

UNIVERSIDADE DO ESTADO DO RIO GRANDE DO NORTE
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
MESTRADO EM FÍSICA

MAGNO DE SOUZA COSTA

MÉTODO MONTE CARLO APLICADO
AO MODELO DE ISING QUASIPERÍODICO

MOSSORÓ

2012

MAGNO DE SOUZA COSTA

**MÉTODO MONTE CARLO APLICADO
AO MODELO DE ISING QUASIPERIÓDICO**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade do Estado do Rio Grande do Norte / Universidade Federal Rural do Semi-Árido, como requisito parcial à obtenção do título de *Mestre em Física*.

ORIENTADOR: Prof. Dr. Idalmir de Souza Queiroz Júnior

MOSSORÓ

2012

Catálogo da Publicação na Fonte.

COSTA, MAGNO DE SOUZA.
MÉTODO MONTE CARLO APLICADO AO MODELO DE ISING
QUASIPERÍODICO . / Magno de Souza Costa. – **MOSSORÓ, RN, 2012.**

98 f

ORIENTADOR(A): PROF. DR. IDALMIR DE SOUZA QUEIROZ JÚNIOR.

Dissertação (Mestrado em Física). Universidade do Estado do Rio Grande do Norte. Programa de Pós-graduação em Física.

1. Modelo de ISING - Dissertação. 2. **Método de Monte Carlo** - Dissertação.
3. Estruturas quasiperiódicas - Dissertação. I. Queiroz Júnior, Idalmir de Souza.
II. Universidade do Estado do Rio Grande do Norte. III. Título.

UERN/BC

CDD 530

Bibliotecária: Elaine Paiva de Assunção CRB 15 / 492

MAGNO DE SOUZA COSTA

**MÉTODO MONTE CARLO APLICADO
AO MODELO DE ISING QUASIPERIÓDICO**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade do Estado do Rio Grande do Norte / Universidade Federal Rural do Semi-Árido, como requisito parcial à obtenção do título de *Mestre em Física* avaliada pela banca composta por:

Aprovado em 28 / 03 / 2012.

Banca Examinadora

Orientador

Professor Dr. Idalmir de Souza Queiroz Júnior.
Universidade Federal Rural do Semi-Árido - UFRSA

Examinador Interno

Professor Dr. Milton Morais Xavier Júnior.
Universidade Federal do Rio Grande do Norte - UFRN

Examinador Externo

Professor Dr. Dory Hélio Aires de Lima Anselmo.
Universidade Federal do Rio Grande do Norte - UFRN

PARA PESSOAS ESPECIAIS

Meus Pais

Manoel Pereira da Costa

Maria Gilvani de Souza Costa

Minha esposa

Maria Solange dos Santos Costa

Meu filho

Petrus Magno dos Santos Costa

AGRADECIMENTOS

- Ao Deus eterno, imortal, invisível, mas real.
- Ao meu orientador, Prof. Dr. Idalmir de Souza Queiroz Júnior, pela confiança, paciência, incentivo no desenvolvimento deste trabalho, imprescindível apoio à conclusão e enorme contribuição para meu crescimento profissional.
- Aos membros da banca examinadora Prof. Dr. Dory Hélio Aires de Lima Anselmo e o Prof. Dr. Milton Morais Xavier Júnior pela contribuição nas observações sobre o trabalho e pelo incentivo.
- A minha esposa Solange Santos e meu filho Petrus Magno pela paciência e apoio incondicional.
- A todos os Professores do Programa de Pós-graduação em Física da UERN que contribuíram para minha formação neste mestrado.
- A UERN e UFERSA, pelo compromisso de formar profissionais com qualidade.
- A todos os meus colegas do mestrado, pela agradável convivência.
- Aos meus colegas de trabalho, da Escola Estadual Prof.^a Maria Stella Pinheiro Costa, que me incentivaram a crescer como pessoa e como profissional.

“Um sonho é uma imagem inspiradora de futuro que energiza a sua mente, a sua vontade e as suas emoções, dando-lhe forças para fazer todo o esforço possível a fim de alcançá-lo.”

John C. Maxwell

RESUMO

Foi investigado a relação entre as grandezas termodinâmicas e magnéticas, com o sequenciamento quasiperiódico de materiais magnéticos, pela sequência de Cantor, usando o modelo clássico de Ising e simulação de Monte Carlo. Mostrou-se que o sistema se torna sensível ao sequenciamento, saindo das propriedades termodinâmicas e magnéticas de um material, para as propriedades do outro material. O sistema também se mostrou sensível à razão dos termos de troca dos dois materiais magnéticos. Foi observado que estes dois fatores influenciam na competição dos materiais magnéticos através de suas grandezas físicas.

