

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA MARIA
CENTRO DE CIÊNCIAS NATURAIS E EXATAS
CURSO DE FÍSICA

TEORIA DE CAMPO MÉDIO COM CLUSTERS
CORRELACIONADOS APLICADA AO
MODELO DE ISING ANTIFERROMAGNÉTICO

TRABALHO FINAL DE GRADUAÇÃO

Mateus Schmidt

Santa Maria, RS, Brasil

2013

**TEORIA DE CAMPO MÉDIO COM CLUSTERS
CORRELACIONADOS APLICADA AO
MODELO DE ISING ANTIFERROMAGNÉTICO**

Mateus Schmidt

Monografia apresentada ao Curso de Física
da Universidade Federal de Santa Maria (UFSM)
como requisito parcial para a obtenção do grau de
Bacharel em Física

Orientador: Prof. Dr. Fábio Mallmann Zimmer

Santa Maria, RS, Brasil

2013

Para minhas sobrinhas,
Ana Laura e Manuela.

AGRADECIMENTOS

As margens deste trabalho não podem comportar minha profunda gratidão com aqueles que de muitas formas me ajudaram e ajudam a seguir adiante. Opto por arriscar, no entanto, neste breve agradecimento aos que a memória permitiu citar.

Agradeço aos meus pais, Valdemar e Nelci, que dedicaram suas vidas a me convencer do quanto a educação e o trabalho eram importantes. Obrigado pelo exemplo de ética, empenho e dedicação que sempre foram. Aos meus irmãos, Rubia e Ismael, agradeço pelo apoio e conselhos nos muitos momentos em que foram necessários. Eu não chegaria tão longe, não fosse os bons exemplos de superação que tive. Agradeço aos amigos, poucos e bons, por compreenderem minha ausência. Sou grato ao Daniel Berlezi, por sempre apoiar meus projetos e por me ouvir, nas muitas vezes em que precisei. Ao amigo que a Física trouxe, Fernando Sperotto, pelas muitas discussões até tarde e por aguentar minha empolgação a cada novo projeto. Aos colegas e amigos do Laboratório de Teoria da Matéria Condensada, Ana, Helena, Diego, Tiago, Giovani e Nathan, sou imensamente grato pela sua paciência, pelo tempo para o café e por acreditarem na ciência que fazemos. A presença de vocês me motivou diariamente. Agradeço a minha noiva Ana Paula, por ter sido determinante no período de desenvolvimento deste trabalho, pela paciência ao meu ouvir e por acreditar tanto em mim. Agradeço por não se cansar de ver meus ensaios de apresentações, por sugerir melhorias na forma como me expressei, por realmente se esforçar para entender minhas pesquisas e por se manter firme quando as coisas ficaram difíceis.

Agradeço aos professores, de todas as etapas da minha formação. Sem a sua dedicação, tão pouco reconhecida e recompensada, nenhuma palavra deste trabalho poderia ser escrita. Em especial, agradeço aos professores do ensino de Física a distância da UFSM, Juca, Joecir, Lúcio e outros, que despertaram em mim a paixão pela Física. Através do trabalho de vocês, tive as oportunidades de que precisava. Ao meu orientador, Fábio Zimmer, sou grato pelo profissionalismo desde o primeiro contato que tivemos. Sem as incontáveis discussões, correções de rota e buscas por melhorias, a pesquisa por trás deste projeto não teria acontecido. Meus agradecimentos também ao professor Jonas Maziero, por sempre ter um tempo para discutir e por me inspirar com sua imensa dedicação. Por fim, agradeço ao povo brasileiro, que através do CNPq e UFSM, fomentou meus estudos e pesquisas durante a graduação.

Disciplined judgement, about what is neat and symmetrical and elegant,
has time and time again proved an excellent guide to how nature works.

Murray Gell-Mann

RESUMO

A teoria de campo médio com clusters correlacionados é um método aproximativo que tem apresentado resultados com boa precisão e baixo custo computacional quando aplicado a sistemas ferromagnéticos. Contudo, devido a sua publicação recente, a técnica ainda não tem aplicação conhecida para sistemas antiferromagnéticos, embora o estudo destes sistemas seja de grande importância. Portanto, neste trabalho apresentamos uma proposta de aplicação da teoria de campo médio com clusters correlacionados ao modelo de Ising com interações antiferromagnéticas. Esta aplicação consiste na separação dos campos médios que atuam sobre o sistema com a finalidade de adequar estes campos ao estado fundamental do sistema. Com esta diferenciação, que permitiu a aplicação da técnica, foi possível obter resultados para a magnetização de sub-redes, a energia interna, o calor específico e a susceptibilidade magnética, com um erro inferior a 6% em relação aos resultados exatos e com boa concordância em relação ao comportamento esperado para os sistemas magnéticos tratados. A aplicação da técnica a um sistema com interações antiferromagnéticas é um passo importante na verificação dos limites de validade do método e no entendimento das suas principais características de funcionamento.

ABSTRACT

The correlated cluster mean-field theory is an approximative method that has presented good accuracy and low computational cost results when applied to ferromagnetic systems. However, due to its recent publication, the technique does not have a known application to antiferromagnetic systems yet, despite the great importance of the study of these systems too. Thus, we propose an application proposal of the correlated cluster mean-field theory to the Ising model with antiferromagnetic interactions. This application consists of the separation of mean fields acting over the system, which aims at adapting these fields to the fundamental state. This differentiation allowed the application of the technique, so it was possible to obtain results for the sublattice magnetization, internal energy, specific heat and the magnetic susceptibility, with error less than 6% in comparison with the exact results and good concordance in relation to the expected behavior for the treated magnetic systems. The application of this technique to an antiferromagnetic system is an important step in the verification of the limits of validity of the method and the understanding of its main characteristics.

Lista de Figuras

2.1	Curva de coexistência de oito fluidos	18
2.2	Representação esquemática da fase ferromagnética para as redes quadrada e cúbica simples	23
2.3	Representação esquemática da fase antiferromagnética para as redes quadrada e cúbica simples com interações de primeiros vizinhos	24
3.1	Fluxograma do algoritmo de Metropolis.	28
3.2	Magnetização por spin em função da temperatura para a rede quadrada	29
4.1	Aplicação da TCMCC à rede com geometria hexagonal	32
4.2	Aplicação da TCMCC à rede com geometria quadrada	33
4.3	Campos médios e magnetização por spin das redes hexagonal e quadrada	34
4.4	Aplicação da TCMCC à rede cúbica.	35
4.5	Campos médios para rede cúbica com 8 spins	36
5.1	Rede hexagonal dividida em sub-redes	39
5.2	Campos médios obtidos para o caso antiferromagnético da rede hexagonal	40
5.3	Rede quadrada dividida em sub-redes	41
5.4	Campos médios obtidos para o caso antiferromagnético da rede quadrada	42
5.5	Rede cúbica dividida em sub-redes	43
5.6	Campos médios obtidos para o caso antiferromagnético da rede cúbica	44
5.7	Comportamento do parâmetro de ordem AF para as redes hexagonal, quadrada e cúbica	46
5.8	Susceptibilidade magnética em função de T/T_N	47
5.9	Efeitos da presença de campo externo na T_N	49
5.10	Diagramas de fases da temperatura crítica pelo campo magnético externo.	50

5.11 Energia interna por spin em função da temperatura no MI antiferromagnético. . .	51
5.12 Calor específico a volume constante em função da temperatura no MI antiferromagnético.	52

Lista de Tabelas

4.1	Resultados da temperatura crítica para o modelo de Ising em 3 geometrias . . .	37
-----	--	----

LISTA DE ABREVIATURAS E SÍMBOLOS

AF - Antiferromagnético(a)

FE - Ferromagnético(a)

MI - Modelo de Ising

PM - Paramagnético(a)

T_C - Temperatura de Curie

T_N - Temperatura de Néel

TCM - Teoria de Campo Médio

TCMCC - Teoria de Campo Médio com Clusters Correlacionados

Sumário

1	INTRODUÇÃO	15
2	FASES DA MATÉRIA	17
2.1	Transições de Fase	17
2.2	Fases Magnéticas	19
2.2.1	Conceitos em Termodinâmica e Mecânica Estatística	19
2.2.2	Paramagnetismo	22
2.2.3	Ferromagnetismo	22
2.2.4	Antiferromagnetismo	24
3	MODELO DE ISING CLÁSSICO	26
3.1	Descrição do Modelo	26
3.2	As Soluções Analíticas	26
3.3	A Teoria de Campo Médio	27
3.4	O Método de Monte Carlo	28
3.4.1	Sistemas simulados	29
4	TEORIA DE CAMPO MÉDIO COM CLUSTERS CORRELACIONADOS	30
4.1	Aplicação ao ferromagneto de Ising	30
4.1.1	Rede Hexagonal	31
4.1.2	Rede quadrada	32
4.1.3	Rede Cúbica	35
5	APLICAÇÃO DA TEORIA DE CAMPO MÉDIO COM CLUSTERS CORRELACIONADOS AO MODELO DE ISING ANTIFERROMAGNÉTICO	38

5.1	Rede Hexagonal	38
5.2	Rede Quadrada	40
5.3	Rede Cúbica	42
5.4	Resultados	45
5.4.1	Magnetização de sub-redes e Susceptibilidade - $H = 0$	46
5.4.2	Magnetização de sub-redes - $H \neq 0$	48
5.4.3	Energia Interna e Calor Específico	51
6	CONCLUSÃO	53

1 INTRODUÇÃO

A busca pela explicação do comportamento magnético apresentado por alguns materiais começou junto ao início da descrição quântica da natureza. Cerca de um século após os primeiros resultados experimentais relevantes, materiais magnéticos têm inúmeras aplicações tecnológicas, seja em dispositivos de armazenamento de dados, em processadores ou na produção dos mais diversos circuitos.

A modelagem de sistemas compostos por momentos magnéticos intrínsecos (BRUSH, 1967; JOYCE, 1967), spins, foi fundamental para a compreensão dos fenômenos magnéticos, permitindo um entendimento mais completo sobre materiais ferro e antiferromagnéticos, por exemplo. Entretanto, sistemas cada vez mais interessantes têm exigido a elaboração de modelos mais complexos, como os materiais que apresentam a fase vidro de spin, em que a presença de desordem e frustração implica em uma série de dificuldades (HEMMEN, 1982; SHERRINGTON; KIRKPATRICK, 1975). A ausência de soluções analíticas para estes modelos com interações desordenadas dificulta a correta descrição do comportamento destes sistemas físicos de grande interesse. Tais dificuldades deram espaço a métodos que desconsideram alguns aspectos da descrição dos modelos, como as correlações entre spins, mas que levam a soluções mais simplificadas, permitindo uma compreensão qualitativa.

Em geral, métodos aproximativos consistem em considerar que parte das interações ocorrem através de campos médios, propondo um tratamento aproximado. Estas teorias de campo médio evoluíram ao longo dos anos, levando a resultados bastante significativos nas pesquisas com materiais magnéticos (KADANOFF, 2009; LAVARÉLO; ROUX; LAFLORENCIE, 2013; KINZA; HONERKAMP, 2013; IHLE, 2013). Contudo, há grande perda de correlações na aplicação de alguns destes métodos, que, em geral, consideram a troca de configurações (ou dinâmica) de um único spin, desconsiderando as correlações entre spins vizinhos e comprometendo não somente a precisão dos resultados, mas também os seus aspectos qualitativos.

A teoria de campo médio com clusters correlacionados (TCMCC), publicada em 2009 por Daisuke Yamamoto, vem apresentando grande acurácia nos resultados para o modelo de Ising ferromagnético (CHVOJ; KUDRNOVSKÝ; DRCHAL, 2010; YAMAMOTO, 2009, 2010). Contudo, ainda não há trabalhos que apresentem a aplicação da técnica a sistemas antiferromagnéticos, embora o estudo de sistemas com interações antiferromagnéticas seja de grande im-

portância, uma vez que muitas ligas (OITMAA et al., 2013; ZHANG et al., 2013; GUCHHAIT et al., 2013; WULFERDING et al., 2013) apresentam a fase antiferromagnética (AF), e em alguns casos competindo com outras fases magnéticas, como a ferromagnética (FE) e vidro de spin (ECHEVARRIA-BONET et al., 2013; WANG et al., 2013).

Portanto, este trabalho objetiva propor a aplicação da TCMCC ao modelo de Ising com interações antiferromagnéticas, buscando compreender os principais mecanismos envolvidos no tratamento proposto por Yamamoto, em especial na determinação dos campos médios, que são de grande importância para o sucesso da técnica. Ao propor este novo tratamento, busca-se verificar os limites de validade da TCMCC, aumentando o número de possíveis aplicações. Outro objetivo é verificar o quão qualitativamente corretos são os resultados apresentados pela TCMCC, não somente para o parâmetro de ordem do sistema, mas também para outros observáveis de interesse, como a susceptibilidade magnética, calor específico e energia interna. Neste trabalho, aplicamos a TCMCC ao modelo de Ising nas estruturas de rede hexagonal, quadrada e cúbica, discutindo detalhadamente os diferentes aspectos da aplicação deste método em cada uma destas geometrias.

Iniciamos este trabalho com uma breve revisão da literatura sobre alguns conceitos importantes de termodinâmica, mecânica estatística de equilíbrio, magnetismo e fases magnéticas no capítulo 2. No capítulo 3 abordamos o modelo de Ising clássico, discutindo as soluções analíticas, a teoria de campo médio e as simulações de Monte Carlo realizadas neste trabalho. Em seguida, apresentamos a aplicação da TCMCC ao caso ferromagnético do modelo de Ising no capítulo 4, discutindo detalhadamente as principais características da técnica, na forma como foi publicada por Yamamoto. Resultados originais são apresentados no capítulo 5, no qual descrevemos nossa proposta de aplicação da TCMCC ao modelo de Ising antiferromagnético e os principais resultados obtidos para alguns observáveis de interesse termodinâmico nas redes hexagonal, quadrada e cúbica. Nossas conclusões são apresentadas no capítulo 6.

2 FASES DA MATÉRIA

Sistemas compostos por muitas partículas apresentam-se na natureza em diferentes fases, caracterizadas pelos seus estados de ordenamento. Como exemplo, podemos citar as fases líquida, sólida e gasosa de inúmeras substâncias. No entanto, há outros tipos de ordenamento, presentes em alguns materiais específicos, como supercondutores, cristais líquidos, superfluidos, ligas metálicas, materiais magnéticos, etc. Os diferentes estados de ordenamento dos materiais possuem características qualitativas distintas, que tornam a utilização de alguns materiais importante em muitos campos do desenvolvimento humano, como é o caso dos materiais magnéticos utilizados na construção de dispositivos de armazenamento de dados, processadores e circuitos diversos. Portanto, o estudo das condições em que ocorrem transições de fase tem recebido grande atenção. A seguir fazemos uma discussão do que são fases na natureza e como as transições de fase podem ser descritas, especialmente no caso de fases magnéticas. Finalmente, é feita uma breve descrição de algumas fases magnéticas.

2.1 Transições de Fase

Uma descrição consistente das transições de fase contínuas foi proposta por Landau na década de 30, baseando-se no conceito de parâmetro de ordem (ψ) e no estabelecimento de uma expansão da energia livre (STANLEY, 1987). O parâmetro de ordem associado às transições de fase é definido de diferentes maneiras, dependendo do material em que a transição ocorre. Podemos considerar vários exemplos: a transição líquido-gás, em que ψ pode ser tomado em termos do volume ou da densidade dos fluidos; a transição para-ferromagnética, em que o parâmetro de ordem é o vetor magnetização, quando o campo externo tende a zero; a transição para-antiferromagnética, na qual ψ pode ser associado à magnetização de sub-rede; a transição ordem-desordem em ligas binárias, em que o parâmetro de ordem pode ser escolhido como a diferença entre as densidades de um dos materiais nos sítios de uma dada sub-rede; a transição estrutural, na qual ψ está associado ao deslocamento de uma sub-rede de íons em relação à outra sub-rede; e a transição superfluida no hélio líquido, na qual o parâmetro de ordem está associado a uma função de onda complexa (SALINAS, 2005).

Na fenomenologia de Landau a energia livre deve ser expandida em termos dos invari-

antes do parâmetro de ordem, de forma que as diversas grandezas termodinâmicas do sistema podem ser obtidas a partir desta expansão. Com isso, torna-se possível também determinar os expoentes críticos, que são de grande importância para a compreensão do comportamento de sistemas próximos das transições de fase. No entanto, segundo Salinas (2005), as experiências nas vizinhanças da criticalidade indicam que os expoentes críticos assumem valores universais, razoavelmente bem definidos, que não coincidem com as previsões das teorias englobadas pela fenomenologia de Landau. Atualmente se reconhece que os expoentes críticos são determinados por alguns fatores: a dimensionalidade dos sistemas físicos, a dimensionalidade do parâmetro de ordem e o alcance das interações microscópicas.

