

Rodrigo Alves Stancioli

Termodinâmica de um gelo de spin artificial regravável

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

Orientador: Lucas Alvares da Silva Mól

Belo Horizonte

2018

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

Stancioli, Rodrigo Alves.

S784t Termodinâmica de um gelo de spin artificial regravável/
Rodrigo Alves Stancioli.
– 2018.
73f.

Orientador: Lucas Alvares da Silva Mól.
Dissertação (mestrado) – Universidade Federal de Minas
Gerais– Departamento de Física.
Bibliografia: f. 69- 73

1. Transição de fase. 2. Método de Monte Carlo. 3.
Simulação. 4. Modelos de spins. I. Título. II. Mól, Lucas
Alvares da Silva.

CDU – 536.7 (043)

Elaborada pela Biblioteca Professor Manoel Lopes de Siqueira da UFMG.

Agradecimentos

Agradeço ao Professor Lucas Mól pela dedicação e competência que sempre demonstrou ao me orientar, e por ter sido muito compreensivo e paciente durante toda a minha trajetória na graduação e no mestrado. Aos demais professores do Departamento de Física da UFMG, que tanto me ensinaram e contribuíram para a minha formação acadêmica.

Aos meus pais e à minha namorada Giovanna, pelo apoio incondicional e pela compreensão em meus momentos de ausência.

Aos meus amigos da graduação e da pós, por terem tornado esse processo bastante mais divertido e compartilhado comigo tantos momentos de aprendizado, e em especial à Bonnie e à Stela, pela amizade, pelos conselhos e pela paciência. Aos companheiros de laboratório, pela agradável convivência e pela disposição em ajudar.

Ao CNPq e à FAPEMIG, pelo suporte financeiro.

Resumo

Gelos de spin artificiais (ASI) são redes bidimensionais de nanoilhas magnéticas geometricamente frustradas, originalmente concebidas para mimetizar o comportamento de materiais com a estrutura cristalina do pirocloro comumente conhecidos como gelos de spin. Diferentes tipos de ASI vêm sendo desenvolvidos recentemente, ensejando a observação de fenômenos interessantes como o aparecimento de excitações que se comportam como monopolos magnéticos, bem como sugerindo a possibilidade de novas aplicações. Uma nova geometria de ASI recentemente proposta na literatura foi denominada gelo de spin artificial “regravável”, por possibilitar total controle sobre os microestados do sistema à temperatura ambiente. Apesar de a realização experimental desse sistema ser essencialmente atérmica, técnicas recentes permitem a fabricação de nanoilhas suscetíveis a flutuações térmicas, o que torna importante investigar o comportamento termodinâmico dos ASI. Neste trabalho, realizamos simulações de Monte Carlo de um modelo do ASI regravável, em que as nanoilhas são tratadas como spins do tipo Ising com interações dipolares, no intuito de estudar suas transições de fase na ausência de campo magnético. Tanto condições de contorno abertas quanto periódicas foram consideradas. O estado fundamental encontrado é maximamente magnetizado, e uma fase ordenada é observada em baixas temperaturas. No limite termodinâmico, uma transição contínua entre essa fase ordenada e uma fase paramagnética é evidenciada pela divergência do calor específico na temperatura crítica. Em sistemas finitos, no entanto, ocorre uma pseudo-transição de fase de baixa temperatura, introduzindo uma fase intermediária entre as fases paramagnética e maximamente magnetizada que se caracteriza pela pequena quantidade de excitações locais e por baixos valores de magnetização total. A temperatura crítica foi determinada mediante o cálculo dos zeros da distribuição de probabilidade da energia. Em trabalhos futuros, pretendemos elucidar a natureza dessa pseudo-transição, bem como investigar o comportamento das excitações na rede.

Palavras-chave: gelo de spin artificial, transições de fase, simulação, método de Monte Carlo.

Abstract

Artificial spin ices (ASI) are geometrically frustrated, two-dimensional arrays of magnetic nanoislands, originally designed to mimic the behavior of pyrochlore spin ice materials. Different types of ASI have been developed lately, giving rise to interesting phenomena such as magnetic monopole-like excitations, as well as suggesting the possibility of new applications. A novel geometry of ASI recently proposed in the literature has been termed “rewritable” artificial spin ice, for it allows total control over the microstates of the system at room temperature. Although the reported experimental realization of this particular system is essentially athermal, recent techniques permit the fabrication of nanoislands susceptible to thermal fluctuations, which makes it important to investigate the thermal behavior of ASI. We have performed Monte Carlo simulations of a model of the rewritable ASI, with nanoislands being treated as Ising macrospins with dipolar interactions, in order to study its phase transitions in the absence of a magnetic field. Both periodic and open boundary conditions have been considered. The ground state has been determined to be maximally magnetized, and an ordered phase has been observed at low temperatures. In the thermodynamic limit, a continuous transition between this ordered phase and a paramagnetic one is evidenced by the divergence of the specific heat curve at the critical temperature. In finite systems, however, a low temperature pseudo-phase transition takes place, introducing an intermediary phase between the paramagnetic and fully magnetized phases which has few local excitations and shows low net magnetization values. The critical temperature has been determined by means of a new method based upon the energy probability distribution zeros. In future works, we intend to further investigate the nature of this pseudo-transition, as well as the behavior of excitations in the lattice.

Keywords: artificial spin ice, phase transitions, simulation, Monte Carlo methods.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	13
2	GELOS DE SPIN	15
2.1	Gelos de spin tridimensionais	15
2.2	Gelos de spin artificiais	16
2.3	Transições de fase em gelos de spin artificiais	20
2.4	Gelo de spin regravável	21
3	SIMULAÇÕES DE MONTE CARLO NO ESTUDO DE TRANSIÇÕES DE FASE	25
3.1	Método de Monte Carlo	25
3.2	Método de histogramas múltiplos	27
3.3	Escala de tamanho finito	30
3.4	Zeros da distribuição de probabilidade da energia	33
4	O MODELO	39
4.1	A rede	39
4.2	As interações	40
4.3	Os vértices	42
4.4	As simulações	43
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO	47
5.1	Condições de contorno periódicas	48
5.1.1	Análise de escala de tamanho finito	51
5.2	Condições de contorno abertas	56
5.2.1	Análise de escala de tamanho finito	64
6	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	67
	REFERÊNCIAS	69

1 Introdução

Alguns materiais encontrados na natureza possuem uma intrigante propriedade, denominada frustração geométrica, que consiste na impossibilidade de minimização simultânea da energia de todas as interações entre seus constituintes. O exemplo mais conhecido é o gelo da água, que foi também o primeiro a despertar interesse científico. A estrutura desse material consiste em uma rede cristalina na qual um átomo de oxigênio está equidistante a quatro outros átomos desse elemento, sendo que entre cada par de átomos de oxigênio existe um átomo de hidrogênio. Cada hidrogênio possui, portanto, dois átomos de oxigênio em sua vizinhança imediata, e tende a ser encontrado nas proximidades de um deles (ver Figura 1.1-A). Para cada átomo de oxigênio, a configuração de menor energia apresenta dois átomos de hidrogênio próximos e dois mais distantes, o que pode ser representado por meio de vetores (Figura 1.1-B), resultando na famosa regra “dois para dentro-dois para fora”, conhecida como regra do gelo [1]. Essa característica peculiar da água faz com que ela apresente uma entropia residual no limite de baixa temperatura, uma vez que a regra do gelo pode ser satisfeita por diferentes configurações, levando a uma degenerescência do estado de energia mínima. Em 1935, Linus Pauling [2] calculou o número de configurações que respeitam a regra do gelo para encontrar uma entropia residual de $S_0 = Nk_B \ln(3/2)$, em que N é o número de moléculas de água e k_B é a constante de Boltzmann, em boa concordância com as medidas experimentais.¹

Há cerca de duas décadas, o fenômeno da frustração foi observado também em materiais magnéticos cristalinos, produzindo efeitos semelhantes aos observados no gelo da água [5]. Por esse motivo, tais materiais foram chamados gelos de spin. O grande interesse gerado por essa descoberta levou ao desenvolvimento de redes de nanoilhas de *permalloy* com interações magnéticas frustradas [6] – que foram denominados gelos de spin artificiais (ASI, na sigla em inglês) – como forma de emular o comportamento dos gelos de spin naturais e possibilitar a observação direta dos microestados do sistema, abrindo novas perspectivas para seu estudo.

Para além de fornecer informações valiosas sobre o comportamento de sistemas

¹ É preciso observar que, atualmente, são conhecidas muitas fases diferentes do gelo da água, sendo três fases amorfas e cerca de 18 fases cristalinas. Dentre estas, algumas apresentam prótons ordenados, não possuindo, portanto, entropia residual. A regra do gelo aplica-se, assim, às fases do gelo nas quais os átomos de hidrogênio encontram-se desordenados. No gelo Ih, por exemplo, que é aquele encontrado abundantemente na Terra, não há ordenamento protônico, resultando em uma entropia residual. À medida que se aproxima do zero absoluto, porém, a estrutura do gelo Ih deixa de ser a mais estável, sendo esperada uma transição de fase para o gelo XI, que é ordenado. Essa transição, entretanto, ocorre de forma extremamente lenta, de modo que a redução da temperatura do sistema abaixo do ponto de transição leva ao congelamento de uma configuração com prótons desordenados [3]. A existência de uma fase completamente ordenada, de estado fundamental não degenerado, em temperaturas próximas ao zero absoluto é característica também dos gelos de spin, como será mencionado adiante.

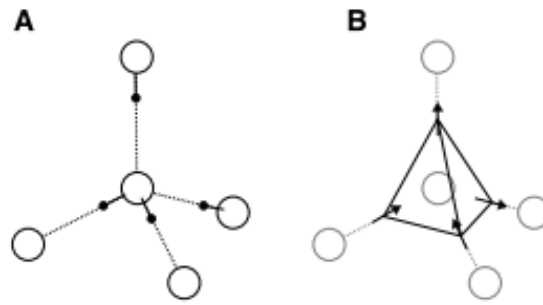


Figura 1.1: (A) Estrutura do gelo da água, com um átomo de oxigênio cercado por quatro outros átomos de oxigênio. Cada ligação entre um par de átomos desse elemento é intermediada por um átomo de hidrogênio, que está mais próximo de um dos átomos vizinhos que do outro. (B) Representação da regra do gelo por meio de vetores. Na configuração mais estável, dois vetores apontam para dentro (átomo de hidrogênio na posição mais próxima) e os outros dois apontam para fora (átomo de hidrogênio mais afastado). Retirado da referência [4].

geometricamente frustrados como os gelos de spin cristalinos, o estudo dos ASI é motivado por perspectivas bastante promissoras de aplicações práticas em áreas como magnetividade e processamento e armazenamento de informações. Como exemplo dos recentes desdobramentos nesse sentido, podemos citar a construção de portas lógicas a partir de gelos de spin coloidais [7], bem como o desenvolvimento de técnicas de manipulação nanoscópica das configurações locais dos ASI com a finalidade de codificar informação [8,9]. Além disso, o aparecimento de excitações nesses sistemas que se comportam como monopolos magnéticos [10] torna os ASI um importante campo de investigação de questões fundamentais da física.

O objeto do presente trabalho é o estudo computacional, por meio de simulações de Monte Carlo, de uma nova geometria de ASI recentemente proposta na literatura [8] e a investigação de suas propriedades termodinâmicas, com especial atenção às transições de fase.

No Capítulo 2, apresentaremos uma breve introdução sobre os gelos de spins artificiais, bem como indicaremos as motivações para o estudo do modelo proposto. No Capítulo 3, apresentaremos os principais aspectos teóricos do estudo de transições de fase por meio de simulações de Monte Carlo que serão utilizados neste trabalho. Em seguida, o Capítulo 4 descreverá o modelo concebido para as simulações e a forma como estas foram realizadas. Os resultados, com as respectivas discussões, serão expostos no Capítulo 5. Por fim, o Capítulo 6 sintetizará as principais conclusões do presente estudo, bem como apresentará os desafios e questionamentos a serem abordados em trabalhos futuros.

2 Gelos de spin

Antes de descrever o modelo utilizado neste trabalho e os resultados obtidos com as simulações, cabe-nos discorrer sobre o conceito e as principais características dos gelos de spin artificiais, bem como expor as motivações do presente estudo. Para isso, apresentamos, a seguir, os desenvolvimentos teóricos e experimentais, presentes na literatura, que foram responsáveis pela observação e elucidação dos fenômenos físicos fundamentais pertinentes a esses sistemas, bem como descreveremos as questões em aberto que serão objeto de nossa investigação.

Na Seção 2.1, faremos uma breve apresentação dos gelos de spin tridimensionais. Os gelos de spin artificiais serão introduzidos na Seção 2.2, com especial foco no ASI de rede quadrada, uma vez que o sistema ora investigado deriva desse tipo de rede. A Seção 2.3 enfatizará o papel das transições de fase no estudo dos ASI. Por fim, a Seção 2.4 descreverá a nova geometria de ASI proposta na literatura [8], que serve de base para a concepção do modelo utilizado em nossas simulações, e destacará as principais questões que motivam o presente estudo.

2.1 Gelos de spin tridimensionais

A frustração geométrica encontrada no gelo da água também pode ser observada em compostos cristalinos de terras raras que apresentam a estrutura do pirocloro, isto é, tetraedros com vértices compartilhados. Os exemplos mais estudados são o $Dy_2Ti_2O_7$ e o $Ho_2Ti_2O_7$. Essa classe de materiais, descoberta por Harris *et al.* em 1997 [5], recebe o nome de gelos de spin, e apresenta várias características semelhantes às do gelo da água, incluindo a entropia residual a temperaturas próximas de zero [11]. Nesse caso, porém, a origem da frustração não é a posição dos átomos nas ligações químicas, mas as interações entre momentos magnéticos, que não podem ser energeticamente minimizadas de forma simultânea. Isso ocorre porque o arranjo dos íons no cristal é tal que, em cada vértice, há um íon cujo momento magnético está alinhado ao eixo que passa pelo vértice e pelo centro do tetraedro. Esse momento magnético pode ser tratado como um spin do tipo Ising, de modo que cada spin pode apontar para dentro ou para fora do tetraedro (ver Figura 2.1-A). As interações entre os momentos magnéticos, que contêm um termo de troca fraco e um termo dipolar dominante [4, 12], não podem ser simultaneamente minimizadas para todos os componentes do sistema. O que se observa nesses materiais é uma minimização da energia de cada tetraedro quando dois spins apontam para dentro e os outros dois apontam para fora [5], ou seja, as configurações de menor energia são aquelas que obedecem à regra do gelo. Apesar do caráter dipolar das interações, os gelos de spin não apresentam ordem

de longo alcance mesmo a temperaturas bastante baixas em comparação com a energia das interações. Isso ocorre porque existem múltiplas formas de organizar os spins na rede respeitando a regra do gelo.

Os gelos de spin têm atraído grande atenção nos últimos anos devido a suas propriedades físicas pouco usuais. Em particular, destaca-se a observação de excitações que se comportam como monopolos magnéticos [13–17]. Tais excitações são um exemplo do fenômeno de fracionalização, que pode ser entendido, neste caso, por meio do modelo de halteres proposto por Castelnovo *et al.* [13]. Tal modelo consiste em tratar os momentos magnéticos como halteres em cujas extremidades acumulam-se cargas magnéticas de sinais opostos. Como mostrado na Figura 2.1-B, a inversão de um spin em uma rede previamente configurada em seu estado fundamental ocasiona a violação da regra do gelo em dois tetraedros adjacentes: um deles passa a ter três spins apontando para dentro e apenas um apontando para fora, enquanto no outro tetraedro ocorre o contrário. No modelo de halteres, isto equivale a dizer que a neutralidade de cargas dos tetraedros foi quebrada, ou seja, um deles agora acumula carga negativa enquanto o outro concentra carga positiva. Nesse sentido, dizemos que foi criado um par de monopolos, que se comportam como fonte e sumidouro de linhas de campo magnético e interagem segundo um potencial coulombiano magnético [13].

Um par de monopolos em um gelo de spin encontra-se desconfinado, uma vez que subsequentes inversões de spins nos tetraedros portadores de carga são capazes de deslocar os monopolos ao longo da rede sem novas violações da regra do gelo (Figura 2.1-C). Os tetraedros que violam a regra do gelo são conectados por *strings* de Dirac compostos de spins invertidos, que nesses sistemas podem ser observadas [16], o que assemelha esses monopolos àqueles propostos por Nambu [18]. A movimentação de excitações que se comportam como cargas magnéticas pela rede motiva a busca por formas de se explorar o fenômeno da magnetricidade, um análogo magnético da eletricidade.

2.2 Gelos de spin artificiais

No ano de 2006, Wang *et al.* [6] deram um passo importante no estudo dos gelos de spin ao fabricar redes quadradas de nanoilhas magnéticas como uma versão bidimensional do pirocloro de terras raras, que logo ficaram conhecidas como gelos de spin artificiais. As ilhas, feitas em *permalloy*, têm dimensões da ordem de dezenas ou centenas de nanômetros, o que as faz pequenas o suficiente para que apenas um domínio magnético esteja presente. Além disso, sua forma alongada estabelece uma direção preferencial de magnetização (eixo fácil) ao longo do eixo maior, o que é chamado anisotropia de forma [20]. Assim, as nanoilhas comportam-se como macrospins do tipo Ising, e interagem entre si por meio da interação dipolar.

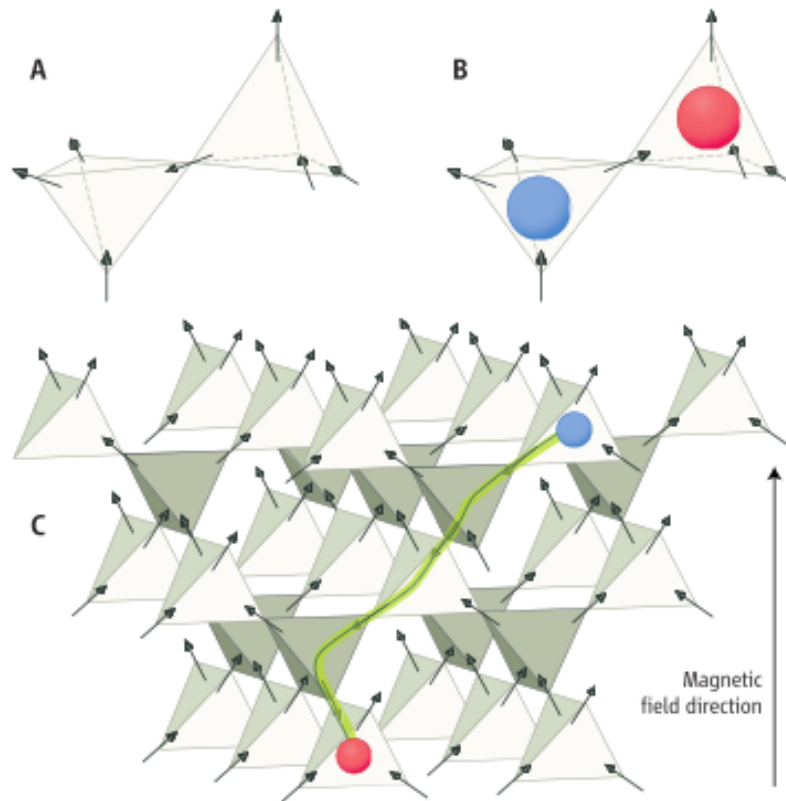


Figura 2.1: (A) Estrutura cristalina do pirocloro, com spins ocupando os vértices dos tetraedros. (B) A inversão do spin central dá origem a um par de monopolos. (C) Subseqüentes inversões de spins separam os monopolos, que deixam em seu caminho uma cadeia de spins invertidos. Retirado da referência [19].

Os ASI de rede quadrada possuem a geometria ilustrada na Figura 2.2. Cada vértice pode assumir 16 configurações diferentes, que Wang *et al.* classificaram em quatro grupos segundo a energia das interações. Os vértices dos tipos III e IV apresentam acúmulo de cargas magnéticas. Se considerarmos cada extremidade de um dipolo como equivalente a um monopolo unitário, podemos definir a carga magnética desses vértices, em unidades arbitrárias, como $Q = \pm 2$ para vértices do tipo III e $Q = \pm 4$ para vértices do tipo IV, em que, convencionalmente, o sinal positivo (negativo) representa um excesso de spins apontando para dentro (fora) do vértice. Já os vértices dos tipos I e II obedecem à regra do gelo, logo apresentam neutralidade de carga e são menos energéticos. Entretanto, ao contrário do que ocorre no pirocloro, nem todos os vértices com dois spins para dentro e dois para fora são degenerados. Isto ocorre porque a equidistância observada no pirocloro entre os quatro spins de um mesmo vértice não pode ser reproduzida em duas dimensões, de modo que, na rede quadrada, os spins de um mesmo vértice não são equidistantes: spins opostos pelo vértice estão mais longe entre si que spins orientados em direções perpendiculares, fazendo com que a interação entre estes seja mais forte que entre aqueles. Assim, mesmo entre os vértices que obedecem à regra do gelo, há uma diferença de energia significativa, o que justifica sua separação em dois tipos: nos vértices do tipo I, os spins que satisfazem

suas interações estão mais próximos e os spins que experimentam frustração estão mais distantes, enquanto nos vértices do tipo II ocorre o contrário, de forma que aqueles são menos energéticos do que estes. Como consequência, a degenerescência observada nos gelos de spins tridimensionais é levantada e um estado fundamental bem definido se configura. Nesse estado fundamental, os dois vértices do tipo I aparecem de forma alternada e cobrem toda a rede.

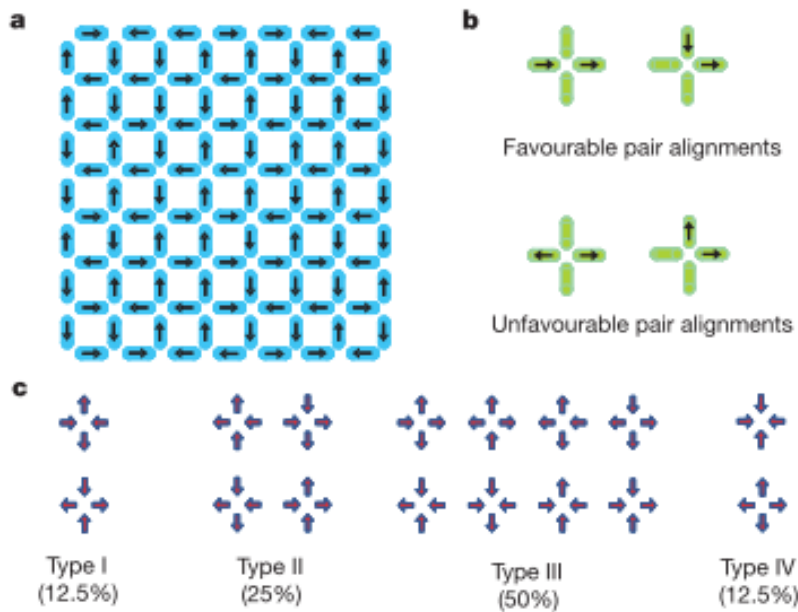


Figura 2.2: (A) Geometria do ASI de rede quadrada. As setas correspondem ao momento magnético das nanoilhas. (B) Interações entre spins dois a dois. O caráter dipolar da interação determina quais as posições relativas entre spins que são energeticamente favorecidas ou desfavorecidas. (C) Classificação dos vértices em ordem crescente de energia de interação. As porcentagens indicam a fração esperada de cada tipo de vértice para uma rede com momentos magnéticos orientados de maneira totalmente aleatória. Retirado da referência [6].

No mesmo ano de 2006, Tanaka *et al.* [21] construíram uma rede de nanofios magnéticos com geometria do tipo *honeycomb*, em que os spins alinham-se sobre as arestas de um hexágono. Nesse caso, a degenerescência do estado fundamental é recuperada, pois os spins de um mesmo vértice estão equidistantes. Entretanto, como cada vértice contém três spins, a neutralidade de carga magnética é impossibilitada, e diz-se que os vértices com carga magnética $Q = \pm 1$ respeitam a pseudo-regra do gelo (dois para dentro e um para fora, ou vice-versa), o que minimiza sua energia.