PALAVRAS-CHAVES: Modelo de Ising. Método de monte Carlo. Estruturas Quasiperiódicas.

ABSTRACT

We investigated the relationship between the thermodynamic and magnetic properties, with the sequencing quasiperiodic of magnetic materials, by Cantor sequence, and we use the classical Ising model and Monte Carlo simulation. It was shown that the system becomes sensitive to sequencing. The system was coming from thermodynamic and magnetic properties of a material to another. The system also is sensitive to the ratio of exchange of the two terms of magnetic material. It was observed that these two factors influence the competition of magnetic materials through their physical quantities.

KEYWORDS: Ising Model. Monte Carlo Method. Quasiperiodic Structures.

SUMÁRIO

AGRADECIMENTOS	i
RESUMO	iii
ABSTRACT	iv
LISTA DE FIGURAS	vii
LISTA DE TABELAS	x
1 INTRODUÇÃO.....	15
1.1 INTRODUÇÃO E MOTIVAÇÃO.....	15
2 SISTEMAS MAGNÉTICOS	18
2.1 INTRODUÇÃO.....	18
2.2 O MODELO DE ISING	18
2.3 O MODELO DE GÁS DE REDE.....	20
2.4 A SOLUÇÃO DE ONSAGER.....	21
2.5 MAGNETISMO E MATERIAIS MAGNÉTICOS	23
2.5.1 Aspectos Históricos.....	23
2.5.2 Conceitos Iniciais	24
2.5.3 Propriedades Magnéticas da Matéria	25
2.5.4 Sistemas Ferromagnéticos e Antiferromagnéticos.....	27
2.5.5 Ferromagnetismo.....	29
2.5.6 Antiferromagnetismo	34
2.5.7 Curva de Histerese	36
2.6 ENERGIAS MAGNÉTICAS	37
2.6.1 Energia de Troca (Exchange).....	38
2.6.2 Energia Zeeman.....	38
3 SISTEMAS QUASIPERÍODICOS	39
3.1 ESTRUTURAS PERIÓDICAS E QUASIPERÍODICAS	39
3.2 APLICAÇÕES DAS ESTRUTURAS QUASIPERÍODICAS.....	40
3.3 SEQUÊNCIA DE CANTOR.....	41
3.4 SEQUÊNCIA DE FIBONACCI	42
3.5 SEQUÊNCIA DE THUE-MORSE	44
3.6 SEQUÊNCIA DE PERÍODO DUPLO	45

4	MÉTODO DE MONTE CARLO	47
4.1	INTRODUÇÃO	47
4.2	HISTÓRIA DO MÉTODO DE MONTE CARLO	48
4.3	MEDIDAS DE GRANDEZAS TERMODINÂMICAS	48
4.4	AMOSTRAGEM E ALEATORIEDADE	51
4.4.1	Processos de Markov	52
4.4.2	Ergodicidade	54
4.4.3	Balanço Detalhado	54
4.4.4	Dinâmicas de Evolução	55
4.4.5	Algoritmo de Metropolis	56
5	MÉTODO MONTE CARLO APLICADO AO MODELO DE ISING QUASIPERÍODICO	58
5.1	INTRODUÇÃO	58
5.2	APRESENTAÇÃO DO MODELO	58
5.3	RESULTADOS	60
5.3.1	Verificação dos Valores mais Adequados para as Simulações	60
5.3.2	Resultados deste Trabalho	80
6	CONCLUSÃO	94
7	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	95

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Ernst Ising, físico alemão nascido em 10 de maio de 1900 e falecido em 11 de maio de 1998.	15
Figura 2: Momentos Magnéticos (esquemáticos) das unidades elementares que constituem um corpo sólido [25].....	25
Figura 3: Representação de domínios num material [15].....	28
Figura 4: Alinhamento dos momentos magnéticos na presença de um campo magnético externo [16].....	28
Figura 5: Alinhamento dos momentos magnéticos de um material antiferromagnético [16]. .	29
Figura 6: Representação do Ferromagnetismo [16].	30
Figura 7: Representação do comportamento da susceptibilidade em função da temperatura. Observa-se que abaixo de T_c o material é ferromagnético e acima de T_c o material em sua fase paramagnética [15].....	30
Figura 8: Representação do comportamento ideal para a lei de Curie-Weiss [16].	32
Figura 9: Domínios Magnéticos [23].	33
Figura 10: Paredes de Bloch [24].	33
Figura 11: Orientação dos domínios magnéticos com campo H [24].	34
Figura 12: Curva de histerese [16].	37
Figura 13: Ilustração esquemática as sequência de Cantor [47].....	42
Figura 14: Ilustração esquemática as sequência de Fibonacci a partir da geração S_2 [47].....	43
Figura 15: Ilustração esquemática as sequência de Thue-Morse a partir da geração S_1 [47]..	44
Figura 16: Ilustração esquemática da sequência de Período Duplo [47].....	45
Figura 17: Cinco sucessivos processos de Markov, formando uma Cadeia de Markov de estados.	53
Figura 18: Energia para o modelo de Ising na rede quadrada para vários tamanhos de rede...	62
Figura 19: Magnetização para o modelo de Ising na rede quadrada para vários tamanhos de rede.	63
Figura 20: Calor específico para o modelo de Ising na rede quadrada para vários tamanhos de rede.	64