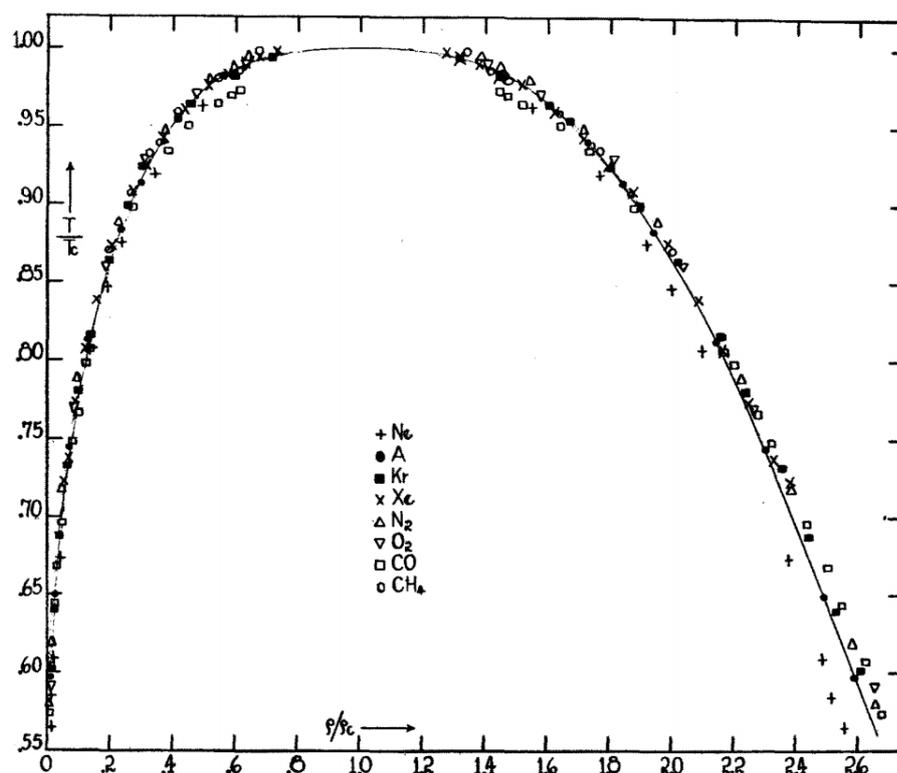


Figura 2.1: Curva de coexistência de oito fluidos evidenciam um comportamento coletivo que se ajusta com uma equação cúbica (GUGGENHEIM, 1945).

O diagrama da figura 2.1 foi obtido em 1945 por Guggenheim e é considerado um marco do início da era moderna do estudo dos fenômenos críticos, juntamente com a solução analítica de Onsager, em 1944, para a rede quadrada do modelo de Ising (STANLEY, 1987), que será discutida no capítulo 3. O resultado de Guggenheim demonstra que o comportamento de coexistência daqueles fluidos se ajusta muito bem a uma curva cúbica e, portanto, diferente da curva parabólica prevista pela fenomenologia de Landau. A figura 2.1 é uma demonstração

do comportamento coletivo em regiões críticas, apresentado por certos grupos de materiais. O estudo do comportamento crítico de diversos sistemas, especialmente das correlações entre os componentes destes sistemas, mostrou-se nas últimas décadas uma forte ferramenta na busca pela compreensão das transições de fases contínuas.

Os inúmeros sistemas de interesse físico em que ocorrem transições de fase têm sido descritos com base em modelos que englobam as suas características microscópicas mais importantes, levando em consideração as correlações do sistema. Embora as teorias clássicas, englobadas pela fenomenologia de Landau, desprezem muito as correlações entre os componentes destes sistemas, o conceito de parâmetro de ordem, introduzido por Landau, é extremamente importante na teoria das transições de fase, pois representa uma variável termodinâmica necessária para a descrição das fases.

2.2 Fases Magnéticas

Vários materiais, ditos magnéticos, apresentam ordenamento magnético abaixo de uma certa temperatura crítica. Estes materiais, em geral, podem ser descritos com base nos elétrons que residem em orbitais localizados nas proximidades dos sítios da rede e/ou elétrons itinerantes, cujos momentos magnéticos intrínsecos (spins) tem um comportamento que determina o caráter magnético destes materiais. A seguir será feita uma breve revisão de Termodinâmica e Mecânica Estatística, explicitando as principais relações matemáticas para as grandezas de interesse no estudo de fases magnéticas. Também serão apresentadas as principais características das fases magnéticas abordadas neste trabalho.

2.2.1 Conceitos em Termodinâmica e Mecânica Estatística

Os diferentes comportamentos dos sistemas de muitas partículas levam a resultados experimentais que permitem caracterizar as fases magnéticas. Portanto, alguns observáveis são de grande interesse no estudo de sistemas magnéticos em geral, a começar pelo parâmetro de ordem magnetização por spin (m). Apresentamos a seguir algumas relações importantes para o estudo de sistemas magnéticos no formalismo do ensemble canônico, que considera o sistema em equilíbrio térmico.

Consideremos um sistema com N partículas interagentes¹, submetido a um campo externo H e em equilíbrio com um reservatório térmico a uma dada temperatura T . A função canônica de partição é dada por

$$Z = Z(T, H, N) = \sum_j e^{-\beta \mathcal{H}_j}, \quad (2.1)$$

na qual $\beta = \frac{1}{K_B T}$, sendo K_B a constante de Boltzmann², e \mathcal{H}_j a energia do sistema dada pelo hamiltoniano no estado j . A soma é realizada sobre todos os estados acessíveis do sistema. Ao obter a função canônica de partição é possível calcular a energia livre de Gibbs por sítio, no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$), que é dada por

$$g = g(T, H) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[-\frac{1}{\beta N} \ln Z \right]. \quad (2.2)$$

Ao encontrarmos a função canônica de partição e a energia livre, podemos obter os demais observáveis de interesse termodinâmico, relacionando assim o comportamento macroscópico do sistema às suas propriedades microscópicas. O parâmetro de ordem é definido por

$$m = m(T, H) = - \left(\frac{\partial g}{\partial H} \right)_T, \quad (2.3)$$

já a entropia por spin é definida por

$$s = s(T, H) = - \left(\frac{\partial g}{\partial T} \right)_H. \quad (2.4)$$

Conhecendo a energia livre também é possível obter o calor específico a volume constante C_v e a susceptibilidade magnética χ através das relações

$$C_v = -T \left(\frac{\partial^2 g}{\partial T^2} \right)_H = T \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_H \quad (2.5)$$

e

$$\chi = - \left(\frac{\partial^2 g}{\partial H^2} \right)_T = \left(\frac{\partial m}{\partial H} \right)_T. \quad (2.6)$$

Estas derivadas da energia livre permitem caracterizar o tipo de transição de fase que um dado material sofre. Se s e m apresentarem um salto descontínuo na região da transição de fase, a transição é dita descontínua ou de primeira ordem. Caso as funções que descrevem estas grandezas forem contínuas na transição de fase, mas as suas derivadas (C_v e χ) apresentarem

¹Os sistemas que estamos considerando são sólidos, cujo volume é constante e proporcional ao número de partículas. Assim, N também é constante e será, portanto, omitido das próximas relações.

² $K_B = 1,38054 \times 10^{-23} \text{ J/K}$.

uma divergência na região crítica, a transição é dita contínua³. A relação entre a função canônica de partição e a energia livre de Gibbs permite fazer a conexão das grandezas de interesse termodinâmico com a interpretação feita pela mecânica estatística.

Com isso, a magnetização e a susceptibilidade magnética podem ser escritas em termos de valores médios:

$$m = \frac{1}{N} \sum_i \langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{NZ} \sum_i \sum_j \sigma_i e^{-\beta \mathcal{H}_j} \quad (2.7)$$

e

$$\chi = \frac{\langle \sigma_i^2 \rangle - \langle \sigma_i \rangle^2}{K_B T}, \quad (2.8)$$

sendo σ_i o spin do sítio i e \mathcal{H}_j a energia do hamiltoniano no estado j do sistema. Por simplificação, a partir da equação (2.7) a soma sobre os spins dos sítios i será considerada implícita, não constando novamente na notação.

Outra grandeza importante é a energia interna U , que pode ser obtida diretamente da função canônica de partição e expressa, no limite termodinâmico, por

$$U = \langle \mathcal{H}_j \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = Z^{-1} \sum_j \mathcal{H}_j e^{-\beta \mathcal{H}_j}. \quad (2.9)$$

Em uma região de transição de fase contínua, espera-se que a energia interna sofra uma mudança de comportamento. Esta mudança de comportamento implica em uma divergência na primeira derivada da energia interna: o calor específico, que já foi definido acima como uma derivada da entropia, também pode ser obtido derivando a energia interna do sistema e, assim como U , pode ser expresso em termos de valores médios:

$$C_v = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{\langle \mathcal{H}_j^2 \rangle - \langle \mathcal{H}_j \rangle^2}{K_B T^2}. \quad (2.10)$$

O comportamento destas grandezas físicas em materiais com diferentes tipos de interações magnéticas e em diferentes condições de temperatura é discutido a seguir.

³Em uma definição comumente utilizada, mas inadequada, diz-se que uma transição contínua é de segunda ordem. Este é um conceito introduzido por Ehrenfest, que definia uma transição como sendo de ordem N quando a N -ésima derivada da energia livre apresentava uma descontinuidade. Porém, como discutido acima, nas transições contínuas verifica-se apenas uma divergência das segundas derivadas da energia livre na região crítica.

2.2.2 Paramagnetismo

A fase paramagnética é comum em sistemas de spins em altas temperaturas e não possui ordenamento magnético devido, principalmente, à presença de flutuações térmicas no sistema, que levam os spins a trocarem constantemente de configuração.

Na ausência de um campo externo a fase paramagnética não apresenta magnetização e, portanto, é caracterizada pela inexistência de magnetização espontânea. Na presença de um campo externo, os spins de um material na fase paramagnética tendem a se alinhar na direção deste campo, resultando em uma magnetização não nula para uma temperatura finita. Isso tem um sentido mais amplo quando consideramos a susceptibilidade magnética como a derivada da magnetização em função do campo: a susceptibilidade magnética é positiva e proporcional ao inverso da temperatura em um paramagneto⁴.

Na fase paramagnética o calor específico é positivo e tende a zero quando a temperatura tende a infinito. Isso advém do comportamento da energia interna, que é negativa⁵ e cresce com a temperatura. Na fase paramagnética a energia interna tende à zero para temperatura infinita⁶. Sistemas com spins não interagentes podem apresentar a fase paramagnética inclusive em temperatura igual à zero. Isso se deve ao fato de que o ordenamento magnético é dependente da existência de interações entre as partículas do sistema.

2.2.3 Ferromagnetismo

A fase ferromagnética apresenta ordenamento magnético e costuma ocorrer para sistemas de spins interagentes em baixas temperaturas⁷. O ferromagnetismo ocorre quando uma quebra espontânea de simetria leva o sistema para um estado de ordenamento magnético em que os

⁴Entende-se por material paramagnético, ou paramagneto, aquele que se encontra na fase paramagnética, independente da existência ou não de interações entre os spins do sistema que levem a um ordenamento magnético abaixo de uma certa temperatura crítica.

⁵A energia interna negativa evidencia o estado ligado em que as partículas do sistema se encontram.

⁶A mecânica estatística nos mostra que para temperatura infinita os estados do sistema são equiprováveis. É aceitável que com tantas flutuações térmicas nenhuma configuração seja privilegiada, ou mais provável, em relação às demais.

⁷Afirmar que o ferromagnetismo é um fenômeno de baixa temperatura é, embora impreciso, uma consequência do estudo teórico feito sobre estes materiais. Experimentalmente a temperatura crítica de materiais ferromagnéticos pode variar muito. Como exemplificação disso, a liga de $GdCl_3$ e o cobalto apresentam T_c em $2,2K$ e $1388K$, respectivamente [ASHCROFT, 2011].

spins estão alinhados em mesma direção e sentido (YOSIDA, 1996; CULLITY, 1972), conforme ilustrado na figura 2.2. A temperatura crítica é conhecida como temperatura de Curie T_C em ferromagnetos e, quando atingida de cima, é caracterizada pelo início da magnetização espontânea do sistema.

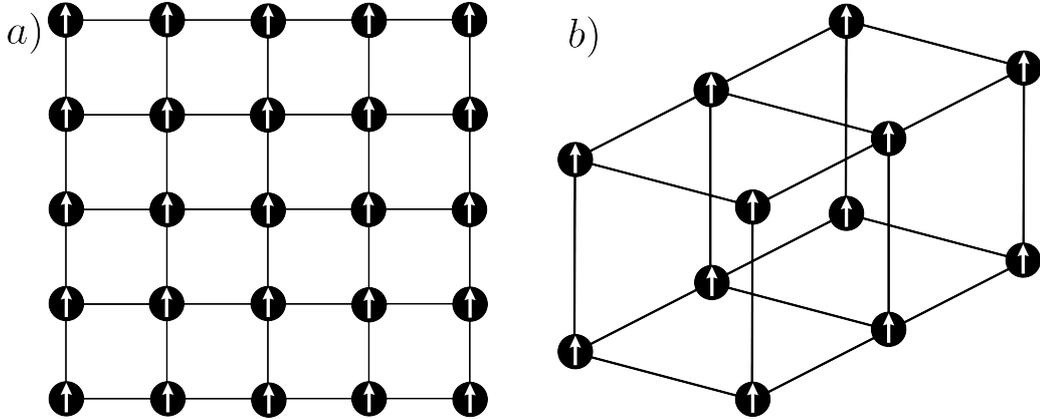


Figura 2.2: Representação esquemática da fase ferromagnética para as redes quadrada (a) e cúbica simples (b).

Em materiais ferromagnéticos a energia interna tende ao seu valor mínimo⁸ para $T \rightarrow 0$. O comportamento de U pode marcar a transição entre as fases paramagnética e ferromagnética, pois deve ocorrer uma mudança de comportamento na transição para-ferromagnética. Esta mudança leva a uma divergência do calor específico magnético na região crítica. Abaixo da temperatura crítica, C_v cai rapidamente para zero.

Outra grandeza que apresenta uma divergência na T_C é a susceptibilidade magnética, que também cai para zero para temperaturas menores que a crítica. A transição para-ferromagnética é então caracterizada como uma transição contínua e, portanto, espera-se um comportamento contínuo do parâmetro de ordem m , que terá valor diferente de zero para $T < T_C$.

2.2.4 Antiferromagnetismo

O antiferromagnetismo é caracterizado também pelo ordenamento magnético de spins interagentes em baixas temperaturas⁹, contudo, como podemos ver na figura 2.3, os spins

⁸Em um material em que não há frustração geométrica o valor mínimo da energia é igual ao negativo do número de interações do sistema.

⁹As temperaturas críticas de materiais antiferromagnéticos variam bastante. Ashcroft e Mermin (2011) citam alguns materiais que explicitam isso: $MnCl_2 - T_N = 2K$; $CoO - T_N = 291K$; e $VS - T_N = 1040K$.

tendem a permanecer alinhados em sentido oposto aos seus primeiros vizinhos, na ausência de campo externo.

A quebra espontânea de simetria também ocorre em sistemas antiferromagnéticos na temperatura de transição para a fase antiferromagnética, chamada temperatura de Néel T_N . Os materiais antiferromagnéticos não apresentam magnetização espontânea, assim como os paramagnetos, mas é possível identificar um ordenamento magnético caracterizado por duas sub-redes interpenetrantes de estruturas idênticas (YOSIDA, 1996; CULLITY, 1972; ASHCROFT; MERMIN, 2011).

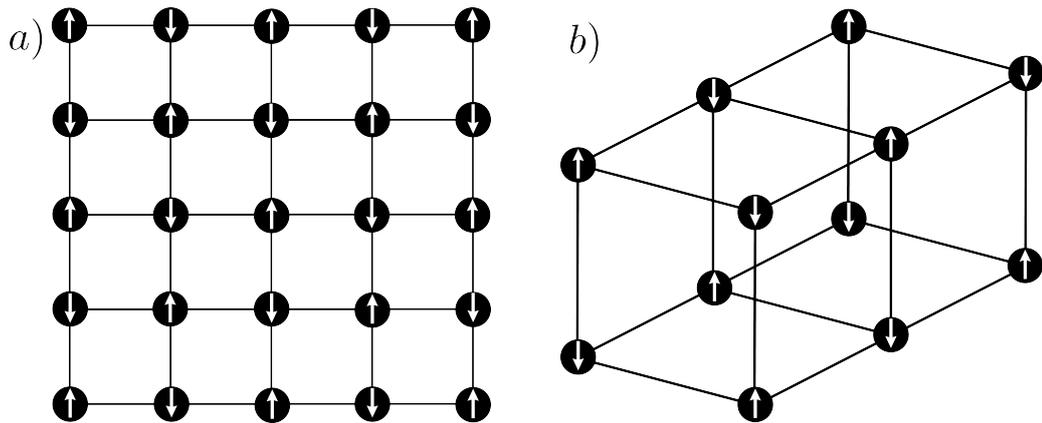


Figura 2.3: Representação esquemática da fase antiferromagnética para as redes quadrada (a) e cúbica simples (b).

Em cada uma destas sub-redes haverá magnetização espontânea diferente de zero no ordenamento antiferromagnético, como pode ser visto na figura 2.3 ¹⁰. Stanley (1987) define então o parâmetro de ordem dos materiais antiferromagnéticos como sendo a magnetização das sub-redes. Embora isso fuja da relação termodinâmica para o parâmetro de ordem, dada pela equação (2.7), esta é uma definição que concorda com o proposto por Landau, que considera, em geral, o parâmetro de ordem nulo na fase mais simétrica (desordenada ou que ocorre em altas temperaturas) e diferente de zero na fase menos simétrica (ou ordenada) (SALINAS, 2005; STANLEY, 1987).