Inicialmente, a grande vantagem trazida pelo advento dos ASI foi a possibilidade de visualização dos microestados do sistema no espaço real por meio de técnicas como microscopia de força magnética (MFM), o que não ocorre com o pirocloro, ensejando um estudo mais aprofundado do comportamento e da dinâmica dos gelos de spin. Entretanto, logo se percebeu que essa classe de materiais apresentava perspectivas inteiramente novas, sobretudo em virtude da ampla gama de geometrias que podem ser fabricadas [22, 23], inclusive de forma deliberada e com propósitos específicos [24], bem como da observação de

novos fenômenos não presentes nos gelos de spin naturais, como, por exemplo, a frustração de vértices [25].

Assim como nos gelos de spin tridimensionais, os ASI também apresentam excitações que se comportam como monopolos magnéticos, as quais foram de fato observadas experimentalmente por Ladak *et al.* em 2010 [26] em uma rede do tipo *honeycomb*. Como já foi mencionado, nessa geometria todos os vértices possuem carga magnética excedente, uma vez que o número ímpar de spins em cada vértice é incompatível com a neutralidade. Ainda que todos os vértices com carga $|Q| = 1$ apresentem idêntica energia de interação quando considerados isoladamente, a interação dipolar de longo alcance em uma rede com muitos vértices levanta essa degenerescência, favorecendo um arranjo em que cargas positivas e negativas apareçam de forma intercalada, de forma análoga ao que ocorre com cátions e ânions em um cristal iônico [27]. Ladak *et al.* [26] observaram, por meio de MFM, que excitações na forma de vértices em que todos os spins apontam para dentro ou todos apontam para fora movimentam-se pela rede em direções contrárias quando um campo magnético é aplicado, comportando-se como monopolos de cargas opostas.

Já no ASI de rede quadrada, o estado fundamental contém apenas vértices do tipo I, neutros em carga magnética. Excitações acima do estado fundamental na forma de vértices do tipo III comportam-se como monopolos magnéticos, por violarem a regra do gelo ao concentrar três spins para dentro ou três spins para fora, de forma semelhante ao que acontece no gelo de spin 3D. Aqui, porém, a separação entre os monopolos por meio da inversão de uma cadeia de spins que liga os dois vértices de cargas opostas deixa um rastro de vértices do tipo II, que, apesar de respeitarem a regra do gelo, são mais energéticos que os vértices do tipo I presentes no fundo. Assim, além do termo coulombiano, a interação entre os monopolos apresenta também um termo dependente do comprimento do *string*. A forma do potencial resultante foi estabelecida por Mól *et al.* [10] como sendo $V(R) = \frac{a}{R} + bX(R) + c$, em que R é a distância entre os monopolos, $X(R)$ é o comprimento do *string*, b é um parâmetro que depende da geometria da rede, e c é uma constante relacionada ao custo energético de criação dos monopolos. Assim, ao contrário do que ocorre com os gelos de spin naturais, os monopolos da rede quadrada não são desconfinados, porquanto conectados por um *string* energético.

Como forma de recuperar a degenerescência do estado fundamental no ASI de rede quadrada, Möller e Moessner [28] propuseram um sistema no qual as ilhas horizontais encontram-se verticalmente deslocadas em relação ao plano das ilhas verticais por uma diferença de altura h . Essa geometria possibilita que, para um determinado valor de h , todos os spins de um determinado vértice estejam a uma mesma distância uns dos outros, de modo que os vértices dos tipos I e II passam a ter energias bastante próximas. Para uma rede de dipolos pontuais, essa diferença de altura foi estimada em $h \approx 0.419a$, em que a é o parâmetro de rede, correspondente à distância entre dois vértices vizinhos. Esse

valor foi obtido considerando-se apenas a interação de primeiros e segundos vizinhos. Por meio desse deslocamento vertical, um verdadeiro estado de gelo, no qual ambos os tipos de vértice que obedecem à regra do gelo aparecem com a mesma probabilidade, foi observado em um intervalo grande de temperaturas. Somente para temperaturas muito inferiores à energia de interação entre os spins é que o sistema passa dessa fase de gelo para uma fase completamente ordenada.

O mesmo sistema foi estudado por Mol *et al.* [29] levando em conta todas as interações dipolares (sem limitar a interação a primeiros e segundos vizinhos). Nesse caso, o valor obtido para a diferença de altura que iguala as interações entre primeiros e segundos vizinhos foi $h \approx 0.444a$. Além da estabilização de uma fase de gelo, essa diferença de altura tem por consequência a redução significativa da tensão dos *strings* entre pares de monopolos.

2.3 Transições de fase em gelos de spin artificiais

Um outro aspecto dos ASI que vem despertando interesse diz respeito ao comportamento termodinâmico desses materiais. As características das nanoilhas tradicionalmente utilizadas na composição das redes, bem como o espaçamento entre estas, determinam uma barreira energética à inversão de orientação do momento magnético de cada ilha da ordem de $10^4 - 10^5 K$ [27, 30]. Assim, à temperatura ambiente o sistema não sofre flutuações térmicas, o que é uma vantagem quando se tem por objetivo obter imagens estáticas de sua configuração. Entretanto, o caráter atérmico dos ASI é um obstáculo à obtenção do estado fundamental, uma vez que o processo de termalização exige o aquecimento da amostra a temperaturas superiores àquelas suportadas pelo material.

As primeiras tentativas de se atingir o estado fundamental dos ASI partiram do protocolo de desmagnetização *ac* proposto por Wang *et al.* em 2007 [31], que consiste na aplicação de um campo magnético de intensidade decrescente ao mesmo tempo em que se gira rapidamente a amostra. Apesar de alcançar a desmagnetização desta, o método não é capaz de levá-la ao estado de menor energia [32]. O estudo desse protocolo motivou o desenvolvimento de uma termodinâmica efetiva para o ASI, inclusive com a definição de uma temperatura efetiva relacionada ao campo magnético aplicado [33, 34].

Uma abordagem diferente para a obtenção do estado fundamental foi proposta por Morgan *et al.* em 2011 [30], que consiste em submeter a amostra a um *annealing* térmico quando esta ainda se encontra em processo de crescimento. Com isso, o menor volume das nanoilhas inacabadas diminui a barreira energética à inversão dos macrospins e facilita a termalização.

Mais recentemente, foram desenvolvidos novos materiais para a fabricação das nanoilhas com temperatura de Curie (T_c) significativamente menor que a dos materiais

tradicionalmente utilizados [35–37], possibilitando o aquecimento da amostra a temperaturas próximas ou mesmo superiores a T_c sem provocar danos permanentes. Em tais materiais, a ordenação dos spins internos de cada ilha ocorre a uma temperatura T_c maior que a temperatura de desacoplamento dos macrospins tipo Ising (T_m), de modo que existe um intervalo de temperaturas $T_m < T < T_c$ no qual as ilhas permanecem magnetizadas mas a configuração geral da rede é desordenada [35]. Essas novas redes têm possibilitado a observação de uma termodinâmica verdadeira nos ASI, o que abre interessantes perspectivas para o estudo de fenômenos como termalização, transições de fase e movimentação de cargas magnéticas nesses materiais, além de permitir o acesso ao estado fundamental mediante *annealing* térmico [36, 37].

Simulações de Monte Carlo do ASI de rede quadrada evidenciaram um pico pronunciado na curva do calor específico do sistema a uma temperatura $T_p \approx 7.2D/k_B$, em que D é uma constante relacionada com a força das interações dipolares. Além disso, a distância média entre as excitações em forma de monopolos atinge seu valor máximo à mesma temperatura T_p . Tanto o valor máximo do calor específico quanto o valor máximo da separação entre monopolos divergem de forma logarítmica com o tamanho da rede. Assim, espera-se que, no limite termodinâmico, monopolos infinitamente separados de seus opostos possam ser observados [38].

Transições de fase também foram observadas em redes de ASI com frustração de vértices. Neste tipo de frustração, a disposição dos tipos de vértices na rede faz com que nem todos os vértices possam ter suas energias simultaneamente minimizadas. Assim, há múltiplos microestados que satisfazem a mesma proporção de tipos de vértices encontrada no estado fundamental, dando origem a uma fase de gelo análoga à do gelo de spin tridimensional. Em uma rede do tipo *shakti*, mostrada na Figura 2.3-A, observam-se dois picos no calor específico (ver Figura 2.3-B): o primeiro deles, a baixa temperatura, marca a transição entre a fase de gelo – em que dominam os tipos de vértices que minimizam a energia, dispostos de maneira desordenada na rede – e uma fase com ordenação de cargas, na qual os vértices, além de obedecerem às proporções que minimizam a energia, estão intercalados em uma estrutura rígida que constitui o estado fundamental do sistema, como consequência das interações de longo alcance [39, 40]. O segundo pico do calor específico, observado a uma temperatura mais alta, evidencia a passagem da fase de gelo à fase paramagnética, em que se observa a presença de vértices mais energéticos.

2.4 Gelo de spin regravável

No âmbito deste trabalho, interessa-nos particularmente a geometria de ASI proposta por Wang *et al.* [8], que possibilitou o desenvolvimento de uma técnica que permite escrever, ler e apagar informações codificadas em uma rede de nanoilhas magnéticas. Tal

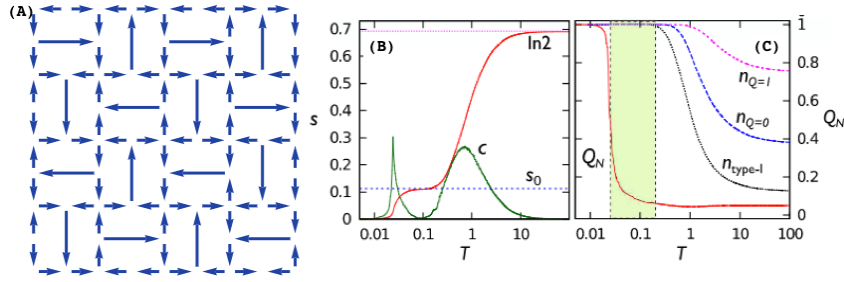


Figura 2.3: (A) Geometria do ASI de rede *shakti*. As setas correspondem ao momento magnético das nanoilhas. O calor específico mostrado em (B) apresenta dois picos. O pico à temperatura mais baixa coincide com o rápido aumento do parâmetro de ordem, evidenciado em (C), indicando a transição da fase de gelo à fase completamente ordenada. Já o outro pico ocorre na temperatura em que o sistema passa da fase paramagnética à fase de gelo, na qual a carga dos vértices, também mostrada em (C), regressa à distribuição observada no estado fundamental. Retirado das referências [39] e [40].

geometria visa a reproduzir o padrão de cargas magnéticas observado no modelo de halteres de um ASI de rede quadrada, porém com uma nova proposta de orientação das nanoilhas. A ideia consiste em remover a conexão entre duas cargas magnéticas de sinais opostos presentes nas extremidades de um halter e reconfigurar essa conexão da forma desejada, mudando os padrões geométricos da rede sem, no entanto, alterar a posição das cargas (ver Figura 2.4).

Com isso, as nanoilhas encontram-se dispostas em células contendo, cada uma delas, uma nanoilha inteira de orientação diagonal, metade de uma nanoilha vertical e metade de uma nanoilha horizontal, totalizando quatro cargas magnéticas unitárias, como ocorre nos vértices da rede quadrada. A presença de nanoilhas de orientações distintas em cada célula permite controlar a configuração da rede por meio de protocolos de aplicação de campo magnético de direção e intensidade controladas, tornando possível a obtenção do estado fundamental do ASI à temperatura ambiente, o que até então nunca havia sido conseguido. O caráter atérmico do sistema permite a observação direta de excitações acima do estado fundamental.

Além disso, no mesmo trabalho foi desenvolvido um método para alterar a configuração de células específicas, por meio da aproximação de uma ponta de dispositivo MFM, o que concedeu aos pesquisadores total controle sobre o microestado do sistema. Para isso, um campo magnético uniforme é aplicado, com intensidade ligeiramente aquém do campo coercivo das ilhas. Em seguida, a aproximação da ponta MFM em um ponto específico da rede gera um pequeno campo magnético que é suficiente para elevar a intensidade do campo magnético acima do valor de inversão, mudando a configuração local das ilhas. Já a aproximação da ponta MFM sem aplicação de campo magnético uniforme externo coloca o dispositivo em modo de leitura, conferindo ao sistema a propriedade de armazenar informações que podem ser lidas posteriormente. Na Figura 2.5, vemos um exemplo de configuração obtida por essa técnica.

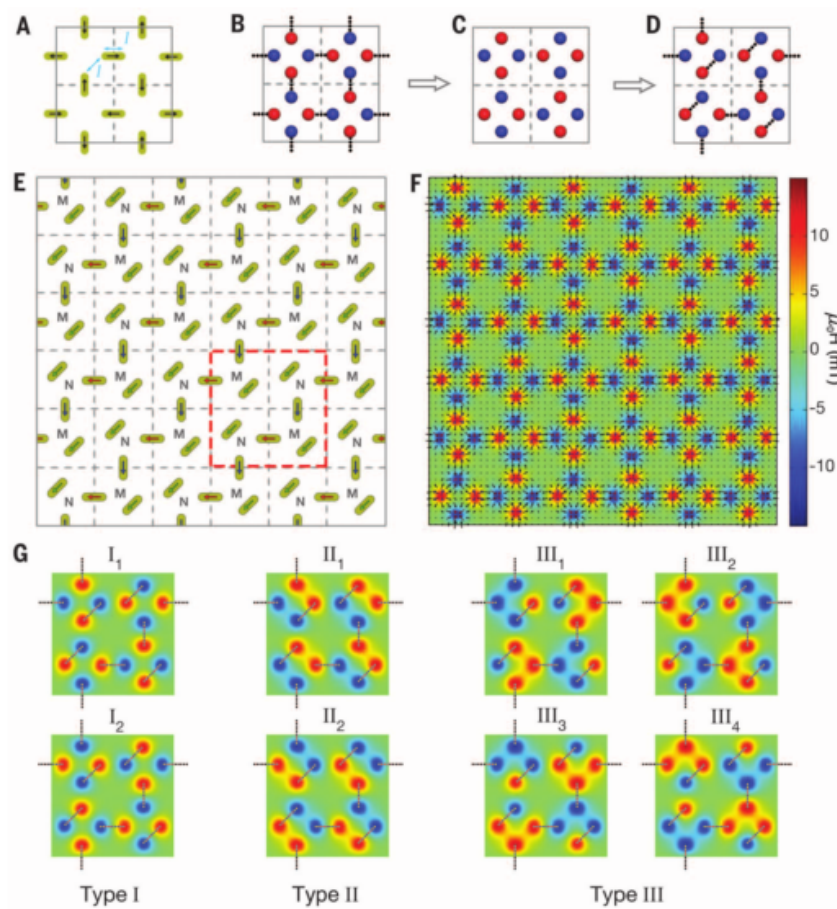


Figura 2.4: Os momentos magnéticos das nanoilhas da rede quadrada (A) podem ser decompostos em cargas magnéticas de sinais opostos de acordo com o modelo de halteres (B). Removendo a conexão entre essas cargas (C) e reconfigurando-as da maneira desejada (D), constroi-se a rede ilustrada em (E). Dois tipos de células estão presentes, sendo que as células do tipo N são idênticas às do tipo M, porém giradas de 180°. Na nova geometria, há nanoilhas orientadas na vertical, na horizontal e na diagonal, ao contrário da rede quadrada, em que apenas as duas primeiras orientações são admitidas. A posição das cargas magnéticas, no entanto, permanece como na rede quadrada (F). Tanto as células do tipo M quanto as células do tipo N podem assumir oito configurações distintas, que são classificadas em três tipos, em ordem crescente de energia das interações (G). Retirado da referência [8].

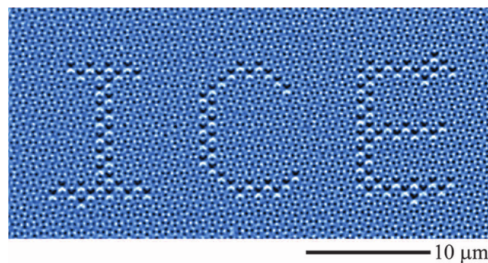


Figura 2.5: Por meio da aplicação de campos magnéticos, os microestados de um gelo de spin regravável podem ser alterados com grande precisão. O padrão observado nessa amostra, formando a palavra “ICE”, é obtido por meio do dispositivo MFM em modo de gravação. Em seguida, o mesmo dispositivo, agora em modo leitura, é utilizado para obter uma imagem em que o contraste de cores representa polos opostos das nanoilhas da rede. Retirado da referência [8].

O estudo desse sistema, visando a uma compreensão mais completa dos mecanismos que levam a seu interessante comportamento, é importante para a perspectiva futura

de aplicação prática de dispositivos desse gênero. Além disso, os recentes avanços na construção de nanoilhas suscetíveis a flutuações térmicas enseja o estudo do comportamento termodinâmico dos diferentes tipos de ASI.

Uma outra motivação importante para o estudo desse sistema decorre da constatação de que a geometria da rede impõe uma única direção para o deslocamento dos vértices excitados. Isso ocorre porque, das quatro cargas unitárias que compõem um vértice, duas pertencem à mesma nanoilha, de modo que a inversão do spin desta não muda o valor total da carga acumulada no vértice. Assim, apenas dois dos três spins de cada vértice contribuem para formar excitações de monopolo, de modo que a sucessiva inversão dos spins a partir de um vértice com acúmulo de carga implica necessariamente em um deslocamento da excitação para um lado ou para o outro, sempre ao longo de um caminho unidimensional. Além da perspectiva de aplicação dessa propriedade para o deslocamento controlado de monopolos pela rede, que não pode ocorrer em ASI convencionais, essa constatação permite-nos indagar sobre uma possível redução de dimensionalidade no comportamento termodinâmico do sistema, de forma análoga ao que foi encontrado recentemente por Gilbert *et al.* em uma outra geometria de ASI [41].

3 Simulações de Monte Carlo no estudo de transições de fase

O estudo de transições de fase é um dos temas mais relevantes em mecânica estatística, não somente por seu interesse teórico intrínseco, mas também por ser capaz de revelar características importantes dos sistemas nos quais esse fenômeno ocorre. No presente trabalho, interessa-nos, sobretudo, o comportamento termodinâmico do gelo de spin artificial que nos propusemos a investigar. As informações que buscamos – como a dependência das grandezas termodinâmicas com a temperatura, o aparecimento de excitações acima do estado fundamental e as configurações típicas da rede em situação de equilíbrio térmico – requerem a utilização de métodos próprios da mecânica estatística.

A seguir, apresentaremos, em linhas gerais, os aspectos teóricos mais importantes que sustentam o estudo simulacional que empreendemos. Em especial, trataremos do método de Monte Carlo e das técnicas que possibilitam a análise dos resultados das simulações para a compreensão dos fenômenos críticos.

3.1 Método de Monte Carlo

O método de Monte Carlo é um dos métodos numéricos mais utilizados no estudo de sistemas físicos das mais diversas áreas, que englobam desde a física de partículas até a física de materiais, passando por biofísica, astrofísica, dentre tantas outras. O sucesso do método é particularmente evidenciado pelo papel fundamental que exerce na física estatística, tanto no equilíbrio quanto fora dele.

Assim como são distintas suas aplicações, também são bastantes variados os algoritmos que aplicam o método de Monte Carlo. Todos eles têm em comum o fato de se utilizarem da geração de números pseudo-aleatórios para obter uma amostragem segundo probabilidades previamente estabelecidas. Em nosso caso, interessa-nos sobretudo o algoritmo de Metropolis [42], que utilizamos em nossas simulações.

O algoritmo de Metropolis pertence a uma classe de processos estocásticos denominada *cadeia de Markov*. Em todo processo desse tipo, a passagem de um estado μ a um estado ν ocorre segundo uma probabilidade fixa $P(\mu \rightarrow \nu)$, e independe dos estados anteriormente acessados. Assim, o algoritmo de Metropolis gera uma sequência de estados do sistema por meio de um processo markoviano [43].

Uma estimativa da média de alguma grandeza de interesse F no ensemble canônico pode ser obtida por meio da geração de uma cadeia de M estados μ , em que cada estado

é obtido com frequência proporcional a seu peso de Boltzmann, isto é, $p_\mu \propto e^{-\beta E_\mu}$, em que $\beta = \frac{1}{k_B T}$. Nesse caso, a estimativa é dada simplesmente por $\langle F \rangle = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M F_{\mu_j}$ [42]. A coincidência entre essa média obtida no ensemble e a média temporal, que seria efetivamente observada em medições físicas, é estabelecida pela hipótese ergódica, segundo a qual o tempo que um sistema permanece em uma região acessível do espaço de fase é proporcional ao volume dessa região, isto é, todos os microestados de um sistema são equiprováveis em um tempo suficientemente longo. Em cadeias de Markov, a ergodicidade é satisfeita pela garantia de que todos os estados podem ser acessados a partir de qualquer outro estado em um número finito de passos, isto é, qualquer estado possível do sistema deve ser visitado desde que o processo seja mantido por tempo longo o suficiente [43].

O algoritmo de Metropolis estabelece um conjunto específico de probabilidades de transição, visando a garantir que os estados sejam gerados conforme a distribuição observada no estado de equilíbrio, isto é, conforme o respectivo peso de Boltzmann. Uma condição suficiente (mas não necessária) para que isso ocorra é a chamada condição de balanço detalhado, dada por

$$p_\mu P(\mu \rightarrow \nu) = p_\nu P(\nu \rightarrow \mu). \quad (3.1)$$

Assim, a taxa na qual ocorre a transição $\mu \rightarrow \nu$ em equilíbrio é igual à taxa em que se observa a transição inversa $\nu \rightarrow \mu$. Rearranjando a equação (3.1), obtemos

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{p_\nu}{p_\mu}. \quad (3.2)$$

Mas a probabilidade de equilíbrio p_μ no ensemble canônico é dada por $p_\mu = \frac{e^{-\beta E_\mu}}{Z}$, em que $Z = \sum_\nu e^{-\beta E_\nu}$ é a função partição canônica. Substituindo em (3.2) e observando o cancelamento do fator $1/Z$, obtemos

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}. \quad (3.3)$$

Existem várias formas de se escolher as probabilidades $P(\mu \rightarrow \nu)$ e $P(\nu \rightarrow \mu)$ de modo a satisfazer (3.3), porém, por uma questão de eficiência, o algoritmo de Metropolis estabelece, para quaisquer estados μ e ν , os valores

$$P(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}, & \text{se } E_\nu - E_\mu > 0 \\ 1, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (3.4)$$

Assim, o algoritmo de Metropolis consiste na repetição do seguinte procedimento:

- A partir do estado atual μ do sistema, escolhemos um dos spins da rede para ter sua orientação S_i invertida, gerando um novo estado ν .

- Calculamos a energia E_ν do novo estado gerado e comparamos com a energia E_μ do estado atual.
 - Se $E_\nu < E_\mu$, aceitamos a alteração, e o estado ν passa a ser o estado atual do sistema.
 - Caso contrário, sorteamos um número aleatório r entre 0 e 1, segundo uma distribuição uniforme.
 - * Se $r < e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}$, aceitamos a alteração, e o estado ν passa a ser o estado atual do sistema.
 - * Caso contrário, rejeitamos a alteração e mantemos o estado μ como o estado atual do sistema.
- Repetimos o procedimento, com a escolha de um outro spin da rede.

Definimos como um passo de Monte Carlo (MCS) a repetição desse procedimento um número N de vezes, equivalente ao número de spins da rede. Em nossas simulações, a escolha do spin a ser invertido é feita sequencialmente, de modo que em cada passo de Monte Carlo todos os spins da rede sofrem uma tentativa de inversão. Aplicando esse algoritmo com um número suficientemente grande de passos, podemos gerar uma sequência de estados em uma dada temperatura T e calcular as médias das grandezas de interesse.

3.2 Método de histogramas múltiplos

Como o cálculo de interações dipolares tem um custo computacional significativo, torna-se inviável realizar as simulações em um número muito grande de temperaturas. Felizmente, existem métodos estatísticos confiáveis para extrapolar os valores das grandezas termodinâmicas obtidas para temperaturas próximas àquelas nas quais as simulações foram realizadas. O método que utilizamos para esse fim, denominado método de histogramas múltiplos, é devido a Ferrenberg e Swendsen [44], e consiste em utilizar histogramas obtidos a diferentes temperaturas de simulação β_i para calcular o valor relativo da função de partição canônica $Z(\beta)$ a uma temperatura β qualquer.