Figura 21: Susceptibilidade para o modelo de Ising na rede quadrada para vários tamanhos de rede.	65
Figura 22: Energia para o modelo de Ising na rede quadrada para vários passos de Monte Carlo.	66
Figura 23: Magnetização para o modelo de Ising na rede quadrada para vários passos de Monte Carlo.	67
Figura 24: Calor específico para o modelo de Ising na rede quadrada para vários passos de Monte Carlo.	68
Figura 25: Susceptibilidade para o modelo de Ising na rede quadrada para vários passos de Monte Carlo.	69
Figura 26: Energia para o modelo de Ising na rede quadrada para vários valores de Termalização.	70
Figura 27: Magnetização para o modelo de Ising na rede quadrada para vários valores de Termalização.	71
Figura 28: Calor específico para o modelo de Ising na rede quadrada para vários valores de Termalização.	72
Figura 29: Susceptibilidade para o modelo de Ising na rede quadrada para vários valores de Termalização.	73
Figura 30: Energia para o modelo de Ising na rede quadrada para vários valores de campo externo.	74
Figura 31: Magnetização para o modelo de Ising na rede quadrada para vários valores de campo externo.	75
Figura 32: Calor específico para o modelo de Ising na rede quadrada para vários valores de campo externo.	76
Figura 33: Susceptibilidade para o modelo de Ising na rede quadrada para vários valores de campo externo.	77
Figura 34: Energia versus campo para o modelo de Ising na rede quadrada para vários valores de temperatura.	78
Figura 35: Histerese magnética para o modelo de Ising na rede quadrada para vários valores de temperatura.	79
Figura 36: Calor específico para o modelo de Ising na rede quadrada para $\lambda = 0,5$ e para as gerações de 1 a 5.	81

Figura 37: Magnetização para o modelo de Ising na rede quadrada para $\lambda = 0,5$ e para as gerações de 1 a 5.....	82
Figura 38: Calor específico para o modelo de Ising na rede quadrada para $\lambda = 2$ e para as gerações de 1 a 5.....	83
Figura 39: Magnetização para o modelo de Ising na rede quadrada para $\lambda = 2$ e para as gerações de 1 a 5.....	84
Figura 40: Calor específico para o modelo de Ising na rede quadrada para $\lambda = 5$ e para as gerações de 1 a 5.....	85
Figura 41: Magnetização para o modelo de Ising na rede quadrada para $\lambda = 5$ e para as gerações de 1 a 5.....	86
Figura 42: Histerese magnética para o modelo de Ising na rede quadrada para $\lambda = 5$ e para a 1ª geração.....	87
Figura 43: Histerese magnética para o modelo de Ising na rede quadrada para $\lambda = 5$ e para a 3ª geração.....	88
Figura 44: Histerese magnética para o modelo de Ising na rede quadrada para $\lambda = 5$ e para a 5ª geração.....	89
Figura 45: Histerese magnética para o modelo de Ising na rede quadrada para $\lambda = -1$ e para a 1ª geração.....	90
Figura 46: Histerese magnética para o modelo de Ising na rede quadrada para $\lambda = -1$ e para a 3ª geração.....	91
Figura 47: Histerese magnética para o modelo de Ising na rede quadrada para $\lambda = -1$ e para a 5ª geração.....	92

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Temperatura crítica para o modelo de Ising bidimensional.	16
Tabela 2: Distribuição de probabilidades nas dinâmicas de Banho Térmico, Metropolis e Glauber.	55
Tabela 3: Temperaturas críticas $\lambda = 0,5$	93
Tabela 4: Temperaturas críticas $\lambda = 2$	93
Tabela 5: Temperaturas críticas $\lambda = 5$	93

1 INTRODUÇÃO

1.1 INTRODUÇÃO E MOTIVAÇÃO

Há décadas se estuda o magnetismo com o intuito de se compreender adequadamente e controlar tais sistemas, dada a complexidade do tema. O magnetismo envolve além de diversos tipos de interação, fenômenos cooperativos e vários graus de liberdade. Porém, o mais fascinante diz respeito à classe de universalidade na qual o mesmo modelo que serve para estudar sistemas magnéticos, também serve para estudar sistemas fluidos, sistemas cosmológicos, propagação de doenças, etc. Um dos modelos mais simples, e com grande riqueza de aplicações, é o modelo de Ising, que entre 1966 e 2000 estava relacionado a pelo menos 16000 artigos publicados.



