(60,status='keep')
C
        temper=temper+0.0025d0
C
end do
C
close(20,status='keep')
close(25,status='keep')
close (30,status='keep')
close (90,status='keep')
close (95,status='keep')
end program
C
C=====
C
C
*****
*
C
subroutine ent_dad
C
** LEITURA DOS DADOS
C
double precision beta,pi,zpi,temper,beta2,dneq,dnboltz,dntotal,
cdlt,ch,w,hx,hy,hz,an
integer IDUM,iops,neq,nboltz,ntotal,l,lz,l3,ll
parameter (l=50,lz=1,ll=(l*1),l3=(ll*lz))
C
common/dble_const/pi,zpi,beta,beta2
common/int_const/IDUM,iops
common/loops/neq,nboltz,ntotal
common/loops_dob/dneq,dnboltz,dntotal
common/extra/dlt
common/temp/temper
common/potential/ch,w,hx,hy,hz,an
C
**ALGUMAS CONSTANTES
C
pi=4.d0*datan(1.d0)
zpi=2.d0*pi
IDUM=-1
dlt=1.d0/dble(l3)
C
**DADOS DE ENTRADA
C
CC IOPS- OPCA0 DE INICIALIZA0AO
CC TEMPER- TEMPERATURA INICIAL
CC NEQ- NUMERO DE FEIXES
CC NBOLTZ- NUMERO DE CONF. NO FEIXE
CC CH,W,AN- PARAMETROS DO HAMILTONIANO
C

```

```

        read(30,*)iops,temper,neq,nboltz,ch,w,an
C
        dneq=1.d0/dble(neq)
        دنبoltz=1.d0/dble(nboltz)
        ntotal=neq*nboltz
        dntotal=1.d0/dble(ntotal)
C
        return
        endsubroutine
*****
**
C
        subroutine posicoes
C
C        ** POSICAO DOS SPINS NA REDE
C
        double precision xm,ym,zm
        integer l,ll,lz,l3,i,j,k,w
        parameter (l=50,ll=(l*1),lz=1,l3=(ll*lz))
C
        dimension xm(l3),ym(l3),zm(l3)
C
        common/posi/xm,ym,zm
C
        do i=1,l3
            xm(i)=0.d0
            ym(i)=0.d0
            zm(i)=0.d0
        end do
C
        i=1
        do w=1,lz
            do j=1,l
                do k=1,l
                    xm(i)=dbble(k)
                    ym(i)=dbble(j)
                    zm(i)=dbble(w)
                    i=i+1
                end do
            end do
        end do
C
        return
        end subroutine
*****
*
C
        subroutine tabela
C
C        ** CRIA VETOR DE PRIMEIROS VIZINHOS
C
        integer iep,iem,jep,jem,kep,kem,ix,iy,iz,iyp,iym,ixp,ixm,
        cisitio,ijvp,ikvp,jkvp,iv,l,lz,ll,l3,viz
        parameter (l=50,lz=1,ll=(l*1),l3=(ll*lz))
C
        dimension iep(l3),iem(l3),jep(l3),jem(l3),kep(l3),kem(l3)
        dimension ijvp(l3),ikvp(l3),jkvp(l3),viz(200000)

```

```

C      common/vizi/iep,iem,jep,jem,kep,kem,ijvp,ikvp,jkvp,viz
C
      iyp=0
      iym=0
      ixp=0
      ixm=0
      do isitio=1,13
         iep(isitio)=0
         iem(isitio)=0
         jep(isitio)=0
         jem(isitio)=0
         kep(isitio)=0
         kem(isitio)=0
         ijvp(isitio)=0
         ikvp(isitio)=0
         jkvp(isitio)=0
      end do
      isitio=0
C
      do 300 iz=1,lz
         do 200 iy=1,1
            iyp=iy+1
            iym=iy-1
            if (iyp.gt.1) iyp=iyp-1
            if (iym.lt.1) iym=iym+1
            do 100 ix=1,1
               ixp=ix+1
               ixm=ix-1
               if (ixp.gt.1) ixp=ixp-1
               if (ixm.lt.1) ixm=ixm+1
               isitio=isitio+1
               iep(isitio)=ixp+(iy-1)*1+11*(iz-1)
               iem(isitio)=ixm+(iy-1)*1+11*(iz-1)
               jep(isitio)=ix+(iyp-1)*1+11*(iz-1)
               jem(isitio)=ix+(iym-1)*1+11*(iz-1)
               kep(isitio)=isitio+11
               kem(isitio)=isitio-11
               iv=iz+1
               if (kep(isitio).gt.13) then
                  kep(isitio)=isitio-13+11
                  iv=1
               endif
               if (kem(isitio).lt.1) then
                  kem(isitio)=isitio+13-11
               end if
               ijvp(isitio)=ixp+(iyp-1)*1+11*(iz-1)
               ikvp(isitio)=ixp+(iy-1)*1+11*(iv-1)
               jkvp(isitio)=ix+(iyp-1)*1+11*(iv-1)
            100      continue
            200      continue
            300      continue
         return
      end subroutine
*****
*
C

```

```

subroutine tabela2
C
C   **CRIA VETOR DE VIZINHOS-INTERACAO DIPOLAR
C
integer i,k,iep,iem,jep,jem,kep,kem,ix,iy,iz,iyp,iym,ixp,ixm,
cisitio,ijvp,ikvp,jkvp,iv,l,lz,ll,l3,viz,nub,aux,aux1,aux2,aux3
parameter (l=50,lz=1,ll=(l*1),l3=(ll*lz))
C
dimension iep(l3),iem(l3),jep(l3),jem(l3),kep(l3),kem(l3)
dimension ijvp(l3),ikvp(l3),jkvp(l3),viz(200000)
C
common/vizi/iep,iem,jep,jem,kep,kem,ijvp,ikvp,jkvp,viz
C
nub=1
do isitio=1,l3
  aux=iep(isitio)
  aux1=iem(isitio)
C
  do i=1,5
    viz(nub)=aux
    nub=nub+1
    viz(nub)=aux1
    nub=nub+1
    aux=iep(aux)
    aux1=iem(aux1)
  end do
C
  aux2=isitio
  aux3=isitio
C
  do k=1,3
    aux2=jep(aux2)
    aux3=jem(aux3)
    aux=aux2
    aux1=aux3
C
    do i=1,5
      viz(nub)=aux
      nub=nub+1
      viz(nub)=aux1
      nub=nub+1
      aux=iep(aux)
      aux1=iep(aux1)
    end do
C
    aux=iem(aux2)
    aux1=iem(aux3)
C
    do i=1,4
      viz(nub)=aux
      nub=nub+1
      viz(nub)=aux1
      nub=nub+1
      aux=iem(aux)
      aux1=iem(aux1)
    end do
C

```

```

        end do
C
        aux2=jep(aux2)
        aux3=jem(aux3)
        aux=aux2
        aux1=aux3
C
        do i=1,4
            viz(nub)=aux
            nub=nub+1
            viz(nub)=aux1
            nub=nub+1
            aux=iep(aux)
            aux1=iep(aux1)
        end do
C
        aux=iem(aux2)
        aux1=iem(aux3)
C
        do i=1,3
            viz(nub)=aux
            nub=nub+1
            viz(nub)=aux1
            nub=nub+1
            aux=iem(aux)
            aux1=iem(aux1)
        end do
C
        aux=jep(aux2)
        aux1=jem(aux3)
        viz(nub)=aux
        nub=nub+1
        viz(nub)=aux1
        nub=nub+1
    end do
C
    return
end subroutine
*****
*****
C
C ** FUNCAO GERADORA DE NUMEROS ALEATORIOS
C
    FUNCTION XRAND(IDUM)
    INTEGER IDUM, IM1, IMM1, IA1, IA2, IQ1, IQ2, IR1, IR2, NTAB, NDIV
    REAL XRAND, AM, EPS, RNMX
    PARAMETER ( IM1=2147413563, IM2=2147413399, AM=1./IM1, IMM1=IM1-1,
*     IA1=40014, IA2=40692, IQ1=53661, IQ2=52774, IR1=12211,
*     IR2=3791, NTAB=32, NDIV=1+IMM1/NTAB, EPS=1.2E-7, RNMX=1.-EPS)
    INTEGER IDUM2, J, K, IV(NTAB), IY
    SAVE IV, IY, IDUM2
    DATA IDUM2/123456719/, IV/NTAB*0/, IY/0/
    IF (IDUM .LE. 0) THEN
        IDUM=MAX(-IDUM, 1)
        IDUM2=IDUM
        DO J=NTAB+1, 1, -1
            K=IDUM/IQ1

```