Sistemas antiferromagnéticos costumam ter uma grande resistência à presença de um campo externo, não respondendo da mesma forma que materiais paramagnéticos, contudo, na presença de um campo externo intenso, os spins dos materiais antiferromagnéticos tendem a se alinhar na direção deste campo. Isso vai implicar em um comportamento da susceptibilidade

¹⁰Uma rede cúbica simples pode ser vista como duas sub-redes cúbicas de face centrada interpenetradas.

magnética na transição para-antiferromagnética diferente da encontrada na região da T_C de materiais ferromagnéticos: a susceptibilidade magnética do sistema apresenta apenas um máximo um pouco acima da T_N , sem divergência (ASHCROFT; MERMIN, 2011). No entanto, uma divergência é obtida na susceptibilidade magnética das sub-redes de um antiferromagneto, reforçando a definição da magnetização das sub-redes como parâmetro de ordem para sistemas antiferromagnéticos.

A energia interna e o calor específico apresentam o mesmo comportamento em materiais ferro e antiferromagnéticos: enquanto U apresenta uma mudança de comportamento na T_N , o calor específico diverge na região crítica.

3 MODELO DE ISING CLÁSSICO

O modelo de Ising (MI) (BRUSH, 1967; SALINAS, 2005) descreve as principais características de um material magnético, considerando interações dos momentos magnéticos em uma única direção. O MI permite descrever as fases para, ferro e antiferromagnética. A seguir apresentamos o modelo de Ising e os principais resultados obtidos com as soluções analíticas conhecidas. Discutimos também a aproximação de campo médio e a simulação do MI através do método de Monte Carlo.

3.1 Descrição do Modelo

O Modelo de Ising descreve o comportamento de um material magnético uniaxial, cujos spins (representados por σ) podem assumir duas configurações: +1 (para cima) e -1 (para baixo). O hamiltoniano do modelo de Ising é dado por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i,j}^N \sigma_i \sigma_j - H \sum_i^N \sigma_i, \quad (3.1)$$

para o qual J é a interação de troca¹ entre os spins vizinhos σ_i e σ_j , i e j denotam a posição dos sítios e N é o número de sítios da rede. A interação de troca determina o alinhamento dos spins no estado fundamental ($T = 0$), sendo $J > 0$ para o ordenamento FE e $J < 0$ a interação de troca AF. O campo magnético externo H , é o campo que atua sobre os spins da rede. Contudo, muitos resultados interessantes do MI são obtidos com campo externo nulo, pois permitem explicar a magnetização espontânea dos materiais ferromagnéticos, por exemplo.

3.2 As Soluções Analíticas

O modelo de Ising possui solução exata, obtida analiticamente, para as redes unidimensional e bidimensional, com interações de primeiros vizinhos, na ausência de campo externo. A solução exata obtida por Ernst Ising, em 1925, revelou a inexistência de magnetização espontânea para uma rede unidimensional para $T > 0$. Segundo Salinas (2005), “há um aumento

¹ J é a interação de acoplamento entre os spins de sítios vizinhos, que pode ser interpretada como o termo quântico de troca, de natureza columbiana (SALINAS, 2005).

atribuído a Landau para mostrar que não existe estado ordenado [...] num sistema unidimensional com interações de curto alcance”. Se considerarmos o custo energético da criação de uma parede de domínio em uma rede unidimensional ($\Delta U = 2J$) e o aumento entrópico da criação desta parede em qualquer lugar da rede ($\Delta S = K_B \ln|N - 1|$) verificamos que a energia livre de Gibbs deverá ter uma variação negativa,

$$\Delta G = 2J - K_B T \ln|N - 1|,$$

para $T \neq 0$ e $N \rightarrow \infty$. “Como a energia livre diminui, há uma tendência de criação de domínios, que impediria a estabilidade de qualquer fase ordenada” (SALINAS, 2005).

Lars Onsager obteve, em 1944, a solução analítica para o modelo de Ising em uma rede bidimensional. Tal solução é considerada um grande feito matemático (STANLEY, 1987), dada a sua dificuldade e grande importância para o entendimento do comportamento de fenômenos críticos. A solução de Onsager leva à expressão para a magnetização por spin

$$m = \left(1 - [\operatorname{senh} 2\beta J]^{-4}\right)^{1/8} \quad (3.2)$$

para $T < T_C$, sendo $K_B T_C / J = 2.269$. Nas proximidades da transição de fase o calor específico a volume constante diverge logicamente, podendo ser expresso na forma assintótica $C_v \sim \ln|T - T_c|$. Este resultado, mostrando uma divergência sem descontinuidade na temperatura crítica, é uma das importantes verificações possibilitadas pela solução de Onsager, contrariando as soluções obtidas na fenomenologia clássica, que indicavam um calor específico com uma descontinuidade na região crítica.

3.3 A Teoria de Campo Médio

A aplicação da teoria de campo médio (TCM), ou aproximação de Bragg-Williams, no modelo de Ising, leva à simplificação dos resultados para o modelo, permitindo a obtenção dos observáveis. Contudo, tal método implica em desconsiderar as flutuações nas funções de correlação, fazendo a aproximação

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle = m^2,$$

que implica em uma grande perda das correlações no sistema.

A expressão para a magnetização por spin é

$$m = \tanh(\beta J z m + \beta H), \quad (3.3)$$

a qual assume valor não nulo para $K_B T_C / J = z$. Aqui, z é o número de coordenação² da rede. Isso significa que o tratamento com a TCM leva à magnetização espontânea para $T=2$ na rede unidimensional, o que está em total desacordo com o resultado analítico de Ising. Contudo, a precisão dos resultados da TCM melhora com o aumento da dimensionalidade dos sistemas físicos tratados.

3.4 O Método de Monte Carlo

As simulações computacionais são uma alternativa para o tratamento de modelos que não possuem solução analítica conhecida. Dentre as possíveis técnicas utilizadas destaca-se o método de Monte Carlo, um dos principais métodos estocásticos. Neste trabalho abordaremos o algoritmo de Metropolis que oferece grande precisão para o modelo de Ising ferromagnético e antiferromagnético, permitindo traçar um comparativo entre os resultados de simulações e os obtidos com métodos aproximativos.

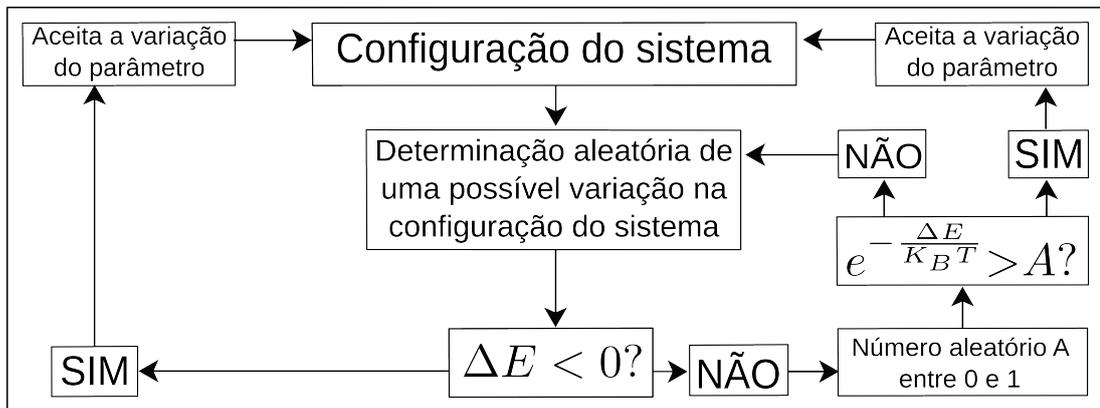


Figura 3.1: Fluxograma do algoritmo de Metropolis.

O algoritmo de Metropolis, descrito na figura 3.1, consiste na utilização da distribuição de probabilidades de Boltzmann como fator de probabilidade para avaliar as transições entre um estado e outro do sistema. Um passo de Monte Carlo consiste na realização da execução do

²O número de coordenação é dado pelo número de primeiros vizinhos que cada sítio tem na rede.

algoritmo descrito na figura 3.1, com a realização de uma determinação aleatória de uma possível variação na configuração do sistema. Embora precisas, as simulações costumam envolver um custo computacional elevado, além de se tratarem de resultados para sistemas finitos³, o que leva à perda das correlações de longo alcance da rede.

3.4.1 Sistemas simulados

Foram realizadas simulações através do algoritmo de Metropolis para a magnetização de sub-redes nas redes hexagonal, quadrada e cúbica. Estes resultados são apresentados na subseção dos resultados da TCMCC, juntamente com o resultado exato e os obtidos através da TCM.

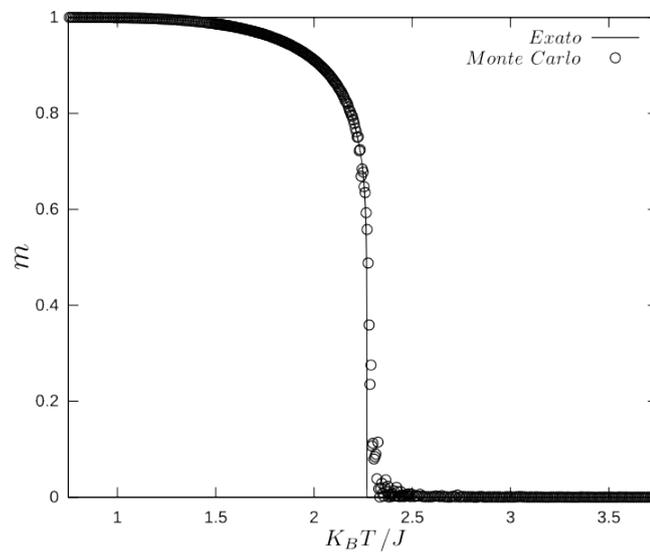


Figura 3.2: Magnetização por spin em função da temperatura para a rede quadrada no modelo de Ising. O resultado demonstra a acurácia das simulações de Monte Carlo realizadas.

As redes hexagonal e quadrada foram simuladas com 40 mil spins e 10^9 passos de Monte Carlo para cada valor de temperatura. Para a rede cúbica foram simulados 125 mil spins, com 10^9 passos de Monte Carlo para cada temperatura. O espaçamento entre os valores de temperatura foi de $0.005K_B T / J$ nas proximidades da T_C (em um intervalo de $0.75K_B T / J$) e $0.01K_B T / J$ para demais valores de $K_B T / J$.

³Em geral, simulações de sistemas magnéticos envolvem algumas centenas ou milhares de spins, o que é distante do limite termodinâmico, que é da ordem de 10^{23} spins.

4 TEORIA DE CAMPO MÉDIO COM CLUSTERS CORRELACIONADOS

A teoria de campo médio com clusters correlacionados foi publicada em 2009, por Daisuke Yamamoto, que propôs uma abordagem com clusters utilizando características de alguns outros métodos aproximativos. O método já foi utilizado em pesquisas recentes (CHVOJ; KUDRNOVSKÝ; DRCHAL, 2010), mas ainda possui poucas aplicações a sistemas diferentes dos tratados por Yamamoto. A seguir abordamos o caso do modelo de Ising ferromagnético como publicado pelo autor da TCMCC (YAMAMOTO, 2009, 2010), descrevendo os principais resultados e os detalhes da técnica.

4.1 Aplicação ao ferromagneto de Ising

A TCMCC, como publicada por Yamamoto (YAMAMOTO, 2009, 2010), permite a obtenção das fases PM e FE no modelo de Ising ferromagnético. Considerando o hamiltoniano do modelo de Ising, já discutido no capítulo 3,

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i,j}^N \sigma_i \sigma_j, \quad (4.1)$$

podemos dividir o sistema em clusters e reescrever o hamiltoniano da seguinte forma:

$$\mathcal{H}_\nu = -J \sum_{\langle i,j \rangle \in \nu} \sigma_i \sigma_j - \sum_{\substack{i \in \nu \\ i \in \bar{\nu}}} \sigma_i \sigma_{\bar{i}}. \quad (4.2)$$

O primeiro termo corresponde às interações dentro de um dado cluster ν e o segundo termo, às interações entre os clusters da rede. A aproximação da TCMCC consiste em considerar que as interações entre os spins do cluster ν e dos cluster vizinhos ocorrem através de campos efetivos $h_e^{\sigma_i}$, que dependem da configuração dos spins do cluster ν . Assim, com a aproximação da TCMCC para o modelo de Ising, podemos expressar o hamiltoniano efetivo:

$$\mathcal{H}_\nu = -J \sum_{\langle i,j \rangle \in \nu} \sigma_i \sigma_j - \sum_{i \in \nu} h_e^{\sigma_i} \sigma_i. \quad (4.3)$$

O segundo termo é, portanto, característico da aproximação da TCMCC, e consiste na interação dos spins do cluster ν com campos efetivos $h_e^{\sigma_i}$.

Na aproximação da TCMCC a rede é dividida em clusters iguais, buscando adequar o formato do cluster à simetria da rede. Por exemplo, na rede quadrada (veja figura 4.2) o formato de cluster escolhido é quadrado¹ com 4 spins (n_s) em cada cluster da rede. Feita a divisão do sistema, é então determinado um cluster central (ν) e os clusters vizinhos (ν', ν'', \dots) com os quais este cluster central interage. As interações entre spins do cluster ν são calculadas exatamente e as interações entre spins de ν e clusters mais próximos é feita através dos campos efetivos, que são aproximações das interações dos spins de ν com o resto da rede.

4.1.1 Rede Hexagonal

Na figura 4.1 é descrito o tratamento para o caso ferromagnético da rede hexagonal, sendo detalhadas as interações para dois clusters ν e ν' . Os campos efetivos dependem das configurações do spin σ_i e, no tratamento ferromagnético, estes campos podem assumir 2 valores distintos, sendo um para cada configuração possível de σ_i ($+1, -1$).

Para a rede hexagonal, descrita na figura 4.1, há apenas um spin interagindo entre os clusters ν e ν' (e entre quaisquer outros clusters vizinhos) e os campos efetivos são definidos como $h_e^{\sigma_i} = Jm^{\sigma_i}$. Sendo m^{σ_i} campos médios que atuam sobre os spins do cluster ν .

É necessário obter, portanto, dois campos médios. Para isso, escolhamos o spin do sítio 1 (σ_1) do cluster ν e definimos ele como o spin s que interage com o spin $\sigma_{4'}$ do cluster ν' . Veja na figura 4.1 b) que o campo $h_e^{\sigma_{4'}}$ é substituído pelos valores de s ($\sigma_1 = \pm 1$). Para cada valor de s será determinado um campo médio (m^+ ou m^-) calculando o valor médio de $\sigma_{4'}$, através da equação

$$m^s = m^\pm = \frac{\sum \sigma_{k'} e^{-\beta \mathcal{H}_{\nu'}^\pm}}{\sum e^{-\beta \mathcal{H}_{\nu'}^\pm}}, \quad (4.4)$$

na qual $\sigma_{k'} = \sigma_{4'}$ e $\beta = 1/K_B T$. O hamiltoniano do cluster ν' é dado por

$$\mathcal{H}_{\nu'} = -J \sum_{\langle i,j \rangle \in \nu'} \sigma_i \sigma_j - \sum_{\substack{i \in \nu' \\ i \neq k'}} h_e^{\sigma_i} \sigma_i - J s \sigma_{k'}. \quad (4.5)$$

Os campos médios são obtidos ao solucionarmos auto-consistentemente as equações (4.4) e (4.5). Feito isso, utiliza-se estes campos médios para obter o hamiltoniano do cluster ν , dado

¹Yamamoto (2009) também apresentou a aplicação da técnica para a rede quadrada considerando um cluster com 2 spins, contudo, o custo computacional desta aplicação torna-se ainda maior que para o caso de um cluster quadrado com 4 spins.