Para isso, são construídos histogramas $h_i(E)$ a partir dos resultados de cada uma das i simulações realizadas a temperaturas diferentes, ou seja, os estados amostrados em uma determinada simulação i são agrupados em “caixas” (*bins*) de acordo com seus valores de energia.¹ Simulações realizadas a temperaturas diferentes tendem a amostrar regiões

¹ Em nosso sistema, como as energias dos estados, além de não serem números inteiros, não são igualmente espaçadas, é necessário agrupar os estados em *bins* discretos com energia entre E e $E + \Delta E$. A rigor, existem formas de evitar essa discretização, que acaba acarretando certa perda de informações (cf. [43]). No entanto, escolhendo valores convenientes de ΔE , isto é, utilizando um número adequado de *bins*, foi possível obter resultados muito semelhantes aos dos métodos sem discretização, com custo

distintas do espectro de energia, uma vez que temperaturas mais baixas (altas) favorecem estados de energia mais baixa (alta). Para a correta aplicação do método, é necessário que haja uma sobreposição significativa dos histogramas obtidos a temperaturas diferentes, de forma que boa parte dos valores de energia amostrados em uma simulação realizada a uma temperatura β_i coincidam com os valores de energia amostrados em uma simulação a uma temperatura subsequente β_j .

O método de histogramas múltiplos parte da constatação de que um histograma $h_i(E)$ obtido a uma temperatura β_i fornece uma estimativa da probabilidade $p(E)$ de que o sistema seja encontrado com energia E nessa temperatura [43]. Assim, se amostrarmos n_i estados à temperatura β_i e obtivermos $h_i(E)$ estados com energia E , temos uma estimativa de $p(E)$:

$$p(E) = \frac{h_i(E)}{n_i} \quad (3.5)$$

Segundo a mecânica estatística de equilíbrio, temos que, no ensemble canônico, a função partição é escrita como:

$$Z = \sum_E g(E)e^{-\beta E}, \quad (3.6)$$

em que $g(E)$ é a densidade de estados e a soma é feita sobre todas as energias E acessíveis ao sistema. A probabilidade $p(E)$, por sua vez, é dada por:

$$p(E) = \frac{g(E)e^{-\beta E}}{Z} \quad (3.7)$$

Substituindo a equação (3.5) em (3.7), encontramos uma estimativa da densidade de estados $g(E)$ obtida por meio de uma simulação realizada à temperatura β_i , que chamaremos $g_i(E)$:

$$g_i(E) = \frac{h_i(E)Z_i}{n_i e^{-\beta E}}, \quad (3.8)$$

em que chamamos de Z_i a função partição referente à temperatura β_i .

Como a densidade de estados de um sistema independe da temperatura, as simulações realizadas no ensemble canônico fornecem, na verdade, diferentes estimativas para essa mesma grandeza. No entanto, cada simulação efetuada terá amostrado diferentes partes do espectro de energias com precisões muito díspares, pois cada temperatura privilegia estados em uma determinada região desse espectro. A ideia contida no método de histogramas múltiplos consiste em utilizar as várias estimativas da função $g(E)$ para calcular a função partição a uma temperatura β qualquer com a maior acuidade possível. Nesse intuito, faz-se uma média ponderada das funções $g_i(E)$, em que o peso utilizado corresponde ao valor esperado de cada histograma $\overline{h_i(E)}$. É preciso notar, aqui, que $\overline{h_i(E)}$ não coincide

computacional consideravelmente menor. De todo modo, a discretização da energia é necessária para aplicar o método descrito na Seção 3.4.

com o histograma $h_i(E)$ que resulta das simulações, mas sim com o valor que seria obtido para o histograma $h_i(E)$ caso pudéssemos fazer uma média sobre infinitas simulações à temperatura β_i . Assim, a melhor estimativa para a densidade de estados é:

$$g(E) = \frac{\sum_i \overline{h_i(E)} g_i(E)}{\sum_j \overline{h_j(E)}} \quad (3.9)$$

Substituindo o valor de $g_i(E)$ dado pela equação (3.8), podemos escrever:

$$g(E) = \frac{\sum_i \overline{h_i(E)} \frac{h_i(E) Z_i}{n_i e^{-\beta_i E}}}{\sum_j \overline{h_j(E)}}. \quad (3.10)$$

Claramente não é possível conhecer o valor esperado dos histogramas $\overline{h_i(E)}$. Todavia, por meio da equação (3.8) podemos perceber que a relação entre $\overline{h_i(E)}$ e o valor exato de $g(E)$ é dada por $g(E) = \frac{\overline{h_i(E)} Z_i}{n_i e^{-\beta_i E}}$. Assim, resolvendo para $\overline{h_i(E)}$ e substituindo em (3.9), temos que

$$g(E) = \frac{\sum_i h_i(E)}{\sum_j n_j e^{-\beta_j E} / Z_j}. \quad (3.11)$$

Ainda não podemos utilizar a equação (3.11) para o cálculo da densidade de estados, pois desconhecemos os valores da função partição Z_j nas temperaturas simuladas β_j . Porém, se utilizarmos o valor de $g(E)$ dado em (3.11) na equação da função partição (equação (3.6)), chegamos a uma relação de recorrência que nos permitirá estimar os valores relativos da função partição nas temperaturas simuladas:

$$Z_k = \sum_E g(E) e^{-\beta_k E} = \sum_E \frac{\sum_i h_i(E)}{\sum_j n_j e^{-(\beta_j - \beta_k) E} / Z_j}. \quad (3.12)$$

Logo, podemos atribuir um valor inicial qualquer para os Z_k e resolver iterativamente a equação (3.12), até que os valores relativos da função partição nas temperaturas simuladas converjam para o valor correto.

Uma vez estimados os valores de Z_k , podemos utilizá-los para calcular o valor relativo da função partição em uma temperatura à qual nenhuma simulação foi realizada:

$$Z(\beta) = \sum_E g(E) e^{-\beta E} = \sum_E \frac{\sum_i h_i(E)}{\sum_j n_j e^{-(\beta_j - \beta) E} / Z_j}. \quad (3.13)$$

O conhecimento de $Z(\beta)$, por sua vez, permite que se calcule a média $\langle A \rangle$ de qualquer grandeza termodinâmica A à temperatura β , desde que tenham sido construídos histogramas bidimensionais $h_i(A, E)$ durante as simulações, contendo as informações referentes ao número de vezes em que um determinado valor de A aparece associado a cada energia E à temperatura β_i :

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z(\beta)} \sum_{E,A} \frac{A \sum_i h_i(A, E)}{\sum_j n_j e^{-(\beta_j - \beta) E} / Z_j}. \quad (3.14)$$

A equação (3.14) pode ser reescrita como:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z(\beta)} \sum_{i,E,A} \frac{A h_i(A, E)}{\sum_j n_j e^{-(\beta_j - \beta)E} / Z_j} = \frac{1}{Z(\beta)} \sum_{i,s} \frac{A_{i,s}}{\sum_j n_j e^{-(\beta_j - \beta)E_{i,s}} / Z_j}, \quad (3.15)$$

em que a soma agora é feita sobre todos os estados s amostrados na simulação à temperatura β_i , e $A_{i,s}$ e $E_{i,s}$ são, respectivamente, o valor da grandeza A e da energia total E em cada um desses estados. Assim, não é necessário construir o histograma bidimensional $h_i(A, E)$, mas apenas gravar os valores de $A_{i,s}$ e $E_{i,s}$ para cada estado amostrado. Para uma grandeza A contínua, a equação (3.15) é vantajosa em comparação com a equação (3.14), uma vez que esta requer a discretização dos valores de A , acarretando certa perda de informações e uma maior imprecisão nos resultados.

É de se esperar que, se as simulações são realizadas em um intervalo restrito de temperaturas, somente teremos informação suficiente para estimar parte da função $g(E)$. Consequentemente, a temperatura β para a qual desejamos extrapolar os resultados de nossas simulações deve estar contida no intervalo de temperaturas das simulações, ou ao menos bem próxima dele. Caso contrário, o comportamento do sistema à temperatura β dependeria significativamente do valor da densidade de estados em um região do espectro de energias não suficientemente amostrada pelas simulações. Logo, a escolha das temperaturas das simulações deve ser feita com o intuito de amostrar o máximo possível as regiões de maior interesse, bem como de propiciar uma razoável sobreposição dos histogramas obtidos.

3.3 Escala de tamanho finito

Transições de fase são rigorosamente definidas somente no *limite termodinâmico*, isto é, no limite em que as variáveis extensivas de um sistema, como o volume V e o número de partículas N , tendem ao infinito ao mesmo tempo em que a proporção entre elas é mantida constante ($N/V = cte.$). Uma das principais assinaturas das transições de fase é a descontinuidade ou divergência de algumas grandezas termodinâmicas, como calor específico e comprimento de correlação, o que não pode ocorrer em sistemas finitos. É inegável, entretanto, que mesmo sistemas finitos apresentam modificações bruscas em suas propriedades quando alguns parâmetros são alterados, que são chamadas pseudo-transições de fase [45].

Sistemas físicos macroscópicos geralmente possuem uma quantidade tão grande de partículas que seu comportamento é adequadamente descrito pelo limite termodinâmico. Entretanto, existem sistemas experimentais, como é geralmente o caso dos gelos de spin artificiais, que apresentam um número de graus de liberdade relativamente pequeno quando comparado à ordem de grandeza do número de partículas geralmente presentes

em sistemas macroscópicos². Nesses casos, o limite termodinâmico não constitui uma boa aproximação, e o estudo de redes finitas torna-se importante. Ainda assim, o conhecimento do comportamento crítico do sistema no limite de tamanho infinito é relevante, devido à constatação, advinda da mecânica estatística, de que tal comportamento é determinado por algumas poucas características, tais como simetrias, alcance das interações e dimensionalidade. Assim, sistemas microscopicamente muito diferentes apresentam propriedades críticas semelhantes, em um fenômeno conhecido como *universalidade*. A maioria das especificidades dos modelos em mecânica estatística – tais como a estrutura da rede, o tamanho dos spins e sua natureza quântica ou clássica – são, em geral, irrelevantes para os fenômenos críticos [46], de modo que os sistemas podem ser agrupados em classes de universalidade, facilitando sua caracterização.

O estudo de transições de fase por meio de simulações computacionais apresenta dificuldades decorrentes da limitação do número de partículas que podem ser consideradas nestas, já que a simulação de sistemas muito grandes requer um tempo computacional proibitivo. Não obstante, é possível obter informações sobre o limite termodinâmico por meio do estudo de sistemas finitos. A técnica mais utilizada para tal fim é análise de escala de tamanho finito, cujo desenvolvimento usual passamos agora a apresentar, com base em [43].

Em sistemas magnéticos, a relação entre um determinado spin $\vec{S}_{\vec{r}}$, que se encontra na posição \vec{r} , e um outro spin $\vec{S}_{\vec{r}'}$, localizado em \vec{r}' , é descrita pela função de correlação $\Gamma(|\vec{r} - \vec{r}'|) = \langle \vec{S}_{\vec{r}} \cdot \vec{S}_{\vec{r}'} \rangle$. Para um sistema infinito, espera-se que a função de correlação apresente um decaimento descrito por:

$$\Gamma(|\vec{r} - \vec{r}'|) \sim \frac{e^{-|\vec{r} - \vec{r}'|/\xi(T)}}{|\vec{r} - \vec{r}'|^{d-2+\eta}}, \quad (3.16)$$

em que η é um número real e $\xi(T)$ é o chamado comprimento de correlação do sistema [46]. Em uma transição de fase, o comprimento de correlação torna-se infinito, e o decaimento da função de correlação é puramente algébrico. A divergência de ξ quando a temperatura aproxima-se da temperatura crítica T_c é dada por

$$\xi \sim |t|^{-\nu}, \quad (3.17)$$

em que $t = \frac{T - T_c}{T_c}$ é a chamada temperatura reduzida. Essa relação define o expoente crítico ν .

Os expoentes críticos consistem em um conjunto de valores que definem o comportamento das grandezas de interesse de um sistema na vizinhança do ponto crítico. Vários sistemas semelhantes compartilham os mesmos expoentes críticos, apesar de suas diferenças microscópicas, podendo ser incluídos em uma mesma classe de universalidade. Um outro

² A rede estudada em [8], por exemplo, é constituída de 24.200 nanoilhas.

expoente crítico comumente estudado é o expoente que governa o comportamento do calor específico, definido como:

$$c_v \sim |t|^{-\alpha}. \quad (3.18)$$

Substituindo (3.17) em (3.18), podemos escrever

$$c_v \sim \xi^{\alpha/\nu}. \quad (3.19)$$

Ocorre que, quando se observa um sistema finito, o comprimento de correlação é limitado pelo tamanho L do sistema e, portanto, não pode divergir. Assim, quando o comprimento de correlação é muito menor que o tamanho do sistema, a finitude deste praticamente não influencia o comportamento do calor específico; próximo à temperatura crítica, porém, o comprimento de correlação no limite termodinâmico torna-se muito maior que L , de maneira que o comprimento característico que influencia o comportamento do calor específico no sistema finito passa a ser o próprio tamanho do sistema. Isto nos motiva a escrever a expressão para o calor específico de um sistema finito de tamanho L como:

$$c_v^L = \xi^{\alpha/\nu} c_v^0(L/\xi), \quad (3.20)$$

em que $c_v^0(x) = \text{const.}$ para $x \gg 1$ e $c_v^0(x) \sim x^{\alpha/\nu}$ para $x \rightarrow 0$. Esta definição garante que o calor específico seja governado pelo comprimento de correlação longe da transição de fase e pelo tamanho do sistema próximo do ponto crítico.

Por conveniência, reescrevemos a equação (3.20) definindo uma nova função $\tilde{c}_v(x)$, que tem a forma $\tilde{c}_v(x) = x^{-\alpha} c_v^0(x^\nu)$. Utilizando $\xi \sim |t|^{-\nu}$, podemos escrever:

$$c_v^0(L/\xi) = (L/\xi)^{\alpha/\nu} \tilde{c}_v \left[(L/\xi)^{1/\nu} \right] = (L/\xi)^{\alpha/\nu} \tilde{c}_v \left(L^{1/\nu} |t| \right).$$

Substituindo na equação (3.20), temos:

$$c_v^L = L^{\alpha/\nu} \tilde{c}_v \left(L^{1/\nu} |t| \right). \quad (3.21)$$

Ao realizarmos simulações de Monte Carlo, o que medimos, na verdade, é o valor do calor específico a uma determinada temperatura e em uma rede de tamanho finito, isto é, medimos $c_v^L(t)$. Quanto à função $\tilde{c}_v(x)$, não conhecemos sua forma exata, mas conhecemos sua dependência em L , pois sabemos que $\tilde{c}_v = \tilde{c}_v \left(L^{1/\nu} |t| \right)$. Podemos rearranjar (3.21) para obter³:

$$\tilde{c}_v \left(L^{1/\nu} t \right) = L^{-\alpha/\nu} c_v^L(t). \quad (3.22)$$

Cada simulação com um tamanho de rede L nos fornece uma estimativa para a forma da função $\tilde{c}_v(x)$, que deve ser a mesma para qualquer L . Assim, se plotarmos $L^{-\alpha/\nu} c_v^L(t)$ por $L^{1/\nu} t$, deveremos observar um *colapso* das curvas para diferentes valores de L , ou seja, tais

³ A troca de $|t|$ por t pode ser feita estendendo a definição de $\tilde{c}_v(x)$ para valores negativos de x (cf. [43], p.233).

curvas tornam-se coincidentes. Podemos nos utilizar desse fato para estimar os expoentes críticos e a temperatura crítica, observando os valores que fornecem o melhor colapso das curvas.

É conveniente notar ainda que, no ponto máximo de $c_v^L(t)$, a função $c_v^0(L/\xi)$ definida em (3.20) deve assumir a forma $c_v^0(x) \sim x^{\alpha/\nu}$, de forma que, nesse ponto, deve valer:

$$c_{v,max}^L \sim L^{\alpha/\nu}. \quad (3.23)$$

Esta constatação será útil para o cálculo do expoente α .

Além disso, é preciso destacar que uma outra interpretação possível para o expoente crítico ν é dada da seguinte forma. O argumento da função $\tilde{c}_v(x)$ definida acima é dado por

$$x = L^{1/\nu}t = L^{1/\nu} \left(\frac{T - T_c}{T_c} \right)$$

Chamando de $T_c(L)$ a temperatura da pseudo-transição em um sistema finito, que, em geral, não coincide com a temperatura crítica T_c no limite termodinâmico, podemos reorganizar essa equação para obter:

$$T_c(L) = T_c \left(1 + x_0 L^{-1/\nu} \right) \quad (3.24)$$

em que x_0 é constante.

Vemos, portanto, que o expoente crítico ν , além de governar a divergência do comprimento de correlação, determina também a temperatura de transição de um sistema finito. Esta pode ser estimada observando-se a temperatura do pico de grandezas termodinâmicas como o calor específico. Um gráfico de $T_c(L)$ por $L^{-1/\nu}$ deve, portanto, apresentar comportamento linear, e o intercepto da reta com o eixo vertical fornece a temperatura crítica T_c . O expoente ν , por sua vez, pode ser estimado observando o melhor ajuste linear para os pontos. Entretanto, este método dá origem a ambiguidades, pois grandezas termodinâmicas diferentes, como, por exemplo, o calor específico e a suscetibilidade, podem apresentar picos a temperaturas diferentes em sistemas finitos. Uma forma de calcular o expoente crítico ν e a temperatura crítica T_c que remove essa ambiguidade é dada pelo método dos zeros da função partição, ou por seu desenvolvimento mais recente, os zeros da distribuição de probabilidades da energia.

3.4 Zeros da distribuição de probabilidade da energia

Uma forma bastante antiga e eficiente de se estudar transições de fase faz uso dos chamados zeros da função partição. A ideia foi inicialmente desenvolvida por Yang e Lee [47], no âmbito do ensemble grande-canônico, e posteriormente estendida por Fisher [48] para o ensemble canônico. Neste ensemble, a energia livre F relaciona-se à função de

partição por meio da equação $F = -\beta^{-1} \ln Z$. A ideia básica dos zeros de Fisher é encontrar os pontos de não-analiticidade da energia livre, que definem a ocorrência de uma transição de fase.

Para isso, escrevemos a função partição, dada por (3.6), como

$$Z = \sum_E g(E) e^{-\beta E} = e^{-\beta E_0} \sum_n g_n e^{-\beta n \epsilon}, \quad (3.25)$$

em que a energia E foi discretizada na forma $E_n = E_0 + n\epsilon$, $g_n = g(E_n)$ é a densidade de estados, e a soma é feita sobre todos os níveis de energia acessíveis ao sistema. Introduzindo a variável $z = e^{-\beta \epsilon}$, ficamos com um polinômio em z cujos coeficientes são dados por g_n :

$$Z = e^{-\beta E_0} \sum_n g_n z^n. \quad (3.26)$$

Este polinômio pode ser escrito em função de suas raízes z_n :

$$Z = e^{-\beta E_0} \prod_n (z - z_n). \quad (3.27)$$

Como os coeficientes g_n são todos reais positivos, um polinômio finito desse tipo não pode ter raízes reais positivas, e suas raízes complexas aparecem em pares conjugados [49].

A teoria de Yang-Lee afirma que regiões do plano complexo livres de raízes reais da função partição indicam a existência de apenas uma fase [47]. Por tal razão, sistemas finitos não podem apresentar transições de fase propriamente ditas. Entretanto, à medida que se aumenta o tamanho do sistema, os zeros da função partição aproximam-se do eixo real positivo e, no limite termodinâmico, eles passam a tocá-lo nos pontos de transição, indicando que existem parâmetros físicos – fugacidade, no caso dos zeros de Yang-Lee, e temperatura, nos zeros de Fisher – com valores reais que geram uma não analiticidade da energia livre.

Estudando a forma como os zeros de Fisher aproximam-se do eixo real positivo com o aumento do tamanho do sistema, podemos estimar a temperatura e o expoente crítico ν referentes à transição de fase no limite termodinâmico. Os zeros que fornecem tais informações são chamados *zeros dominantes*. Um exemplo da distribuição dos zeros de Fisher no plano complexo é mostrado na Figura 3.1.

Um dos principais problemas práticos da aplicação dos zeros de Fisher consiste no fato de que a ordem do polinômio em (3.26) aumenta rapidamente com o tamanho da rede, tornando bastante desafiadora a tarefa numérica de encontrar suas raízes. Além disso, a densidade de estados assume valores muito distintos para diferentes faixas de energia, de modo que a ordem de grandeza de alguns dos coeficientes do polinômio dificulta seu tratamento numérico. Por fim, o conhecimento da densidade de estados $g(E)$ para todo o intervalo de energia acessível ao sistema, apesar de possível, tem custo computacional considerável. É razoável pressupor, no entanto, que somente uma pequena parcela dos

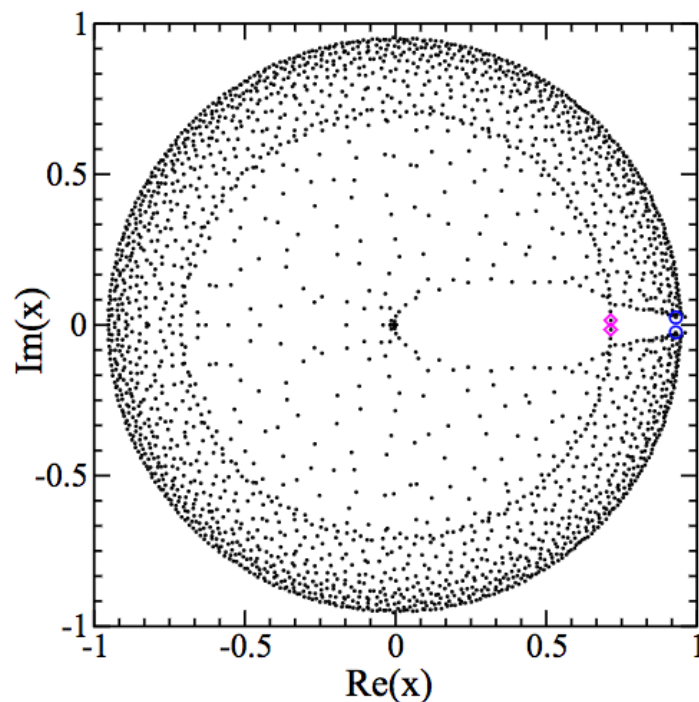


Figura 3.1: Mapa da distribuição dos zeros de Fisher no plano complexo, com os zeros dominantes destacados, para um modelo de polímero, retirado da referência [50].

microestados acessíveis tenha papel revelante na transição de fase, uma vez que a grande maioria deles são altamente improváveis de ocorrer no intervalo de temperaturas próximo à transição. Assim, Costa *et al.* desenvolveram um método, derivado dos zeros de Fisher, que é capaz de superar essas dificuldades práticas, ao descartar as informações irrelevantes para a transição de fase e considerar somente os estados que a influenciam significativamente [51].

Esse novo método parte de uma reescrita da função partição, dada pela equação (3.25), em função dos histogramas $h_0(E)$, que podem ser obtidos em uma simulação de Monte Carlo no ensemble canônico à temperatura β_0 . Para isso, basta multiplicar (3.25) por $e^{\beta_0 E} e^{-\beta_0 E} = 1$, de modo a obter

$$Z = \sum_E g(E) e^{-\beta E} e^{\beta_0 E} e^{-\beta_0 E} = \sum_E h_0(E) e^{-\Delta\beta E}, \quad (3.28)$$

em que $\Delta\beta = \beta - \beta_0$, e $h_0(E) = g(E) e^{-\beta_0 E}$ é a distribuição de probabilidade da energia (EPD, na sigla em inglês) não normalizada do sistema, ou, de modo mais simples, o histograma à temperatura β_0 . Procedendo à mesma discretização realizada para os zeros de Fisher, ficamos com

$$Z = e^{-\Delta\beta E_0} \sum_n h_0(n) e^{-\Delta\beta n \epsilon}. \quad (3.29)$$

Definindo $x \equiv e^{-\Delta\beta \epsilon}$, temos

$$Z = e^{-\Delta\beta E_0} \sum_n h_0(n) x^n, \quad (3.30)$$

que é um polinômio análogo ao de Fisher, porém com os coeficientes dados por $h_0(n)$, e não mais por g_n . Fatorando o polinômio para explicitar suas raízes complexas x_n , obtemos

$$Z = e^{-\Delta\beta E_0} \prod_n (x - x_n). \quad (3.31)$$

Da mesma forma que nos zeros de Fisher no limite termodinâmico, a existência de zeros que tocam o eixo real positivo indicam a ocorrência de uma transição de fase. Isto fica evidente ao notarmos que $x_n = e^{\beta_0 \epsilon} z_n$, isto é, os zeros EPD consistem em uma simples reescala dos zeros de Fisher. Ao considerarmos $\beta_0 = \beta_c$, o zero x_c correspondente à temperatura crítica, para o qual $\beta = \beta_c$, teria parte real igual a 1 e parte imaginária nula, uma vez que teríamos $\Delta\beta = 0$. Para sistemas finitos, entretanto, o zero dominante x_c – isto é, aquele que indica a temperatura da pseudo-transição $\beta_c(L)$ – terá uma parte imaginária não nula, já que a energia livre nesse caso é sempre analítica, e o eixo real positivo será livre de zeros. Espera-se que essa parte imaginária seja pequena e decrescente com o tamanho do sistema, de modo que, para $\beta \approx \beta_c(L)$, esperamos que o zero dominante seja aquele mais próximo do ponto $(1, 0)$.