```

                IDUM=IA1*( IDUM-K*IQ1 )-K*IR1
                IF( IDUM .LT. 0)IDUM=IDUM+IM1
                IF(J .LE. NTAB) IV(J)=IDUM
            END DO
            IY=IV(1)
        END IF
        K=IDUM/IQ1
        IDUM=IA1*( IDUM-K*IQ1 )-K*IR1
        IF( IDUM .LT. 0)IDUM=IDUM+IM1
            K=IDUM2/IQ2
            IDUM2=IA2*( IDUM2-K*IQ2 )-K*IR2
            IF( IDUM2 .LT. 0)IDUM2=IDUM2+IM2
            J= 1 + IY/NDIV
            IY=IV(J)-IDUM2
            IV(J)=IDUM
            IF(IY .LT. 1)IY=IY+IMM1
C
C
                XRAND=MIN(AM*IY,RNMX)
        RETURN
        END
*****
*****
C
    subroutine config_zero
C
C    ** CONFIGURACAO INICIAL
C
    double precision sx,sy,sz,teta,pi,zpi,beta,beta2,sxy,tem,
caux1,aux2,aux3
    real XRAND
    integer l,ll,lz,l3,i,IDUM,iops
    parameter (l=50,lz=1,ll=(l*1),l3=(ll*lz))
    dimension sx(l3),sy(l3),sz(l3)
C
    common/spins/sx,sy,sz
    common/dble_const/pi,zpi,beta,beta2
    common/int_const/IDUM,iops
C
C*****aleatorio*****
**
    if (iops.eq.0) then
        do 200 i=1,l3
            teta=zpi*dble(XRAND(IDUM))
            sz(i)=1.d0-2.d0*dble(XRAND(IDUM))
            sxy=dsqrt(1.d0-sz(i)*sz(i))
            sx(i)=sxy*dcos(teta)
            sy(i)=sxy*dsin(teta)
200    continue
        end if
C*****ordenado*****
    if (iops.eq.1) then
        do 300 i=1,l3
            sx(i)=0.d0
            sy(i)=0.d0
            sz(i)=1.d0
300    continue

```

```

        end if
C*****leitura*****
        if (iops.eq.2) then
            read(25,*)tem
            write(*,*)tem
            do 400 i=1,l3
                read(25,*)aux1,aux2,aux3,sx(i),sy(i),sz(i)
400          continue
            end if
C
            return
            end subroutine
*****
*
C
        subroutine energy(e,ch,w,hx,hy,hz,an)
C
C        ** CALCULO DA ENERGIA TOTAL
C
        double precision e,ex,ey,ez,rx,ry,rz,rij,sx,sy,sz,xm,ym,zm,aux1,
        caux2,ch,w,hx,hy,hz,an,eang,bigl
        integer
i,j,il,i2,i3,l,lz,ll,l3,iem,iem,jep,jem,kep,kem,ijvp,ikvp,
        cjkvp,viz,nub,k
        parameter (l=50,lz=1,ll=(l*1),l3=(ll*lz))
C
        dimension sx(l3),sy(l3),sz(l3),xm(l3),ym(l3),zm(l3)
        dimension iep(l3),iem(l3),jep(l3),jem(l3),kep(l3),kem(l3)
        dimension ijvp(l3),ikvp(l3),jkvp(l3),viz(200000)
C
        common/posi/xm,ym,zm
        common/vizi/iep,iem,jep,jem,kep,kem,ijvp,ikvp,jkvp,viz
        common/spins/sx,sy,sz
C
        bigl=dbl(1)
        ex=0.d0
        ey=0.d0
        ez=0.d0
        eang=0.d0
        nub=1
C
        do i=1,l3
            il=iep(i)
            i2=jep(i)
            i3=kep(i)
            ex=ex-sx(i)*(sx(il)+sx(i2))-sy(i)*(sy(il)+sy(i2))
c-sz(i)*(sz(il)+sz(i2))
            ez=ez-sx(i)*hx-sy(i)*hy-sz(i)*hz
            eang=eang-sz(i)*sz(i)
        end do
C
        do i=1,l3
            do k=1,80
                j=viz(nub)
                rx=xm(j)-xm(i)
                ry=ym(j)-ym(i)
                rz=zm(j)-zm(i)

```

```

        if (dabs(rx).gt.5.d0) then
            if (rx.gt.0.d0) then
                rx=rx-big1
            else
                rx=-rx+big1
            end if
        end if
        if (dabs(ry).gt.5.d0) then
            if (ry.gt.0.d0) then
                ry=ry-big1
            else
                ry=-ry+big1
            end if
        end if
        rij=rx*rx+ry*ry+rz*rz
        rij=dsqrt(rij)
        ey=ey+(sx(i)*sx(j)+sy(i)*sy(j)+sz(i)*sz(j))/rij**3
        aux1=sx(i)*rx+sy(i)*ry+sz(i)*rz
        aux2=sx(j)*rx+sy(j)*ry+sz(j)*rz
        ey=ey-3.d0*aux1*aux2/rij**5
        nub=nub+1
    end do
end do
C
e=ch*ex+w*0.5d0*ey+ez+an*ean
C
return
endsubroutine
*****
*****
C
subroutine boltz(e,num)
C
** ALGORITMO METROPOLIS
C
double precision
sx,sy,sz,xm,ym,zm,pi,zpi,beta,r,teta,sxt,syt,szt,
cvx,vy,vz,tz,dif,mx,my,mzz,e,aux_mg,beta2,dlt,rx,ry,rz,rij,aux1,
Caux2,ey,ey_new,ch,w,hx,hy,hz,an,bigl,dif1
integer i,j,k,IDUM,iops,iem,jep,jem,kep,kem,ijvp,ikvp,jkvp,
cl,l1,lz,l3,num,viz,nub
real XRAND
parameter (l=50,lz=1,l1=(l*1),l3=(l1*lz))
C
dimension
sx(l3),sy(l3),sz(l3),r(l3),teta(l3),xm(l3),ym(l3),zm(l3)
dimension iep(l3),iem(l3),jep(l3),jem(l3),kep(l3),kem(l3)
dimension ijvp(l3),ikvp(l3),jkvp(l3),viz(200000)
C
common/posi/xm,ym,zm
common/vizi/iep,iem,jep,jem,kep,kem,ijvp,ikvp,jkvp,viz
common/spins/sx,sy,sz
common/dble_const/pi,zpi,beta,beta2
common/int_const/IDUM,iops
common/extra/dlt
common/potential/ch,w,hx,hy,hz,an
C

```

```

bigl=dbl(1)
mx=0.d0
my=0.d0
mzz=0.d0
nub=1
C
do i=1,13
  teta(i)=zpi*dbl(XRAND(IDUM))
  r(i)=dbl(XRAND(IDUM))
end do
C
do i=1,13
  szt=1.d0-2.d0*dbl(XRAND(IDUM))
  tz=dsqrt(1.d0-szt*szt)
  sxt=tz*dcos(teta(i))
  syt=tz*dsin(teta(i))
  vx=sx(iep(i))+sx(iem(i))+sx(jep(i))+sx(jem(i))
c+sx(kem(i))
c+sx(kep(i))
  vy=sy(iep(i))+sy(iem(i))+sy(jep(i))+sy(jem(i))
c+sy(kem(i))
c+sy(kep(i))
  vz=sz(iep(i))+sz(iem(i))+sz(jep(i))+sz(jem(i))
c+sz(kem(i))
c+sz(kep(i))
  ey=0.d0
  ey_new=0.d0
C
do k=1,80
  j=viz(nub)
  rx=xm(j)-xm(i)
  ry=ym(j)-ym(i)
  rz=zm(j)-zm(i)
C
  if (dabs(rx).gt.5.d0) then
    if (rx.gt.0.d0) then
      rx=rx-bigl
    else
      rx=-rx+bigl
    end if
  end if
C
  if (dabs(ry).gt.5.d0) then
    if (ry.gt.0.d0) then
      ry=ry-bigl
    else
      ry=-ry+bigl
    end if
  end if
C
  rij=rx*rx+ry*ry+rz*rz
  rij=dsqrt(rij)
C
  ey=ey+(sx(i)*sx(j)+sy(i)*sy(j)+sz(i)*sz(j))/rij**3
  aux1=sx(i)*rx+sy(i)*ry+sz(i)*rz
  aux2=sx(j)*rx+sy(j)*ry+sz(j)*rz
  ey=ey-3.d0*aux1*aux2/rij**5

```

```

C      ey_new=ey_new+(sxt*sx(j)+syt*sy(j)+szt*sz(j))/rij**3
      aux1=sxt*rx+syt*ry+szt*rz
      ey_new=ey_new-3.d0*aux1*aux2/rij**5
C
      nub=nub+1
      end do
C
      dif1=((sxt-sx(i))*vx+(syt-sy(i))*vy+(szt-sz(i))*vz)*ch
c+(ey-ey_new)*w+(szt*szt-sz(i)*sz(i))*an
      dif1=dif1+(sxt-sx(i))*hx+(syt-sy(i))*hy+(szt-sz(i))*hz
      dif=dexp(beta*dif1)
C
      if (r(i).le.dif) then
        sx(i)=sxt
        sy(i)=syt
        sz(i)=szt
      end if
C
      mzz=mzz+sz(i)
      mx=mx+sx(i)
      my=my+sy(i)
      end do
C
      if (num.ne.0) then
        aux_mg=(mx*mx+my*my)*dlt*dlt
        aux_mg=dsqrt(aux_mg)
        call energy(e,ch,w,hx,hy,hz,an)
        write(60,*) e
        write(40,*)aux_mg,mzz*dlt
      end if
C
      return
      endsubroutine
*****
*
C
      subroutine equilibrium(e,neq,nboltz,temper)
C
C      ** EQUILIBRA O SISTEMA E CHAMA METROPOLIS
C
      double precision e,temper
      integer l,lz,neq,nboltz,ieq,iboltz,nul_aux,nuz_aux,
cnum
C
      parameter (l=50,lz=1)
C
      num=0
      do 100 iboltz=1,500000
        call boltz(e,num)
100    continue
C
      do 500 ieq=1,neq
        num=1
      do 200 iboltz=1,nboltz
        nul_aux=(ieq-1)*l+1
        nuz_aux=(ieq-1)*lz+1

```