Figura 1: Ernst Ising, físico alemão nascido em 10 de maio de 1900 e falecido em 11 de maio de 1998.

Uma grandeza importante que diversos métodos e modelos se esforçavam para calcular é a temperatura crítica (T_C) do modelo de Ising, conforme a tabela a seguir [1]:

Método	Temperatura Crítica $k_B T_C/J$
Campo médio	4
Cálculo Exato – Onsager	$\approx 2,2690$
Monte Carlo	$\approx 2,3$ (a precisão depende de vários fatores)

Tabela 1: Temperatura crítica para o modelo de Ising bidimensional.

O trabalho pioneiro de Merlin e colaboradores [2], e a descoberta de materiais, como a liga AlMn, que quando submetidos à difração dos raios X, manifestam ordem orientacional de longo alcance e auto similaridade, porém não possuem simetria translacional, caracterizada pela periodicidade dá o início ao estudo experimental de estruturas quasicristais. Aliado a esses trabalhos surgiram diversos outros aplicando o modelo de Ising a estruturas quasiperiódicas, seguindo as mais diversas sequências, como a de Fibonacci [3] e Thue-Morse [4], por exemplo. Na década de oitenta, tais ideias foram estendidas aos modelos de spins de modo que suas interações, geradas por regras de substituição, assumissem um caráter aperiódico [5, 6]. A junção destes elementos motivaram este trabalho.

Neste trabalho, estudamos a aplicação do método de Monte Carlo ao Modelo de Ising submetido a uma sequência de substituição de Cantor. Este trabalho visa analisar as propriedades termodinâmicas no equilíbrio, como energia, magnetização, calor específico e susceptibilidade. É usado o modelo de Ising de spin $-1/2$ na rede quadrada junto ao Método de Monte Carlo seguindo a dinâmica evolutiva de Metropolis. A sequência de Cantor utilizada é construída por dizimação devido aos enormes tamanhos gerados para a rede quadrada.

O capítulo 2 trata de uma revisão bibliográfica de modelos e propriedades magnéticas, exibindo conceitos básicos necessários à compreensão de resultados e de capítulos posteriores. Temas como o Modelo de Ising, as propriedades básicas de materiais magnéticos, as Energias envolvidas no processo, etc. O capítulo seguinte trata de estruturas periódicas e quasiperiódicas, apresentando uma revisão acerca de aplicações das estruturas quase periódicas e das principais sequências: Cantor, Fibonacci, Thue-Morse e Período Duplo. O quarto capítulo apresenta o método de Monte Carlo, a forma de se medir grandezas termodinâmicas e magnéticas, as principais propriedades, como amostragem e aleatoriedade, processos de Markov, ergodicidade e balanço detalhado, principais dinâmicas de evolução, aprofundando da dinâmica de Metropolis.

O trabalho, propriamente dito, é apresentado no capítulo 5, onde se mostra os efeitos das sequências quase periódicas sobre o modelo de Ising, e sobre suas propriedades. Neste capítulo se dá mais detalhes também sobre a simulação de Monte Carlo implementada.

Por fim, apresentam-se as conclusões deste trabalho, além da proposta de novos trabalhos como forma de continuidade.

2 SISTEMAS MAGNÉTICOS

2.1 INTRODUÇÃO

Uma das metas dos físicos nos primeiros anos do século XX foi compreender como se comporta a magnetização espontânea, e encontrar uma descrição quantitativa da magnetização em função da temperatura. Com relação a isso, muitas suposições foram feitas, e a mais simplificada foi, por exemplo, que átomos se comportem como minúsculas agulhas de bússolas que interagem apenas com os seus primeiros vizinhos. As propriedades magnéticas dos materiais foram intensivamente estudadas por um grande número de pesquisadores antes mesmo de que uma teoria adequada tivesse sido desenvolvida. Estas propriedades foram analisadas com base na mecânica quântica, desenvolvida no começo do século XX. Atualmente, inúmeras aplicações baseadas nas propriedades magnéticas da matéria são encontradas em diversas áreas, como medicina, telecomunicações, informática, etc. Entre estas propriedades destacamos: o ferromagnetismo, antiferromagnetismo, diamagnetismo e paramagnetismo.