Podemos, portanto, encontrar o zero dominante de sistemas finitos como forma de estimar sua temperatura pseudo-crítica. Para isso, construímos um histograma à temperatura β_0 e resolvemos o polinômio resultante para encontrar o zero dominante x_c . Relembrando a definição da variável x , dada por $x \equiv e^{(\beta_0 - \beta)\epsilon}$, podemos estimar a temperatura pseudo-crítica como

$$\beta_c(L) = \beta_0 - \frac{\ln(\Re(x_c))}{\epsilon} \quad (3.32)$$

A grande vantagem desse método reside no fato de sabermos que, próximo à temperatura crítica, os estados menos prováveis de serem acessados – isto é, aqueles com pequenos valores de $h_0(E)$ – têm uma contribuição negligenciável para o comportamento do sistema na transição de fase. Com isso, podemos descartar de forma segura os estados pouco prováveis – estados com valores pequenos de $h_0(E)$ – ao calcular os zeros da função de partição à temperatura β_0 sem modificar significativamente os zeros mais relevantes. De fato, quanto mais próximo β_0 estiver de $\beta_c(L)$, mais acurada será a estimativa do zero dominante e, conseqüentemente, da temperatura pseudo-crítica, já que, para $\beta_0 \approx \beta_c(L)$, os estados com maior probabilidade de serem acessados são exatamente os que têm maior influência no comportamento crítico.

Com isso, podemos melhorar sucessivamente a estimativa da temperatura pseudo-crítica mediante um processo iterativo, em que atribuímos a β_0 o valor obtido para $\beta_c(L)$ no passo anterior e construímos um histograma na nova temperatura β_0 . Se o zero dominante do novo polinômio estiver suficientemente próximo do ponto $(1, 0)$, paramos o algoritmo. Caso contrário, calculamos uma nova estimativa de $\beta_c(L)$ por meio da equação (3.32) e repetimos o procedimento.

A utilização dos zeros da função de partição no estudo de transições de fase elimina a ambiguidade na definição da temperatura pseudo-crítica a que aludimos na Seção 3.3, uma vez que, agora, podemos calcular essa temperatura diretamente da função partição, sem a necessidade de recorrer à divergência de grandezas termodinâmicas como calor específico e suscetibilidade, que podem fornecer temperaturas críticas inconsistentes.

Além disso, o método dos zeros EPD possui algumas vantagens importantes quando comparado aos zeros de Fisher. A mais óbvia delas é a desnecessidade de se conhecer toda a densidade de estados $g(E)$ do sistema para a construção do polinômio. Como já foi mencionado, o histograma $h_0(E)$ obtido a uma temperatura próxima à transição é suficiente. Além de necessitar de menos tempo computacional para sua obtenção, a utilização do histograma $h_0(E)$ ao invés da densidade de estados $g(E)$ reduz consideravelmente o grau do polinômio a ser resolvido e a ordem de grandeza de seus coeficientes, facilitando a tarefa numérica de encontrar os zeros.

O método dos zeros EPD foi devidamente testado para uma ampla gama de modelos comumente estudados em mecânica estatística, com resultados que comprovam sua precisão e confiabilidade, bem como suas vantagens significativas em relação aos zeros de Fisher [51].

Por fim, cabe destacar que a análise dos zeros EPD pode fornecer o expoente crítico ν , definido em (3.17). Para isso, partimos da relação de escala da temperatura crítica dada por (3.24) para conjecturar que

$$x_c(L) = x_c + aL^{-1/\nu}, \quad (3.33)$$

em que $x_c(L)$ é o zero dominante à temperatura pseudo-crítica para uma rede de tamanho L e a é uma constante. Como a parte real de $x_c(L)$ é igual a 1 para todos os tamanhos de rede, é de se esperar que o comportamento de escala seja devido a sua parte imaginária, isto é, $\Im m(x_c) \sim L^{-1/\nu}$ [51].

4 O modelo

Para simular a estrutura de nanoilhas magnéticas proposta em [8], concebemos um modelo de spins do tipo Ising, com interações dipolares, dispostos em uma rede com a mesma geometria da rede realizada experimentalmente. Passamos, agora, a descrever a construção do modelo, bem como a detalhar os procedimentos utilizados na simulação.

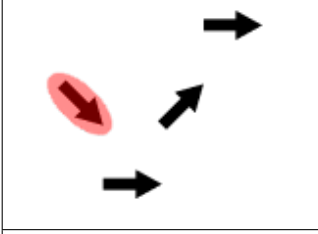
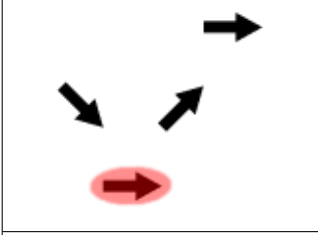
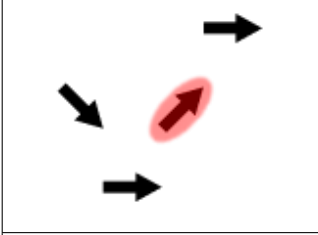
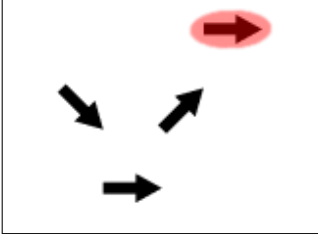
4.1 A rede

Em nosso modelo, tratamos cada ilha como um spin do tipo Ising, que pode assumir os valores $S_i = \pm 1$, interagindo mediante um potencial dipolar. Os spins são considerados pontuais e localizam-se no centro de cada ilha da rede original. Escrevemos o momento de dipolo magnético de cada nanoilha como $\vec{m}_i = \mu S_i \hat{e}_i$, em que μ é o módulo do momento magnético e \hat{e}_i é o vetor unitário que indica a direção do eixo fácil de cada ilha. Espera-se que as aproximações contidas no modelo, que desprezam os graus de liberdade internos das ilhas e as interações de ordem mais alta que a dipolar, não alterem o comportamento físico do sistema [38].

Para facilitar a visualização, escolhemos o eixo x da rede como o eixo paralelo às nanoilhas diagonais mostradas na Figura 2.4-E, de modo que a orientação da rede em nosso modelo difere da orientação da rede original por uma rotação de $\pi/4$ em sentido horário. A rede foi construída a partir de uma célula unitária contendo quatro spins, cuja posição e orientação estão indicadas na tabela 4.1. A posição dos spins é dada em unidades de l , que correspondem ao comprimento das nanoilhas utilizadas em [8], conforme definido na Figura 2.4-A. A repetição da célula unitária em cada linha e em cada coluna ocorre segundo os vetores primitivos $\vec{a}_x = l(2 + \sqrt{2})\hat{i}$ e $\vec{a}_y = l(2 + \sqrt{2})\hat{j}$. O tamanho da rede é definido pelo número L de células unitárias em cada linha e coluna. Como há 4 spins em cada célula, o número de spins da rede é dado por $N = 4 \times L^2$.

Duas condições de contorno diferentes são consideradas. Na rede com condições de contorno periódicas (rede PBC), cópias da rede são consideradas em ambos os eixos como forma de emular uma rede infinita; já para condições de contorno abertas (rede OBC), removemos o último spin de cada linha para eliminar a assimetria entre as bordas direita e esquerda da rede (ver Figura 4.1).

Tabela 4.1: Posição e orientação dos spins de uma célula unitária da rede (em unidades de l).

Spin	Posição	Orientação
	$\vec{r}_1 = (-\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{2}}{4}, 1 + \frac{\sqrt{2}}{4})$	$\hat{e}_1 = (\frac{\sqrt{2}}{2}, -\frac{\sqrt{2}}{2})$
	$\vec{r}_2 = (0, 0)$	$\hat{e}_2 = (1, 0)$
	$\vec{r}_3 = (\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{2}}{4}, 1 + \frac{\sqrt{2}}{4})$	$\hat{e}_3 = (\frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2})$
	$\vec{r}_4 = (1 + \frac{\sqrt{2}}{2}, 2 + \frac{\sqrt{2}}{2})$	$\hat{e}_4 = (1, 0)$

4.2 As interações

A interação entre nanoilhas em um gelo de spin artificial é do tipo dipolar. Assim, a energia entre dois spins quaisquer da rede é dada por:

$$E_{ij} = \frac{\mu_0}{4\pi l^3} \left[\frac{\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j}{r_{ij}^3} - \frac{3(\vec{m}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right], \quad (4.1)$$

em que μ_0 é a permeabilidade magnética do vácuo e \vec{r}_{ij} é o vetor que liga o sítio i ao sítio j , dado em unidades de l .

Computando todas as interações presentes na rede, podemos escrever o hamiltoniano do sistema como:

$$H = \frac{\mu_0}{4\pi l^3} \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \left[\frac{\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j}{r_{ij}^3} - \frac{3(\vec{m}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right], \quad (4.2)$$

em que o somatório é sobre todos os pares de sítios da rede.

Escrevendo o momento magnético das ilhas como $\vec{m}_i = \mu S_i \hat{e}_i$ e definindo $D \equiv \frac{\mu_0 \mu^2}{4\pi l^3}$,

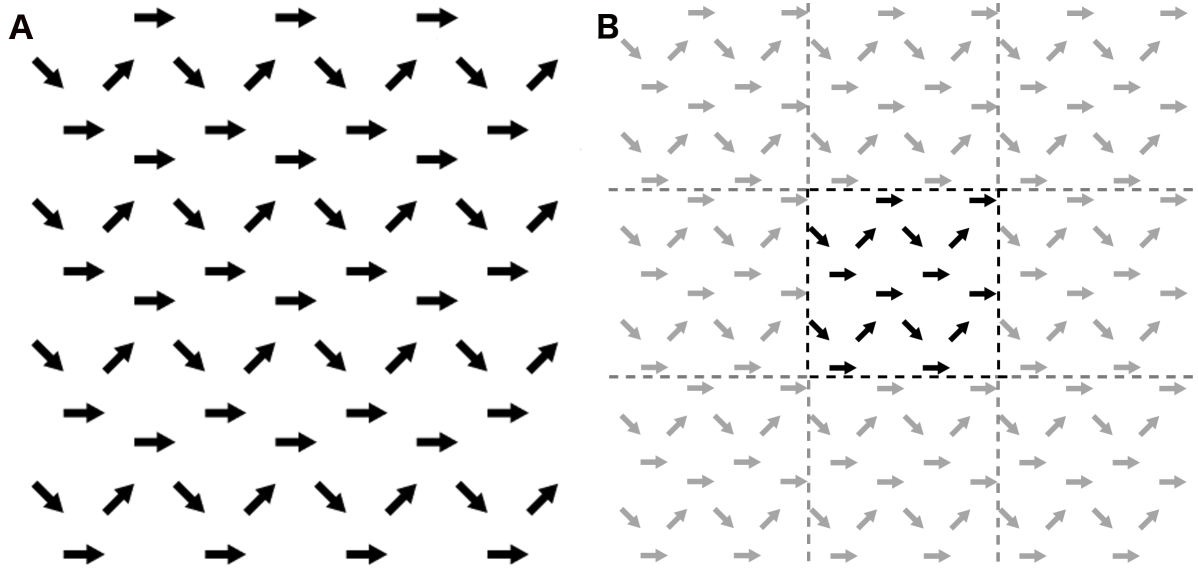


Figura 4.1: (A) Rede com condições de contorno abertas, de tamanho $L = 4$. (B) Rede com condições de contorno periódicas, de tamanho $L=2$. Os spins em cinza claro representam as cópias da rede utilizadas para o cálculo da energia de interação dos spins da rede principal, mostrados em cor preta. Aqui, temos um número de cópias igual a 8. Nas simulações realizadas, utilizamos um número de cópias da ordem de 10^5 (detalhes no texto).

o hamiltoniano fica:

$$H = \frac{D}{2} \sum_{i \neq j} \left[\frac{S_i \hat{e}_i \cdot S_j \hat{e}_j}{r_{ij}^3} - \frac{3(S_i \hat{e}_i \cdot \vec{r}_{ij})(S_j \hat{e}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right]. \quad (4.3)$$

Por uma questão de simplicidade, o termo constante $D = \frac{\mu_0 \mu^2}{4\pi l^3}$ será doravante considerado como unitário.

Uma simples fatoração das variáveis referentes à orientação dos spins, S_i e S_j , permite-nos escrever:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} S_i S_j \left[\frac{\hat{e}_i \cdot \hat{e}_j}{r_{ij}^3} - \frac{3(\hat{e}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\hat{e}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right]. \quad (4.4)$$

Como tais variáveis são as únicas que podem ter seus valores alterados de acordo com a configuração do sistema, o termo entre colchetes pode ser calculado apenas uma vez para cada um dos pares de spins e escrito em uma matriz de interações $N \times N$, em que N é o número de spins da rede, de modo que o valor do hamiltoniano é atualizado pela simples multiplicação de cada um dos elementos dessa matriz pelo valor do produto $S_i S_j$ correspondente. Esse procedimento reduz consideravelmente o tempo computacional gasto para calcular a energia do sistema durante as simulações.

Ao contrário do que ocorre em três dimensões, o somatório das interações dipolares de um determinado spin em uma rede bidimensional com condições de contorno periódicas é convergente. Este fato permite que a energia de uma rede de dipolos em duas dimensões

seja calculada sem a utilização de métodos específicos para o cômputo de potenciais de longo alcance, como a soma de Ewald [28]. Em nosso modelo, a rede PBC é constituída por um número muito grande ($\sim 10^5$) de réplicas do sistema, conforme Figura 4.1, e a matriz de interações é calculada considerando a interação de um determinado spin i com todos os spins localizados no sítio j de todas as réplicas. Como este cálculo é realizado apenas uma vez para cada tamanho de rede, o tempo computacional gasto com a obtenção da matriz de interações é razoavelmente pequeno quando comparado ao tempo computacional das simulações propriamente ditas. O grande número de réplicas consideradas torna confiável a estimativa das energias de interação obtidas por esse método.

Naturalmente, a rede OBC permite um tratamento mais simples, em que as interações entre todos os spins da rede são consideradas.

4.3 Os vértices

No ASI de rede quadrada, o ponto para o qual se direcionam os momentos magnéticos de quatro ilhas vizinhas é denominado vértice. Cada vértice pode assumir 16 configurações distintas, conforme a Figura 2.2. No modelo aqui considerado, define-se como vértice, por analogia com a rede quadrada, o ponto entre dois spins diagonais e um spin horizontal para o qual se apontam os momentos de dipolo dos spins diagonais, conforme mostrado na Figura 4.2. É fácil ver que, aqui, somente os spins diagonais contribuem para o acúmulo de carga magnética nos vértices, de modo que os spins horizontais, resultantes de um rearranjo dos polos dos spins da rede quadrada, apenas alteram sua energia de interação.

Também por analogia, considera-se que os vértices que obedecem à regra do gelo são aqueles que possuem um spin apontando para dentro e um spin apontando para fora. Tais vértices, classificados como tipos I e II na Figura 4.2, apresentam neutralidade de carga magnética. Os vértices do tipo I são menos energéticos que os do tipo II, uma vez que a orientação dos spins horizontais nestes é contrária à orientação do campo gerados pelos dipolos diagonais. Já os vértices do tipo III, mais energéticos que os demais, apresentam acúmulo de carga magnética, sendo, portanto, possíveis candidatos a se comportar como monopolos. Sua carga Q pode assumir os valores $+2$ ou -2 , em unidades arbitrárias, conforme definição no Capítulo 2. Ao contrário do que ocorre na rede quadrada, não existem, neste modelo, vértices com carga ± 4 .

No decorrer deste trabalho, utilizaremos o código de cores apresentado na Figura 4.2 para identificar os diferentes tipos de vértices.

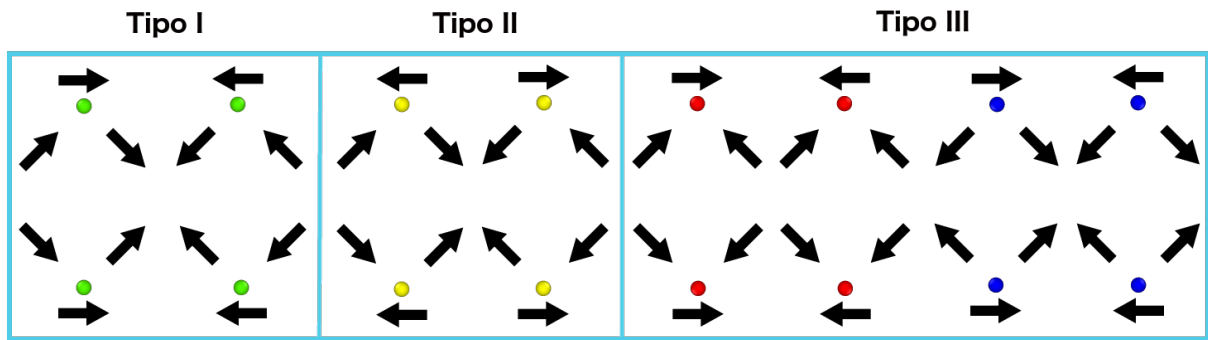


Figura 4.2: As 16 configurações possíveis dos vértices no modelo aqui tratado são classificadas em três tipos, em ordem crescente de energia de interação. Em uma configuração aleatória da rede, os vértices dos tipos I e II tendem a aparecer em 25% dos casos cada, enquanto os demais 50% seriam encontrados com a configuração do tipo III.

4.4 As simulações

Para simular o modelo proposto, escrevemos um programa em linguagem Fortran que aplica o algoritmo de Metropolis. A construção da rede e o cálculo da energia obedecem ao esquema descrito nas Seções 4.1 e 4.2.

O programa permite que o sistema seja iniciado em seu estado fundamental ou em um estado aleatório, em que a configuração de cada spin é selecionada ao acaso. Escolhe-se, inicialmente, uma temperatura T para executar a simulação. Realizamos, então, uma sequência de passos de Monte Carlo, conforme o algoritmo descrito na Seção 3.1.

Para conferir à simulação uma dinâmica mais eficiente e evitar o aprisionamento do sistema em mínimos locais de energia livre, introduzimos alguns passos em que múltiplos spins são invertidos de uma só vez. Esses passos múltiplos (*multiple spin-flips*) podem ser de seis tipos diferentes, que passamos a descrever, fazendo uso da numeração dos spins em uma célula unitária introduzida na tabela 4.1:

- A Inversão de todos os spins de posição \vec{r}_2 de uma determinada linha.
- B Inversão de todos os spins de posição \vec{r}_4 de uma determinada linha.
- C Inversão de todos os spins de posição \vec{r}_1 de uma diagonal da rede.
- D Inversão de todos os spins de posição \vec{r}_3 de uma diagonal da rede.
- E Inversão de todos os spins de uma determinada linha, independentemente de sua posição na célula unitária.
- F Inversão de todos os spins de uma das metades (inferior ou superior) da rede.

Os passos múltiplos estão exemplificados na Figura 4.3. A cada cinco passos de Monte Carlo efetuados com a inversão simples de spins (*single spin-flips*), realizamos até três passos múltiplos, cujo tipo é escolhido ao acaso. A escolha da linha, da diagonal ou da metade da rede a ser invertida também é feita de maneira aleatória. Nos passos múltiplos, a aceitação ou rejeição dos estados é realizada segundo os mesmos critérios dos passos simples, descritos na Seção 3.1, obedecendo ao algoritmo de Metropolis. A satisfação da condição de balanço detalhado nesse caso decorre do fato de que a escolha dos spins a serem invertidos em cada passo múltiplo independe da configuração atual do sistema, de modo que a probabilidade de um sistema no estado μ tentar passar para o estado ν é igual à probabilidade de que ocorra a tentativa inversa, isto é, de ν para μ .

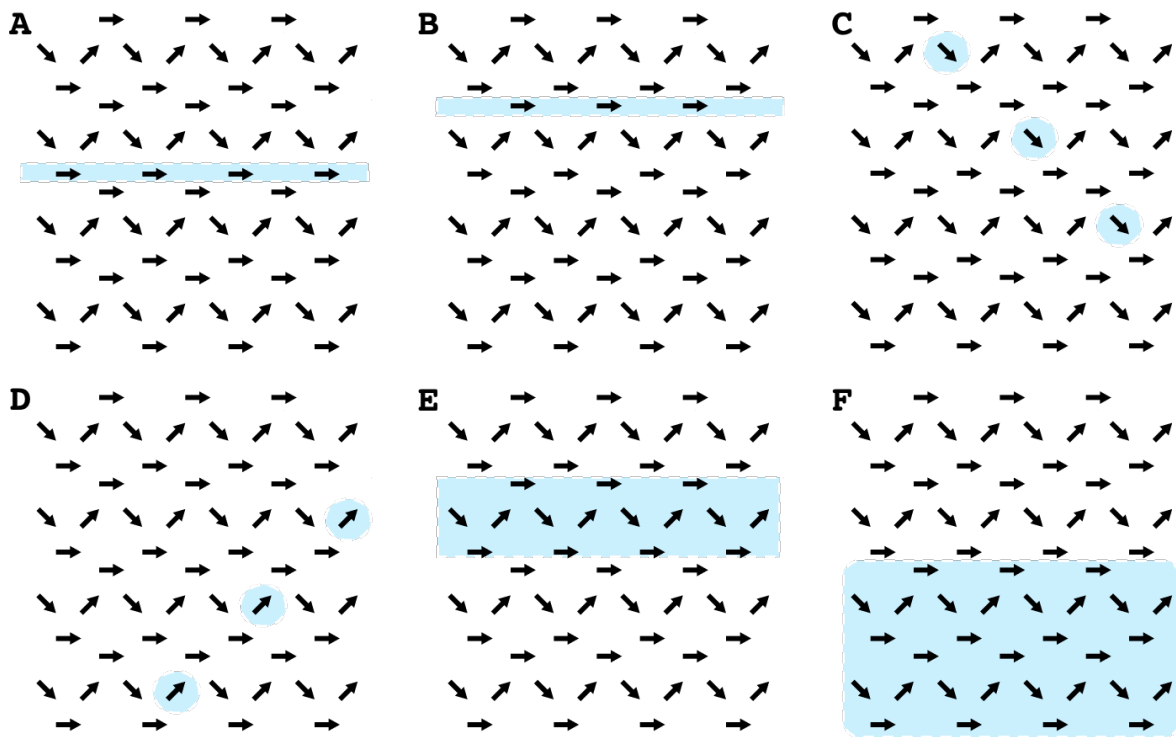


Figura 4.3: Exemplos dos diferentes tipos de passos múltiplos executados durante as simulações, descritos nos itens **A-F** (detalhes no texto).

Ao submetermos o sistema a uma determinada temperatura, aguardamos um tempo de termalização equivalente $100 \times N$ MCS, e só depois desse intervalo é que começamos a utilizar os dados para o cômputo das médias. Uma vez termalizado o sistema, gravamos o valor das grandezas de interesse a cada oito passos de Monte Carlo, simples ou múltiplos. Em cada simulação, o número de MCS realizados foi da ordem de $\sim 10^6$ a $\sim 10^7$, sendo que, quanto maior a rede, maior o número de passos utilizado. De modo a obter uma média das grandezas de interesse e calcular as respectivas barras de erro, foram realizadas entre cinco e dez execuções independentes de cada simulação.