```

        call boltz(e,num)
        call vortices(iboltz,ieq,nul_aux,nuz_aux)
200  continue
500  continue
C
    call errvor
C
    call escreve_conf
C
    return
    endsubroutine
*****
***
C
    subroutine vortices(iboltz,ieq,nul_aux,nuz_aux)
C
C    ** CALCULA O NUMERO DE VORTICES E ANTIVORTICES
C
    double precision arg,aux,sx,sy,sz,pi,zpi,beta,beta2,phi,dphi,mpi,
    cv,aul,ycomp,es_aux
    integer ix,iy,iz,l,ll,lz,l3,iep,iem,jep,jem,kep,kem,ijvp,ikvp,
    cjkv,ivij,ivik,iavij,iavik,jvij,jvjk,javij,javjk,kvik,kvjk,kavik,
    ckavjk,is,i,nvij,nvik,nvjk,navij,navik,navjk,nvij_eq,
    cnvik_eq,nvjk_eq,navij_eq,navik_eq,navjk_eq,nul_aux,nuz_aux,dime,
    cnvij_med,nvik_med,nvjk_med,navij_med,navik_med,navjk_med,
    cneq,nboltz,ntotal,vtotal,iboltz,ieq,avtotal,viz
C
    parameter (l=50,ll=(l*1),lz=1,l3=(ll*lz),dime=1000000)
C
    dimension sx(l3),sy(l3),sz(l3),phi(5),dphi(4)
    dimension iep(l3),iem(l3),jep(l3),jem(l3),kep(l3),kem(l3)
    dimension ijvp(l3),ikvp(l3),jkvp(l3),viz(200000)
    dimension
    ivij(ll),ivik(ll),iavij(ll),iavik(ll),jvij(ll),jvjk(ll),
    javij(ll),javjk(ll),kvik(ll),kvjk(ll),kavik(ll),kavjk(ll)
    dimension nvij(lz),navij(lz),nvik(l),navik(l),nvjk(l),navjk(l)
    dimension nvij_med(lz),navij_med(lz),nvik_med(l),navik_med(l),
    cnvjk_med(l),navjk_med(l)
    dimension nvij_eq(dime),navij_eq(dime),nvik_eq(dime),
    cnavik_eq(dime),nvjk_eq(dime),navjk_eq(dime)
C
    common/spins/sx,sy,sz
    common/vizi/iep,iem,jep,jem,kep,kem,ijvp,ikvp,jkvp,viz
    common/dble_const/pi,zpi,beta,beta2
    common/vort_med/nvij_med,nvik_med,nvjk_med,navij_med,navik_med,
    cnavjk_med
    common/numb/nvij_eq,nvik_eq,nvjk_eq,navij_eq,navik_eq,navjk_eq
    common/loops/neq,nboltz,ntotal
C
    mpi=-pi
    do i=1,lz
        nvij(i)=0
        navij(i)=0
    end do
C
    calculo de vortices nos planos xy e paralelos
    is=0
    do 400 iz=1,lz

```

```

do 300 iy=1,1
do 200 ix=1,1
  is=is+1
C
  aul=sx(is)
  ycomp=sy(is)
  aux=dsqrt(aul*aul+ycomp*ycomp)
  arg=aul/aux
  phi(1)=dacos(arg)
  if (ycomp.lt.0.d0) phi(1)=zpi-phi(1)
C
  aul=sx(iep(is))
  ycomp=sy(iep(is))
  aux=dsqrt(aul*aul+ycomp*ycomp)
  arg=aul/aux
  phi(2)=dacos(arg)
  if (ycomp.lt.0.d0) phi(2)=zpi-phi(2)
C
  aul=sx(ijvp(is))
  ycomp=sy(ijvp(is))
  aux=dsqrt(aul*aul+ycomp*ycomp)
  arg=aul/aux
  phi(3)=dacos(arg)
  if (ycomp.lt.0.d0) phi(3)=zpi-phi(3)
C
  aul=sx(jep(is))
  ycomp=sy(jep(is))
  aux=dsqrt(aul*aul+ycomp*ycomp)
  arg=aul/aux
  phi(4)=dacos(arg)
  if (ycomp.lt.0.d0) phi(4)=zpi-phi(4)
C
  phi(5)=phi(1)
  v=0.d0
  do 100 i=1,4
    dphi(i)=phi(i+1)-phi(i)
    if (dphi(i).gt.pi) dphi(i)=dphi(i)-zpi
    if (dphi(i).lt.mpi) dphi(i)=dphi(i)+zpi
    v=v+dphi(i)
100 continue
C
  if (dabs(v).gt.6.2d0) then
    if (v.gt.6.2d0) then
      nvij(iz)=nvij(iz)+1
      ivij(nvij(iz))=ix
      jvij(nvij(iz))=iy
    else
      navij(iz)=navij(iz)+1
      iavij(navij(iz))=ix
      javij(navij(iz))=iy
    end if
  end if
C
200 continue
300 continue
400 continue
C

```

```

if ((ieq.eq.neq).and.(iboltz.eq.nboltz)) then
  vttotal=0
  avtotal=0
  do iz=1,lz
    vttotal=vttotal+nvij(iz)
    avtotal=avtotal+navij(iz)
  end do
  write(90,*)vttotal
  write(95,*)avtotal
  do iz=1,lz
    if (nvij(iz).ne.0) then
      do i=1,nvij(iz)
        write(90,*)ivij(i),jvij(i),iz
      end do
      if (navij(iz).ne.0) then
        do i=1,navij(iz)
          write(95,*)iavij(i),javij(i),iz
        end do
      end if
    end if
  end do
end if
C
do ix=1,lz
  nvij_med(ix)=nvij_med(ix)+nvij(ix)
  navij_med(ix)=navij_med(ix)+navij(ix)
  nvij_eq(nuz_aux)=nvij(ix)+nvij_eq(nuz_aux)
  navij_eq(nuz_aux)=navij(ix)+navij_eq(nuz_aux)
  nuz_aux=nuz_aux+1
end do
C
return
endsubroutine
*****
*
C
subroutine errorr
C
** CALCULA O ERRO NO NUMERO DE VORTICES E ANTIVORTICES
C
double precision nvij_err,nvik_err,nvjk_err,navij_err,navik_err,
cnvjk_err,dnboltz,dneq,dntotal,temper,aux,nvij_aux,nvik_aux,
cnvjk_aux,navij_aux,navik_aux,navjk_aux
integer i,j,l,ll,lz,dime,nvij_eq,nvik_eq,
cnvjk_eq,navij_eq,navik_eq,navjk_eq,nvij_med,nvik_med,nvjk_med,
cnvij_med,navik_med,navjk_med,neq,nboltz,ntotal,aux1,aux2
character*16 fill
parameter (l=50,lz=1,ll=(l*1),dime=1000000)
C
dimension nvij_err(lz),navij_err(lz),nvik_err(l),navik_err(l),
cnvjk_err(l),navjk_err(l)
dimension nvij_med(lz),navij_med(lz),nvik_med(l),navik_med(l),
cnvjk_med(l),navjk_med(l)
dimension nvij_eq(dime),navij_eq(dime),nvik_eq(dime),
cnvik_eq(dime),nvjk_eq(dime),navjk_eq(dime)
dimension nvij_aux(lz),nvik_aux(l),nvjk_aux(l),navij_aux(lz),
cnvik_aux(l),navjk_aux(l)

```



```

C
common/numb/nvij_eq,nvik_eq,nvjk_eq,navij_eq,navik_eq,navjk_eq
common/loops/neq,nboltz,ntotal
common/loops_dob/dneq,dnboltz,dntotal
common/vort_med/nvij_med,nvik_med,nvjk_med,navij_med,navik_med,
cnavjk_med
common/temp/temper

C
do i=1,lz
  nvij_err(i)=0.d0
  navij_err(i)=0.d0
  nvij_aux(i)=dble(nvij_med(i))*dntotal
  navij_aux(i)=dble(navij_med(i))*dntotal
end do

C
aux1=0
aux2=0

C
do j=1,neq
  do i=1,lz
    aux1=aux1+1
    nvij_err(i)=nvij_err(i)+dabs(nvij_aux(i)-dble(nvij_eq(aux1))*
c dnboltz)
    navij_err(i)=navij_err(i)+dabs(navij_aux(i)
c-dble(navij_eq(aux1))*dnboltz)
  end do
end do

C
read(20,*)fill
open(33,file=fill)

C
do i=1,lz
  nvij_err(i)=nvij_err(i)*dneq
  navij_err(i)=navij_err(i)*dneq
  write(33,*)i,nvij_aux(i),nvij_err(i),navij_aux(i),
cnavij_err(i)
end do

C
close(33,status='keep')

C
end subroutine
*****
***

C
subroutine escreve_conf

C
** ESCREVE A CONFIGURACAO FINAL

C
double precision xm,ym,zm,sx,sy,sz,temper
integer i,l,ll,lz,l3
parameter (l=50,lz=1,ll=(l*1),l3=(ll*lz))

C
dimension xm(l3),ym(l3),zm(l3),sx(l3),sy(l3),sz(l3)

C
common/posi/xm,ym,zm
common/spins/sx,sy,sz
common/temp/temper

```

```

C
  open(90,file='ultima.out',access='append')
  write(90,*)temper
  do i=1,l3
    write(90,*)xm(i),ym(i),zm(i),sx(i),sy(i),sz(i)
  end do
  close(90,status='keep')
C
  end subroutine
*****
**