2.2 O MODELO DE ISING

O modelo de Ising [7] trata do comportamento de elementos individuais como os componentes de spins, presença de átomos ou moléculas em sítios, atividade neural, etc. Proposto em 1920 por Wilhelm Lenz ao seu aluno de doutorado Ernest Ising tinha o objetivo de simular o comportamento de domínios magnéticos de materiais como, por exemplo, ferro e níquel, onde uma fração dos spins atômicos se torna espontaneamente polarizada em uma dada direção, dando origem a um campo magnético macroscópico, que ocorre apenas abaixo de certa temperatura, chamada de temperatura de Curie. Esse modelo foi resolvido em uma dimensão pelo mesmo, que observou a não existência de transição de fases nestas circunstâncias. Equivocadamente, Ising sugeriu que o mesmo ocorreria em dimensões superiores, o que se mostrou um erro; de fato, a partir de argumentos qualitativos e de

métodos aproximados (Ansats de Bethe e teoria de campo médio) ficou solidamente estabelecido que o modelo pudesse exibir uma transição de fase, em dimensões superiores, o que foi confirmado pelo famoso trabalho de Onsager [8] em redes bidimensionais.

O artigo original de Ising [9] apresentou um modelo simples para tratar sistemas magnéticos, porém diversos autores propuseram generalizações que tem aplicações em diferentes áreas que incluem fenômenos de ordem-desordem em magnetismo e outros sistemas coordenados (ligas binárias, gás de rede, etc.), também com algum sucesso em sistemas biológicos, como, por exemplo, hemoglobina, enzimas alostéricas e DNA. O que existe em comum nestes sistemas (magnéticos e biológicos) é o fenômeno de cooperatividade entre os constituintes microscópios, dando origem a ordem local (curto alcance) e global (longo alcance). Este fenômeno da cooperação deve-se exclusivamente às interações microscópicas dos constituintes (spins, moléculas, etc.). Devido a sua simplicidade matemática, o modelo de Ising tem sido aplicado numa variedade de sistemas, tais como tráfego, economia, propagação de doenças, etc., devido à totalidade dos resultados dos cálculos efetuados antecipadamente em sistemas magnéticos no qual tem dado os alicerces para estudar diversos sistemas complexos.

O modelo proposto por Ising para o estudo de transições de fase em materiais ferromagnéticos é definido pelo Hamiltoniano:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - B \sum_{i=1}^N S_i \quad (2.1)$$

onde H representa o Hamiltoniano, J a energia de troca (exchange), B é o campo magnético e S os momentos de spins atômicos.

Tal modelo consiste em um sistema de momentos magnéticos atômicos arranjados nos sítios de uma determinada rede cristalina regular, os quais são descritos apenas por suas variáveis de spin S_i que podem assumir apenas dois valores ($S_i = \pm 1$), correspondentes às duas orientações (opostas) de um dipolo magnético. Outra contribuição importante vem da agitação térmica, que age desfavorecendo a ordem magnética. Para temperaturas suficientemente elevadas, os materiais não apresentam ordem magnética. Entretanto, observando o comportamento de materiais magnéticos, verifica-se que, à medida que a temperatura é diminuída, uma ordem magnética é estabelecida. Se os momentos magnéticos se ordenam paralelamente uns aos outros ($J_{ij} > 0$), diz-se que o material é ferromagnético. A temperatura, abaixo da qual essa ordem é alcançada, é denominada temperatura de Curie T_C . Se a ordem magnética é tal que os momentos magnéticos se alinham antiparalelamente

($J_{ij} < 0$), diz-se que o material é antiferromagnético, e a temperatura abaixo da qual essa ordem é estabelecida é chamada de temperatura de Néel, T_N .

Para resolvermos o modelo de Ising devemos escrever a função de partição *canônica* (ou a soma sobre todas as configurações das variáveis de spin) e obter a energia livre magnética por sítio. A função de partição é dada por:

$$Z = \sum_{S_i}^N \exp(-\beta H) \quad (2.2)$$

onde $\{S_i\}$ são todas as configurações dos spins (2^N),

As propriedades termodinâmicas são obtidas através das derivadas da energia livre de Helmholtz $F(H, T)$, a qual está relacionada com a função de partição da seguinte forma:

$$U(H, T) = -k_B T \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{F}{k_B T} \right) \quad (2.3)$$

$$C(H, T) = \frac{\partial U}{\partial T} \quad (2.4)$$

$$M(H, T) = -\frac{\partial}{\partial H} \left(\frac{F}{k_B T} \right) = \left\langle \sum_i^N S_i \right\rangle \quad (2.5)$$