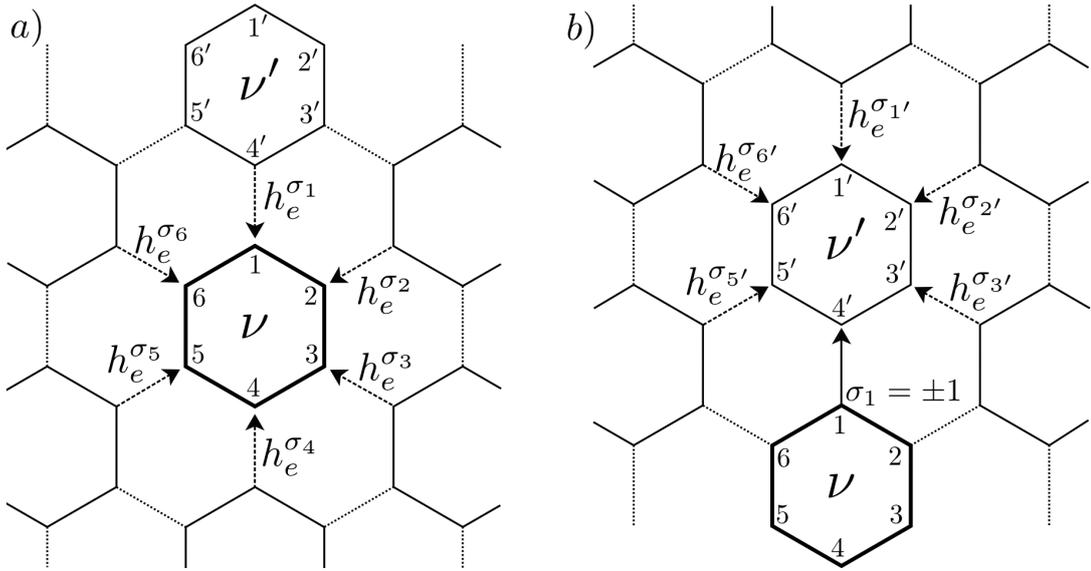


Figura 4.1: Aplicação da TCMCC à rede com geometria hexagonal. a) Interações do cluster ν com a vizinhança. b) Interações do cluster ν' com a vizinhança e com a substituição de um campo auxiliar por um spin s (σ_1).

pela equação (4.3). Assim, é possível obter a magnetização por spin (m) do cluster ν , dada por

$$m = \langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{n_s} \frac{\sum \sigma_i e^{-\beta \mathcal{H}_\nu}}{\sum e^{-\beta \mathcal{H}_\nu}}. \quad (4.6)$$

4.1.2 Rede quadrada

No caso da rede quadrada, descrita na figura 4.2, há dois spins interagindo entre os clusters ν e ν' , conseqüentemente os campos efetivos (neste caso $h_e^{\sigma_i \sigma_j}$) dependerão dos spins σ_i e σ_j , que podem assumir 4 configurações diferentes: $++$, $+-$, $-+$ e $--$. Neste caso, os campos efetivos são definidos como $h_e^{\sigma_i \sigma_j} = J m^{\sigma_i \sigma_j}$, sendo $m^{\sigma_i \sigma_j}$ campos médios que atuam sobre os spins do cluster ν da rede quadrada. Para a rede quadrada precisamos substituir $h_e^{\sigma_i} \rightarrow h_e^{\sigma_i \sigma_j}$ nas equações (4.3) e (4.5), tornando necessário resolver 5 equações auto-consistentemente.

Para isso, escolhemos os spins dos sítios 1 e 2 (σ_1 e σ_2) do cluster ν e definimos eles como os spins s e s' que interagem com os spins $\sigma_{3'}$ e $\sigma_{4'}$, respectivamente, do cluster ν' . Veja na figura 4.2 b) que os campos $h_e^{\sigma_{3'} \sigma_{4'}}$ e $h_e^{\sigma_{4'} \sigma_{3'}}$ são substituídos pelos valores de s ($\sigma_1 = \pm 1$) e s' ($\sigma_2 = \pm 1$). Para cada conjunto de valores de s e s' será determinado um campo médio ($m^{ss'} = \{m^{++}, m^{+-}, m^{-+}, m^{--}\}$) calculando o valor médio² de $\sigma_{3'}$, através da equação (4.4),

²Poderíamos ter utilizado o valor médio de $\sigma_{4'}$, contanto que definíssemos $\sigma_1 = s'$ e $\sigma_2 = s$.

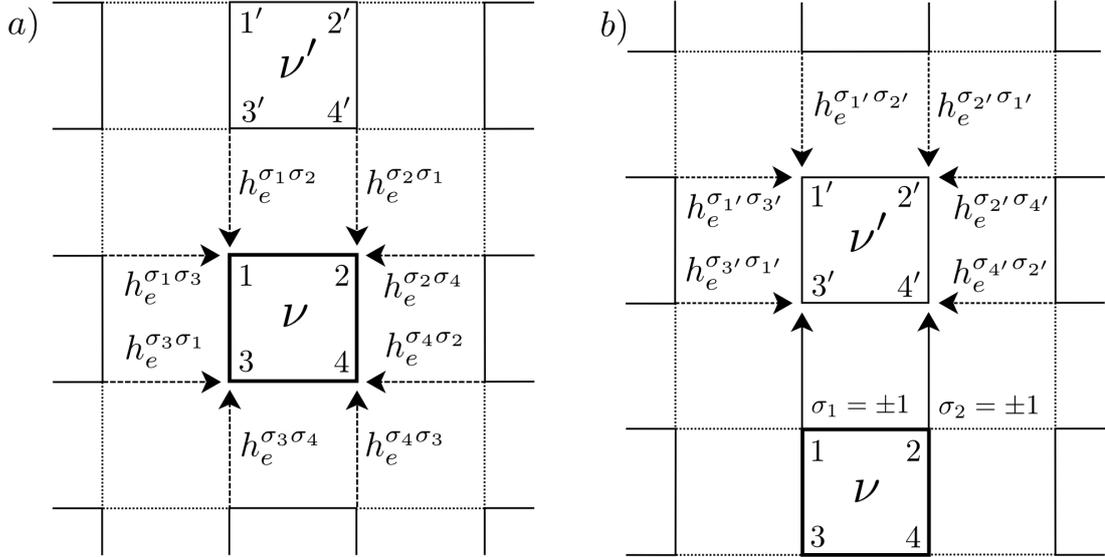


Figura 4.2: Aplicação da TCMCC à rede com geometria quadrada. a) Interações do cluster ν com a vizinhança. b) Interações do cluster ν' com a vizinhança e com a substituição de dois campos auxiliares por spins s e s' (σ_1 e σ_2).

na qual $\sigma_{k'} = \sigma_{3'}$.

O hamiltoniano do cluster ν' para a rede quadrada é dado por

$$\mathcal{H}_{\nu'} = -J \sum_{\langle i,j \rangle \in \nu'} \sigma_i \sigma_j - \sum_{\substack{i \in \nu' \\ i \neq \{k', l'\}}} h_e^{\sigma_i \sigma_j} \sigma_i - J s \sigma_{k'} - J s' \sigma_{l'}, \quad (4.7)$$

para o qual $\sigma_{l'} = \sigma_{4'}$ nesta abordagem. Ao obtermos estes campos médios, podemos calcular a magnetização por spin do cluster ν , através da equação (4.6).

Na figura 4.3 são apresentados os resultados dos campos médios m^{σ_i} e $m^{\sigma_i \sigma_j}$ e da magnetização por spin para as redes hexagonal e quadrada. Os 2 campos médios para a rede hexagonal (m^+ e m^-) são anti-simétricos na fase paramagnética, a qual é marcada pelo parâmetro de ordem m com valor nulo. Contudo, na temperatura crítica, os campos médios apresentam uma mudança de comportamento, deixando de ser anti-simétricos e convergindo para o mesmo valor³, neste caso, igual a +1. A mudança de comportamento dos campos médios ocorre na mesma temperatura em que ocorre a transição entre as fases paramagnética e ferromagnética.

Os 4 campos médios obtidos no caso da rede quadrada (m^{++} , m^{+-} , m^{-+} e m^{--}) apresentam o mesmo comportamento de anti-simetria na fase paramagnética (à direita na figura

³Os campos médios também poderiam tender a -1, pois ambas as configurações de alinhamento, com todos os spins para cima ou todos para baixo, correspondem ao estado de mínima energia do sistema

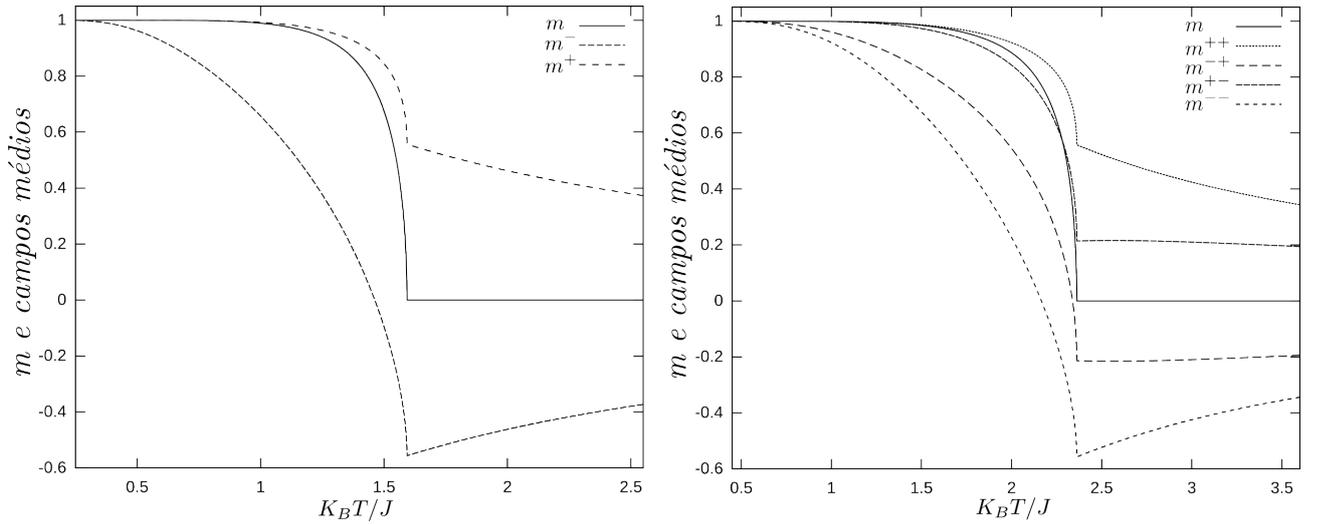


Figura 4.3: Campos médios e magnetização por spin (m) das redes hexagonal (esquerda) e quadrada.

4.3). Com a mudança de comportamento dos campos médios o sistema apresenta uma transição de fase, marcada pelo valor não nulo da magnetização por spin. O tratamento da rede quadrada também permite observar o efeito das diferentes configurações do cluster central sobre o valor dos campos médios. Considerando os campos médios acima da T_C , percebemos que quando um par de spin (neste caso, os pares podem ser $\sigma_1\sigma_2$, $\sigma_2\sigma_4$, $\sigma_3\sigma_4$ ou $\sigma_1\sigma_3$) do cluster central está em uma configuração que satisfaz o estado de mínima energia, o valor absoluto dos campos médios é maior. Podemos perceber isso pelos valores absolutos de m^{++} e m^{--} , que são maiores que os valores absolutos de m^{+-} e m^{-+} . Isso é justificável pela dependência dos campos médios que atuam sobre o cluster central com os valores médios dos spins do cluster vizinho. Para altas temperaturas, o valor médio de um spin no cluster ν' , por exemplo, é estimulado a ter o mesmo valor do par de spins alinhados no cluster ao lado (ν), pois esta é uma configuração que minimiza a energia.

Contudo, quando a temperatura do sistema atinge um valor crítico, as interações ferromagnéticas são suficientes para que apenas configurações que satisfaçam o estado de mínima energia sejam mais prováveis. Ou seja, configurações em que spins não estão alinhados na mesma direção e sentido têm uma energia alta, que diminui muito a sua probabilidade. Por outro lado, abaixo da T_C , configurações em que os spins estão alinhados na mesma direção de uma forma que satisfaça também a tendência de alinhamento de toda a rede (que pode ser para cima ou para baixo), terão uma energia muito baixa em relação às demais configurações e, conseqüentemente, maior probabilidade. Com isso, para $T \rightarrow 0$, os campos médios tendem ao

mesmo valor, que no caso da figura 4.3 é +1 e satisfazem a configuração do estado fundamental do sistema, descrita pelo parâmetro de ordem m , que é igual a +1 no estado fundamental, indicando o alinhamento de todos os spins da rede.

4.1.3 Rede Cúbica

A aplicação da TCMCC para a rede com geometria cúbica simples (figura 4.4) é feita de forma análoga à aplicação às redes hexagonal e quadrada. Como as interações entre clusters vizinhos é dada sempre por 8 spins, 4 de cada cluster, os campos efetivos serão dependentes da configuração de 4 spins. Para diferenciar os campos efetivos é interessante seguir um padrão, determinado pela sequência de spins que estão envolvidos no cálculo dos campos médios. Por exemplo, para o campo agindo sobre o spin do sítio 1 (σ_1), consideramos os primeiros vizinhos de σ_1 (σ_2 e σ_3) e depois o seu segundo vizinho (σ_4) e definimos que o campo que atua sobre este spin é $h_e^{\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4}$. Usamos o mesmo critério⁴ para definir os demais campos efetivos que atuam sobre o cluster ν .

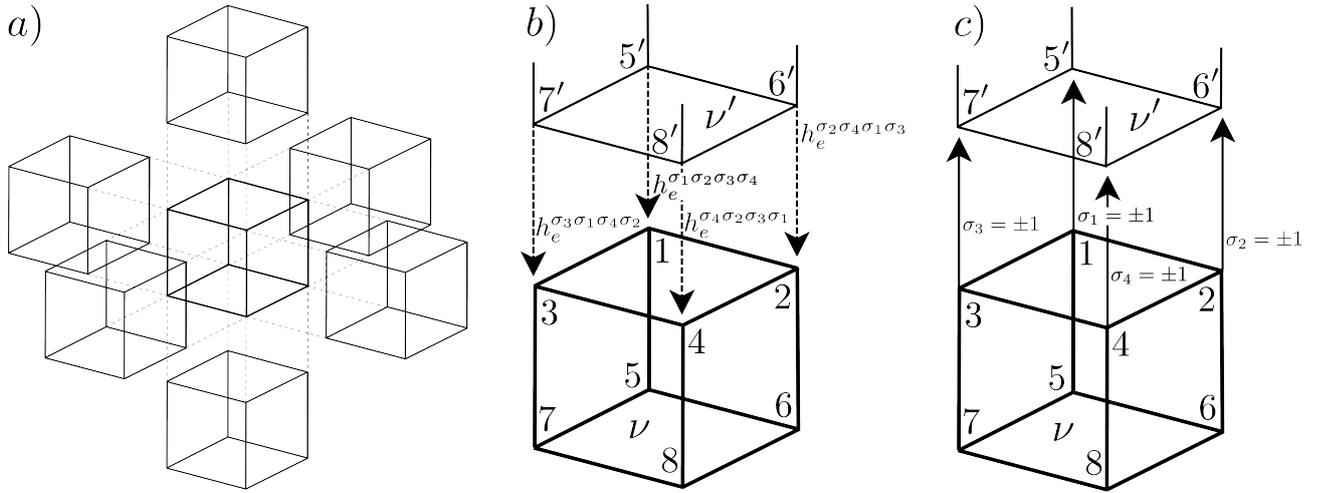


Figura 4.4: Aplicação da TCMCC à rede cúbica. a) A estrutura da rede cúbica. b) As interações, através de campos efetivos, entre dois clusters ν e ν' . c) Os campos efetivos substituídos pelos valores possíveis de 4 spins para aplicação da TCMCC.

Se considerarmos as configurações possíveis de 4 spins ($\sigma_i, \sigma_j, \sigma_k$ e σ_l) será necessário obter 16 campos médios ($m^{\sigma_i\sigma_j\sigma_k\sigma_l}$). Contudo, a forma como definimos os campos efetivos

⁴É este critério que assegura o uso do mesmo conjunto de campos médios ($m^{++++}, m^{+++}, \dots, m^{----}$) para qualquer spin da rede.

permite identificar uma simetria entre os campos médios: se os spins σ_2 e σ_3 são ambos segundos vizinhos de σ_1 e não há nenhuma diferença entre a posição destes spins na rede⁵, então poderíamos definir $h_e^{\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4} = h_e^{\sigma_1\sigma_3\sigma_2\sigma_4}$ sem alterar o resultado da aplicação da técnica.

A liberdade na escolha da importância dos spins σ_2 e σ_3 para o cálculo do campo médio, indica que alguns conjuntos de configurações destes spins terão igual efeito sobre o valor médio calculado. Mais precisamente, sempre que estes spins (que podem ser generalizados para σ_j e σ_k) assumirem valores distintos, haverá uma simetria a ser explorada na obtenção dos campos médios, pois $m^{\sigma_i\sigma_j\sigma_k\sigma_l} = m^{\sigma_i\sigma_k\sigma_j\sigma_l}$. Isso significa que

$$\begin{aligned}
 m^{+-+-} &= m^{+--+} \\
 m^{-+-+} &= m^{--++} \\
 m^{++--} &= m^{+-+-} \\
 m^{-+--} &= m^{--+-}
 \end{aligned}
 \tag{4.8}$$

tornando necessária a obtenção de apenas 12 campos médios na aplicação da TCMCC, que são descritos na figura 4.5.