Dois grandezas termodinâmicas de interesse foram obtidas na simulação, a saber,

a magnetização por spin m e o calor específico c_v , que são dados por:

$$m = \frac{1}{N} \left\langle \left| \sum_i \vec{m}_i \right| \right\rangle \quad (4.5)$$

$$c_v = \frac{1}{Nk_B T^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (4.6)$$

Além disso, obtivemos a média da razão entre o número de vértices de cada tipo (N_I, N_{II}, N_{III}) e o número total de vértices da rede (N_T) para cada temperatura:

$$n_I = \left\langle \frac{N_I}{N_T} \right\rangle \quad (4.7)$$

$$n_{II} = \left\langle \frac{N_{II}}{N_T} \right\rangle \quad (4.8)$$

$$n_{III} = \left\langle \frac{N_{III}}{N_T} \right\rangle \quad (4.9)$$

Como as simulações foram realizadas em um número restrito de temperaturas, foi utilizado o método de histogramas múltiplos como forma extrapolar os resultados das simulações para temperaturas próximas às temperaturas simuladas. Com esse método, é possível obter um número tão grande quanto se queira de pontos nos gráficos das grandezas termodinâmicas para o intervalo de temperaturas de interesse. Assim, pudemos visualizar melhor o comportamento de tais grandezas, bem como estimar com maior precisão os pontos de transição de fase.

Para cada tamanho de rede, utilizamos o método dos zeros EPD para obter a temperatura pseudo-crítica. O método de histogramas múltiplos foi novamente utilizado para a construção dos histogramas $h_0(E)$ à temperatura β_0 , de acordo com o procedimento iterativo descrito na Seção 3.4.

Com os dados do calor específico e dos zeros EPD, procedemos a uma análise de escala de tamanho finito para calcular a temperatura crítica e os expoentes críticos α e ν .

Passamos, agora, a apresentar os resultados obtidos em nossas simulações.

5 Resultados e discussão

O primeiro procedimento simulacional que utilizamos consistiu em efetuar um *annealing* térmico, no qual dez amostras de uma rede de tamanho $L = 10$ foram submetidas a uma gradativa redução de temperatura, como forma de encontrar o estado fundamental do sistema. Iniciando-se a $T = 10.0D/k_B$, a temperatura das amostras foi sendo reduzida em passos de $T = 0.1D/k_B$, até chegar a uma temperatura final $T_f = 0.1D/k_B$, na qual a aceitação de qualquer dos passos de Monte Carlo tentados torna-se altamente improvável. Em cada temperatura utilizada, aguardou-se a termalização da amostra, conforme indicado no capítulo anterior. Esse procedimento foi realizado tanto para condições de contorno abertas quanto periódicas, e, ao final, todas as amostras foram encontradas no mesmo estado, identificado como o estado fundamental do sistema.¹ Neste estado, todos os spins têm componente x de mesmo sinal, e todos os vértices são do tipo I. Além disso, a magnetização por spin m da rede coincide com a magnetização de saturação, isto é, o estado fundamental é maximamente magnetizado.

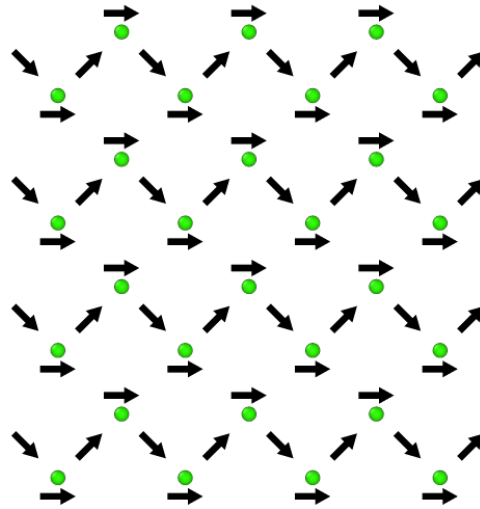


Figura 5.1: Estado fundamental de uma rede de tamanho $L = 4$.

Uma vez determinado o estado fundamental, procedemos ao estudo de redes de diferentes tamanhos, com vistas à elucidação de fenômenos críticos. Apresentaremos, a seguir, os principais resultados de nossas simulações, primeiro para condições de contorno periódicas e, posteriormente, para condições de contorno abertas.

¹ Para efetuar o procedimento de *annealing* para a rede com condições de contorno abertas, foi necessário tomar certos cuidados, e mais detalhes serão fornecidos em momento oportuno.

5.1 Condições de contorno periódicas

Em nossas simulações iniciais, utilizamos um tamanho de rede pequeno ($L = 8$) para observar o comportamento do sistema em um intervalo grande de temperaturas e identificar possíveis regiões de interesse. Na Figura 5.2, vemos que a curva de magnetização decresce monotonicamente com o aumento da temperatura, atingindo sua maior inclinação para uma temperatura no intervalo $0.6D/k_B < T < 0.7D/k_B$. Neste mesmo intervalo, o calor específico atinge seu valor máximo, sugerindo a possível existência de um comportamento crítico. Nesse gráfico, assim como naqueles que serão apresentados na sequência, os pontos representam dados obtidos diretamente por meio de simulações realizadas na temperatura indicada. As barras de erro, quando não mostradas, são menores que os pontos. Já as linhas pontilhadas representam a combinação dos resultados de simulações em temperaturas próximas mediante o método de histogramas múltiplos.

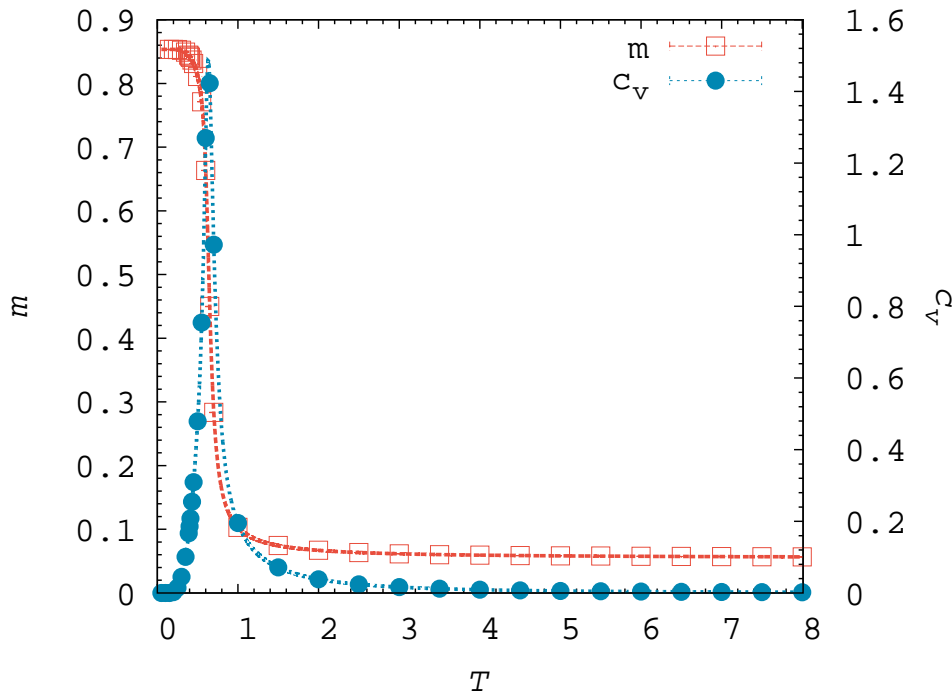


Figura 5.2: Magnetização por spin e calor específico em função da temperatura para a rede PBC com $L = 8$, evidenciando a ocorrência de um estado magnetizado a baixa temperatura e de um pico do calor específico em $T \approx 0.63D/k_B$.

Novas simulações foram realizadas no intervalo de temperaturas de interesse ($0.6D/k_B < T < 0.7D/k_B$) para redes maiores, até $L = 24$. Como o custo computacional cresce rapidamente com o número de spins, ao mesmo tempo em que o pico do calor específico torna-se mais pronunciado, as redes de tamanho $L \geq 28$ foram simuladas em um intervalo menor de temperaturas, de forma a obter o máximo de informação possível na região que se queria investigar. A maior rede que simulamos foi de tamanho $L = 40$, equivalente a $N = 6400$ spins, uma vez que o tempo de execução do programa torna proibitiva a simulação de redes muito maiores.

Na Figura 5.3, vemos que a mudança na magnetização torna-se mais abrupta em redes maiores, de modo que as curvas de magnetização para diferentes tamanhos de rede interceptam-se em uma temperatura próxima à do pico do calor específico. Este, por sua vez, torna-se mais pronunciado com o aumento da rede, ao mesmo tempo em que a temperatura em que se observa o pico também aumenta (ver Figura 5.4).

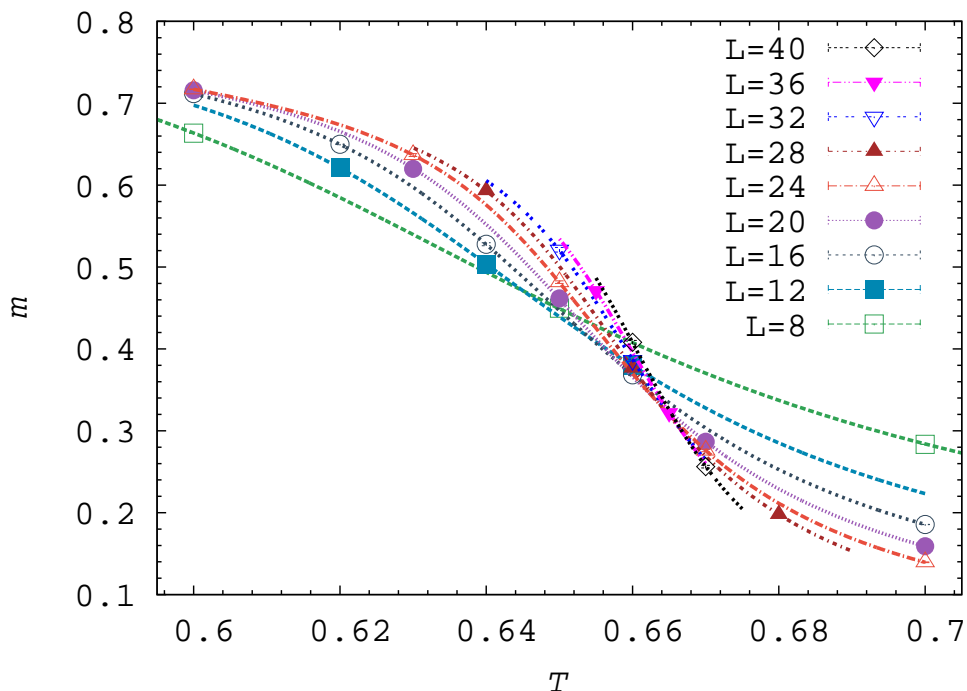


Figura 5.3: Magnetização por spin em função da temperatura para diferentes tamanhos da rede PBC. Nota-se que, à medida que se aumenta o tamanho da rede, a inclinação da curva também aumenta, indicando uma mudança abrupta na magnetização do sistema.

Também as frações correspondentes a cada tipo de vértice, mostradas na Figura 5.5, passam por uma transformação abrupta com o aumento da temperatura. Para $T = 0.3D/k_B$, praticamente todos os vértices de uma rede de tamanho $L = 8$ são do tipo I. Aumentando-se a temperatura, começam a aparecer vértices mais energéticos, dos tipos II e III. No intervalo $0.6D/k_B \lesssim T \lesssim 0.65D/k_B$, a inclinação das três curvas atinge seu máximo – o que também ocorre com a curva da magnetização para esse tamanho de rede. A temperaturas mais altas ($T \gtrsim 1.0D/k_B$), as razões de cada tipo de vértice já estão próximas de convergir para os valores correspondentes à multiplicidade de cada um deles, que seria de 25% para os tipos I e II e 50% para o tipo III. A convergência mais lenta dos vértices do tipo III em relação aos do tipo II decorre do fato de que os vértices do tipo III são mais energéticos e, portanto, necessitam de temperaturas maiores que os vértices do tipo II para aparecer.

Configurações típicas do sistema para temperaturas acima e abaixo da temperatura do máximo do calor específico são mostradas na Figura 5.6. A princípio, identificam-se duas fases distintas: a baixas temperaturas, o sistema ordena-se de forma a maximizar a magnetização e quase todos os vértices encontram-se no estado de menor energia; a

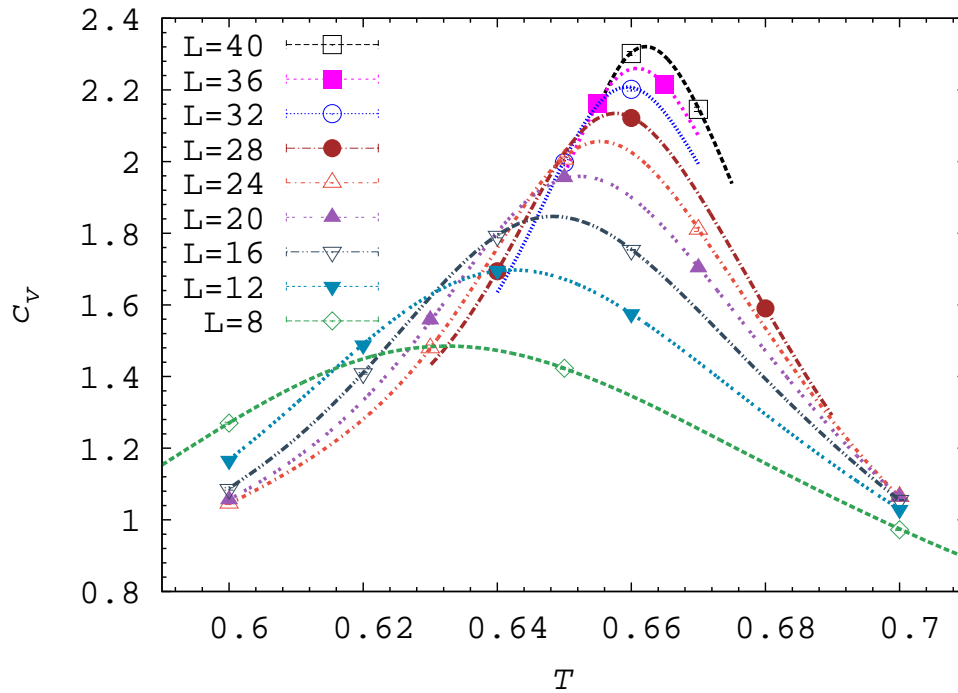


Figura 5.4: Calor específico em função da temperatura para diferentes tamanhos da rede PBC. O pico da curva torna-se mais pronunciado e ocorre a uma temperatura mais alta com o aumento do tamanho da rede.

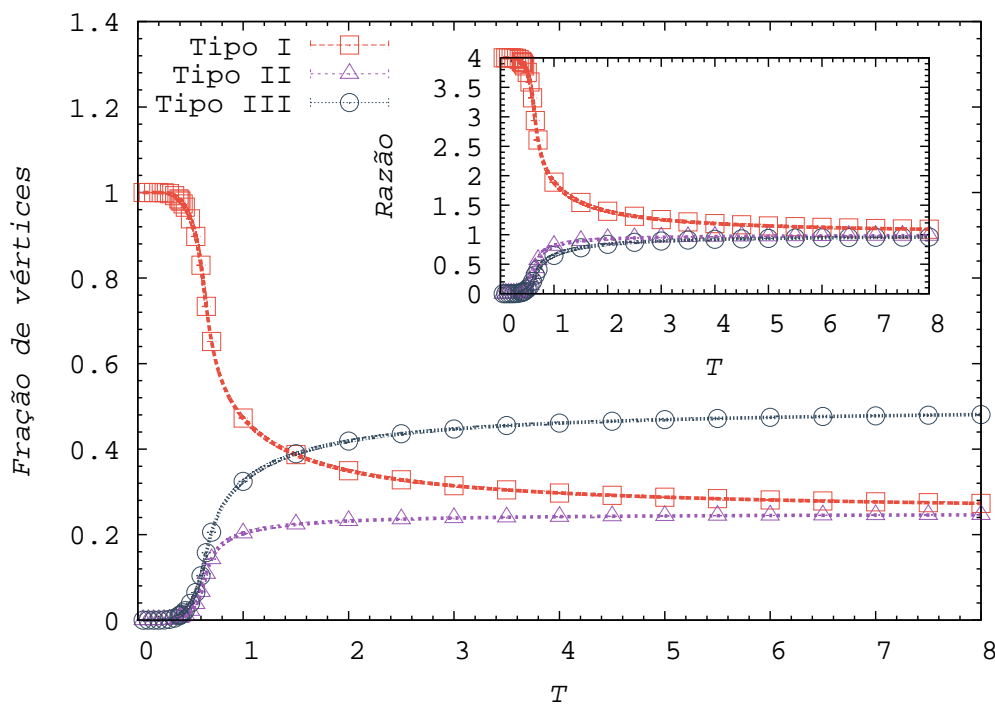


Figura 5.5: Variação da fração de vértices correspondentes a cada tipo com a temperatura, com $L=8$. No *inset*, plotamos a razão entre este valor e o valor que seria esperado caso as configurações fossem completamente aleatórias. A baixa temperatura, os vértices do tipo I predominam. À medida que a temperatura aumenta, as frações de vértices convergem para os valores correspondentes à multiplicidade de cada um dos tipos, sendo que os vértices do tipo III apresentam uma convergência um pouco mais lenta que os do tipo II, devido à sua maior energia.

temperaturas altas, não se observa uma direção preferencial de magnetização dos spins, e a aparição de vértices mais energéticos torna-se frequente.

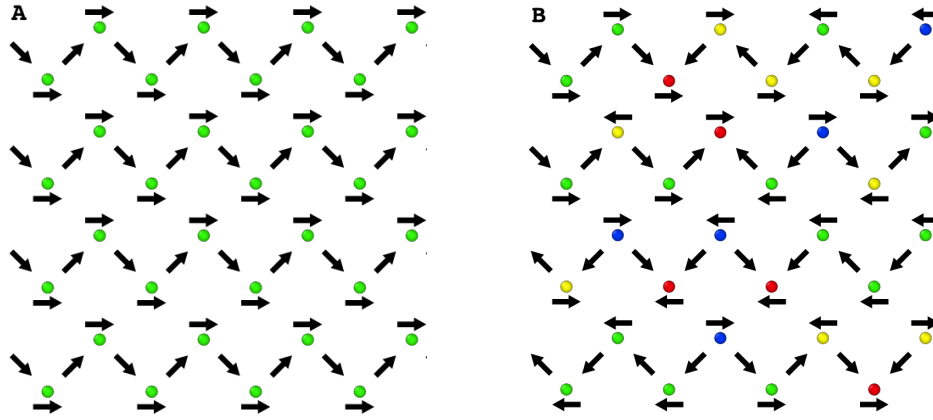


Figura 5.6: Configurações típicas da rede PBC para baixas temperaturas (A) e para altas temperaturas (B). A baixas temperaturas, o estado fundamental predomina, de modo que temos uma fase ordenada e maximamente magnetizada. Para temperatura altas, verifica-se uma fase paramagnética, caracterizada pela presença de vértices excitados e por baixos valores de magnetização total.

No intuito de determinar se estamos diante de uma transição de fase propriamente dita, procedemos a uma análise de escala de tamanho finito, bem como aplicamos o método dos zeros da distribuição de probabilidades da energia, cujos resultados passamos a apresentar.

5.1.1 Análise de escala de tamanho finito

A primeira informação que obtivemos a partir dos dados das simulações diz respeito ao cálculo do expoente α , referente à divergência do calor específico. Como observado na Figura 5.4, o ponto de máximo da curva do calor específico atinge valores mais altos para sistemas maiores. A equação (3.23) estabelece a relação de escala para o calor específico em termos da razão entre expoentes α/ν . Podemos ver que valores positivos de α/ν indicam um calor específico divergente no limite termodinâmico, enquanto valores negativos indicam que o calor específico converge para um valor finito. Convencionalmente, uma divergência logarítmica do calor específico, na forma $c_{v,max}^L = a \ln L + b$, é identificada com o expoente crítico $\alpha = 0$. Na Figura 5.7, foram tentados um ajuste de divergência logarítmica e um ajuste por lei de potência. A divergência logarítmica forneceu um melhor ajuste, o que é evidenciado pelo menor valor de χ^2 : 7.5×10^{-6} , contra 1.1×10^{-4} para a lei de potência. Os dados sugerem, portanto, o expoente $\alpha = 0$, que é compatível com a classe de universalidade do modelo de Ising bidimensional.

Uma divergência logarítmica do calor específico também foi observada para o ASI de rede quadrada [38]. Como os dois sistemas se diferenciam apenas pela posição dos spins na rede, é de se esperar que eles pertençam à mesma classe de universalidade, hipótese que é reforçada por este resultado.

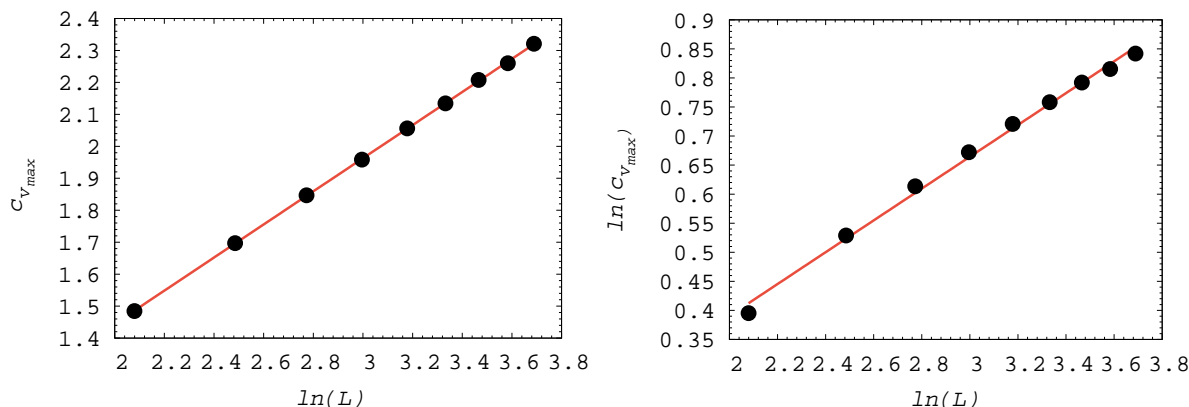


Figura 5.7: Ajuste linear para o máximo do calor específico em função do tamanho da rede. O gráfico à esquerda corresponde ao ajuste de uma divergência logarítmica do calor específico. Já o gráfico à direita corresponde a uma lei de potência com expoente $\alpha/\nu = 0.274(7)$, dado pela inclinação da reta. A divergência logarítmica fornece um melhor ajuste, sugerindo um expoente crítico $\alpha = 0$.

A partir da temperatura do pico do calor específico para diferentes tamanhos de rede, podemos ainda estimar a temperatura crítica do sistema no limite termodinâmico, como tradicionalmente é feito, por meio da equação (3.24). Para isso, no entanto, é preciso conhecer o expoente crítico ν . Esse expoente pode ser obtido pela análise dos zeros da função partição. Assim, antes de estimar a temperatura crítica, procedemos à análise dos zeros EPD.

Para cada tamanho de rede, realizamos o procedimento iterativo descrito na Seção 3.4. A Figura 5.8 ilustra esse procedimento, efetuado a partir de uma das simulações da rede de tamanho $L = 20$. Ao final do processo, obtivemos uma temperatura crítica $T_c(L) = 0.6502D/k_B$. A essa temperatura, observa-se, no mapa de zeros, a existência de um ponto com parte real próxima de 1 cuja parte imaginária é significativamente menor que a dos demais pontos (circulado em azul na Figura 5.8-C), indicando a existência de uma transição de fase.

Mediante a equação (3.33), podemos utilizar a dependência da parte imaginária do zero dominante x_c com o tamanho da rede L para estimar o expoente crítico ν . A Figura 5.9 mostra a regressão linear obtida no gráfico do logaritmo da parte imaginária de x_c pelo logaritmo do tamanho da rede. A inclinação da reta corresponde a $-1/\nu$.

O ajuste linear fornece o valor $1/\nu = 0.999(5)$, o que resulta em um expoente crítico $\nu = 1.001(5)$. Este valor é muito próximo do expoente crítico $\nu = 1$ do modelo de Ising bidimensional, reforçando a hipótese de que o modelo aqui estudado pertence a essa classe de universalidade, assim como já foi observado em outros modelos de gelos de spin artificiais [52].