C
C          *****          PROGRAMA ANALISE          *****
C          *****
C
C          **          PROGRAMA DE ANALISE DE DADOS          **
C          **
C          *****
C
C =====
C
  programa analise
  implicit none
  double precision beta,beta2,mz,mxy,energ,energ2,temper,mz_med,
  ce_med,cv_med,suscz_med,mxy_med,suscz,cv,dneq,dnboltz,dntotal,dlt,
  ce2_med,mz_eq,mxy_eq,e_eq,mz2_eq,e2_eq,aux_mg,e,cv_err,suscz_err,
  ce_err,mz_err,mxy_err,aux_xy,suscxy,suscxy_err,suscxy_med,mxy2_eq,
  cmz4_eq,mxy4_eq,cum_xy,cum_z,mz2,mxy2,mz4,mxy4,cumxy_med,cumxy_eq,
  ccumxy_err,aux1,aux2,aux3,mz_c,mxy_c,energ_c
  integer
i,j,k,l,ll,lz,l3,w,neq,nboltz,ntotal,IDUM,rand1,rand2,ini,
  cfin
  real XRAND
C
  parameter (l=80,ll=(l*1),lz=1,l3=(ll*lz))
C
  dimension mz(10000),mxy(10000),energ(10000),suscz(10000),
  ccv(10000),suscxy(10000),cum_xy(10000),mz_c(1000000),
  cmxy_c(1000000),energ_c(1000000)
C
  open(20,file='mag.out')
  open(30,file='energia.out')
  open (40,file='magz.out')
  open (50,file='magxy.out')
  open (60,file='en.out')
  open (70,file='suscz.out')
  open (80,file='calor.out')
  open (90,file='suscxy.out')
  open (95,file='cumulante.out')
C
  INICIALIZACOES
  ntotal=1000000
  IDUM=-1
C
  do i=1,10

```

```

C      LEITURA
      read(20,*)temper
      do j=1,ntotal
        read(20,*)energ_c(j)
        read(30,*)mxy_c(j),mz_c(j)
      end do
C      EMBARALHAR
      do j=1,50
        do k=1,ntotal
          rand1=XRAND(IDUM)*ntotal+1
          rand2=k
          aux1=energ_c(rand1)
          aux2=mxy_c(rand1)
          aux3=mz_c(rand1)
          energ_c(rand1)=energ_c(rand2)
          mxy_c(rand1)=mxy_c(rand2)
          mz_c(rand1)=mz_c(rand2)
          energ_c(rand2)=aux1
          mxy_c(rand2)=aux2
          mz_c(rand2)=aux3
        end do
      enddo
C      ALCULANDO AS MEDIAS COM OS FEIXES
      do neq=20,20
        nboltz=ntotal/neq
        dneq=1.d0/dble(neq)
        dnboltz=1.d0/dble(nboltz)
        dntotal=dneq*dnboltz
        dlt=1.d0/(db1e(13))
C
        beta=1.d0/temper
        beta2=beta*beta
        mz_med=0.d0
        mxy_med=0.d0
        e_med=0.d0
        suscz_med=0.d0
        suscxy_med=0.d0
        cv_med=0.d0
        mz_err=0.d0
        mxy_err=0.d0
        e_err=0.d0
        suscz_err=0.d0
        suscxy_err=0.d0
        cv_err=0.d0
        mxy2=0.d0
        mz2=0.d0
        mz4=0.d0
        mxy4=0.d0
        cumxy_med=0.d0
        cumxy_err=0.d0
        ini=1
        fin=nboltz
C
        do j=1,neq
          mz_eq=0.d0
          mz2_eq=0.d0
          mz4_eq=0.d0

```

```

mxy_eq=0.d0
mxy2_eq=0.d0
mxy4_eq=0.d0
e_eq=0.d0
e2_eq=0.d0
C
do k=ini,fin
C
e=energ_c(k)
aux_xy=mxy_c(k)
aux_mg=mz_c(k)
C
mz_eq=mz_eq+dabs(aux_mg)
aux_mg=aux_mg*aux_mg
mz2_eq=mz2_eq+aux_mg
mz4_eq=mz4_eq+aux_mg*aux_mg
mxy_eq=mxy_eq+dabs(aux_xy)
aux_xy=aux_xy*aux_xy
mxy2_eq=mxy2_eq+aux_xy
mxy4_eq=mxy4_eq+aux_xy*aux_xy
e_eq=e_eq+e
e2_eq=e2_eq+e*e
C
end do
ini=fin+1
fin=fin+nboltz
mz2=mz2+mz2_eq
mxy2=mxy2+mxy2_eq
mz4=mz4+mz4_eq
mxy4=mxy4+mxy4_eq
mz_med=mz_med+mz_eq
mxy_med=mxy_med+mxy_eq
e_med=e_med+e_eq
C
mz(j)=mz_eq
mxy(j)=mxy_eq
energ(j)=e_eq
C
suscx(j)=beta*(mz2_eq-mz_eq*mz_eq*dnboltz)*dnboltz
suscky(j)=beta*(mxy2_eq)*dnboltz
cv(j)=beta2*(e2_eq-e_eq*e_eq*dnboltz)*dnboltz
cum_xy(j)=mxy4_eq/(3.d0*mxy2_eq*mxy2_eq*dnboltz)
cum_xy(j)=1.d0-cum_xy(j)
suscx_med=suscx_med+suscx(j)
suscky_med=suscky_med+suscky(j)
cv_med=cv_med+cv(j)
cumxy_med=cumxy_med+cum_xy(j)
C
end do
cv_err=0.d0
suscx_err=0.d0
suscky_err=0.d0
mz_err=0.d0
mxy_err=0.d0
e_err=0.d0
cumxy_err=0.d0
C

```

```

mz_med=mz_med*dntotal
mxy_med=mxy_med*dntotal
mz2=mz2*dntotal
mxy2=mxy2*dntotal
mz4=mz4*dntotal
mxy4=mxy4*dntotal
e_med=e_med*dntotal*dlt
cv_med=cv_med*dneq
susc_med=susc_med*dneq
suscxy_med=suscxy_med*dneq
cumxy_med=cumxy_med*dneq
C
do w=1,neq
  cv_err=cv_err+(cv_med-cv(w))*(cv_med-cv(w))
  susc_err=susc_err+(susc_med-susc(w))*(susc_med-susc(w))
  suscxy_err=suscxy_err+(suscxy_med-suscxy(w))*
c(suscxy_med-suscxy(w))
  end do
  aux1=dsqrt(1.d0/dbl(neq*(neq-1)))
  cv_err=dsqrt(cv_err)*aux1
  susc_err=dsqrt(susc_err)*aux1
  suscxy_err=dsqrt(suscxy_err)*aux1
C
do w=1,neq
  mz_err=mz_err+(mz_med-mz(w)*dnboltz)**2.d0
  mxy_err=mxy_err+(mxy_med-mxy(w)*dnboltz)**2.d0
  e_err=e_err+(e_med-energ(w)*dlt*dnboltz)**2.d0
  cumxy_err=cumxy_err+(cumxy_med-cum_xy(w))**2.d0
  end do
  mz_err=dsqrt(mz_err)*aux1
  mxy_err=dsqrt(mxy_err)*aux1
  e_err=dsqrt(e_err)*aux1
  cumxy_err=dsqrt(cumxy_err)*aux1
C
write(40,*)neq,temper,mz_med,mz_err,mz_err/mz_med
write(50,*)neq,temper,mxy_med,mxy_err,mxy_err/mxy_med
write(60,*)neq,temper,e_med,e_err,dabs(e_err/e_med)
write(70,*)neq,temper,susc_med/dlt,susc_err/dlt
write(80,*)neq,temper,cv_med*dlt,cv_err*dlt,cv_err/cv_med
write(90,*)neq,temper,suscxy_med/dlt,suscxy_err/dlt
write(95,*)neq,temper,cumxy_med,cumxy_err
  enddo
enddo
C
close(20,status='keep')
close(30,status='keep')
close(40,status='keep')
close(50,status='keep')
close(60,status='keep')
close(70,status='keep')
close(80,status='keep')
close(90,status='keep')
close(95,status='keep')
end program
*****
***
C

```

```

C  ** FUNCAO GERADORA DE NUMEROS ALEATORIOS
C
FUNCTION XRAND(IDUM)
  INTEGER IDUM, IM1, IMM1, IA1, IA2, IQ1, IQ2, IR1, IR2, NTAB, NDIV
  REAL XRAND, AM, EPS, RNMX
  PARAMETER (IM1=2147413563, IM2=2147413399, AM=1./IM1, IMM1=IM1-1,
*   IA1=40014, IA2=40692, IQ1=53661, IQ2=52774, IR1=12211,
*   IR2=3791, NTAB=32, NDIV=1+IMM1/NTAB, EPS=1.2E-7, RNMX=1.-EPS)
  INTEGER IDUM2, J, K, IV(NTAB), IY
  SAVE IV, IY, IDUM2
  DATA IDUM2/123456719/, IV/NTAB*0/, IY/0/
  IF (IDUM .LE. 0) THEN
    IDUM=MAX(-IDUM, 1)
    IDUM2=IDUM
    DO J=NTAB+1, 1, -1
      K=IDUM/IQ1
      IDUM=IA1*(IDUM-K*IQ1)-K*IR1
      IF(IDUM .LT. 0) IDUM=IDUM+IM1
      IF(J .LE. NTAB) IV(J)=IDUM
    END DO
    IY=IV(1)
  END IF
  K=IDUM/IQ1
  IDUM=IA1*(IDUM-K*IQ1)-K*IR1
  IF(IDUM .LT. 0) IDUM=IDUM+IM1
  K=IDUM2/IQ2
  IDUM2=IA2*(IDUM2-K*IQ2)-K*IR2
  IF(IDUM2 .LT. 0) IDUM2=IDUM2+IM2
  J= 1 + IY/NDIV
  IY=IV(J)-IDUM2
  IV(J)=IDUM
  IF(IY .LT. 1) IY=IY+IMM1