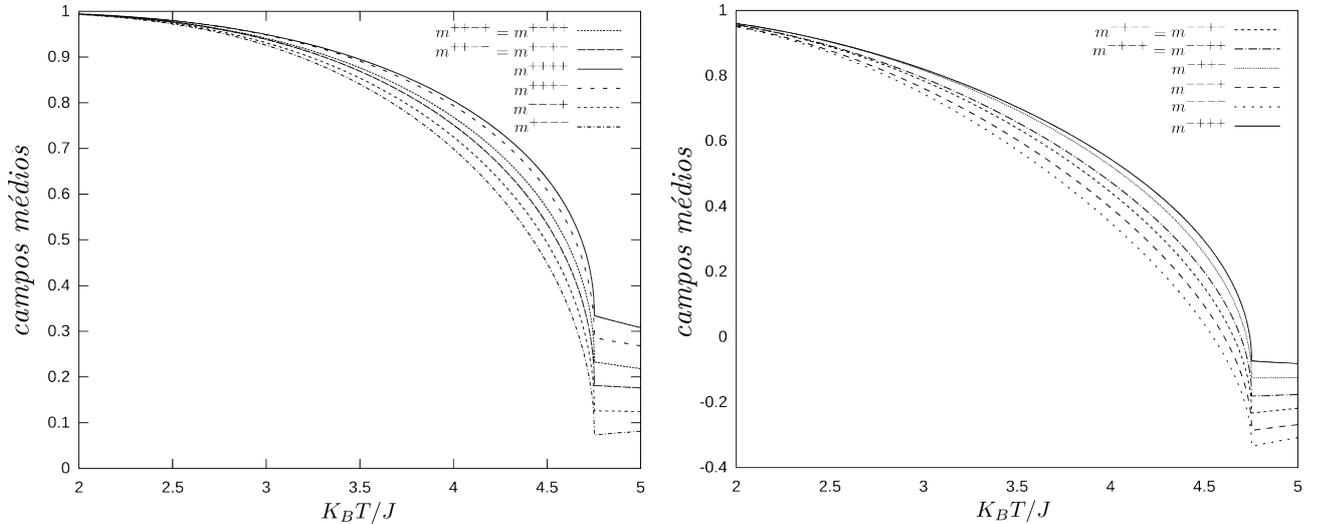


Figura 4.5: Campos médios para rede cúbica dividida em clusters com 8 spins.

Na tabela 4.1 a precisão dos resultados da TCMCC torna-se evidente, principalmente quando estes são comparados aos resultados obtidos com a TCM. O erro do valor de $K_B T_C/J$ para as 3 geometrias em relação ao resultado exato é apresentado entre parênteses, ao lado

⁵Supondo uma aplicação a outros tamanhos de clusters, haveria uma diferença entre os campos que atuam nos spins localizados em vértices do cluster e os que atuam nos outros spins.

dos resultados da TCM e TCMCC. Destaca-se que o erro da TCMCC é inferior a 6% nas 3 geometrias.

Tabela 4.1: Resultados de $K_B T_C / J$ para o MI em 3 geometrias

Estrutura	z	Exato	TCM (erro)	TCMCC (erro)
Hexagonal	3	1.519	3 (97,5%)	1.593 (4,9%)
Quadrada	4	2.269	4 (76,3%)	2.362 (4,1%)
Cúbica	6	4.510	6 (33,0%)	4.753 (5,4%)

Fonte: (YAMAMOTO, 2009)

5 APLICAÇÃO DA TEORIA DE CAMPO MÉDIO COM CLUSTERS CORRELACIONADOS AO MODELO DE ISING ANTIFERROMAGNÉTICO

Para aplicar a TCMCC ao caso antiferromagnético do modelo de Ising é necessário adaptar a técnica para que os campos efetivos possam assumir valores adequados ao estado fundamental do sistema tratado. Isso implica em dividir o sistema em duas sub-redes e diferenciar os campos que atuam nestas sub-redes. A descrição desta aplicação às redes hexagonal, quadrada e cúbica é feita nas seções a seguir. Após, apresentamos e discutimos os principais resultados obtidos destas aplicações da TCMCC.

5.1 Rede Hexagonal

A aplicação da TCMCC à geometria de rede hexagonal é realizada ao dividirmos o sistema em sub-redes interpenetrantes, conforme descrito na figura 5.1. Os sítios mais próximos (primeiros vizinhos) não fazem parte da mesma sub-rede.

Podemos verificar na figura 5.1 que os sítios 1, 3 e 5 (ou 2, 4 e 6) pertencem à sub-rede A (ou B). Devemos calcular, portanto, um grupo de campos médios para cada sub-rede do cluster ν . Para isso, é preciso observar as interações com os clusters vizinhos ν' e ν'' . Vamos iniciar expressando o hamiltoniano do cluster ν , que é dado pela equação (4.3), mas também pode ser expresso em termos dos campos médios e na ausência de campo externo, na seguinte forma

$$\mathcal{H}_\nu^{AF} = -J \sum_{\langle i,j \rangle \in \nu} \sigma_i^\rho \sigma_j^{\bar{\rho}} - Jm_A^{\sigma_1} \sigma_1^A - Jm_B^{\sigma_2} \sigma_2^B - Jm_A^{\sigma_3} \sigma_3^A - Jm_B^{\sigma_4} \sigma_4^B - Jm_A^{\sigma_5} \sigma_5^A - Jm_B^{\sigma_6} \sigma_6^B. \quad (5.1)$$

onde ρ e $\bar{\rho}$ podem ser A ou B, contanto que $\rho \neq \bar{\rho}$. Portanto, torna-se necessário obter os campos médios que atuam sobre as sub-redes A ($m_A^{\sigma_i}$) e B ($m_B^{\sigma_i}$), totalizando 4 campos médios (m_A^+ , m_A^- , m_B^+ e m_B^-). Isso é feito de forma análoga ao caso ferromagnético, mas nesse caso é preciso calcular o valor médio de spins de dois clusters vizinhos (ν' e ν''). Para resolver os campos médios atuando sobre a sub-rede A definimos o spin $\sigma_1 = s = \pm 1$, como descrito na figura 5.1 (a), e calculamos o valor médio do spin σ_4^B

$$m_A^s = m_A^\pm = \frac{\sum \sigma_4^B e^{-\beta \mathcal{H}_{\nu'}^{AF}}}{\sum e^{-\beta \mathcal{H}_{\nu'}^{AF}}}, \quad (5.2)$$

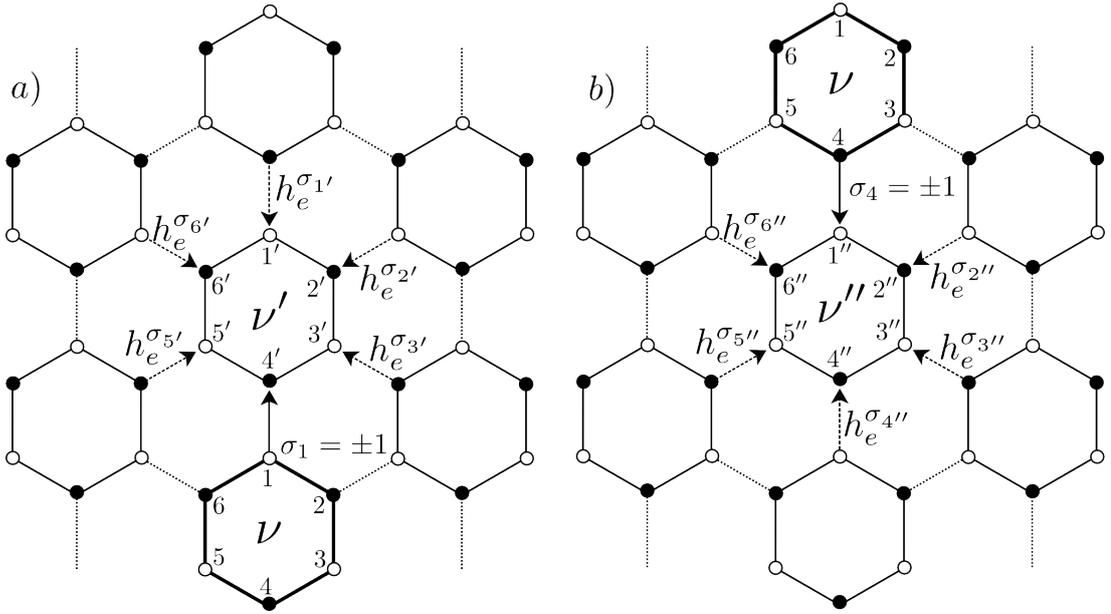


Figura 5.1: Rede hexagonal dividida em sub-redes A (\circ) e B (\bullet). a) Descrição das interações entre os clusters ν e ν' , com a interação do spin σ_1 fixada em ± 1 . b) Descrição das interações entre os clusters ν e ν'' , com a interação do spin σ_4 fixada em ± 1 .

sendo $\mathcal{H}_{\nu'}^{AF}$ o hamiltoniano do cluster ν' , dado por

$$\mathcal{H}_{\nu'}^{AF} = -J \sum_{\langle i,j \rangle \in \nu'} \sigma_i^\rho \sigma_j^{\bar{\rho}} - Jm_A^{\sigma_{1'}} \sigma_{1'}^A - Jm_B^{\sigma_{2'}} \sigma_{2'}^B - Jm_A^{\sigma_{3'}} \sigma_{3'}^A - Js \sigma_{4'}^B - Jm_A^{\sigma_{5'}} \sigma_{5'}^A - Jm_B^{\sigma_{6'}} \sigma_{6'}^B \quad (5.3)$$

onde o campo médio $m_B^{\sigma_{4'}}$ foi substituído por s . Obtemos os campos médios atuando sobre a sub-rede B de forma semelhante, ao definirmos o spin $\sigma_4^B = s' = \pm 1$, como descrito na figura 5.1 (b). Então podemos calcular o valor médio do spin $\sigma_{1''}^A$

$$m_B^{s'} = m_B^\pm = \frac{\sum \sigma_{1''}^A e^{-\beta \mathcal{H}_{\nu''}^{AF}}}{\sum e^{-\beta \mathcal{H}_{\nu''}^{AF}}}, \quad (5.4)$$

sendo $\mathcal{H}_{\nu''}^{AF}$ o hamiltoniano do cluster ν'' , dado por

$$\mathcal{H}_{\nu''}^{AF} = -J \sum_{\langle i,j \rangle \in \nu''} \sigma_i^\rho \sigma_j^{\bar{\rho}} - Js' \sigma_{1''}^A - Jm_B^{\sigma_{2''}} \sigma_{2''}^B - Jm_A^{\sigma_{3''}} \sigma_{3''}^A - Jm_B^{\sigma_{4''}} \sigma_{4''}^B - Jm_A^{\sigma_{5''}} \sigma_{5''}^A - Jm_B^{\sigma_{6''}} \sigma_{6''}^B \quad (5.5)$$

onde o campo médio $m_A^{\sigma_{1''}}$ foi substituído por s' . O conjunto de 4 campos médios para o caso antiferromagnético é obtido resolvendo auto-consistentemente as equações (5.2), (5.3), (5.4) e (5.5). Feito isso, torna-se possível obter o hamiltoniano do cluster central, através da equação (5.1), calcular a função de partição e obter os observáveis desejados.

Contudo, o número de campos médios para o caso AF do modelo de Ising na rede hexagonal duplicou em relação ao caso ferromagnético. O gráfico da figura 5.2 mostra os

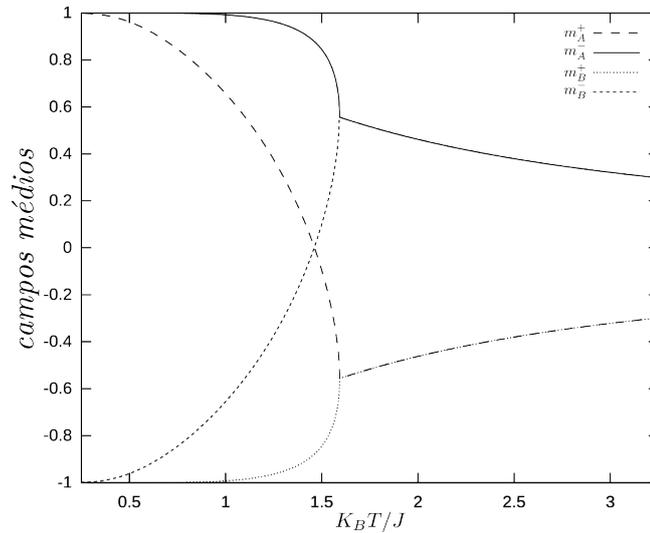


Figura 5.2: Campos médios obtidos para o caso antiferromagnético da rede hexagonal. Há uma anti-simetria entre os campos de sub-redes diferentes.

campos médios para o caso AF da rede hexagonal e permite identificar uma anti-simetria entre os campos de sub-redes distintas. No caso em que não há campo externo ($H = 0$) podemos utilizar esta anti-simetria para diminuir o número de equações a serem resolvidas auto-consistentemente, já que $m_A^+ = -m_B^-$ e $m_A^- = -m_B^+$. Sendo assim, basta obter os campos para uma das sub-redes ao resolvermos as equações (5.2) e (5.3). No entanto, a presença de um campo externo não nulo quebra a anti-simetria dos campos médios, tornando necessária a obtenção do conjunto de campos médios para cada sub-rede.

5.2 Rede Quadrada

A aplicação da TCMCC na rede quadrada com interações antiferromagnéticas é ainda mais simples que a realizada para a rede hexagonal, pois não é necessário considerar as interações com dois clusters vizinhos do cluster central. Contudo, *a priori* o número de campos médios ainda duplica para o caso AF. Na figura 5.3 é descrita a aplicação da TCMCC ao caso AF da rede quadrada, na qual os spins σ_1^A e σ_2^B são definidos como s e s' , respectivamente. Este par de spins pode assumir 4 configurações distintas ($ss' = \{++, +-, -+, --\}$), sendo necessário obter campos médios para cada configuração nas duas sub-redes.

Para a sub-rede A (identificada por \circ) os campos médios são definidos pelo valor médio

do spin $\sigma_{3'}$,

$$m_A^{ss'} = \frac{\sum \sigma_{3'}^B e^{-\beta \mathcal{H}_{\nu'}^{AF}}}{\sum e^{-\beta \mathcal{H}_{\nu'}^{AF}}}, \quad (5.6)$$

que depende do hamiltoniano do cluster ν' , dado por

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\nu'}^{AF} = & -J \sum_{\langle i,j \rangle \in \nu'} \sigma_i^\rho \sigma_j^{\bar{\rho}} - J\sigma_{1'}^A (m_A^{\sigma_{1'}\sigma_{2'}} + m_A^{\sigma_{1'}\sigma_{3'}}) - J\sigma_{2'}^B (m_B^{\sigma_{2'}\sigma_{1'}} + m_B^{\sigma_{2'}\sigma_{4'}}) \\ & - J\sigma_{3'}^B (m_B^{\sigma_{3'}\sigma_{1'}} + s) - J\sigma_{4'}^A (m_A^{\sigma_{4'}\sigma_{2'}} + s'). \end{aligned} \quad (5.7)$$

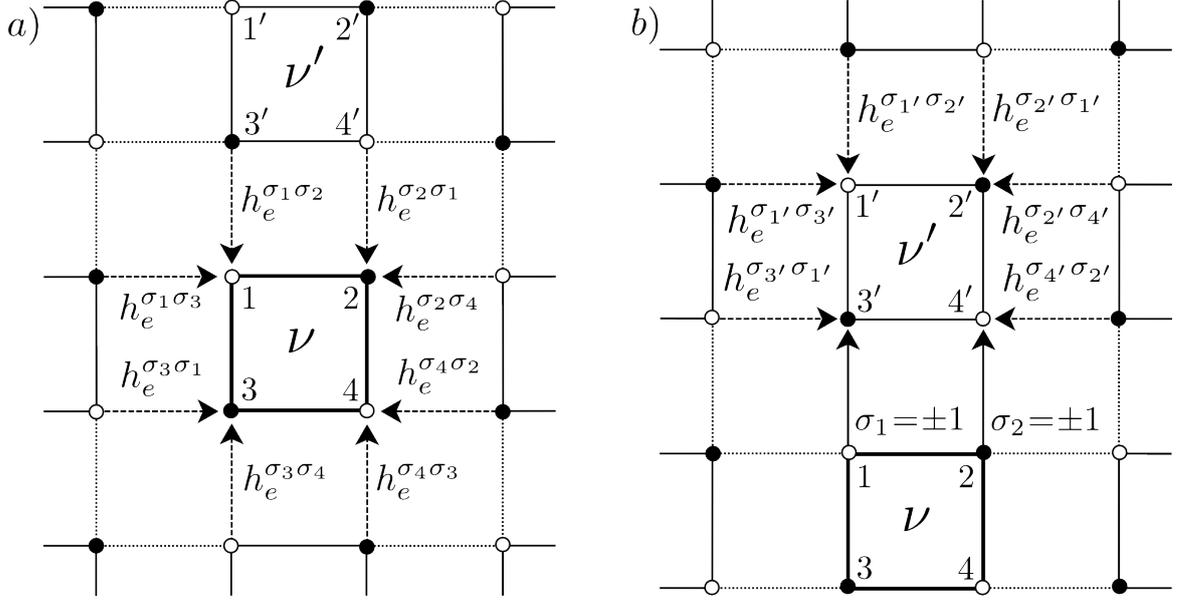


Figura 5.3: Rede quadrada dividida em sub-redes A (o) e B (•). a) Descrição das interações do cluster central ν . b) Descrição das interações entre os clusters ν e ν' , com os campos provenientes dos spins σ_1^A e σ_2^B substituidos por valores bem definidos (± 1).