A concordância dos expoentes críticos com a classe de universalidade do modelo de Ising 2D vai de encontro à hipótese de uma possível redução de dimensionalidade no modelo proposto. Aparentemente, o fato de as excitações dos vértices estarem restritas

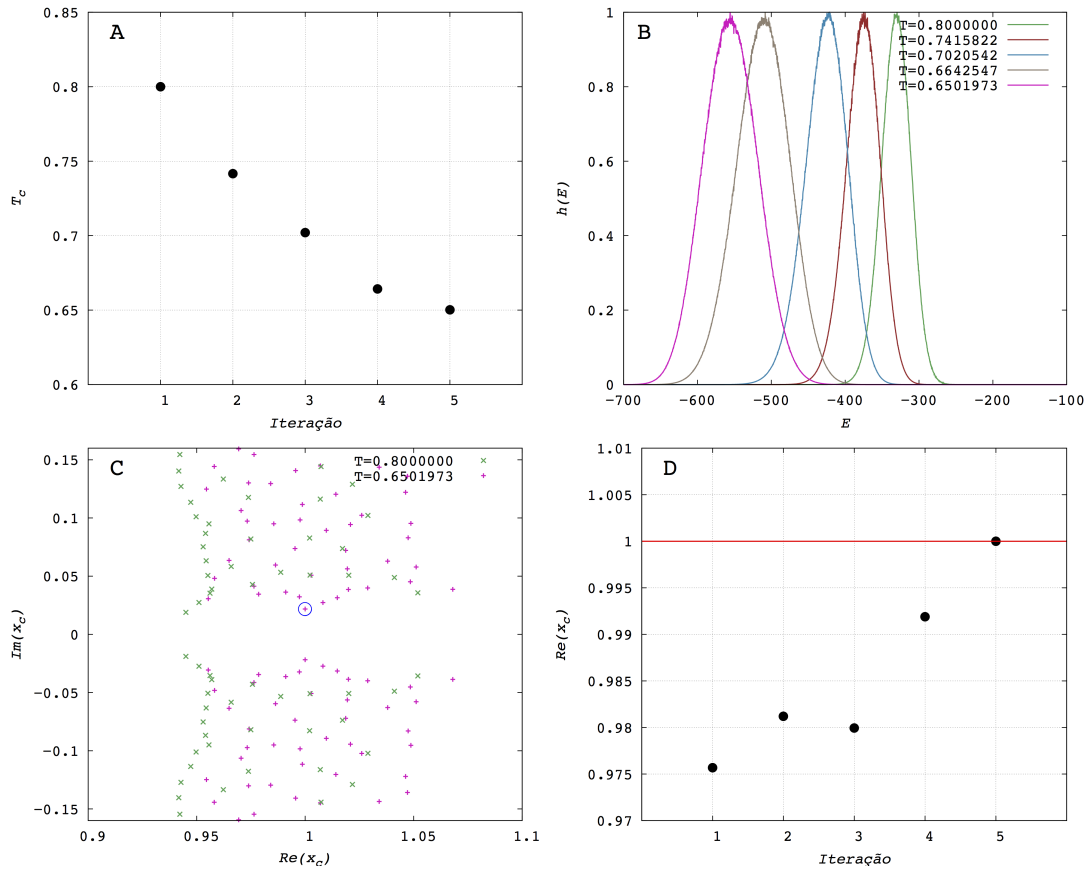


Figura 5.8: Processo de convergência do método de zeros EPD, para uma rede PBC com $L = 20$. Primeiramente, escolhemos, de forma arbitrária, uma temperatura $T_0 = 0.8D/k_B$ (A), e construímos um histograma por meio do método de histogramas múltiplos (B), utilizando um tamanho de $\text{bin } \Delta E = 0.25D$. Resolvendo o polinômio e plotando o mapa de zeros (C), escolhemos o zero mais próximo do ponto $(1, 0)$. A parte real desse zero dominante (D) é, então, usada para estimar a temperatura crítica. Em seguida, repetimos o procedimento, atribuindo a T_0 o valor de $T_c(L)$ encontrado na iteração anterior, até que o valor da parte real do zero dominante esteja suficientemente próximo de 1, indicando a convergência do algoritmo. Neste caso, encontramos $T_c(L) = 0.6502D/k_B$.

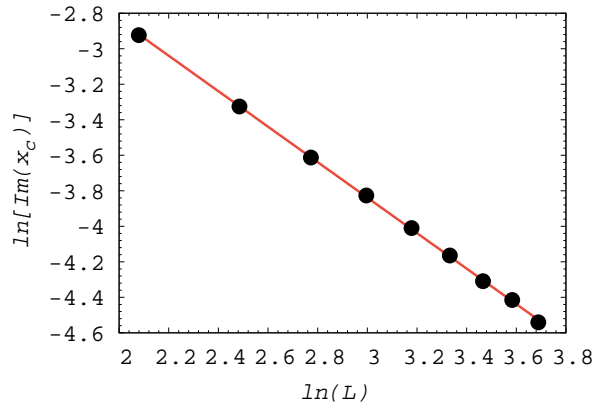


Figura 5.9: Logaritmo da parte imaginária do zero dominante em função do logaritmo do tamanho da rede. A inclinação da reta permite calcular o expoente ν .

a percorrer um caminho unidimensional na rede não afeta o comportamento crítico do sistema, que continua possuindo características claramente bidimensionais.

De posse do valor de ν , podemos calcular a temperatura crítica T_c no limite termodinâmico, por meio da equação (3.24). Isto pode ser feito com os valores de $T_c(L)$ obtidos tanto por meio dos zeros EPD quanto a partir da temperatura do pico do calor específico. No primeiro caso, a utilização do expoente $\nu = 1$ fornece um bom ajuste linear no gráfico de $T_c(L)$ por $L^{-1/\nu}$, como evidenciado na Figura 5.10. O intercepto do gráfico com o eixo y sugere uma temperatura crítica $T_c = 0.6696(6)D/k_B$.

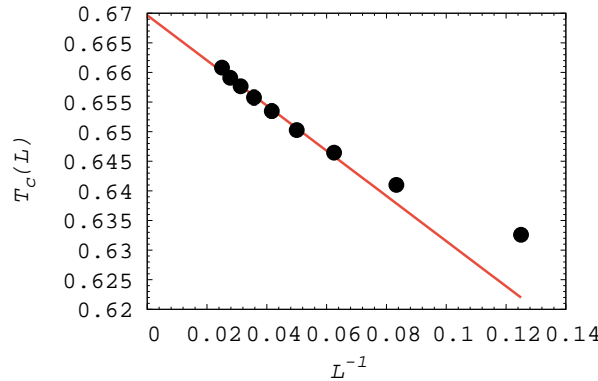


Figura 5.10: Temperatura crítica obtida pelo método de zeros EPD em função do tamanho da rede à potência $-1/\nu = -1$. Na regressão linear, foram desconsiderados os dois menores tamanhos de rede: $L = 12$ e $L = 8$. O intercepto da reta com o eixo y fornece uma estimativa da temperatura crítica no limite termodinâmico.

Para o ASI de rede quadrada, Silva *et al.* observaram um pico no calor específico a uma temperatura $T_c \approx 7.2D/k_B$ para tamanhos de rede até 9800 spins [38]. Apesar de esse trabalho não ter empreendido uma análise de escala de tamanho finito para a temperatura, esse valor de T_c pode ser tomado como uma aproximação, ainda que bastante imprecisa, da temperatura crítica no limite termodinâmico, uma vez que os autores observaram uma variação bem pequena da posição do pico para diferentes tamanhos de rede. Para comparar este resultado com a temperatura crítica do nosso modelo, devemos notar que a constante D foi definida de forma diferente nos dois casos. Em nosso modelo, utilizamos a definição $D = \frac{\mu_0 \mu^2}{4\pi l^3}$, em que l foi definido no Capítulo 4. Já em [38], $D = \frac{\mu_0 \mu^2}{4\pi a^3}$, em que a é a distância entre dois spins adjacentes de mesma orientação. Isto significa que, neste caso, dois spins primeiros vizinhos estão separados por uma distância de $a/\sqrt{2}$. Em nosso modelo, o par de spins correspondente ao par de primeiros vizinhos da rede quadrada é constituído pelos spins diagonais de uma célula unitária, que não foram modificados pelo novo arranjo proposto. Tais spins estão separados por uma distância de $(1 + \sqrt{2}/2)l$. Assim, para que os dois modelos tivessem a mesma escala, deveríamos ter $l = a/(1 + \sqrt{2})$ e $D = (1 + \sqrt{2})^3 D'$, em que chamamos D' a constante utilizada em [38] e D a constante empregada no presente trabalho. Isto resultaria em uma temperatura crítica $T_c = 0.6696(6)D/k_B = 9.42(1)D'/k_B$, que é maior que a temperatura crítica da rede quadrada.

Para obter uma nova estimativa da temperatura crítica e verificar a consistência de nossos resultados, procedemos à análise de FSS também para a temperatura do pico do

calor específico. Neste caso, o ajuste linear com o expoente $\nu = 1$ fornece uma temperatura crítica $T_c = 0.6709(4)D/k_B$ (ver Figura 5.11), bastante próxima do resultado obtido com o método dos zeros.

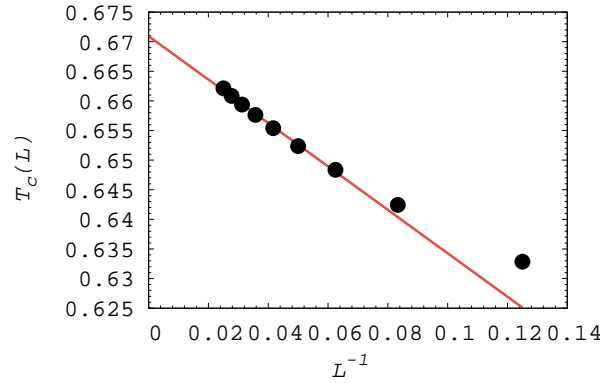


Figura 5.11: Temperatura do pico do calor específico em função do tamanho da rede à potência $-1/\nu = -1$. Na regressão linear, foram desconsiderados os dois menores tamanhos de rede: $L = 12$ e $L = 8$. O intercepto da reta com o eixo y fornece uma estimativa da temperatura crítica no limite termodinâmico.

É preciso observar, entretanto, que os valores de ν e T_c encontrados não fornecem um colapso ideal das curvas de calor específico para grandes intervalos de temperatura. Procurando os valores de ν e T_c que fornecem o melhor ajuste linear possível para a temperatura do pico do calor específico, encontramos $1/\nu = 0.59(1)$ e $T_c = 0.6813(1)D/k_B$ (ver Figura 5.12), valores bem diferentes dos obtidos anteriormente. Utilizando estes valores, observamos um ótimo colapso das curvas de calor específico em todo o intervalo de temperatura considerado, como mostra a Figura 5.13.

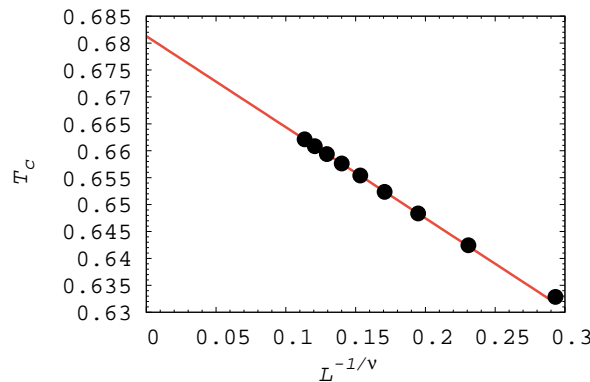


Figura 5.12: Melhor ajuste linear obtido para a temperatura do pico do calor específico por meio da variação dos parâmetros ν e T_c , desprezando-se as redes de tamanho $L = 8$ e $L = 12$.

Este valor obtido para o expoente ν , entretanto, é incompatível com o expoente α encontrado, segundo a conhecida relação de escala $2\nu = 2 - \alpha$. De fato, observamos que o colapso das curvas utilizando o expoente ν da classe de universalidade do modelo de Ising torna-se consideravelmente melhor para os maiores tamanhos de rede, indicando que correções de escala devem desempenhar um papel importante nesse sistema. Esse melhor

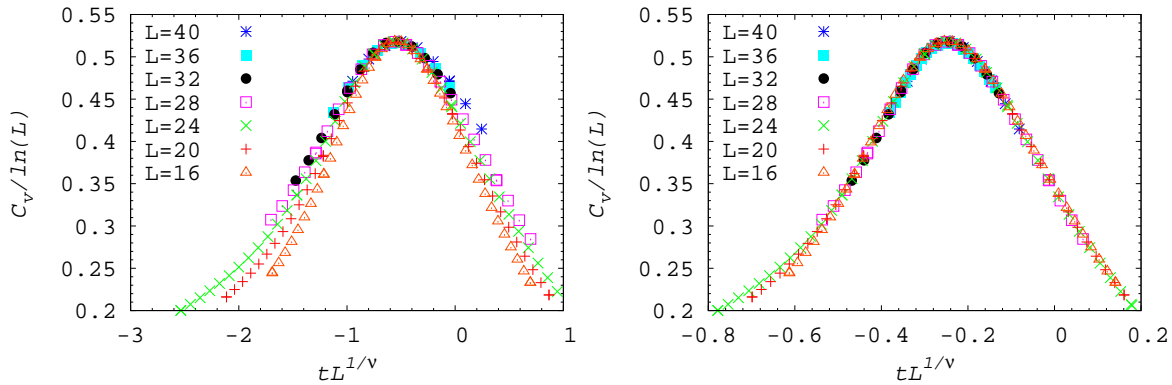


Figura 5.13: Comparação entre o colapso das curvas de calor específico quando são utilizados os valores de ν e T_c obtidos pelo métodos de zeros (gráfico à esquerda) e pelo melhor ajuste linear da temperatura do pico (à direita). Todos os pontos mostrados resultam da repesagem pelo método de histogramas múltiplos.

ajuste para redes maiores pode ser observado também nas figuras 5.10 e 5.11. Somando-se a isto o fato de o expoente obtido com o método dos zeros advir diretamente da função partição, todos os ingredientes corroboram a hipótese de uma transição de fase pertencente à classe de universalidade do modelo de Ising bidimensional.

5.2 Condições de contorno abertas

Se por um lado a investigação da classe de universalidade à qual pertence o modelo é relevante do ponto de vista teórico, por outro o número limitado de nanoilhas presentes nas realizações experimentais dos ASI faz com que o limite termodinâmico não constitua uma boa aproximação do comportamento verdadeiro do sistema, ensejando o estudo computacional de redes com condições de contorno abertas.

Para essas condições de contorno, foram simuladas redes de tamanho até $L = 28$, equivalente a $N = 3036$ spins. O fato de não termos estudado redes maiores decorre da maior complexidade do comportamento apresentado por esse sistema, o que exigiu a realização de um número maior de passos de Monte Carlo com inversão de múltiplos spins em nossas simulações, uma vez que as barreiras energéticas existentes entre mínimos locais de energia livre dificilmente são transpostas apenas com a realização de passos com inversões simples de spins.

O aspecto finito da rede e a influência de efeitos de borda torna a termodinâmica do sistema bastante mais interessante. Qualitativamente, observamos uma diferença significativa na dependência da magnetização e do calor específico com a temperatura em comparação com a rede PBC, como pode ser visto na Figura 5.14. Este comportamento distinto da rede OBC, evidenciado pela simulação com $L = 8$, motivou-nos a abranger um intervalo maior de temperaturas nas simulações subsequentes, demandando um tempo computacional ainda mais longo.

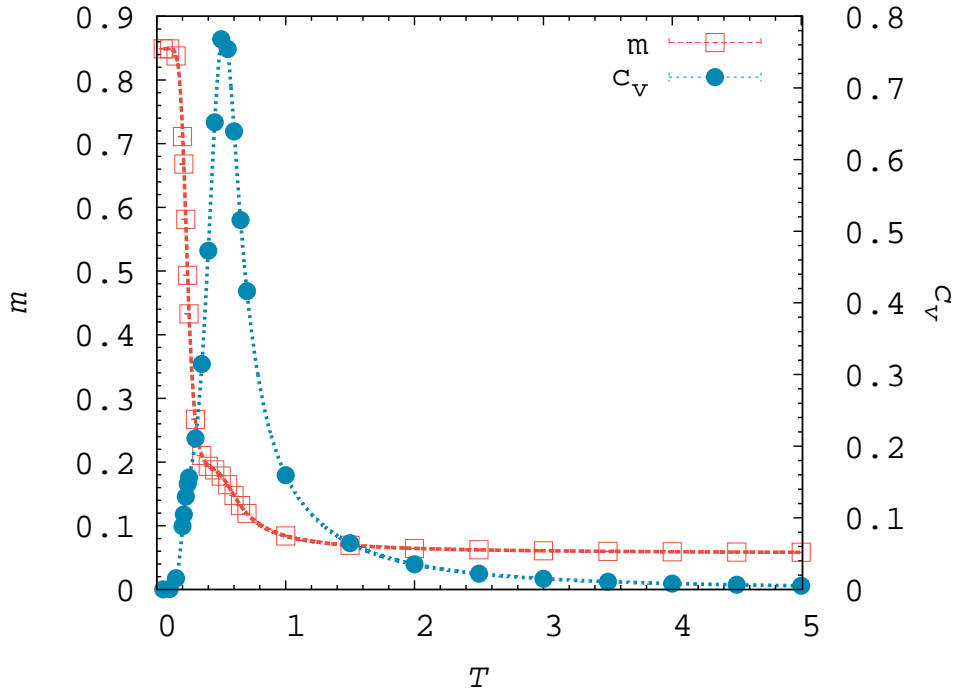


Figura 5.14: Magnetização por spin e calor específico em função da temperatura para a rede OBC, com $L = 8$. Além de um pico semelhante ao encontrado na rede PBC, a curva do calor específico da rede com condições de contorno abertas apresenta ainda um ponto de inflexão a uma temperatura $T < 0.5D/k_B$. Outro ponto de inflexão inexistente na rede PBC é observado na curva de magnetização.

Concentrando nossa análise no intervalo de temperaturas $T < 0.7D/k_B$, podemos ver que, com condições de contorno abertas, a magnetização de saturação somente é atingida a temperaturas bem mais baixas ($T < 0.3D/k_B$ para os tamanhos de rede estudados) do que na rede PBC, e um platô de magnetização aparece no intervalo de temperaturas $0.3D/k_B \lesssim T \lesssim 0.55D/k_B$. Para redes maiores, a magnetização chega a apresentar um comportamento ligeiramente crescente com a temperatura nessa faixa. A temperaturas mais altas, o comportamento decrescente da magnetização é retomado (ver Figura 5.15).

No que diz respeito ao calor específico, além do pico à temperatura $T \approx 0.6D/k_B$, semelhante ao da rede PBC, observamos também um máximo local à temperatura $T \approx 0.3D/k_B$, que se torna mais definido com o aumento do tamanho da rede (Figura 5.16), ainda que seu valor aparentemente tenda a diminuir. Em redes menores, este máximo local sequer se configura, sendo observado apenas um ponto de inflexão na curva próximo a essa temperatura, como já havia sido notado na Figura 5.14 para a rede $L = 8$.

Para investigar a possível existência de uma nova pseudo-transição de fase, não encontrada na rede PBC, observamos o comportamento dos zeros EPD a baixas temperaturas. A Figura 5.17 mostra dois mapas de zeros, um obtido com condições de contorno abertas e o outro com condições de contorno periódicas, ambos à mesma temperatura $\beta_0 = 1/k_B T_0 = 0.27^{-1} D^{-1}$ e com o mesmo tamanho de rede $L = 8$. Podemos perceber que, para os dois tipos de condições de contorno, o mapa de zeros apresenta um zero próximo

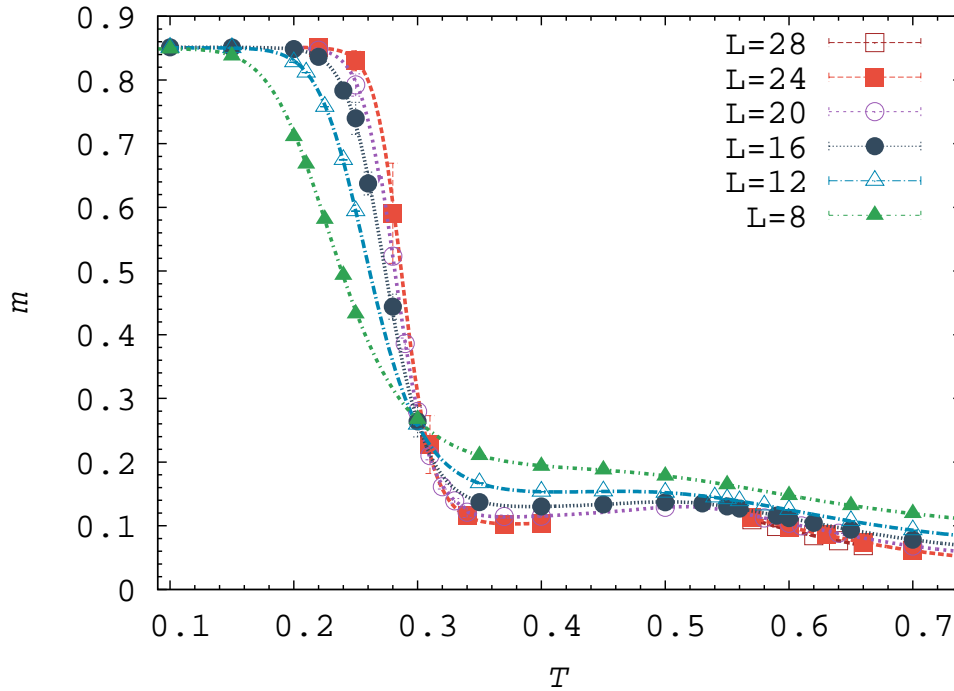


Figura 5.15: Magnetização por spin em função da temperatura para diferentes tamanhos da rede OBC. Aqui, a curva não é mais monotonicamente decrescente como na rede PBC, uma vez que um platô de magnetização aparece no intervalo $0.3D/k_B \lesssim T \lesssim 0.55D/k_B$.

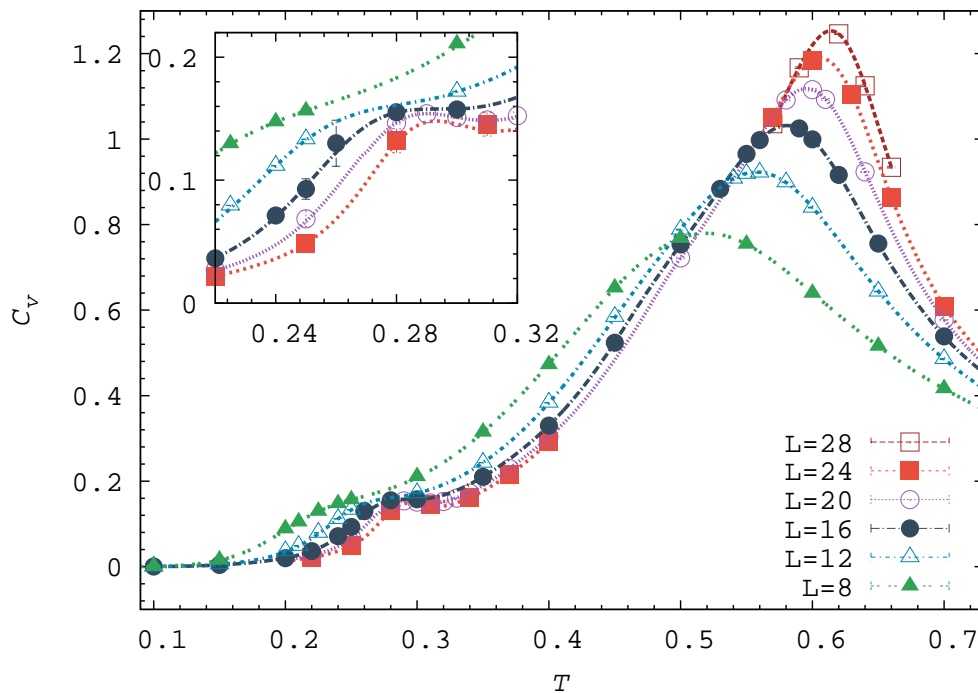


Figura 5.16: Calor específico em função da temperatura para diferentes tamanhos da rede OBC. Além do máximo global, há ainda um máximo local a baixa temperatura (mostrado no *inset*) que se torna mais definido com o aumento do tamanho do sistema, ao mesmo tempo em que seu valor decresce. Já a temperatura em que se observa esse máximo local aumenta com o tamanho da rede.

ao eixo real positivo com parte real maior que 1. Entretanto, o mapa de zeros da rede OBC apresenta um outro zero que se destaca dos demais, com parte real menor que 1 e parte

imaginária pequena e decrescente com o tamanho do sistema (mais detalhes na Seção 5.2.1), sugerindo que a rede OBC possua não apenas um, mas dois zeros dominantes.