C
C
      XRAND=MIN(AM*IY, RNMX)
  RETURN
  END
*****
*****

```

# Apêndice B

## Artigo

Artigo que apresenta os resultados deste trabalho (submetido à revista Physical Review B).

# Phase transition in ultrathin magnetic films with long range interactions

M. Rapini,<sup>\*</sup> R.A. Dias,<sup>†</sup> and B.V. Costa<sup>‡</sup>

Laboratório de Simulação - Departamento de Física - ICEX - UFMG 30123-970 Belo Horizonte - MG, Brazil

Ultrathin magnetic films can be modeled as an anisotropic Heisenberg model with long range dipolar interactions. It is believed that the phase diagram presents three phases: An ordered ferromagnetic phase (*I*), a phase characterized by a change from out-of-plane to in-plane in the magnetization (*II*), and a high temperature paramagnetic phase (*III*). It is claimed that the border lines from phase *I* to *III* and *II* to *III* are of second order and from *I* to *II* is first order. In the present work we have performed a very careful Monte Carlo simulation of the model. Our results strongly support that the line separating phase *II* and *III* is of the *BKT* type.

PACS numbers:

## I. INTRODUCTION

Since the late 80's there has been an increasing interest in ultrathin magnetic films [1–6]. This interest is mainly associated to the development of magnetic-non-magnetic multilayers for the purpose of giant magnetoresistance applications [7]. In addition, experiments on epitaxial magnetic layers have shown that a huge variety of complex structures can develop in the system [8–11]. Rich magnetic domain structures like stripes, chevrons, labyrinths and bubbles associated to the competition between dipolar long range interactions and strong anisotropies perpendicular to the plane of the film were observed experimentally. A lot of theoretical work has been done on the morphology and stability of these magnetic structures [12–14]. Beside that, it has been observed the existence of a switching transition from perpendicular to in-plane ordering at low but finite temperature [15–18]: at low temperature the film magnetization is perpendicular to the film surface, as temperature rises the magnetization flips to an in-plane configuration. Eventually the out-of-plane and the in plane magnetization become zero [19].

The general Hamiltonian describing a prototype for a ultrathin magnetic film assumed to lay in the  $xy$  plane is [17]

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - A \sum_i S_i^z{}^2 + \quad (1)$$

$$D \sum_{\langle ij \rangle} \left[ \frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ij}) \cdot (\vec{S}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right].$$

Here  $J$  is an exchange interaction which is assumed to be nonzero only for nearest-neighbor interaction,  $D$  is the dipolar coupling parameter,  $A$  is a single-ion anisotropy and  $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_j - \vec{r}_i$  where  $\vec{r}_i$  stands for lattice vectors. The

structures developed in the system depend on the sample geometry and size. Several situations are discussed in reference [14] and citations therein.

Although the structures developed in the system are well known the phase diagram of the model is still being studied. There are several possibilities since we can combine the parameters in many ways. We want to analyze the case  $J > 0$  in some interesting situations. A more detailed analysis covering the entire space of parameters is under consideration.

- Case  $D = 0$

For  $D = 0$  we recover the two dimensional ( $2d$ ) anisotropic Heisenberg model. The isotropic case,  $A = 0$ , is known to present no transition [21]. For  $A > 0$  the model is in the Ising universality class [20] undergoing a order-disorder phase transition whose critical temperature is approximately [33]

$$T_2 = \frac{2T_3}{\ln(\pi^2 J/A)} \quad (2)$$

where  $T_3$  is the transition temperature of the three-dimensional Heisenberg model  $T_3/J \approx 1.30$ .

If  $A < 0$  the model is in the *XY* universality class. In this case it is known to have a Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (*BKT*) phase transition [22–25]. This is an unusual magnetic phase transition characterized by the unbinding of pairs of topological excitations named vortex-anti-vortex [26–28]. A vortex (Anti-vortex) is a topological excitation in which spins on a closed path around the excitation core precess by  $2\pi$  ( $-2\pi$ ). Above  $T_{BKT}$  the correlation length behaves as  $\xi \approx \exp(bt^{-1/2})$ , with  $t \equiv (T - T_{BKT})/T_{BKT}$  and  $\xi \rightarrow \infty$  below  $T_{BKT}$ .

- Case  $D \neq 0$

In this case, there is a competition between the dipolar and the anisotropic terms. If  $D$  is small compared to  $A$  we can expect the system to have an Ising behavior. If  $D$  is not too small we can expect a transition of the spins from out-of-plane to in-plane configuration [17]. For large enough  $D$  out-of-plane configurations become unstable such that, the system lowers its energy by turning the spins into an

<sup>\*</sup>Electronic address: mrapini@fisica.ufmg.br

<sup>†</sup>Electronic address: radias@fisica.ufmg.br

<sup>‡</sup>Electronic address: bvc@fisica.ufmg.br



in-plane anti-ferromagnetic arrangement. For the planar XY model with pure dipolar interactions, the system orders at  $T_c = 1.39 \pm 0.05$ [34] where temperature is in units of  $JS^2/k_B$  and  $k_B$  is the Boltzmann constant.

Earlier works on this model which discuss the phase diagram were mostly done using renormalization group approach and numerical Monte Carlo simulation [17, 19, 26]. They agree between themselves in the main features. The phase diagram for fixed  $A$  and  $J = 1$  is schematically shown in figure 1 in the space  $(D, T)$ . From Monte

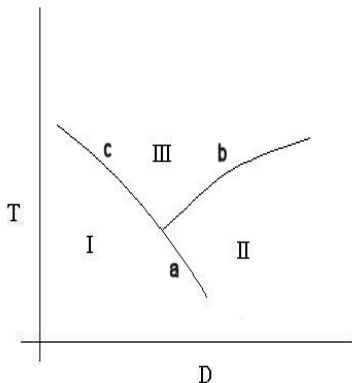


FIG. 1: A sketch of the phase diagram for the model, (eq. 1). Phase *I* corresponds to an out-of-plane magnetization, phase *II* has in-plane magnetization and phase *III* is paramagnetic. The border line between phase *I* and phase *II* is believed to be of first order and from regions *I* and *II* to *III* to be both of second order.

Carlo (MC) results it is found that there are three regions labelled in the figure 1 as *I*, *II* and *III*. Phase *I* correspond to an out-of-plane magnetization, phase *II* has in-plane magnetization and phase *III* is paramagnetic. The border line between phase *I* to phase *II* is believed to be of first order and from region *I* and *II* to *III* are both second order.