Para a sub-rede B (identificada por •) os campos médios são definidos pelo valor médio do spin $\sigma_{4'}^A$,

$$m_B^{ss'} = \frac{\sum \sigma_{4'}^A e^{-\beta \mathcal{H}_{\nu'}^{AF}}}{\sum e^{-\beta \mathcal{H}_{\nu'}^{AF}}}, \quad (5.8)$$

que também depende do hamiltoniano do cluster ν' , dado pela equação (5.7). Os campos médios para a rede quadrada são obtidos ao resolvermos auto-consistentemente as equações (5.7), (5.8) e (5.6), tornando possível calcular o hamiltoniano do cluster central, dado por

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\nu}^{AF} = & -J \sum_{\langle i,j \rangle \in \nu} \sigma_i^\rho \sigma_j^{\bar{\rho}} - J\sigma_1^A (m_A^{\sigma_1\sigma_2} + m_A^{\sigma_1\sigma_3}) - J\sigma_2^B (m_B^{\sigma_2\sigma_1} + m_B^{\sigma_2\sigma_4}) \\ & - J\sigma_3^B (m_B^{\sigma_3\sigma_1} + m_B^{\sigma_3\sigma_4}) - J\sigma_4^A (m_A^{\sigma_4\sigma_2} + m_A^{\sigma_4\sigma_3}). \end{aligned} \quad (5.9)$$

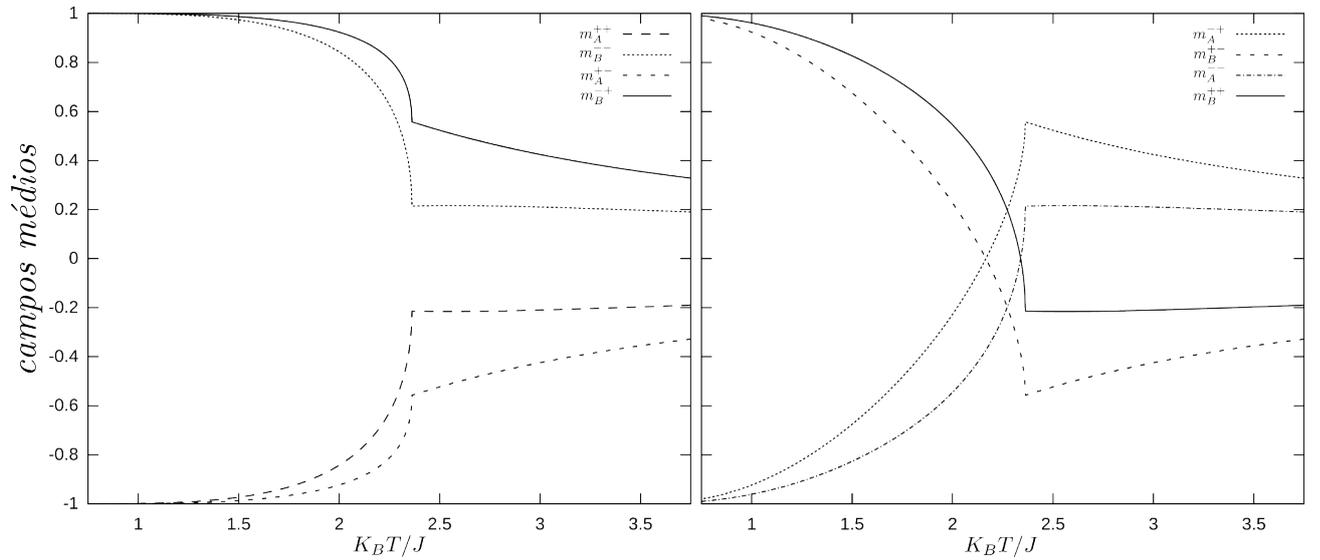


Figura 5.4: Campos médios obtidos para o caso antiferromagnético da rede quadrada.

Os 8 campos médios obtidos são descritos nos gráficos da figura 5.4. Assim como no caso da rede hexagonal há anti-simetrias entre os campos resultantes, sendo possível reduzir o número de equações a serem resolvidas para $H = 0$. Neste caso as simetrias são dadas por

$$m_A^{++} = -m_B^{--}$$

$$m_A^{+-} = -m_B^{-+}$$

$$m_A^{-+} = -m_B^{+-}$$

$$m_A^{--} = -m_B^{++},$$

sendo que podemos estabelecer uma relação geral para as simetrias da rede quadrada, definindo que $m_A^{ss'} = -m_B^{q'q}$ se, e somente se, $s \neq q$ e $s' \neq q'$. Assim, o número de campos médios a serem obtidos para o caso AF da rede quadrada tratada pela TCMCC é o mesmo do caso FE.

5.3 Rede Cúbica

A aplicação da TCMCCC à rede cúbica envolve o cálculo do hamiltoniano de apenas um cluster vizinho ao cluster ν como podemos ver na figura 5.5 está descrita a aplicação da TCMCC ao caso AF da rede quadrada, na qual os spins σ_1^A , σ_2^B , σ_3^B e σ_4^A são definidos como s , s' , s'' e s''' , respectivamente. Estes spins podem assumir 16 configurações distintas ($ss's''s''' = \{++++, +++-, \dots, ----\}$), mas devido à simetria descrita na equação 4.8,

torna-se necessário obter campos médios para 12 configurações nas duas sub-redes, totalizando 24 campos médios.

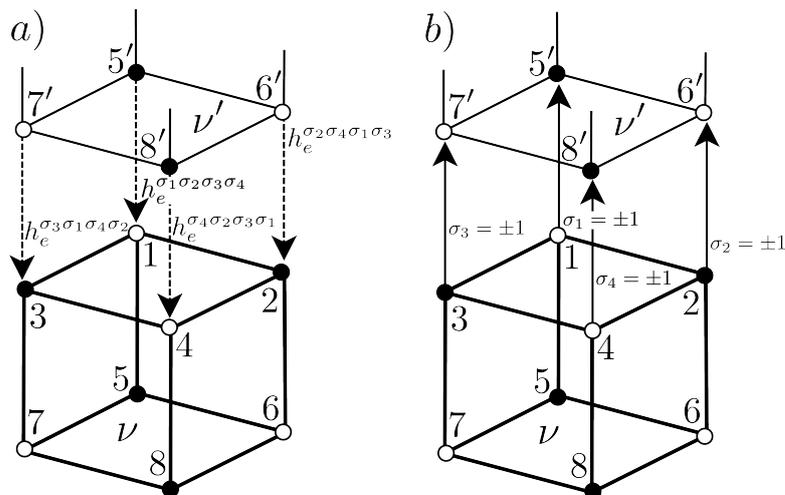


Figura 5.5: Rede cúbica dividida em sub-redes A (○) e B (●). a) Descrição das interações do cluster central ν . b) Descrição das interações entre os clusters ν e ν' , com os campos provenientes dos spins σ_1^A e σ_2^B substituídos por valores bem definidos (± 1).

Para a sub-rede A (identificada por ○) os campos médios são definidos pelo valor médio do spin $\sigma_{5'}^B$,

$$m_A^{ss's''s'''} = \frac{\sum \sigma_{5'}^B e^{-\beta \mathcal{H}_{\nu'}^{AF}}}{\sum e^{-\beta \mathcal{H}_{\nu'}^{AF}}}, \quad (5.10)$$

que depende do hamiltoniano do cluster ν' , dado por

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\nu'}^{AF} = & -J \sum_{\langle i,j \rangle \in \nu'} \sigma_i^\rho \sigma_j^{\bar{\rho}} - J\sigma_{1'}^A (m_A^{\sigma_{1'}\sigma_{2'}\sigma_{3'}\sigma_{4'}} + m_A^{\sigma_{1'}\sigma_{3'}\sigma_{5'}\sigma_{7'}} + m_A^{\sigma_{1'}\sigma_{2'}\sigma_{5'}\sigma_{6'}}) \\ & - J\sigma_{2'}^B (m_B^{\sigma_{2'}\sigma_{4'}\sigma_{1'}\sigma_{3'}} + m_B^{\sigma_{2'}\sigma_{1'}\sigma_{6'}\sigma_{5'}} + m_B^{\sigma_{2'}\sigma_{4'}\sigma_{6'}\sigma_{8'}}) \\ & - J\sigma_{3'}^B (m_B^{\sigma_{3'}\sigma_{1'}\sigma_{4'}\sigma_{2'}} + m_B^{\sigma_{3'}\sigma_{4'}\sigma_{7'}\sigma_{8'}} + m_B^{\sigma_{3'}\sigma_{1'}\sigma_{7'}\sigma_{5'}}) \\ & - J\sigma_{4'}^A (m_A^{\sigma_{4'}\sigma_{2'}\sigma_{3'}\sigma_{1'}} + m_A^{\sigma_{4'}\sigma_{3'}\sigma_{8'}\sigma_{7'}} + m_A^{\sigma_{4'}\sigma_{2'}\sigma_{8'}\sigma_{6'}}) \\ & - J\sigma_{5'}^B (m_B^{\sigma_{5'}\sigma_{1'}\sigma_{7'}\sigma_{3'}} + m_B^{\sigma_{5'}\sigma_{1'}\sigma_{6'}\sigma_{2'}} + s) - J\sigma_{6'}^A (m_A^{\sigma_{6'}\sigma_{2'}\sigma_{8'}\sigma_{4'}} + m_A^{\sigma_{6'}\sigma_{2'}\sigma_{5'}\sigma_{1'}} + s') \\ & - J\sigma_{7'}^A (s'' + m_A^{\sigma_{7'}\sigma_{3'}\sigma_{8'}\sigma_{4'}} + m_A^{\sigma_{7'}\sigma_{3}\sigma_{5}\sigma_{1}}) - J\sigma_{8'}^B (m_B^{\sigma_{8'}\sigma_{4'}\sigma_{6'}\sigma_{2'}} + m_B^{\sigma_{8'}\sigma_{4'}\sigma_{7'}\sigma_{3'}} + s'''). \end{aligned} \quad (5.11)$$

Para a sub-rede B (identificada por ●) os campos médios são definidos pelo valor médio do spin $\sigma_{6'}$,

$$m_B^{s'ss''s'''} = \frac{\sum \sigma_{6'}^A e^{-\beta \mathcal{H}_{\nu'}^{AF}}}{\sum e^{-\beta \mathcal{H}_{\nu'}^{AF}}}, \quad (5.12)$$

que também depende do hamiltoniano do cluster ν' , dado pela equação (5.11). Os campos médios para a rede cúbica são obtidos ao resolvermos auto-consistentemente as equações (5.10),

(5.11) e (5.12), tornando possível calcular o hamiltoniano do cluster central, dado por

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_\nu^{AF} = & -J \sum_{\langle i,j \rangle \in \nu} \sigma_i^\rho \sigma_j^{\bar{\rho}} - J\sigma_1^A(m_A^{\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4} + m_A^{\sigma_1\sigma_3\sigma_5\sigma_7} + m_A^{\sigma_1\sigma_2\sigma_5\sigma_6}) \\
& -J\sigma_2^B(m_B^{\sigma_2\sigma_4\sigma_1\sigma_3} + m_B^{\sigma_2\sigma_1\sigma_6\sigma_5} + m_B^{\sigma_2\sigma_4\sigma_6\sigma_8}) - J\sigma_3^B(m_B^{\sigma_3\sigma_1\sigma_4\sigma_2} + m_B^{\sigma_3\sigma_4\sigma_7\sigma_8} + m_B^{\sigma_3\sigma_1\sigma_7\sigma_5}) \\
& -J\sigma_4^A(m_A^{\sigma_4\sigma_2\sigma_3\sigma_1} + m_A^{\sigma_4\sigma_3\sigma_8\sigma_7} + m_A^{\sigma_4\sigma_2\sigma_8\sigma_6}) - J\sigma_5^B(m_B^{\sigma_5\sigma_1\sigma_7\sigma_3} + m_B^{\sigma_5\sigma_1\sigma_6\sigma_2} + m_B^{\sigma_5\sigma_6\sigma_7\sigma_8}) \\
& -J\sigma_6^A(m_A^{\sigma_6\sigma_2\sigma_8\sigma_4} + m_A^{\sigma_6\sigma_2\sigma_5\sigma_1} + m_A^{\sigma_6\sigma_5\sigma_8\sigma_7}) - J\sigma_7^A(m_A^{\sigma_7\sigma_5\sigma_8\sigma_6} + m_A^{\sigma_7\sigma_3\sigma_8\sigma_4} + m_A^{\sigma_7\sigma_3\sigma_5\sigma_1}) \\
& -J\sigma_8^B(m_B^{\sigma_8\sigma_4\sigma_6\sigma_2} + m_B^{\sigma_8\sigma_4\sigma_7\sigma_3} + m_B^{\sigma_8\sigma_6\sigma_7\sigma_5}).
\end{aligned} \tag{5.13}$$

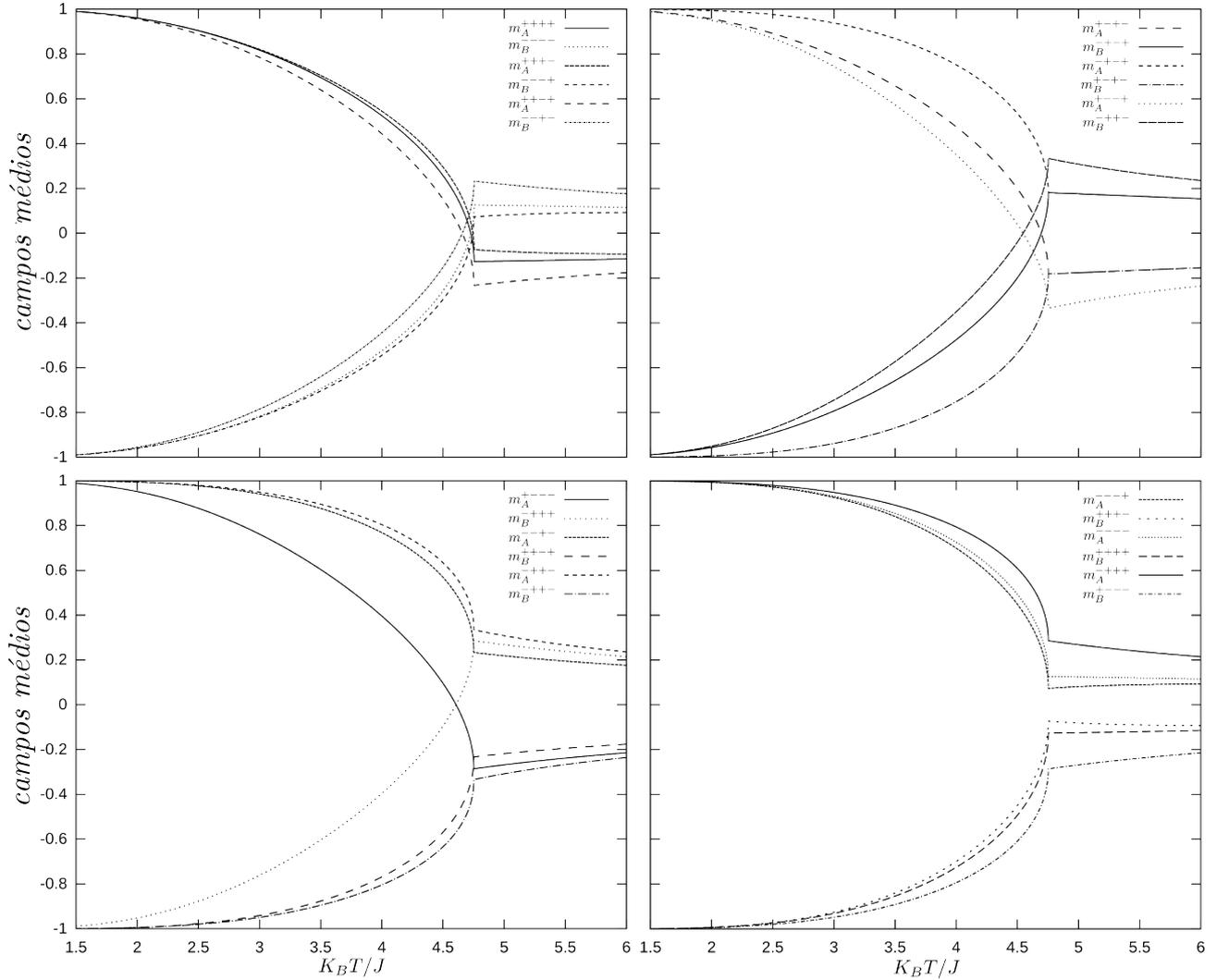


Figura 5.6: Campos médios obtidos para o caso antiferromagnético da rede cúbica.

Os 24 campos médios obtidos são descritos nos gráficos da figura 5.6. Assim como nos casos das redes hexagonal e quadrada há anti-simetrias entre os campos resultantes, sendo possível reduzir o número de equações a serem resolvidas para $H = 0$. Neste caso as simetrias são dadas por

$$\begin{aligned}
m_A^{++++} &= -m_B^{----} \\
m_A^{+--+} &= -m_B^{-+-+} \\
m_A^{+-+-} &= -m_B^{-++-} \\
m_A^{++--} &= -m_B^{--++} \\
m_A^{--++} &= -m_B^{++--} \\
m_A^{-+++} &= -m_B^{+--+} \\
m_A^{---+} &= -m_B^{+++-} \\
m_A^{-+--} &= -m_B^{+-++},
\end{aligned}$$

sendo que podemos estabelecer uma relação geral para as simetrias da rede cúbica, definindo que $m_A^{ss's''s'''} = -m_B^{qq'q''q'''}$ se, e somente se, $s \neq q$, $s' \neq q'$, $s'' \neq q''$ e $s''' \neq q'''$. Assim, o número de campos médios a serem obtidos para o caso AF da rede quadrada tradada pela TCMCC passa a ser o mesmo do caso FE.