2.3 O MODELO DE GÁS DE REDE

O modelo de Ising não é aplicado somente a sistemas magnéticos; existem outros problemas que podem ser estudados pelo modelo. Um exemplo simples é o “gás de rede”. Ele é aqui considerado como modelo de um sistema de partículas (moléculas) clássicas cujas posições dos centros de massa são restritas a coincidir com os vértices de uma rede regular, em d dimensões. Na versão mais simples do gás de rede, cada sítio é descrito por uma variável de ocupação, a qual assume o valor 0 quando o sítio está vazio e 1 quando está ocupado. Nesta situação, as partículas são independentes e a função de partição pode ser calculada analiticamente. A energia total do sistema é dada por:

$$H = -\varepsilon \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j - \mu \sum_j^N n_j \quad (2.6)$$

onde μ é o potencial químico e $-\varepsilon$ a energia de interação associada à ocupação de dois sítios vizinhos. Neste caso a grande função de partição é definida como:

$$\Xi = \sum_{n_1=0}^1 \sum_{n_2=0}^1 \dots \sum_{n_N=0}^1 \exp \left[\beta \varepsilon \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j + \beta \mu \sum_j n_j \right] \quad (2.7)$$

A equivalência entre o modelo de Ising e o gás de rede pode ser facilmente comprovada fazendo uma simples mudança de variável, $n_j = \frac{S_j + 1}{2}$. Desta forma a Eq. (2.7)

fica reescrita como:

$$\Xi = \sum_{S_1=-1}^{+1} \sum_{S_2=-1}^{+1} \dots \sum_{S_N=-1}^{+1} \exp \left[\beta \frac{\varepsilon}{4} \sum_{\langle ij \rangle} (S_{i+1})(S_{j+1}) + \beta \frac{\mu}{2} \sum_j (S_j + 1) \right] \quad (2.8)$$

que é equivalente a função de partição de Ising feita as seguintes modificações:

$$B \leftrightarrow \frac{\mu}{2} \quad (2.9)$$

$$J \leftrightarrow \frac{\varepsilon}{4} \quad (2.10)$$

$$S_j \leftrightarrow 2n_j - 1 \quad (2.11)$$

Um modelo um pouco mais complexo e muito estudado na física é quando as partículas de um dado sítio interagem com os seus primeiros vizinhos. Este tipo de interação será a responsável pelo sistema apresentar uma transição gás-líquido. Neste caso é possível estabelecer uma correspondência de um para um entre as variáveis termodinâmicas do gás de rede e as de um sistema magnético de spins na rede, o que permite a transferência de resultados conhecidos de um sistema para outro. O sistema em questão, quando a interação é atrativa, pode ser mapeado no modelo de Ising ferromagnético, cuja solução exata é conhecida em $d=1$ e 2 [8]. Já uma interação repulsiva entre os primeiros vizinhos corresponde a um sistema antiferromagnético. Porém, para a maioria dos gases de rede, não há um análogo magnético.

2.4 A SOLUÇÃO DE ONSAGER

Após alguns anos, o modelo de Ising, ganhava importância e, em 1944 foi resolvido analiticamente pelo químico e físico norueguês Lars Onsager [8]. O fato mais

importante descoberto por Onsager é que o modelo de Ising apresentava transição de fase, para duas dimensões, tornando-se assim uma das bases do estudo dos fenômenos críticos e transições de fase. Ainda que tenha sido resolvido na ausência de campo externo, e ainda não ter sido apresentada a solução analítica em três dimensões, a solução de Onsager é muito rica e apresenta um formalismo singular. Vamos apresentar a função de partição do sistema e a matriz de transferência utilizando como exemplo o modelo de Ising em uma dimensão, onde os cálculos são mais fáceis.

Na presença de um campo magnético e com interações do tipo primeiros vizinhos, em uma dimensão a hamiltoniana que descreve o modelo de Ising assume a seguinte forma:

$$H = -J \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} - B \sum_{i=1}^N (S_i + S_{i+1}) \quad (2.12)$$

onde foram empregadas condições de contorno periódicas, ou seja, $S_{N+1} = S_1$.

A função de partição pode ser escrita da seguinte maneira:

$$Z_N = \sum_{\{S_i\}} \exp \left[K \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} + L \sum_{i=1}^N (S_i + S_{i+1}) \right] \quad (2.13)$$

$$Z_N = \sum_{S_1} \sum_{S_2} \dots \sum_{S_N} \exp [K S_1 S_2 + L(S_1 + S_2)] \dots \exp [K S_N S_1 + L(S_N + S_1)]$$

sendo $K = \beta J$ e $L = \frac{\beta B}{2}$.