Although, the different results agree between themselves about the character of the different regions, much care has to be taken because they were obtained by using a cut-off,  $r_c$ , in the dipolar term. The long range character of the potential is lost. As a consequence, it will not be surprising if a different phase line emerges coming from region *II* to region *III*.

In this work we use MC simulations to investigate the model defined by equation 1. We use a cutoff,  $r_c$ , in the dipolar interaction. Our results strongly suggest that the transition between regions *II* and *III* is in the *BKT* universality class, instead of second order, as found in earlier works.

## II. SIMULATION BACKGROUND

Our simulations are done in a square lattice of volume  $L \times L$  ( $L = 10, 20, 30, 40, 50, 80$ ) with periodic boundary conditions. We use the Monte Carlo method with the Metropolis algorithm [27, 29–31]. To treat the dipole term we use a cut-off  $r_c = 5a$ , where  $a$  is the lattice spacing, as suggested in the work of Santamaria and co-workers [17].

We have performed the simulations for temperatures in the range  $0.3 \leq T \leq 1.2$  at intervals of  $\Delta T = 0.1$ . When necessary this temperature interval is reduced to  $\Delta T = 0.01$ . For every temperature the first  $5 \times 10^5$  MC steps per spin were used to lead the system to equilibrium. The next  $10^6$  configurations were used to calculate thermal averages of thermodynamical quantities of interest. We have divided these last  $10^6$  configurations in 20 bins from which the error bars are estimated from the standard deviation of the averages over these twenty runs. The single-site anisotropy constant was fixed as  $A = 1.0$  while the  $D$  parameter was set to 0.10, 0.15 and 0.20. In this work the energy is measured in units of  $JS^2$  and temperature in units of  $JS^2/k_B$ , where  $k_B$  is the Boltzmann constant.

To estimate the transition temperatures we use finite-size-scaling (FSS) analysis to the results of our MC simulations. In the following we summarize the main FSS properties. If the reduced temperature is  $t = (T - T_c)/T$ , the singular part of the free energy, is given by

$$F(L, T) = L^{-(2-\alpha)/\nu} \mathcal{F}(tL^{1/\nu}) \quad (3)$$

for  $T$  in the vicinity of the critical temperature and  $L$  not too small.

Appropriate differentiation of  $F$  yields the various thermodynamic properties. For an order disorder transition exactly at  $T_c$  the magnetization,  $M$ , susceptibility,  $\chi$  and specific heat,  $C$ , behave respectively as [31, 32]

$$\begin{aligned} M &\propto L^{-\beta/\nu} \\ \chi &\propto L^{-\gamma/\nu} \\ C &\propto L^{-\alpha/\nu}. \end{aligned} \quad (4)$$

In addition to these an important quantity is the fourth order Binder's cumulant

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

where  $m$  is the magnetization.

For large enough  $L$ , curves for  $U_4(T)$  cross the same point  $U^*$  at  $T = T_c$ . For a *BKT* transition the quantities defined above behave in a different way. There is no spontaneous magnetization for any finite temperature. The specific heat present a peak at a temperature which is slightly higher than  $T_{BKT}$ . Beside that, the peak height does not depends on  $L$ . Because models presenting a *BKT* transition have an entire critical region, the curves for  $U_4(L)$  just coincide inside that region presenting no crosses at all.

The vortex density is defined as the number of vortices per area. In the simulation, we analyze each plaquette of four sites and if the sum of the difference of the angles between adjacent spins equals  $\pm 2\pi$ , we have a vortex (anti-vortex).

Below we present MC results for three typical regions. When not indicated the error bars are smaller than the symbol sizes.

### III. SIMULATION RESULTS

#### A. Case $D=0.1$

For  $D = 0.1$  we measured the dependence of the out-of-plane magnetization,  $M_z$ , and the in-plane magnetization,  $M_{xy}$ , as a function of temperature for several values of  $L$  (See figure 2). The figures indicate that in

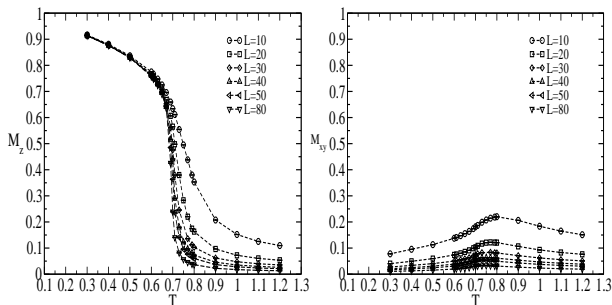


FIG. 2: Out-of-plane (left) and in-plane (right) magnetization for  $D = 0.1$ . The ground state is ferromagnetic. There is no in-plane spontaneous magnetization.

the ground state the system is aligned in the  $z$  direction. Approximately at  $T \approx 0.70$  the  $M_z$  magnetization goes to zero, which gives a rough estimate of the critical temperature. The in-plane magnetization has a small peak close to  $T \approx 0.70$ . However, the height of the peak diminishes as  $L$  grows, in a clear indicative that it is a finite size artifact.

The behavior of the specific heat, susceptibility and Binder's cumulant are shown in figures 3, 4 and 5 respectively. The results indicate an order-disorder phase transition in clear agreement with references [15–17, 19]. The vortex density in the  $xy$  plane (Figure 6) has a very shallow minimum near the estimated critical temperature and is almost independent of the lattice size. The growth of the number of vortices when the temperature is decreased is related to the disordering in the plane when the magnetic moments tend to be in the  $z$  direction.

We have performed a finite size scaling analysis of the data above by plotting the temperature  $T_c^L$  as a function of  $1/L$  for the specific heat, the susceptibility and the crosses of the fourth-order cumulant. The results are shown in the table I. By linear regression we have obtained the critical temperature as  $T_c^\infty = 0.682(2)$ . An

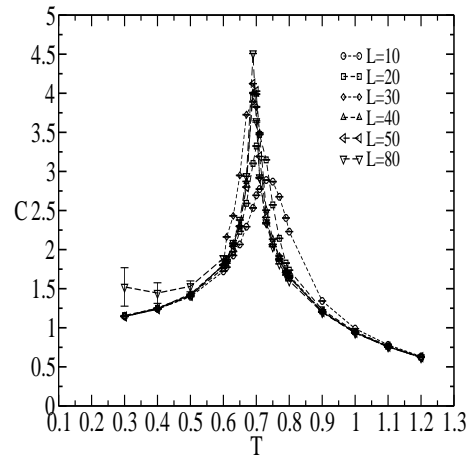


FIG. 3: Specific heat as function of temperature for  $D = 0.1$ .

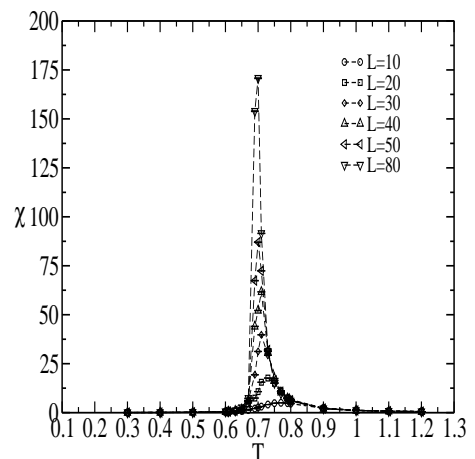


FIG. 4: Out-of-plane susceptibility as function of temperature for  $D = 0.1$

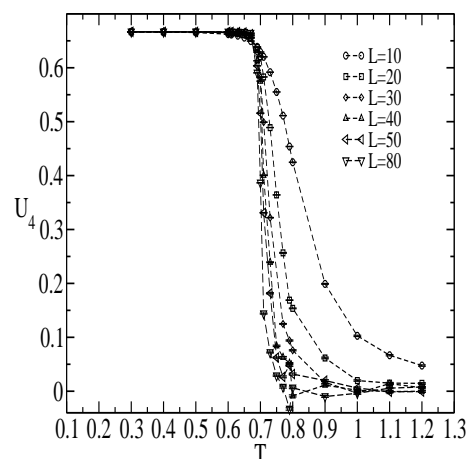


FIG. 5: Binder's cumulant as function of temperature for  $D = 0.1$ .

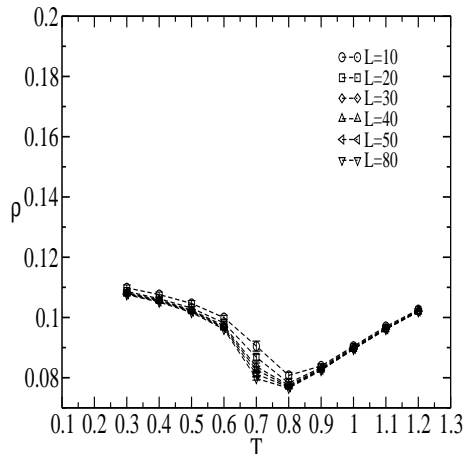


FIG. 6: Vortex density in the  $xy$  plane for  $D = 0.1$ .

analysis of the maxima of the specific heat,  $C_{max}$  (See figure 17), as a function of the lattice size shows that it behaves as  $C_{max} \propto \ln L$ , indicating a second order phase transition. In the phase diagram we crossed the second order line labelled  $c$ .

L	10	20	30	40	50	80
$C$	0.735	0.711	0.695	0.693	0.690	0.689
$\chi$	0.771	0.729	0.710	0.707	0.700	0.697