5.4 Resultados

Para aplicar a TCMCC à qualquer geometria de rede foi necessário construir um algoritmo que, primeiro, gera as configurações possíveis dos spins dos clusters da rede. Por exemplo, para a rede quadrada, com 4 spins em cada cluster, é necessário obter as 2^4 configurações, sendo 2^{n_s} o número de configurações possíveis dos spins de um cluster com n_s spins. Após a construção desta base de configurações, descrevemos as interações da rede através do hamiltoniano dos clusters central e vizinhos, para só então resolver auto-consistentemente os campos médios. Para a programação deste algoritmo, assim como para os algoritmos necessários para a aplicação do método de Monte Carlo e para a solução das equações acopladas da TCM, utilizamos a linguagem Fortran 95. Na TCMCC, após o cálculo dos campos médios é possível obter os resultados para os observáveis de interesse. A seguir, são apresentados nossos resultados para o parâmetro de ordem AF, energia interna, calor específico e susceptibilidade magnética para o modelo de Ising com interações antiferromagnéticas.

5.4.1 Magnetização de sub-redes e Susceptibilidade - $H = 0$

Calculamos o parâmetro de ordem AF (m_S) através da equação

$$m_S = \frac{|m_A - m_B|}{2}, \quad (5.14)$$

na qual m_A (ou m_B) é a magnetização por spin da sub-rede A (ou B), que pode ser obtida utilizando a equação (2.7), mas realizando a soma em i somente sobre os spins das sub-redes A (ou B). Dessa forma buscamos encontrar uma ordem nas sub-redes que seja caracterizada pela diferença entre a magnetização de cada uma delas. Os resultados obtidos para m_S são apresentados na figura 5.7 em um comparativo com resultados da TCM, do método de Monte Carlo e da solução exata de Onsager para a rede quadrada.

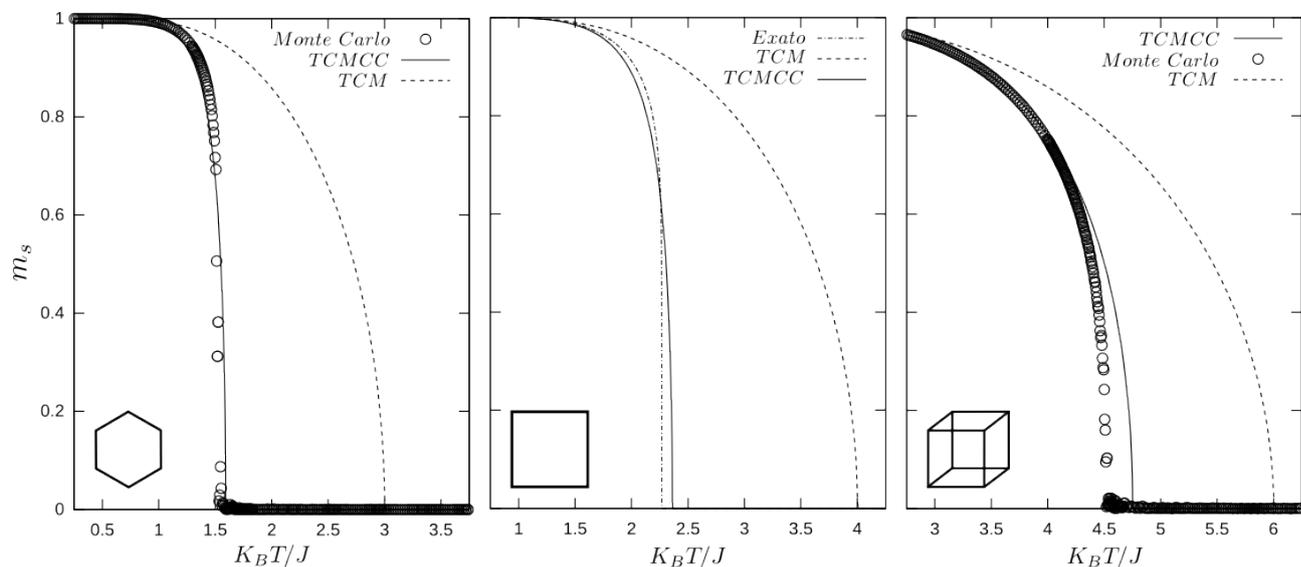


Figura 5.7: Comportamento do parâmetro de ordem AF para as redes hexagonal, quadrada e cúbica. Os resultados obtidos com a TCMCC são comparados aos da TCM, das simulações de Monte Carlo e ao exato para a rede quadrada.

Na figura 5.7 podemos ver que para temperaturas altas o parâmetro de ordem m_S tem valor nulo, caracterizando a fase paramagnética. No entanto, para uma dada temperatura, m_S passa a ter valor diferente de zero, marcando a transição entre as fases paramagnética e antiferromagnética. Estes resultados para o MI antiferromagnético tratado com a TCMCC mostram que a precisão da técnica em determinar a T_N permanece tão boa quanto para o caso ferromagnético. Os resultados obtidos são idênticos aos descritos na tabela 4.1, o que confirma a validade destes resultados, já que a simetria da densidade de estados leva à mesma temperatura crítica no MI ferro e antiferromagnético (KIM, 2011) em algumas geometrias de rede.

Na figura 5.8 (esquerda) apresentamos nossos resultados para a susceptibilidade magnética de sub-redes χ_S em função da temperatura, para o MI antiferromagnético. O comportamento da susceptibilidade nas sub-redes é idêntico ao comportamento obtido em um sistema ferromagnético, o que é perfeitamente esperado, uma vez que a magnetização de sub-redes seja idêntica a magnetização de um ferromagneto de Ising.

Portanto, o resultado apresentado na figura 5.8, apresentando um divergência da susceptibilidade magnética de sub-redes exatamente na T_N , é um comportamento esperado. Isso se deve à forte tendência de alinhamento dos spins das sub-redes nas proximidades da transição de fase. Assim, mesmo um campo com intensidade baixa estimula os spins daquela sub-rede a se alinharem na direção do campo. Para temperaturas muito altas essa tendência de alinhamento cai para zero, uma vez que há grandes flutuações térmicas no sistema. Para temperaturas baixas, com a ordem AF estabelecida, a presença de um campo externo tende a não surtir efeito, fazendo com que a susceptibilidade magnética de sub-redes caia para zero.

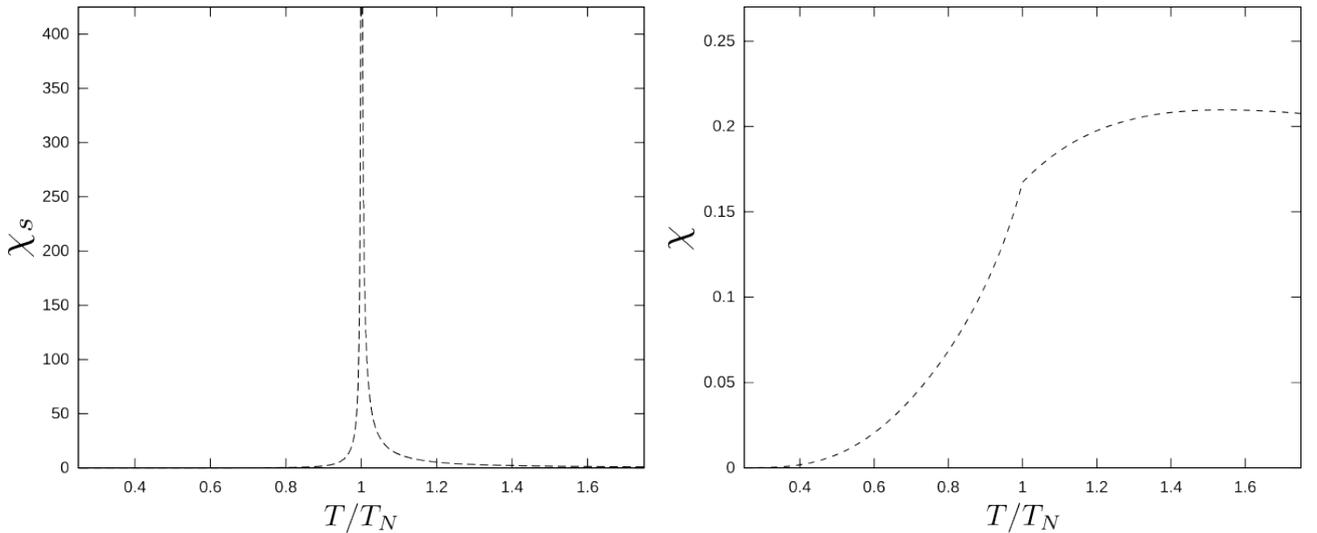


Figura 5.8: Os resultados da susceptibilidade magnética das sub-redes χ_S e do sistema χ é apresentado em função da temperatura normalizada T/T_N . Os resultados foram obtidos para a rede quadrada, mas são os mesmos para as redes hexagonal e cúbica.

Contudo, os resultados para a susceptibilidade magnética χ do sistema antiferromagnético apresenta um comportamento diferenciado, com um máximo acima da T_N . Este é um resultado coerente com o esperado para um sistema antiferromagnético, considerando que na fase paramagnética a presença de um campo externo leva o sistema a apresentar magnetização não-nula, pois a redução da temperatura e, conseqüentemente, a diminuição das flutuações

térmicas fazem com que a magnetização da rede aumente ainda mais. Portanto, o sistema está cada vez mais suscetível ao alinhamento com um campo externo.

Entretanto, com a diminuição da temperatura do sistema, as interações antiferromagnéticas da rede também começam a predominar em relação às flutuações térmicas. Além disso, as interações AF também não são favorecidas pela presença de um campo externo, pois a ordem AF é caracterizada pela ausência de magnetização espontânea e um campo externo não nulo irá favorecer o alinhamento dos spins em uma direção e sentido. Portanto, a redução da susceptibilidade magnética um pouco acima da T_N é um indício do quão predominantes as interações AF estão se tornando no sistema. Essa tendência se confirma com a queda rápida da susceptibilidade magnética na T_N , demonstrando que na temperatura crítica a presença de um campo externo fraco não é capaz de alterar de forma relevante a ordem AF estabelecida.

5.4.2 Magnetização de sub-redes - $H \neq 0$

Embora a susceptibilidade magnética permita compreender os efeitos do campo externo sobre um sistema com interações antiferromagnéticas, é interessante avaliar a forma como este campo interfere na transição entre as fases PM e AF. Para isso, admitimos a presença de um campo atuando sobre o sistema e incluímos no hamiltoniano de cada cluster, descritos pelas equações (5.1), (5.9) e (5.13), um termo que represente essa atuação: $-H \sum(\sigma_i^A + \sigma_j^B)$. Com esta aplicação, as anti-simetrias identificadas nas seções 5.1, 5.2 e 5.3 não podem ser utilizadas, uma vez que os campos efetivos dependem do valor médio dos spins nos clusters vizinhos e estes valores médios mudam na presença de um campo externo.

Os resultados obtidos na presença de um campo externo com diferentes intensidades são apresentados nas figuras 5.9 e 5.10. No gráfico da esquerda da figura 5.9 podemos perceber a concordância com a descrição feita com base no comportamento da susceptibilidade magnética. Nas proximidades da T_N a magnetização em cada sub-rede assume o mesmo valor, no entanto, ao aproximar-se de uma temperatura suficientemente baixa, a ordem AF torna-se predominante. Esta ordem AF pode ser verificada pela diferença entre as magnetizações das sub-redes A e B ou pelo valor não nulo do parâmetro de ordem AF, m_S , que permite marcar a T_N para diferentes valores de H . Percebemos também que para campos magnéticos muito intensos o sistema não apresenta ordem AF, o que pode ser identificado em ambos os gráficos da figura 5.9 nos resultados para $H = 5$.

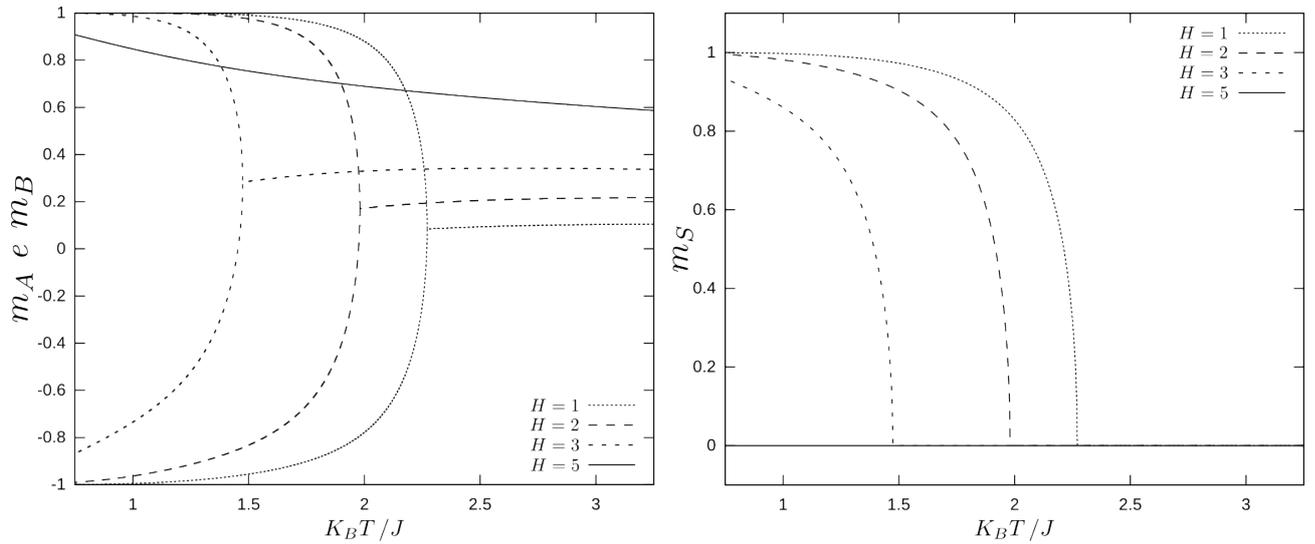


Figura 5.9: Efeitos da presença de campo externo na T_N . À esquerda, a magnetização das sub-redes A e B na geometria quadrada, na presença do campo externo H com diferentes intensidades. À direita, o comportamento do parâmetro de ordem antiferromagnético m_S para diferentes valores de H .

Na figura 5.10 são apresentados diagramas de fases $K_B T_N / J \times H$ para as redes hexagonal, quadrada e cúbica. Percebemos que a fase antiferromagnética é desestimulada pela presença do campo externo H , embora campos com baixa intensidade não levem a uma variação grande da T_N . Contudo, campos bastante intensos levam a uma grande diminuição da temperatura crítica, até um certo valor crítico de H , para o qual o sistema deixa de apresentar ordem AF. Para campos com intensidade acima deste valor crítico, o sistema passa a apresentar apenas características da fase paramagnética, como $m_S = 0$ e o alinhamento dos spins da rede na direção do campo externo.

A intensidade do campo externo necessária para eliminar o ordenamento AF do sistema depende da geometria de rede. Pelos diagramas da figura 5.10 percebemos que redes com o número de coordenação mais alto são menos sensíveis à presença do campo externo. Isso é justificável pelo número de interações que cada spin tem na rede, quanto mais interações, maior é a tendência de ordenamento do sistema, o que pode também ser observado pelo aumento da temperatura crítica (T_C ou T_N) junto com o número de coordenação das redes¹.

As transições descritas pelos diagramas de fase da figura 5.10 são contínuas e podem ser

¹A temperatura crítica cresce com o número de coordenação da rede, mas não da forma linear como sugere a TCM. Há outros fatores envolvidos, como a dimensionalidade da rede, por exemplo.