Definindo o elemento de matriz T_{ij} por:

$$T_{ij} = \langle S_i | T | S_j \rangle = \exp [K S_i S_j + L(S_i + S_j)] \quad (2.14)$$

temos que a função de partição pode ser reescrita como:

$$Z_N = \sum_{S_1} \sum_{S_2} \dots \sum_{S_N} \langle S_1 | T | S_2 \rangle \langle S_2 | T | S_3 \rangle \dots \langle S_N | T | S_1 \rangle \quad (2.15)$$

$$Z_N = \sum_{S_1 = \pm 1} \langle S_1 | T^N | S_1 \rangle = \text{Tr}(T^N) = \sum_i \lambda_i^N$$

Embora a Eq. (2.15) ter sido obtida para um caso particular, ela é igualmente válida para outras dimensões. Consideremos agora que λ_1 seja o maior autovalor associado à matriz de transferência T de forma que:

$$Z_N = \sum_i \lambda_i^N = \lambda_1^N \sum_{i \neq 1} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^N \quad (2.16)$$

Assim, no limite termodinâmico, a energia livre de Helmholtz por spin é dada por:

$$-\beta f = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z_N \quad (2.17)$$

Podemos observar que:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z_N = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \ln \lambda_1 + \frac{1}{N} \ln \sum_{i \neq 1} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^N \right\} = \ln \lambda_1 \quad (2.18)$$

uma vez que:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^N \rightarrow 0 \quad (2.19)$$

logo:

$$-\beta f = \ln \lambda_1 \quad (2.20)$$

Desta forma, vemos que o problema se reduz ao cálculo do maior autovalor da matriz de transferência.

A solução exata para duas dimensões, com campo magnético externo nulo, foi realizado por Onsager [8], no qual a reprodução não será feita aqui mas pode ser encontrada uma versão simplificada em [10].

2.5 MAGNETISMO E MATERIAIS MAGNÉTICOS

2.5.1 Aspectos Históricos

Os primeiros fenômenos magnéticos observados foram aqueles associados aos chamados “ímãs naturais” (magnetos). Conta a lenda que esse minério encontrado por um pastor chamado Magnes, originou o nome, Magnetita (Fe_2O_3). Outros dizem que o nome veio devido ao fato do minério ser encontrado em uma região da Turquia chamada de Magnésia. Esses ímãs tinham a propriedade de atrair ferro desmagnetizado, sendo que esta propriedade era mais acentuada em certas regiões desse material denominada, depois, de polos. Descobriu-se então que, quando uma barra de ferro era colocada perto de um ímã natural ela adquiria e retinha essa propriedade do ímã natural e que, quando suspensa livremente em torno de um eixo vertical, ela alinhava com a direção norte-sul. Surgiram, então, os instrumentos de navegação. Desde então os materiais magnéticos vêm sendo utilizados em grande volume

aproveitando-se dessa característica desses materiais. Equipamentos como: transformadores, motores, geradores, alto-falantes, eletroímãs, etc, contêm ferro, ou ligas de ferro, em suas estruturas, com o duplo propósito de aumentar a fluxo magnético e restringi-lo a uma região desejada.

Atualmente, pesquisas são feitas para se desenvolver outros tipos de materiais que tenham essa propriedade ainda mais acentuada e que possam ser manipulados de maneira a Permitir novas configurações e formatos de núcleos reduzindo-se assim as *perdas* desses núcleos, bem como seus tamanhos.

2.5.2 Conceitos Iniciais

A área de magnetismo pode ser resumida como a combinação de três pilares:

- a) A origem do magnetismo, ou seja, da existência dos momentos magnéticos (Mecânica Quântica).
- b) O entendimento das interações entre os momentos.
- c) A Mecânica estatística, necessária para descrever as propriedades macroscópicas observáveis.

Antes, porém precisamos discutir alguns conceitos e definições fundamentais:

- ✓ Forças magnéticas aparecem quando partículas eletricamente carregadas (não neutras) se movimentam.
- ✓ As linhas de força saem do polo norte em direção ao polo sul.
- ✓ Os dipolos magnéticos são análogos aos dipolos elétricos e podem ser imaginados como pequenas barras compostas de polo norte e sul.
- ✓ O momento magnético é um vetor, que em presença de um campo magnético, relaciona-se com o torque de alienação de ambos os vetores no ponto no qual se situa o elemento. O vetor de campo magnético a utilizar-se é o B (tesla).
- ✓ Um campo magnético H é gerado pela passagem de uma corrente i por uma espira cilíndrica de comprimento l e contendo N voltas. O campo magnético é medido em termos de fluxo magnético no vácuo B_0 (Wb/m^2) [13].

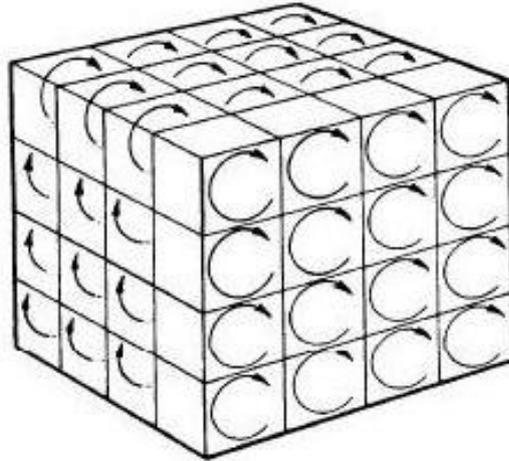


Figura 2: Momentos Magnéticos (esquemáticos) das unidades elementares que constituem um corpo sólido [25].