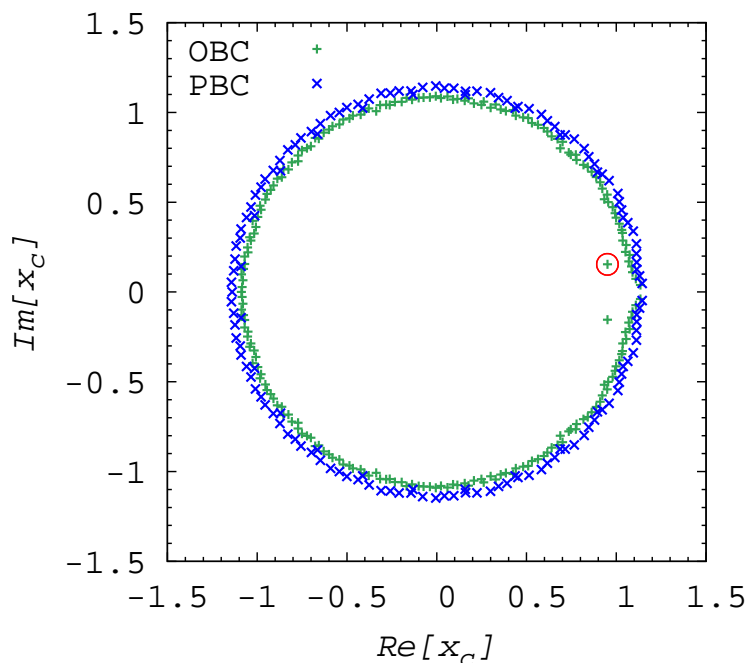


Figura 5.17: Comparação entre os mapas de zeros das redes OBC e PBC, ambos com $L = 8$ e $T_0 = 0.27D/k_B$. Para condições de contorno abertas, um novo zero dominante, destacado no gráfico, indica a pseudo-transição de fase de baixa temperatura.

Escolhendo um valor de T_0 pequeno e efetuando o processo iterativo descrito na Seção 3.4, observamos uma convergência do algoritmo para um valor de T_{c1} próximo à temperatura do primeiro pico do calor específico. A Figura 5.18 ilustra esse processo para uma rede OBC com $L = 20$.

Para valores iniciais de T_0 pouco maiores que T_{c1} , ainda temos como zero mais próximo do ponto $(1, 0)$ o zero que leva para a transição de baixa temperatura, destacado em azul na Figura 5.19. Aumentando, porém, a temperatura inicial T_0 , o zero escolhido como dominante passa a ser o zero que leva para a transição de temperatura superior, circulado em verde na Figura 5.19.

Quando nos aproximamos da temperatura do segundo pico do calor específico, no entanto, observa-se uma linha de zeros praticamente paralela ao eixo real positivo, de modo que o zero dominante não pode mais ser facilmente identificado, conforme mostrado na Figura 5.20. Isto ocorre para todos os tamanhos de rede estudados. Mesmo após tentarmos aumentar o número de passos de Monte Carlo realizados ($N_{MCS} \sim 10^8$) para redes menores, como forma de resolver possíveis problemas de amostragem, o aspecto do mapa de zeros permaneceu o mesmo. Acreditamos que o caráter finito do sistema, que o impossibilita de exibir uma transição de fase propriamente dita, seja o responsável por ocasionar este padrão no mapa de zeros, pois é de se esperar que, quanto menor o sistema, menos bem definida esteja a transição de fase.

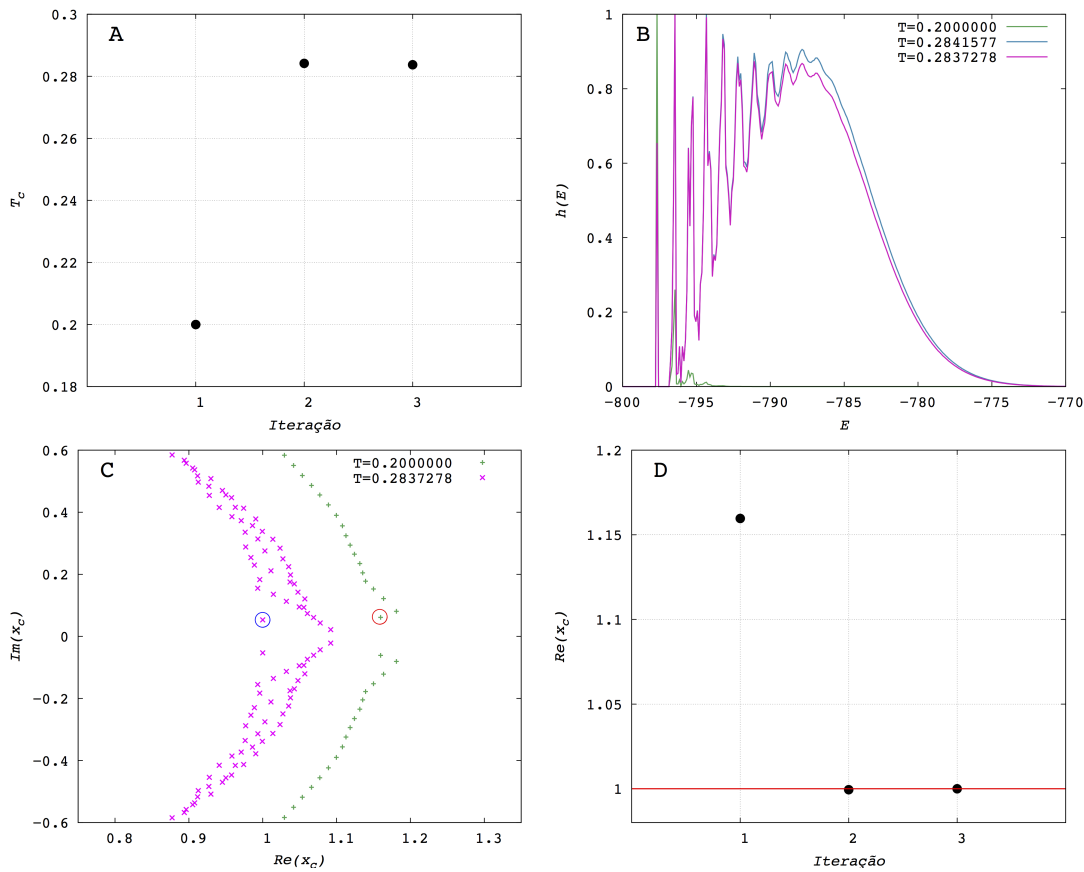


Figura 5.18: Processo de convergência do método de zeros EPD, para uma rede OBC com $L = 20$. Primeiramente, escolhemos, de forma arbitrária, uma temperatura $T_0 = 0.2D/k_B$ (A), e construímos um histograma por meio do método de histogramas múltiplos (B), utilizando um tamanho de $\text{bin } \Delta E = 0.1D$. Resolvendo o polinômio e plotando o mapa de zeros (C), escolhemos o zero mais próximo do ponto (1,0). A parte real desse zero dominante (D) é, então, usada para estimar a temperatura crítica. Em seguida, repetimos o procedimento, atribuindo a T_0 o valor de $T_c(L)$ encontrado na iteração anterior, até que o valor da parte real do zero dominante esteja suficientemente próximo de 1, indicando a convergência do algoritmo. Neste caso, encontramos $T_{c_1}(L) = 0.2837D/k_B$.

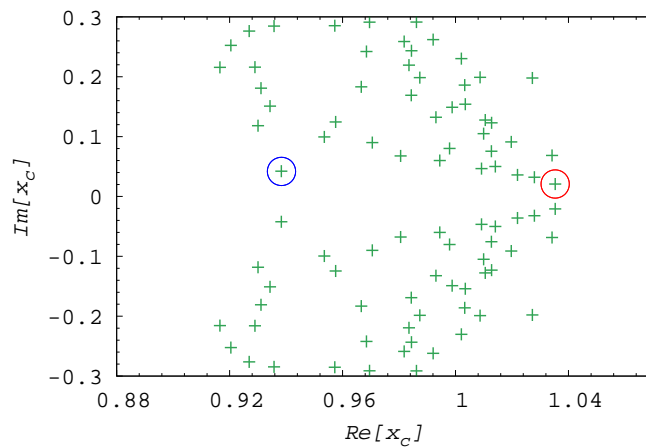


Figura 5.19: Mapa de zeros próximo ao ponto (1,0) do plano complexo, para uma rede OBC com $L = 20$, à temperatura $T = 0.36D/k_B$. O zero circulado em azul indica a transição de temperatura inferior, enquanto o zero destacado em vermelho leva-nos para perto da transição de temperatura mais alta.

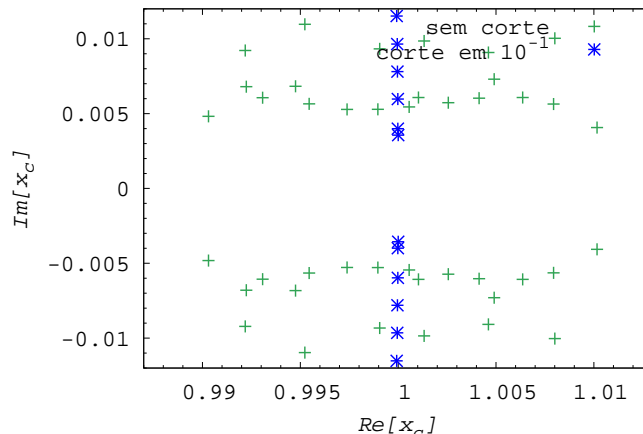


Figura 5.20: Comparação entre os mapas de zeros obtidos com e sem corte nos histogramas, na região próxima ao ponto $(1, 0)$, com $L = 28$ e $T = 0.624D/k_B$. Quando o corte é realizado para valores relativos menores que 0.1, o zero dominante torna-se facilmente identificável. Entretanto, o procedimento acarreta certa perda de informações e pode reduzir a confiabilidade da estimativa da temperatura crítica.

Conforme discutido na Seção 3.4, o método dos zeros EPD permite que filtremos os zeros mais relevantes por meio do descarte dos menores valores presentes nos histogramas, pois se espera que os estados menos acessados a uma temperatura próxima à transição sejam irrelevantes para o comportamento crítico. Assim, desconsiderando todos os valores do histograma inferiores a 10^{-1} , em que 1 corresponde ao valor de energia mais acessado, podemos filtrar os zeros mais relevantes e estimar a temperatura crítica para cada tamanho de rede. Para a rede $L = 28$, mostrada na Figura 5.20, este valor foi calculado em $T_{c_2}(L) \approx 0.62D/k_B$.

É inegável, entretanto, que esse procedimento acarreta, necessariamente, uma perda de informações e uma diminuição da precisão do método. O comportamento aparentemente divergente do calor específico, porém, reforça a suspeita da existência dessa segunda pseudo-transição na rede OBC, conforme discutiremos na Seção 5.2.1.

A tabela 5.1 apresenta as temperaturas das pseudo-transições de fase encontradas pelo método dos zeros EPD para diferentes tamanhos de rede.

Tabela 5.1: Temperatura das pseudo-transições de fase para diferentes tamanhos de rede.

L	$T_{c_1}(D/k_B)$	$T_{c_2}(D/k_B)$
8	0.2439(1)	0.569(1)
12	0.2645(1)	0.588(1)
16	0.2765(7)	0.600(2)
20	0.2843(5)	0.611(2)
24	0.2884(4)	0.620(3)
28	0.293(2)	0.622(2)

A existência de duas pseudo-transições leva-nos a questionar quais microestados do sistema são tipicamente acessados em cada uma das três faixas de temperatura, isto é,

quais fases estão presentes no sistema. Para $T < T_{c1}$, o estado fundamental predomina, e poucas excitações são encontradas, o que resulta em altos valores de magnetização. A fase paramagnética é novamente observada a $T > T_{c2}$. É no intervalo de temperaturas intermediárias ($T_{c1} < T < T_{c2}$), porém, que o comportamento da rede OBC torna-se qualitativamente diferente. As configurações tipicamente encontradas nessa fase intermediária contêm partes significativas da rede com magnetização em direções opostas, formando uma barreira de domínio horizontal que, preferencialmente, divide a rede pela metade. Isso explica os baixos valores de magnetização observados nessa fase, que praticamente não variam com a temperatura. Algumas excitações são encontradas nessa fase, mas há um claro predomínio de vértices do tipo I. A Figura 5.21 exemplifica as configurações típicas de cada fase.

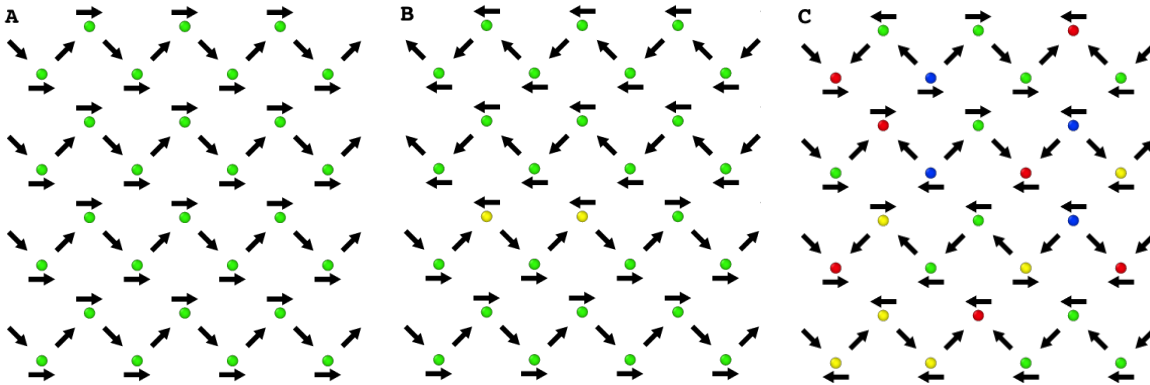


Figura 5.21: Configurações típicas da rede OBC para diferentes fases. (A) A fase observada a baixas temperaturas caracteriza-se pela completa ordenação dos spins e pelos altos valores de magnetização total. (B) A fase de temperaturas intermediárias também é ordenada, porém com a formação de uma barreira de domínio que resulta em baixos valores de magnetização total. (C) A temperaturas altas, observa-se novamente uma fase paramagnética.

É interessante destacar que existe uma barreira de energia bastante significativa entre as configurações mostradas nas Figuras 5.21-A e 5.21-B. De fato, ao realizarmos o procedimento de *annealing* somente com passos de Monte Carlo com inversão simples de spins, não raramente a amostra era aprisionada em um estado metaestável e, mesmo a baixas temperaturas, a configuração típica da fase intermediária prevalecia. Assim, em uma possível realização experimental de um gelo de spin regravável com nanoilhas suscetíveis a flutuações térmicas, é de se esperar que, na ausência de campo magnético, esse estado metaestável seja obtido com maior facilidade do que o estado fundamental em um processo de resfriamento da amostra. Somente com a introdução de passos de Monte Carlo com inversão de múltiplos spins (ver Figura 4.3), e principalmente com o passo múltiplo que inverte metade da rede de uma só vez (Figura 4.3-F), é que pudemos obter o estado fundamental da rede com maior facilidade no procedimento de *annealing*.

O comportamento qualitativamente diferente encontrado na rede OBC é evidenciado também pela dependência da fração dos tipos de vértices com a temperatura, conforme

mostrado na Figura 5.22. Ao contrário do que ocorre na rede PBC, existe aqui uma faixa de temperatura na qual os vértices do tipo II são mais numerosos do que os vértices do tipo III. Com $L = 8$, essa faixa está entre $T \approx 0.12D/k_B$ e $T \approx 0.43D/k_B$. O interessante é que a transição da fase maximamente magnetizada para a fase intermediária parece ocorrer exatamente em um ponto de inflexão da curva referente à população de vértices do tipo II. Já a transição entre a fase intermediária e a fase paramagnética coincide aproximadamente com a maior inclinação das curvas referentes às populações dos vértices dos tipos II e III. A fase intermediária caracteriza-se por um certo favorecimento das excitações do tipo II em relação às do tipo III. O comportamento descrito se repete, em termos qualitativos, para os demais tamanhos de rede simulados, porém as faixas de temperatura em que esses aspectos são observados variam com o tamanho do sistema.

Ainda que a fase intermediária apresente valores comparativamente maiores para a fração de vértices do tipo II em relação aos vértices do tipo III, os vértices do tipo I ainda correspondem a, no mínimo, 70% do número total de vértices da rede. Este fato leva-nos a descartar a existência de uma fase de gelo no ASI regrável, como a que foi observada, por exemplo, em [39] e [28]. A fase de gelo é caracterizada pela coexistência de vértices com neutralidade de carga magnética, mas com topologias distintas, em proporções similares. Nesse regime, as frações de cada tipo de vértice são determinadas predominantemente pela regra do gelo, de modo que os vértices que obedecem tal regra são favorecidos em detrimento dos demais. No caso do modelo aqui estudado, a fase de gelo implicaria que vértices dos tipos I e II fossem encontrados com probabilidades semelhantes, o que não foi observado em nossas simulações.

A inexistência de uma fase de gelo em nosso modelo pode ser explicada pelo fato de que tal fase resulta da degenerescência que caracteriza os gelos de spin. No trabalho de Möller e Moessner [28], por exemplo, a fase de gelo foi obtida pela introdução de uma diferença de altura entre as nanoilhas horizontais e verticais de um ASI quadrado, que devolveu ao sistema a degenerescência observada nos gelos de spin tridimensionais, fazendo com que todos os vértices que obedecem à regra do gelo tivessem energias muito próximas. Em nosso modelo, porém, a frustração presente no ASI de rede quadrada foi removida pelo novo arranjo geométrico, uma vez que, nos vértices do tipo I, todos os spins têm suas interações satisfeitas. Com isso, temos uma grande diferença de energia entre os vértices dos tipos I e II. Assim, os vértices do tipo II somente se tornam quase tão numerosos quanto os do tipo I na fase paramagnética.

Os resultados obtidos para a rede OBC parecem, a princípio, difíceis de serem reconciliados com os resultados para condições de contorno periódicas. De fato, no limite termodinâmico as condições de contorno utilizadas não podem influenciar o comportamento do sistema. Sendo assim, somos levados a acreditar que, nesse limite, a fase intermediária observada nas redes finitas não persista. Para que isso ocorra, é necessário que haja uma

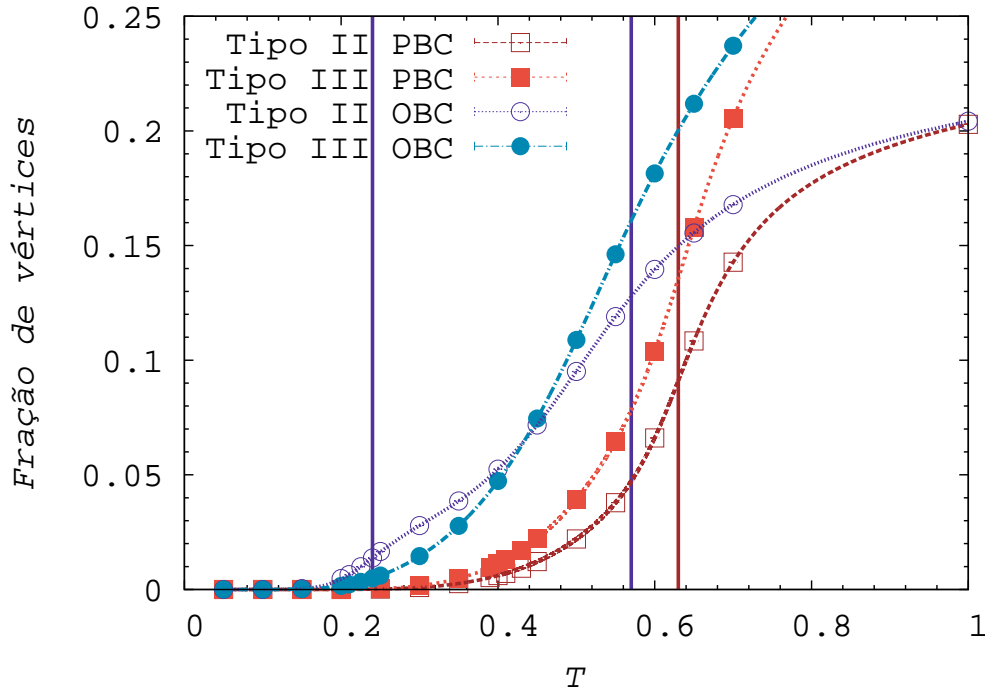


Figura 5.22: Comparação entre as frações de vértices dos tipos II e III encontradas para as redes OBC e PBC com $L = 8$. Linhas verticais azuis foram traçadas às temperaturas de transição da rede OBC, enquanto a linha vertical marrom indica a temperatura de transição da rede PBC. Na rede com condições de contorno abertas, existe uma faixa de temperatura em que os vértices do tipo II são mais numerosos que os do tipo III, o que não é observado na rede periódica. O aumento do número de vértices do tipo II na rede OBC coincide com a transição de baixa temperatura, de modo que a fase intermediária tende a privilegiar os vértices desse tipo. Já na fase paramagnética, as frações de vértices tendem aos valores correspondentes a suas respectivas multiplicidades: 0.25 para o tipo II e 0.5 para o tipo III.

supressão da transição de fase de baixa temperatura, ou ainda que as duas transições observadas na rede OBC venham a coalescer no limite termodinâmico. A forma pela qual isso aconteceria, entretanto, não pode ser inferida dos resultados do presente estudo, uma vez que o tamanho reduzido das redes simuladas nos mantém sempre muito longe desse limite. Por outro lado, o número de nanoilhas contidas nas realizações experimentais dos ASI não é muito distante do utilizado neste estudo, de modo que o comportamento do modelo no limite termodinâmico torna-se menos relevante, do ponto de vista experimental, do que os resultados obtidos para as redes finitas.

5.2.1 Análise de escala de tamanho finito

Certamente, a utilização de condições de contorno periódicas é capaz de oferecer um panorama mais acurado do comportamento do modelo no limite termodinâmico. Redes com condições de contorno abertas são, em geral, bastante influenciadas por efeitos de borda e podem apresentar características que não subsistem quando o tamanho do sistema tende ao infinito. Ainda assim, utilizamos os dados obtidos por meio do método dos zeros EPD para proceder a uma análise de escala de tamanho finito da rede OBC, a fim de verificar se a pseudo-transição de baixa temperatura é um fenômeno de tamanho finito.

Ao contrário do que se poderia esperar para uma pseudo-transição de fase que não é encontrada na rede PBC, a parte imaginária do zero dominante referente à transição de baixa temperatura efetivamente diminui com o tamanho do sistema segundo a mesma lei de escala dada pela equação (3.33). O expoente ν nesse caso foi calculado em $\nu = 0.88(2)$, e fornece um ajuste satisfatório quando utilizado para linearizar as temperaturas pseudo-críticas $T_{c_1}(L)$ (ver Figura 5.23), resultando em uma temperatura crítica $T_{c_1} = 0.3076(8)D/k_B$. Entretanto, conforme já mencionamos, é de se esperar que este comportamento não subsista no limite termodinâmico, já que somente uma transição é observada para a rede PBC, a uma temperatura bem mais alta. É possível que correções de escala estejam mascarando o real comportamento do sistema.