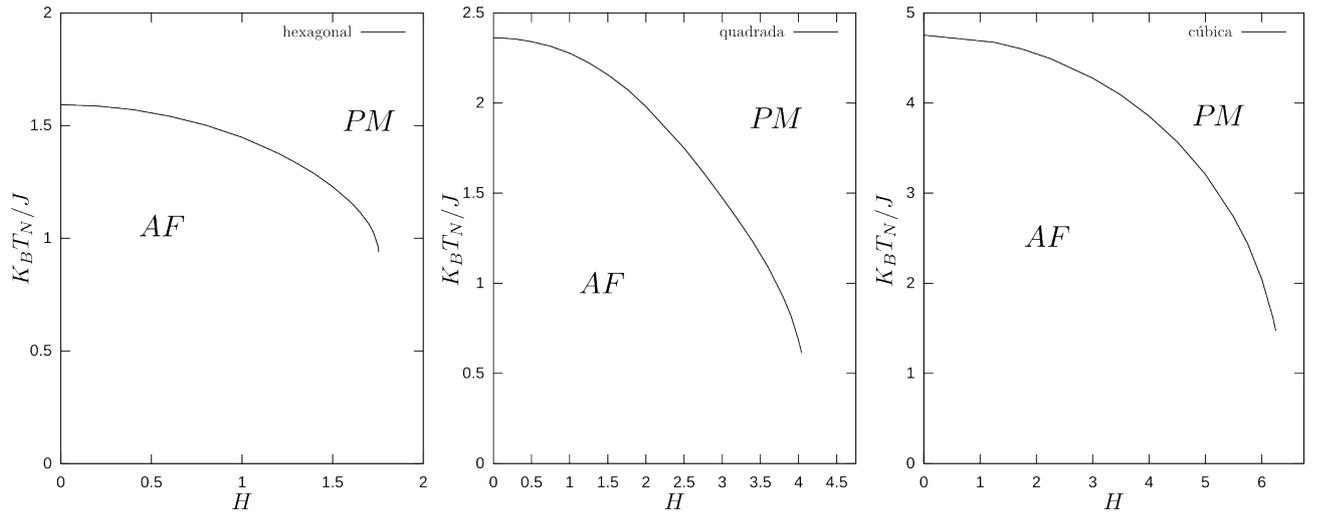


Figura 5.10: Diagramas de fases da temperatura crítica pelo campo magnético externo para as redes quadrada, hexagonal e cúbica.

marcadas pelo parâmetro de ordem m_S . Contudo, para alguns valores de H acima do crítico, as transições são descontínuas e o parâmetro de ordem não pode ser utilizado para a determinação da T_N . Infelizmente, a TCMCC, por não se tratar de um método obtido totalmente através de argumentos analíticos, não permite a obtenção de uma expressão para a energia livre de Gibbs. Também não é possível obter resultados coerentes utilizando a equação 2.2 diretamente sobre a função de partição. Com isso, não podemos determinar uma linha do diagrama de fases da figura 5.10 que marque estas transições de primeira ordem de forma confiável. Esta linha poderia ser obtida, por exemplo, observando o comportamento da entropia do sistema. Porém, a entropia é uma derivada da energia livre e, portanto, sua obtenção não é possível com este tratamento. Assim, as aplicações deste método aproximativo limitam-se aos casos em que as transições são contínuas e podem ser descritas totalmente com base no parâmetro de ordem.

5.4.3 Energia Interna e Calor Específico

A Energia interna U foi obtida através da equação (2.9) de forma bastante simples, já que os valores da energia do cluster central são facilmente obtidos após o cálculo dos campos efetivos. O calor específico à volume constante (C_v) foi obtido através de uma derivada numérica da energia interna, seguindo a equação (2.6). Estes resultados estão descritos na figura 5.11. Devido à simetria da densidade de estados, nossos resultados para a energia interna e o calor específico apresentam o mesmo comportamento do caso FE.

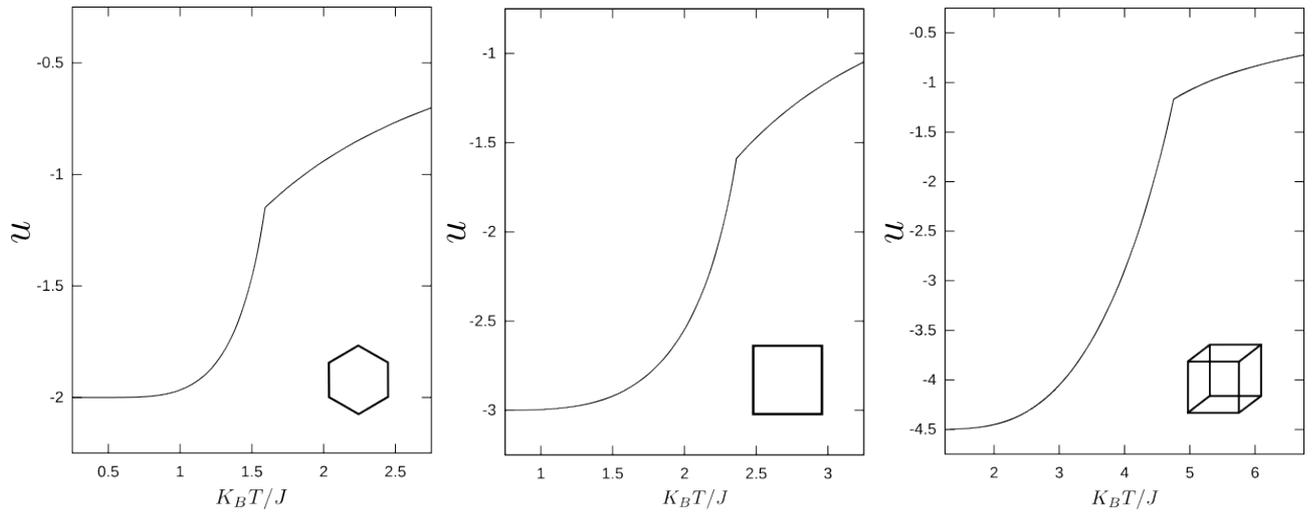


Figura 5.11: Energia interna por spin em função da temperatura no MI antiferromagnético.

Os resultados para a energia interna por spin, mostram uma tendência ao estado de mínima energia, conforme a temperatura baixa, o que concorda totalmente com o esperado. Contudo, a energia do estado fundamental dos sistemas tratados com a TCMCC não é adequada. Espera-se que para sistemas magnéticos não frustrados a energia interna do estado fundamental seja igual ao negativo do número de interações da rede. Ou seja, a energia interna por spin no estado fundamental será igual ao negativo da metade do número de coordenação, uma vez que as interações na rede são todas de troca (ou compartilhadas). Com isso, a energia do estado fundamental é $-1,5|J|$ para a rede hexagonal, $-2|J|$ para a rede quadrada e $-3|J|$ para a rede cúbica².

Entretanto, os campos efetivos que atuam sobre o cluster central na TCMCC não são equivalentes às interações de troca entre spins do mesmo cluster. As interações com campos efetivos não envolvem compartilhamento, pois estes campos representam uma interação dos spins do cluster central com toda a rede, sendo a energia mínima por interação igual a $-J$. Isso leva os resultados para a energia interna das redes hexagonal, quadrada e cúbica aos valores descritos na figura 5.11, que no estado fundamental valem $-2|J|$, $-3|J|$ e $-4,5|J|$. No entanto, o comportamento qualitativo da energia interna é bastante adequado ao obtido com métodos aproximativos. Isso pode ser verificado na descontinuidade apresentada pelo calor específico na temperatura crítica, o que concorda com os resultados de outros métodos que

²Neste caso, $|J|$ é o módulo da interação de troca entre os primeiros vizinhos da rede e não uma unidade de energia. Para conhecer os valores de energia e a intensidade desta interação de troca em sistemas magnéticos reais são necessários estudos de primeiros princípios destes materiais

utilizam aproximações de campo médio.

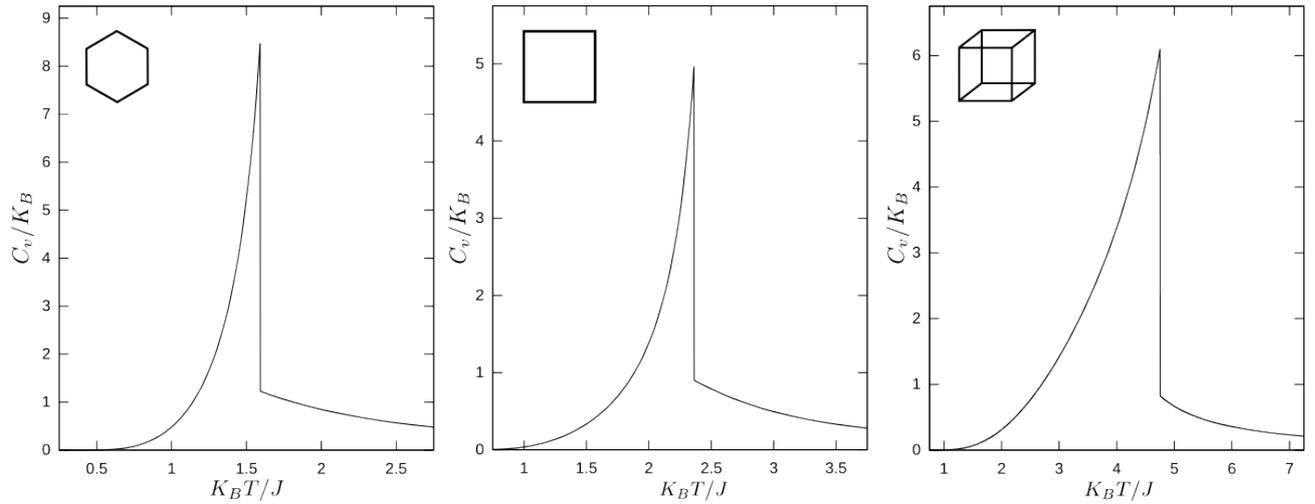


Figura 5.12: Calor específico a volume constante em função da temperatura no MI antiferromagnético para as redes hexagonal, quadrada e cúbica.

Os resultados de C_v em função da temperatura são apresentados na figura 5.12 para as redes hexagonal, quadrada e cúbica. Estes resultados mostram que na fase paramagnética o calor específico é inversamente proporcional ao quadrado da temperatura até a T_N , na qual o sistema apresenta um comportamento crítico marcado pela descontinuidade do calor específico. Abaixo da T_N o calor específico cai para zero, pois a ordem antiferromagnética passa a predominar na rede, levando o sistema rapidamente para um estado próximo ao de mínima energia.

6 CONCLUSÃO

Neste trabalho foi proposta a aplicação da teoria de campo médio com clusters correlacionados ao modelo de Ising com interações antiferromagnéticas. Inicialmente, realizou-se um estudo aprofundado da TCMCC e da sua aplicação ao modelo de Ising ferromagnético, feita por Yamamoto (2009). Propos-se, então, a divisão do sistema em sub-redes A e B interpenetradas, diferenciando os campos médios m^{σ_i} em cada sub-rede ($m^{\sigma_i^A}$ e $m^{\sigma_i^B}$), de forma que estes pudessem assumir um conjunto de valores distintos para cada sub-rede. Desta forma, mostramos que os campos médios devem ser adequados de forma que possam assumir valores condizentes com o esperado para o estado fundamental do sistema em questão, seja ele ferro ou antiferromagnético. Esta proposta de aplicação se mostrou eficiente, uma vez que obtivemos os resultados para a T_N idênticos aos obtidos para a T_C nos sistemas com interações ferromagnéticas. Contudo, o tratamento do caso AF leva ao dobro do número de campos médios em relação ao caso FE, aumentando o custo computacional da técnica, que necessita da solução auto-consistente dos campos médios. Entretanto, identificamos uma anti-simetria entre os campos médios de sub-redes diferentes, permitindo reduzir pela metade o número de equações acopladas e, portanto, tornando o custo computacional do caso AF idêntico ao do caso FE. Com a finalidade de comparar os resultados da TCMCC, também realizamos simulações de Monte Carlo e utilizamos os resultados propostos pela aproximação de campo médio usual (TCM) e a solução analítica de Onsager para o caso bidimensional do MI.

Em relação aos observáveis de interesse, além do parâmetro de ordem antiferromagnético (m_s), que permitiu determinar a T_N para $H = 0$ e $H \neq 0$, obtivemos a susceptibilidade magnética χ , a energia interna U e o calor específico magnético C_v . Os resultados para m_s no caso em que $H \neq 0$ mostraram que o aumento do campo externo H faz com que a T_N diminua até um valor crítico, para o qual a ordem AF deixa de ser apresentada. O comportamento da T_N em função de H foi descrito em um diagrama $K_B T_N / J \times H$, no qual fica clara a relação entre a dimensionalidade e o número de coordenação da rede e a resistência do sistema à presença de um campo magnético externo.

A susceptibilidade magnética foi obtida para o sistema e para as sub-redes, de forma que foi possível verificar o comportamento idêntico ao do sistema descrito pelo modelo de Ising com interações ferromagnéticas na susceptibilidade magnética de sub-redes. Para a susceptibilidade

magnética do sistema, os resultados obtidos com a TCMCC concordam com os esperados para sistemas com interações antiferromagnéticas, mostrando um máximo arredondado um pouco acima da T_N . Embora a energia interna tenha apresentado um valor para o estado fundamental diferente do esperado, a sua primeira derivada, que é o calor específico, apresenta um comportamento semelhante ao de outros métodos aproximativos, com uma descontinuidade na T_N .

A TCMCC mostrou-se uma eficiente técnica para a determinação da T_N , uma vez que permite recuperar parte das correlações perdidas com a aproximação de campo médio usual (TCM). Os resultados da magnetização de sub-redes, por exemplo, tem precisão comparável às nossas simulações, realizadas através do método de Monte Carlo, mas sem a dificuldade de determinar com exatidão a temperatura crítica, devido às flutuações nas proximidades da criticalidade, que são características de simulações de Monte Carlo.

Os resultados obtidos com a teoria de campo médio com clusters correlacionados e a aplicação da técnica ao modelo de Ising antiferromagnético, demonstram que a TCMCC é um poderoso método aproximativo, cujas aplicações ainda podem ser estendidas a outros sistemas, ainda mais interessantes. A técnica permite obter resultados precisos, desde que identificadas as simetrias necessárias para sua aplicação, seja na estrutura de rede tratada ou na diferenciação de campos médios exigida para satisfazer o estado fundamental do sistema. Além disso, a aplicação da TCMCC ao MI antiferromagnético permitiu a identificação de anti-simetrias entre estes campos médios, permitindo a redução do custo computacional da técnica, que é outro fator preponderante na aplicação de um método a sistemas mais complexos, como os que possuem interações desordenadas, por exemplo. Como perspectiva de pesquisas pretendemos adequar a TCMCC ao estudo de sistemas desordenados, que apresentam, por exemplo, competição entre as fases vidro de spin e antiferromagnética (ECHEVARRIA-BONET et al., 2013).

Referências Bibliográficas

ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. *Física do Estado Sólido*. São Paulo: Cengage Learning, 2011.

BRUSH, S. G. History of the lenz-ising model. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 39, p. 883–893, Oct 1967. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.39.883>>.

CHVOJ, Z.; KUDRNOVSKÝ, J.; DRCHAL, V. Ordering in random overlayers: the correlated cluster mean-field method. *Journal of Physics: Condensed Matter*, IOP Publishing, v. 79, p. 144427, Sep 2010. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/22/39/395005>>.

CULLITY, B. D. *Introduction to Magnetic Materials*. Estados Unidos da América: Addison-Wesley Publishing Company, 1972.

ECHEVARRIA-BONET, C. et al. Size-induced superantiferromagnetism with reentrant spin-glass behavior in metallic nanoparticles of TbCu₂. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 87, p. 180407, May 2013. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.87.180407>>.

GUCHHAIT, S. et al. Magnetic ordering of implanted Mn in HOPG substrates. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 88, p. 174425, Nov 2013. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.88.174425>>.

GUGGENHEIM, E. A. The principle of corresponding states. *Journal of Chemical Physics*, American Institute of Physics, v. 13, 1945.

HEMMEN, J. L. van. Classical spin-glass model. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 49, p. 409–412, Aug 1982. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.49.409>>.

IHLE, T. Invasion-wave-induced first-order phase transition in systems of active particles. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 88, p. 040303, Oct 2013. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.88.040303>>.

JOYCE, G. S. Classical heisenberg model. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 155, p. 478–491, Mar 1967. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.155.478>>.

KADANOFF, L. P. More is the Same; Phase Transitions and Mean Field Theories. *Journal of Statistical Physics*, Springer Science+Business Media, LLC, v. 137, n. 5-6, p. 777–797, Dez. 2009.

KIM, S.-Y. Exact solution of the Ising model on the 15x15 square lattice with free boundary conditions. *Engineering and Technology*, World Academy of Science, v. 59, 2011.

KINZA, M.; HONERKAMP, C. Two-particle correlations in a functional renormalization group scheme using a dynamical mean-field theory approach. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 88, p. 195136, 2013. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.88.195136>>.

LAVARÉLO, A.; ROUX, G.; LAFLORENCIE, N. Magnetic responses of randomly depleted spin ladders. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 88, p. 134420, Oct 2013. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.88.134420>>.

OITMAA, J. et al. Phase transition and thermal order-by-disorder in the pyrochlore antiferromagnet $\text{Er}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$: A high-temperature series expansion study. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 88, p. 220404, Dec 2013. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.88.220404>>.

SALINAS, S. R. de A. *Introdução à Física Estatística*. São Paulo: Edusp, 2005.

SHERRINGTON, D.; KIRKPATRICK, S. Solvable model of a spin-glass. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 35, p. 1792–1796, Dec 1975. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.35.1792>>.

STANLEY, H. E. *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*. New York: Oxford University Press, 1987.

WANG, C.-W. et al. Complex magnetic couplings in Co_3TeO_6 . *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 88, p. 184427, Nov 2013. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.88.184427>>.

WULFERDING, D. et al. Lattice and orbital fluctuations in TiPO_4 . *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 88, p. 205136, Nov 2013. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.88.205136>>.

YAMAMOTO, D. Correlated cluster mean-field theory for spin systems. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 22, p. 395005, Apr 2009. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.79.144427>>.

YAMAMOTO, D. Cluster mean-field approach including correlation effects between clusters. *J. Phys.: Conf. Ser.*, IOP Publishing, v. 200, 2010. Disponível em: <<http://iopscience.iop.org/1742-6596/200/2/022072/>>.

YOSIDA, K. *Theory of Magnetism*. Berlim: Springer, 1996.

ZHANG, Q. et al. Magnetic structures and interplay between rare-earth Ce and Fe magnetism in single-crystal CeFeAsO. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 88, p. 174517, Nov 2013. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.88.174517>>.