$U_4$	0.675	0.673	0.673	0.673	0.673	-

TABLE I: Critical temperature  $T_c^L$  of the specific heat,  $C$ , susceptibility,  $\chi$ , and the crosses of the fourth-order Binder's cumulate  $U_4$  as a function of the lattice size  $L$ . Data are for  $D = 0.10$

### B. Case $D=0.15$

In this region of the parameters, it was observed a transition from an out-of-plane ordering at low temperatures to an in-plane configuration as described by the magnetization behavior shown in Fig. 7. We show  $M_z$  and  $M_{xy}$  in the same figure for comparison. The out-of-plane magnetization goes to zero at  $T \approx 0.35$  while an in-plane magnetization sets in. This phenomenon has already been reported experimentally [15, 16] and it is due to the competition between the easy axis anisotropy and the dipolar interaction. The specific heat curve presents two peaks (See figure 8.). The peak at low temperature is pronounced and is centered in the temperature in which occurs the rapid decrease of the out-of-plane magnetization,  $T_1 \approx 0.35$ . The second peak appears at  $T_2 \approx 0.65$  and seems to be independent of the lattice size.

In the figure 9 we show the in-plane and out-of-plane susceptibilities. The out-of-plane susceptibility presents

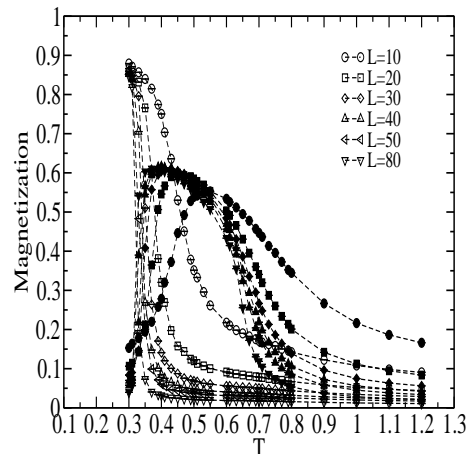


FIG. 7:  $M_z$  and  $M_{xy}$  (open and full symbols respectively) for  $D = 0.15$ .

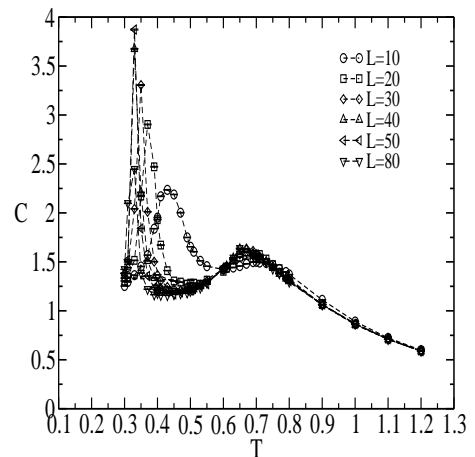


FIG. 8: Specific heat for  $D = 0.15$ .

a single peak close to  $T_1 \approx 0.35$ . The in-plane susceptibility has a maxima at  $T_2 \approx 0.65$  beside the peak at  $T_1$ , indicating two phase transitions. The Binder's cumulate for the in-plane and out-of-plane magnetization are shown in figures 10. Except for the case  $L = 10$  the curves for different values of the lattice size do not cross each other indicating a  $BKT$  transition at  $T \approx T_2$ . Beside that, the in-plane cumulate has a minimum at  $T \approx T_1$ , which is a characteristic of a first order phase transition [31, 32].

The vortex density is shown in figure 11. Its behavior is similar to that one shown in figure 6. The maxima of the specific heat are shown in figure 17 as a function of  $L$ . It is clear that after a transient behavior it remains constant indicating a  $BKT$  transition. A  $FSS$  analysis of the susceptibility (see table II) gives the  $BKT$  temperature  $T_{BKT}^\infty = 0.613(5)$ . In the phase diagram we crossed the first order line labelled  $a$  ( $T_1$ ) and the line labelled  $b$  ( $T_2$ ).

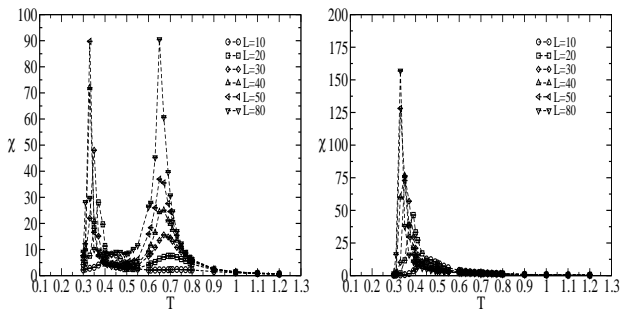


FIG. 9: In-plane (left) and out-of-plane (right) susceptibility for  $D = 0.15$ .

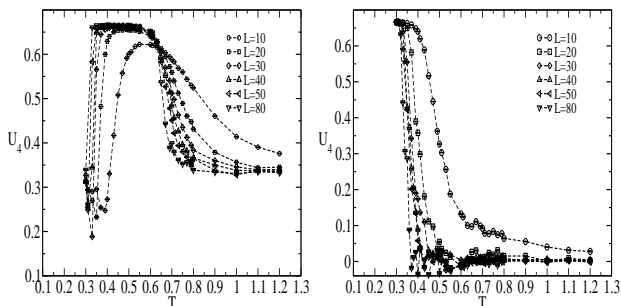


FIG. 10: In-plane (left) and out-of-plane (right) Binder's cumulant as function of temperature for  $D = 0.15$ . Observe that the in-plane cumulant has a minimum at  $T \approx 0.35$  indicating a first order phase transition. After the minimum the curves do not cross each other having the same behavior (Except the spurious case  $L = 10$ .) up to  $T \approx 0.65$  when they go apart. That is an indication of a *BKT* phase transition.

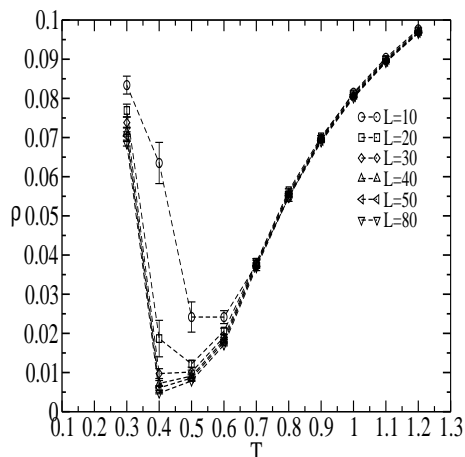


FIG. 11: Vortex density as function of temperature for  $D = 0.15$ .

$T_c^L$	0.729	0.698	0.678	0.670	0.650	0.638
L	10	20	30	40	50	80

TABLE II: Critical temperature  $T_c^L$  as a function of the linear size  $L$  for the susceptibility  $\chi_{xy}$  and  $D = 0.15$ .

$T_c^L$	0.829	0.781	0.768	0.753	0.750	0.729
L	10	20	30	40	50	80

TABLE III: Critical temperature  $T_c^L$  as a function of the linear size  $L$  for the susceptibility  $\chi_{xy}$  and  $D = 0.20$ .

### C. Case $D=0.20$

In figure 12 we show the in-plane and out-of-plane magnetization curves for several lattice sizes and  $D = 0.20$ . We observe that as the lattice size  $L$  goes from  $L = 10$  to  $L = 80$ , both magnetization decrease. It can be inferred that as the system approaches the thermodynamic limit, the net magnetization should be zero. Therefore, the system does not present finite magnetization for any temperature  $T \neq 0$ . The specific heat (Figure 13) presents

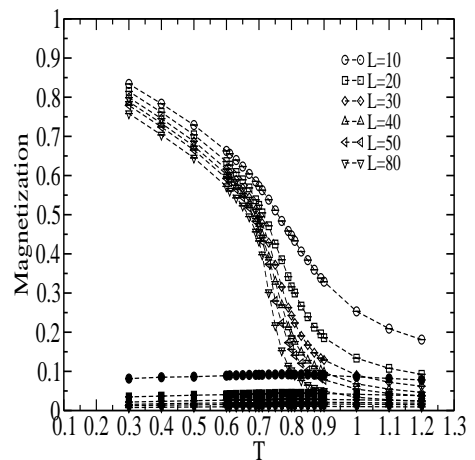


FIG. 12:  $M_{xy}$  and  $M_z$  (open and full symbols respectively) for  $D = 0.2$ .

a maximum at  $T \approx 0.75$ . The curves are for different values of  $L$ . We observe that the position of the maxima and their heights are not strongly affected by the lattice size, all points falling approximately in the same curve.

In the figure 14 we show the in-plane and out-of-plane susceptibilities respectively.  $\chi^{zz}$  does not present any critical behavior.  $\chi^{xy}$  presents a peak which increases with  $L$ . For the Binder's cumulant (see Fig.15) there is

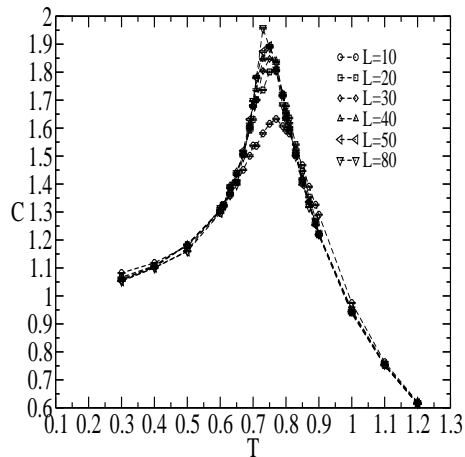


FIG. 13: Specific heat for  $D = 0.2$ . The line is a guide to the eyes.

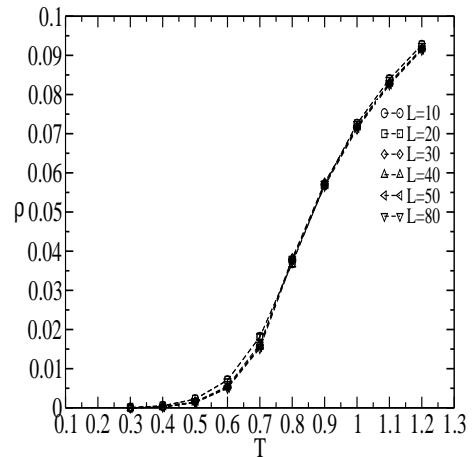


FIG. 16: Vortex density in the  $xy$  plane for  $D = 0.2$ .

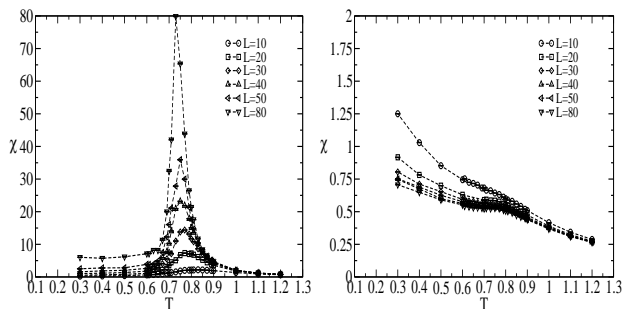


FIG. 14: In-plane (left) and out-of-plane (right) susceptibility for  $D = 0.2$ .

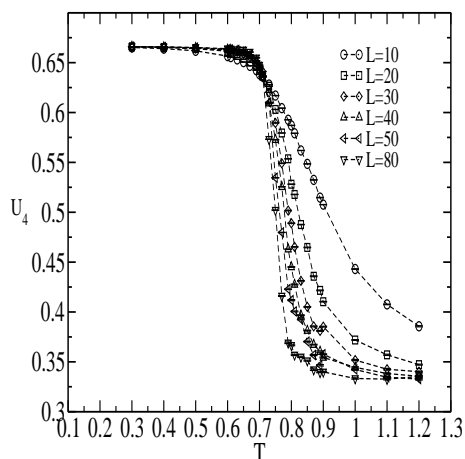


FIG. 15: Fourth-order in-plane cumulant for  $D = 0.2$ .

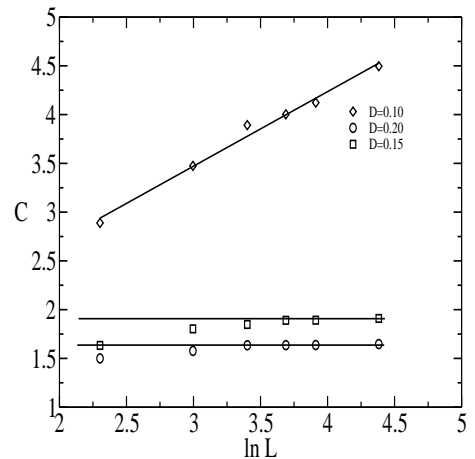


FIG. 17: Maxima of the specific heat as a function of the lattice size. The diamonds are for  $D = 0.10$ , the squares for  $D = 0.15$  and the circles for  $D = 0.20$ . While in the second order phase transition the maxima in the specific heat scale as  $\ln L$ , in the  $BKT$  phase transition the finite-size effects are very small.

no unique cross of the curves (Except for the  $L = 10$  curve, which is considered too small to be taken in to account). This behavior indicates a  $BKT$  transition at  $T_{BKT} \approx 0.75$ . The vortex density, shown in figure 16 is almost independent on the lattice size.

In addition, we did a  $FSS$  analysis of the susceptibility (see table III) and the maxima of the specific heat. The specific heat is shown in figure 17. Its behavior indicates a  $BKT$  transition. The analysis of the susceptibility gives  $T_{BKT}^{\infty} = 0.709(5)$ . In the phase diagram we crossed the line labelled  $b$ . In our results we could not detect any other transition for  $D = 0.20$ , indicating that: The line labelled  $a$  ends somewhere in between  $0.15 < D < 0.20$  or the crossing at  $a$  occurs at a lower

temperature ( $T < 0.30$ ) outside the range of our simulated data.