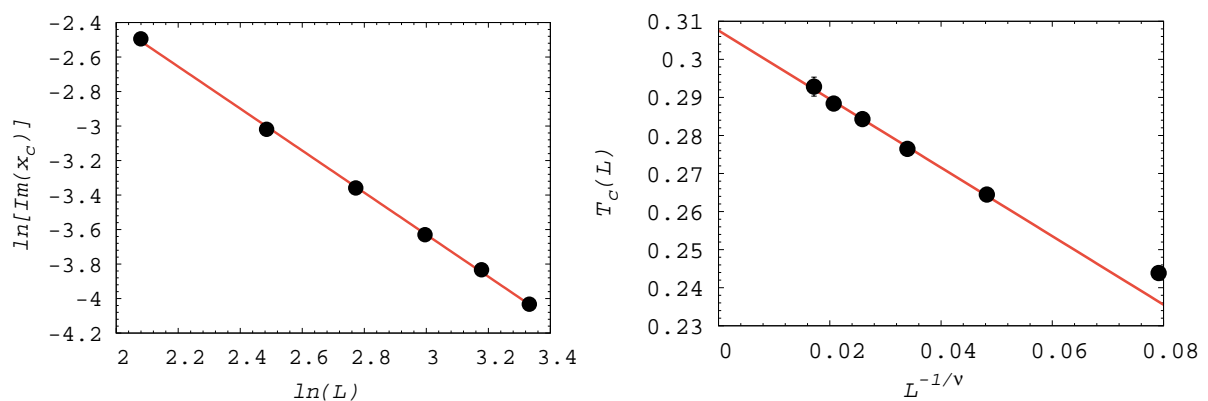


Figura 5.23: No gráfico à esquerda, vemos o logaritmo da parte imaginária do zero dominante referente à transição de temperatura mais baixa em função do logaritmo do tamanho da rede. A inclinação da reta fornece o expoente $1/\nu = 1.22(1)$. À direita, utilizamos o valor de ν encontrado para linearizar a temperatura crítica em função do tamanho da rede. Na regressão linear, foi desconsiderada a rede $L = 8$.

No que diz respeito à transição da fase intermediária para a fase paramagnética, já ressaltamos a dificuldade de determinar o zero dominante nessa situação. Utilizando o histograma cortado em 10^{-1} , encontramos o expoente crítico $\nu = 0.79(1)$, que resulta em uma temperatura crítica $T_{c_2} = 0.640(3)D/k_B$.

Quanto ao expoente α desta transição, mais uma vez o melhor ajuste encontrado para o valor do pico do calor específico corresponde a uma divergência logarítmica, com $\chi^2 = 6.2 \times 10^{-6}$. Já para a divergência por lei de potência, o ajuste foi pior ($\chi^2 = 1.6 \times 10^{-5}$), como mostra a Figura 5.25.

Conforme observado, a análise do comportamento crítico do sistema com condições de contorno abertas mostra-se muito mais desafiadora em comparação com o sistema com condições de contorno periódicas. Assim, a elucidação dos pontos aqui expostos necessita de investigações mais detalhadas usando, em especial, sistemas maiores no intuito de diminuir possíveis efeitos de correção de escala que parecem estar influenciando as análises. De fato, do ponto de vista experimental, a determinação de um tamanho máximo onde a fase intermediária é observada e das propriedades do sistema neste tamanho pode ser de

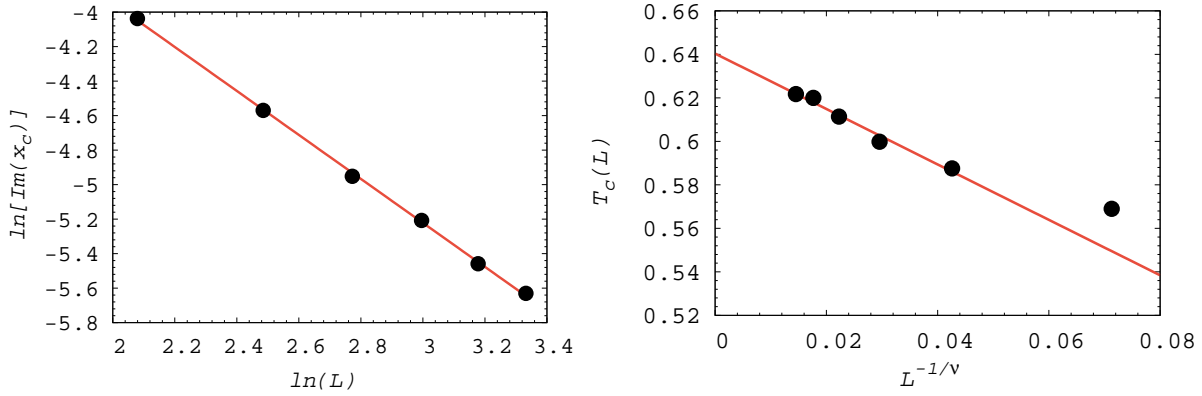


Figura 5.24: No gráfico à esquerda, vemos o logaritmo da parte imaginária do zero dominante referente à transição de temperatura mais alta em função do logaritmo do tamanho da rede. A inclinação da reta fornece o expoente $1/\nu = 1.27(1)$. À direita, utilizamos o valor de ν encontrado para linearizar a temperatura crítica em função do tamanho da rede. Na regressão linear, foi desconsiderada a rede $L = 8$.

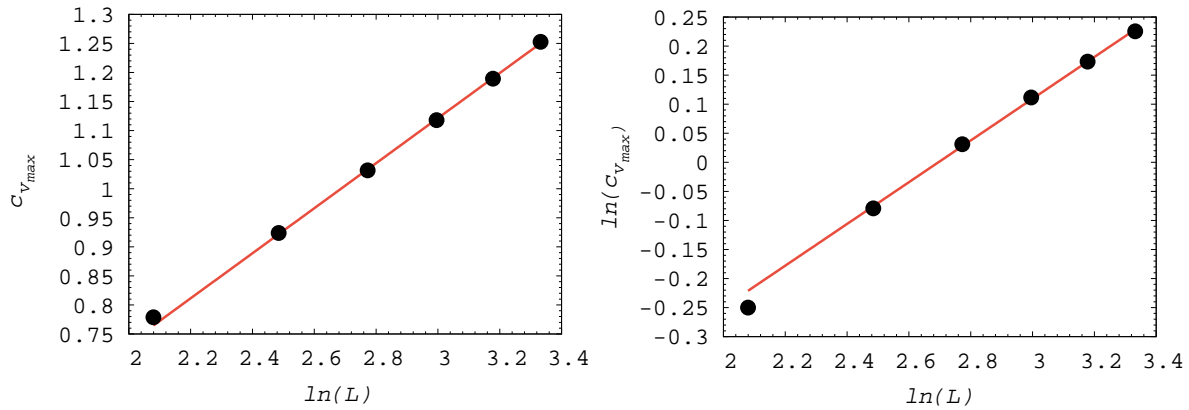


Figura 5.25: Ajuste linear para o máximo do calor específico em função do tamanho da rede. O gráfico à esquerda corresponde ao ajuste de uma divergência logarítmica do calor específico. Já o gráfico à direita corresponde a uma lei de potência, com o expoente crítico $\alpha/\nu = 0.359(6)$ dado pela inclinação da reta. Na regressão linear, foi desconsiderada a rede $L = 8$. Mais uma vez, é a divergência logarítmica que fornece o melhor ajuste, sugerindo um expoente crítico $\alpha = 0$ também para a rede OBC.

grande importância. Por fim, ressaltamos que tais questões tornam o estudo e a física do sistema intrinsecamente finito ainda mais ricos e interessantes.

6 Conclusões e perspectivas

Neste trabalho, estudamos um modelo de gelo de spin artificial cuja realização experimental, recentemente reportada na literatura, possibilita a manipulação direta dos microestados do sistema por meio da aplicação de campos magnéticos, ensejando promissoras aplicações em dispositivos de armazenamento de informações [8]. A geometria da rede de nanoilhas, tratadas em nosso modelo como spins do tipo Ising com interações dipolares, apresenta a interessante peculiaridade de restringir o movimento de monopolos magnéticos ao longo de um caminho unidimensional. Em nosso estudo, priorizamos a elucidação do comportamento termodinâmico do sistema, tendo em vista o recente desenvolvimento de técnicas capazes de fabricar nanoilhas suscetíveis a flutuações térmicas.

No limite termodinâmico, o sistema apresenta uma transição entre uma fase paramagnética e uma fase ordenada à temperatura $T_c = 0.6696(6)D/k_B$. Tanto o expoente ν quanto o expoente α concordam com a classe de universalidade do modelo de Ising. A temperatura crítica encontrada em nosso modelo é superior à temperatura crítica do modelo de ASI de rede quadrada calculada por Silva *et al.* [38], quando o mesmo espaçamento de rede é utilizado.

A simulação de redes com condições de contorno abertas revelou a ocorrência de uma fase intermediária entre a fase paramagnética e a fase completamente magnetizada, sugerindo a existência de duas pseudo-transições de fase em sistemas finitos. Essa fase intermediária é caracterizada por baixos valores de magnetização, que permanecem relativamente estáveis com a variação da temperatura, bem como pela predominância dos vértices do tipo I, de menor energia. A importância da utilização de condições de contorno abertas nesse caso decorre do fato de que o sistema experimentalmente realizado possui cerca de 24 mil nanoilhas, o que o deixa bem distante do limite termodinâmico. Desta forma, os resultados obtidos com essas condições de contorno constituem uma previsão mais adequada do comportamento de uma eventual realização experimental de um ASI regravável suscetível a flutuações térmicas.

É preciso ressaltar que o tempo demandado pelo cômputo de interações dipolares é um fator limitador do tamanho das redes simuladas, de modo que os resultados quantitativos obtidos em nossas simulações não podem ser considerados definitivos. Além disso, a forma pela qual o comportamento observado em redes finitas se reconcilia com os resultados obtidos com condições de contorno periódicas permanece uma questão em aberto. Em especial, a natureza da transição de baixa temperatura e as causas de sua supressão na rede com condições de contorno periódicas requerem estudos mais aprofundados.

Para dar continuidade a este trabalho, pretendemos investigar quais são as primeiras

excitações acima do estado fundamental, no intuito de compreender melhor a emergência do estado intermediário no modelo. Empreenderemos esforços, também, no sentido de verificar a existência de termos de monopolo na energia das interações magnéticas entre vértices excitados e analisar seu deslocamento na rede. A emergência de monopolos é uma das principais características das redes de nanoilhas magnéticas, e a possibilidade aberta pelo modelo aqui estudado de observação de monopolos cujo caminho é determinado pela geometria da rede motiva a realização de novos estudos.

Referências

- [1] Bernal, J. D. e Fowler, R. H.: *A Theory of Water and Ionic Solution, with Particular Reference to Hydrogen and Hydroxyl Ions*. J. Chem. Phys., 1(8):515–548, 1933. Citado na página 13.
- [2] Pauling, L.: *The structure and entropy of ice and of other crystals with some randomness of atomic arrangement*. J. Am. Chem. Soc., 57(12):2680–2684, 1935. Citado na página 13.
- [3] Bartels-Rausch, T., Bergeron, V., Cartwright, J. H. E., Escribano, R., Finney, J. L., Grothe, H., Gutiérrez, P. J., Haapala, J., Kuhs, W. F., Pettersson, J. B. C., Price, S. D., Sainz-Díaz, C. I., Stokes, D. J., Strazzulla, G., Thomson, E. S., Trinks, H. e Uras-Aytemiz, N.: *Ice structures, patterns, and processes: A view across the icefields*. Rev. Mod. Phys., 84(2):885–944, 2012. Citado na página 13.
- [4] Bramwell, S. T. e Gingras, M. J. P.: *Spin Ice State in Frustrated Magnetic Pyrochlore Materials*. Science, 294(5546):1495–1501, 2001. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 15.
- [5] Harris, M. J., Bramwell, S. T., McMorrow, D. F., Zeiske, T. e Godfrey, K. W.: *Geometrical Frustration in the Ferromagnetic Pyrochlore Ho₂Ti₂O₇*. Phys. Rev. Lett., 79(13):2554–2557, 1997. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 15.
- [6] Wang, R. F., Nisoli, C., Freitas, R. S., Li, J., McConville, W., Cooley, B. J., Lund, M. S., Samarth, N., Leighton, C., Crespi, V. H. e Schiffer, P.: *Artificial ‘spin ice’ in a geometrically frustrated lattice of nanoscale ferromagnetic islands*. Nature, 439(7074):303–306, 2006. Citado 3 vezes nas páginas 13, 16 e 18.
- [7] Loehr, J., Ortiz-Ambriz, A. e Tierno, P.: *Defect Dynamics in Artificial Colloidal Ice: Real-Time Observation, Manipulation, and Logic Gate*. Phys. Rev. Lett., 117(16):168001, 2016. Citado na página 14.
- [8] Wang, Y. L., Xiao, Z. L., Snezhko, A., Xu, J., Ocola, L. E., Divan, R., Pearson, J. E., Crabtree, G. W. e Kwok, W. K.: *Rewritable artificial magnetic charge ice*. Science, 352(6288):962 LP – 966, 2016. Citado 7 vezes nas páginas 14, 15, 21, 23, 31, 39 e 67.
- [9] Gartside, J. C., Burn, D. M., Cohen, L. F. e Branford, W. R.: *A novel method for the injection and manipulation of magnetic charge states in nanostructures*. Sci. Rep., 6:32864, 2016. Citado na página 14.

- [10] Mól, L. A., Silva, R. L., Silva, R. C., Pereira, A. R., Moura-Melo, W. A. e Costa, B. V.: *Magnetic monopole and string excitations in two-dimensional spin ice*. J. Appl. Phys., 106(6):063913, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 19.
- [11] Ramirez, A. P., Hayashi, A., Cava, R. J., Siddharthan, R. e Shastry, B. S.: *Zero-point entropy in 'spin ice'*. Nature, 399(6734):333–335, 1999. Citado na página 15.
- [12] Siddharthan, R., Shastry, B. S., Ramirez, A. P., Hayashi, A., Cava, R. J. e Rosenkranz, S.: *Ising Pyrochlore Magnets: Low-Temperature Properties, "Ice Rules," and Beyond*. Phys. Rev. Lett., 83(9):1854–1857, 1999. Citado na página 15.
- [13] Castelnovo, C., Moessner, R. e Sondhi, S. L.: *Magnetic monopoles in spin ice*. Nature, 451(7174):42–45, 2008. Citado na página 16.
- [14] Jaubert, L. D. C. e Holdsworth, P. C. W.: *Signature of magnetic monopole and Dirac string dynamics in spin ice*. Nat. Phys., 5(4):258–261, 2009. Citado na página 16.
- [15] Fennell, T., Deen, P. P., Wildes, A. R., Schmalzl, K., Prabhakaran, D., Boothroyd, A. T., Aldus, R. J., McMorrow, D. F. e Bramwell, S. T.: *Magnetic Coulomb Phase in the Spin Ice Ho₂Ti₂O₇*. Science, 326(5951):415–417, 2009. Citado na página 16.
- [16] Morris, D. J. P., Tennant, D. A., Grigera, S. A., Klemke, B., Castelnovo, C., Moessner, R., Czternasty, C., Meissner, M., Rule, K. C., Hoffmann, J. U., Kiefer, K., Gerischer, S., Slobinsky, D. e Perry, R. S.: *Dirac Strings and Magnetic Monopoles in the Spin Ice Dy₂Ti₂O₇*. Science, 326(5951):411–414, 2009. Citado na página 16.
- [17] Bramwell, S. T., Giblin, S. R., Calder, S., Aldus, R., Prabhakaran, D. e Fennell, T.: *Measurement of the charge and current of magnetic monopoles in spin ice*. Nature, 461(7266):956–959, 2009. Citado na página 16.
- [18] Nambu, Y.: *Strings, monopoles, and gauge fields*. Phys. Rev. D, 10(12):4262–4268, 1974. Citado na página 16.
- [19] Gingras, M. J. P.: *Observing Monopoles in a Magnetic Analog of Ice*. Science, 326(5951):375–376, 2009. Citado na página 17.
- [20] Ross, C. A., Haratani, S., Castaño, F. J., Hao, Y., Hwang, M., Shima, M., Cheng, J. Y., Vögeli, B., Farhoud, M., Walsh, M. e Smith, H. I.: *Magnetic behavior of lithographically patterned particle arrays (invited)*. J. Appl. Phys., 91(10):6848, 2002. Citado na página 16.
- [21] Tanaka, M., Saitoh, E., Miyajima, H., Yamaoka, T. e Iye, Y.: *Magnetic interactions in a ferromagnetic honeycomb nanoscale network*. Phys. Rev. B, 73(5):052411, 2006. Citado na página 18.

- [22] Mól, L. A. S., Pereira, A. R. e Moura-Melo, W. A.: *Extending spin ice concepts to another geometry: The artificial triangular spin ice*. Phys. Rev. B, 85(18):184410, 2012. Citado na página 18.
- [23] Li, J., Ke, X., Zhang, S., Garand, D., Nisoli, C., Lammert, P., Crespi, V. H. e Schiffer, P.: *Comparing artificial frustrated magnets by tuning the symmetry of nanoscale permalloy arrays*. Phys. Rev. B, 81(9):092406, 2010. Citado na página 18.
- [24] Nisoli, C., Kapaklis, V. e Schiffer, P.: *Deliberate exotic magnetism via frustration and topology*. Nat. Phys., 13(3):200–203, 2017. Citado na página 18.
- [25] Morrison, M. J., Nelson, T. R. e Nisoli, C.: *Unhappy vertices in artificial spin ice: new degeneracies from vertex frustration*. New J. Phys., 15(4):045009, 2013. Citado na página 19.
- [26] Ladak, S., Read, D. E., Perkins, G. K., Cohen, L. F. e Branford, W. R.: *Direct observation of magnetic monopole defects in an artificial spin-ice system*. Nat. Phys., 6(5):359–363, 2010. Citado na página 19.
- [27] Nisoli, C., Moessner, R. e Schiffer, P.: *Colloquium : Artificial spin ice: Designing and imaging magnetic frustration*. Rev. Mod. Phys., 85(4):1473–1490, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 20.
- [28] Möller, G. e Moessner, R.: *Artificial Square Ice and Related Dipolar Nanoarrays*. Phys. Rev. Lett., 96(23):237202, 2006. Citado 3 vezes nas páginas 19, 42 e 63.
- [29] Mól, L. A. S., Moura-Melo, W. A. e Pereira, A. R.: *Conditions for free magnetic monopoles in nanoscale square arrays of dipolar spin ice*. Phys. Rev. B, 82(5):054434, 2010. Citado na página 20.
- [30] Morgan, J. P., Stein, A., Langridge, S. e Marrows, C. H.: *Thermal ground-state ordering and elementary excitations in artificial magnetic square ice*. Nat. Phys., 7(1):75–79, 2011. Citado na página 20.
- [31] Wang, R. F., Li, J., McConville, W., Nisoli, C., Ke, X., Freeland, J. W., Rose, V., Grimsditch, M., Lammert, P., Crespi, V. H. e Schiffer, P.: *Demagnetization protocols for frustrated interacting nanomagnet arrays*. J. Appl. Phys., 101(9):09J104, 2007. Citado na página 20.
- [32] Ke, X., Li, J., Nisoli, C., Lammert, P. E., McConville, W., Wang, R. F., Crespi, V. H. e Schiffer, P.: *Energy Minimization and ac Demagnetization in a Nanomagnet Array*. Phys. Rev. Lett., 101(3):037205, 2008. Citado na página 20.

- [33] Nisoli, C., Wang, R., Li, J., McConville, W.F., Lammert, P.E., Schiffer, P. e Crespi, V.H.: *Ground State Lost but Degeneracy Found: The Effective Thermodynamics of Artificial Spin Ice*. Phys. Rev. Lett., 98(21):217203, 2007. Citado na página 20.
- [34] Nisoli, C., Li, J., Ke, X., Garand, D., Schiffer, P. e Crespi, V.H.: *Effective Temperature in an Interacting Vertex System: Theory and Experiment on Artificial Spin Ice*. Phys. Rev. Lett., 105(4):047205, 2010. Citado na página 20.
- [35] Kapaklis, V., Arnaldis, U.B., Harman-Clarke, A., Papaioannou, E. T., Karimipour, M., Korelis, P., Taroni, A., Holdsworth, P.C.W., Bramwell, S.T. e Hjörvarsson, B.: *Melting artificial spin ice*. New J. Phys., 14(3):035009, 2012. Citado na página 21.
- [36] Porro, J.M., Bedoya-Pinto, A., Berger, A. e Vavassori, P.: *Exploring thermally induced states in square artificial spin-ice arrays*. New J. Phys., 15(5):055012, 2013. Citado na página 21.
- [37] Zhang, S., Gilbert, I., Nisoli, C., Chern, G.W., Erickson, M.J., O'Brien, L., Leighton, C., Lammert, P.E., Crespi, V.H. e Schiffer, P.: *Crystallites of magnetic charges in artificial spin ice*. Nature, 500(7464):553–557, 2013. Citado na página 21.
- [38] Silva, R.C., Nascimento, F.S., Mól, L.A.S., Moura-Melo, W.A. e Pereira, A.R.: *Thermodynamics of elementary excitations in artificial magnetic square ice*. New J. Phys., 14(1):015008, 2012. Citado 5 vezes nas páginas 21, 39, 51, 54 e 67.
- [39] Chern, G.W., Morrison, M.J. e Nisoli, C.: *Degeneracy and Criticality from Emergent Frustration in Artificial Spin Ice*. Phys. Rev. Lett., 111(17):177201, 2013. Citado 3 vezes nas páginas 21, 22 e 63.
- [40] Gilbert, I., Chern, G.W., Zhang, S., O'Brien, L., Fore, B., Nisoli, C. e Schiffer, P.: *Emergent ice rule and magnetic charge screening from vertex frustration in artificial spin ice*. Nat. Phys., 10(9):670–675, 2014. Citado 2 vezes nas páginas 21 e 22.
- [41] Gilbert, I., Lao, Y., Carrasquillo, I., O'Brien, L., Watts, J.D., Manno, M., Leighton, C., Scholl, A., Nisoli, C. e Schiffer, P.: *Emergent reduced dimensionality by vertex frustration in artificial spin ice*. Nat. Phys., 12(2):162–165, 2015. Citado na página 24.
- [42] Metropolis, N., Rosenbluth, A.W., Rosenbluth, M.N., Teller, A.H. e Teller, E.: *Equation of State Calculations by Fast Computing Machines*. J. Chem. Phys., 21(6):1087–1092, 1953. Citado 2 vezes nas páginas 25 e 26.
- [43] Newman, M.E.J. e Barkema, G.T.: *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Oxford University Press, 1999. Citado 6 vezes nas páginas 25, 26, 27, 28, 31 e 32.

- [44] Ferrenberg, A. M. e Swendsen, R. H.: *Optimized Monte Carlo data analysis*. Phys. Rev. Lett., 63(12):1195–1198, 1989. Citado na página 27.
- [45] Bachmann, M.: *Thermodynamics and Statistical Mechanics of Macromolecular Systems*. Cambridge University Press, Cambridge, 2014. Citado na página 30.
- [46] Plischke, M. e Bergersen, B.: *Equilibrium statistical physics*. World Scientific, 2006. Citado na página 31.
- [47] Yang, C. N. e Lee, T. D.: *Statistical Theory of Equations of State and Phase Transitions. I. Theory of Condensation*. Phys. Rev., 87(3):404–409, 1952. Citado 2 vezes nas páginas 33 e 34.
- [48] Fisher, M. E.: *The Nature of Critical Points*. Em Brittin, W. E. e Dunham, L. G. (editores): *Lect. Theor. Phys. vol 7C*. The University of Colorado Press, Boulder, 1965. Citado na página 33.
- [49] Rocha, J., Mól, L. e Costa, B.: *Using zeros of the canonical partition function map to detect signatures of a Berezinskii–Kosterlitz–Thouless transition*. Comput. Phys. Commun., 209:88–91, 2016. Citado na página 34.
- [50] Rocha, J. C. S., Schnabel, S., Landau, D. P. e Bachmann, M.: *Identifying transitions in finite systems by means of partition function zeros and microcanonical inflection-point analysis: A comparison for elastic flexible polymers*. Phys. Rev. E, 90(2):022601, 2014. Citado na página 35.
- [51] Costa, B., Mól, L. e Rocha, J.: *Energy probability distribution zeros: A route to study phase transitions*. Comput. Phys. Commun., 216:77–83, 2017. Citado 2 vezes nas páginas 35 e 37.
- [52] Xie, Y. L., Du, Z. Z., Yan, Z. B. e Liu, J. M.: *Magnetic-charge ordering and phase transitions in monopole-conserved square spin ice*. Sci. Rep., 5(1):15875, 2015. Citado na página 52.