In a preliminary calculation using a lattice of size  $L = 40$ , we have estimated the value of the multicritical point in the intersection of the  $a$ ,  $b$  and  $c$  lines around  $D = 0.14$ . Our estimate agrees with the phase diagram obtained by Santamaria e co-workers[17] for  $A = 2.0$ . Their simulations were done on a BCC lattice with (001) surfaces while we used a simple cubic lattice. However, the first layer of these two structures are equivalent.

#### IV. CONCLUSIONS

In earlier studies several authors have claimed that the model for ultrathin magnetic films defined by the equation 1 presents three phases. Referring to figure 1 it is believed that the line labelled  $a$  is of first order. The line  $b$  and  $c$  are of second order. Those results were obtained by introducing a cut off in the long range interaction of the hamiltonian. In the present work we have used a numerical Monte Carlo approach to study the phase diagram of the model for  $J = A = 1$  and  $D = 0.10, 0.15$  and  $0.20$ . In order to compare our results to those discussed above we have introduced a cut off in the long range dipolar interaction. A finite size scaling analysis of the magnetization, specific heat, susceptibilities and Binder's cumulant clearly indicates that the line labelled  $a$  is of first order and the line  $c$  is of second order in agreement with other results. However, the  $b$  line is of  $BKT$  type. After analysing the results obtained, some questions come out:

1. Is it possible the existence of a limiting range of interaction in the dipolar term beyond which the character of the transition changes from  $BKT$  to second order ?
2. How does the line labelled  $a$  end in the phase dia-

gram ?

3. What is the character of the intersection point of the three lines in the phase diagram ?

As the cut-off  $r_0$  in the dipolar term is increased, the symmetry of the hamiltonian is not changed. Therefore, we expect that for larger values of  $r_0$ , there would be no qualitative changes in our results except when the range of the interaction goes to infinity.

However, to respond question 1 it is necessary a much more detailed study of the model for several values of the cut off range  $r_c$ . In a simulation program we have to be careful in taking larger  $r_c$  values since we have to augment the lattice size proportionally to prevent misinterpretations.

In a very preliminary calculation Rapini et al.[18] studied the model with true dipolar long range interactions by using open boundary conditions and performing the sum without a cut-off. Their results led them to suspect of a phase transition of the  $BKT$  type involving the unbinding of vortices-anti-vortices pairs in the model.

In order to estimate the point  $(D, T)$  in the phase diagram where the  $a$  line ends it would be necessary to study the system for  $T < 0.3$ . Unfortunately, we would not obtain reliable results by using any MC algorithm because for low temperatures the system becomes trapped in a few regions of the phase space for a long time. In the near future, we will address this problem using the histogram technique to respond questions 2 and 3.

#### V. ACKNOWLEDGMENTS

Work partially supported by CNPq (Brazilian agency). Numerical work was done in the LINUX parallel cluster at the Laboratório de Simulação Departamento de Física - UFMG.

- 
- |  |  |
|--|--|
| <p>[1] M.B. Salamon, S. Sinha, J.J. Rhyne, J.E. Cunningham, R.W. Erwin and C.P. Flynn, Phys. Rev. Lett. <b>56</b>, 259 (1986).</p> <p>[2] C.F. Majkrzak, J.M. Cable, J.Kwo, M. Hong, D.B. McWhan, Y. Yafet and C. Vettier, Phys. Rev. Lett. <b>56</b>, 2700 (1986).</p> <p>[3] J.R. Dutcher, B. Heirich, J.F. Cochran, D.A. Steigerwald and W.F. Egelhoff, J. Appl. Phys. <b>63</b>, 3464 (1988).</p> <p>[4] P. Grünberg, R. Schreiber, Y. Pang, M.B. Brodsky and H. Sowers, Phys. Rev. Lett. <b>57</b>, 2442 (1986).</p> <p>[5] F. Saurenbach, U. Walz, L. Hinchey, P. Grünberg and W. Zinn, J. Appl. Phys. <b>63</b>, 3473 (1988).</p> <p>[6] R. Allenspach, J. Magn. Magn. Mater. <b>129</b>, 160 (1994).</p> <p>[7] P.M. Lévy, Solid State Phys. <b>47</b>, 367(1994).</p> <p>[8] J.N. Chapman, J. Phys. D <b>17</b>, 623 (1984).</p> <p>[9] A.C. Daykin and J.P. Jakubovics, J. Appl. Phys. <b>80</b>, 3408 (1986).</p> | <p>[10] A.B. Johnston, J.N. Chapman, B. Khamsehpour and C.D.W. Wilkinson, J. Phys. D <b>29</b>, 1419 (1996).</p> <p>[11] M. Hehn, J.-P. Boucher, F. Rousseaux, D. Decamini, B. Bartenlian and C. Chappert, Science, <b>272</b> 1789 (1996).</p> <p>[12] S.T. Chui and V.N. Ryzhov, Phys. Rev. Lett. <b>78</b>, 2224 (1997).</p> <p>[13] E.Yu. Vedmedenko, A. Ghazali and J.-C.S. Lévy, Surf. Sci., <b>402-404</b>, 391 (1998).</p> <p>[14] E.Yu. Vedmedenko, A. Ghazali and J.-C.S. Lévy, Phys. Rev. B, <b>59</b>, 3329 (1999).</p> <p>[15] D.P. Pappas, K.P. Kamper and H. Hopster, Phys. Rev. Lett. <b>64</b>, 3179 (1990).</p> <p>[16] R Allenspach and A. Bischof, Phys. Rev. Lett. <b>69</b>, 3385 (1992).</p> <p>[17] C. Santamaria and H.T. Diep, J. Magn. Magn. Mater. <b>212</b>, 23 (2000).</p> <p>[18] M. Rapini, R.A. Dias, D.P. Landau and B. V. Costa,</p> |
|--|--|

- Brazilian Journal of Physics, (2006) (in press).
- [19] S.T. Chui, Phys. Rev. Lett. **74**, 3896 (1995).
  - [20] Lars Onsager, Phys. Rev. **65**,(1944)117.
  - [21] M.D. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).
  - [22] V.L. Berezinskii, Zh. Eksp. Teo. Fiz. **61**, 1144 (1971).
  - [23] J.M. Kosterlitz and D.J. Thouless, J. Phys. C **6**, 1181 (1973).
  - [24] S. Teitel and C. Jayaprakash, Phys. Rev. Lett. **51**, 1999 (1983).
  - [25] John B. Kogut, Rev. Mod. Phys. **51** (1979)659.
  - [26] J. Sak, Phys. Rev. B, **15**, 4344 (1977).
  - [27] J.E.R. Costa and B.V. Costa, Phys. Rev. B **54**,(1996)994.
  - [28] J.E.R. Costa, D. P. Landau and B.V.Costa, Phys. Rev. B **57**, (1998)11510.
  - [29] J. M. Thijssen, Computational Physics, Cambridge University Press (1999).
  - [30] S. E. Koonin, D. C. Meredith, Computational Physics, Addison- Wesley Publishing Company (1990).
  - [31] D.P. Landau and K. Binder, A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics (Cambridge University Press, Cambridge).
  - [32] V. Privman (ed.), Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems (World Scientific, Singapore), 1990.
  - [33] M. Bander, D. L. Mills, Phys. Rev. B **38**,12015 (1988).
  - [34] K. De'Bell, A. B. MacIsaac, I. N. Booth, J. P. Whitehead, Phys. Rev. B **55**, 15108 (1997).