2.5.3 Propriedades Magnéticas da Matéria

Na presença de um campo magnético cada material responde de acordo com as propriedades de seus átomos e moléculas individuais bem como das interações entre elas. As respectivas propriedades magnéticas do material estão diretamente ligadas à magnetização \vec{M} , podendo representar, do ponto de vista microscópico, o estado magnético dos materiais pelo vetor magnetização, dado por:

$$\vec{M} = \frac{1}{V} \sum_i \vec{\mu}_i \quad (2.21)$$

onde $\vec{\mu}_i$ é o momento do dipolo magnético total feito sobre o somatório dos i -ésimos átomos ou moléculas no interior da rede cristalina V , que deve ser suficientemente grande para conter um número elevado de momentos, porém pequeno em relação ao tamanho da amostra [13].

A grandeza \vec{M} pode variar em relação a outras grandezas tais como temperatura T ou o campo magnético \vec{H} no qual o material possa está submetido. A forma do comportamento com respeito ao campo magnético tem origem nos vários tipos de interações entre os momentos magnéticos $\vec{\mu}_i$. A estrutura da rede cristalina e os defeitos nela existentes

influenciam na resposta a magnetização com a variação do campo \vec{H} . Assim podemos escrever:

$$\vec{M} = \chi \vec{H} \quad (2.22)$$

onde χ é a susceptibilidade magnética sendo uma grandeza que caracteriza um material magnético segundo sua resposta a um campo magnético aplicado. Ela é uma das mais importantes grandezas físicas no que se refere às propriedades físicas dos materiais magnéticos, como por exemplo, sua determinação pode revelar a ocorrência de transição de fase de natureza variada, ou a existência de estados com ordenamento magnético, com ou sem magnetização resultante.

Os fenômenos magnéticos podem ser expressos por duas grandezas: o vetor indução magnética \vec{B} e o vetor intensidade campo magnético \vec{H} . No entanto o vetor \vec{H} está diretamente relacionado com a corrente que cria o campo, já \vec{B} depende tanto da corrente quanto da magnetização do meio, assim \vec{B} é a resposta a um campo externo \vec{H} aplicado ao material magnético. Desse modo, \vec{B} e \vec{H} se relacionam pela equação:

$$\vec{B} = \mu_0 (\vec{H} + \vec{M}) \quad (2.23)$$

podendo ser expresso também por:

$$\vec{B} = \mu \vec{H} \quad (2.24)$$

onde $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ N/A}^2$ é a permeabilidade magnética no vácuo. A permeabilidade magnética é a facilidade com que um material permite estabelecer, através dele, um fluxo magnético.

Outra característica dos materiais magnéticos é a *relutância* que é a dificuldade que um material tem para deixar estabelecer nele um fluxo magnético. A expressão para a relutância é dada por:

$$\mathfrak{R} = \frac{l}{\mu A} \quad (2.25)$$

onde l é o caminho do campo magnético e A é a área da seção reta do material em estudo. Materiais com alta permeabilidade possuem baixa relutância.

Quando se aplica uma intensidade de campo magnético nas diversas direções de determinado cristal que compõe um material magnético observa-se que a densidade de fluxo resultante varia de direção para direção, mostrando que a permeabilidade magnética é uma função da orientação do campo aplicado, caracterizando, portanto, a existência de uma

anisotropia cristalina. Isto significa que, em dependendo da região, as perdas podem ser maiores ou menores. Como a redução das perdas é uma preocupação constante nos projetos magnéticos é justificável se determinar, em cada conjunto de cristais que formam determinado núcleo magnético, qual a direção em que se deve aplicar o campo magnético [13].

Além da anisotropia cristalina, o campo magnético aplicado pode também alterar as dimensões físicas do cristal ferromagnético para tamanho maior ou menor. Esse fenômeno é denominado de *magnetostricção*. A grandeza da variação nas dimensões é função do eixo cristalino sobre o qual incide o campo magnético. Materiais que sofrem esse fenômeno, quando são submetidos à tração ou compressão sofrem um aumento ou redução da permeabilidade, como o níquel. Essa propriedade é utilizada em sistemas de controle de pressão nas prensas hidráulicas, por exemplo [13].

2.5.4 Sistemas Ferromagnéticos e Antiferromagnéticos

O ferromagnetismo, assim como o paramagnetismo, ocorre em materiais cujos átomos possuem momentos de dipolo magnético permanentes. O que diferencia os materiais ferromagnéticos dos paramagnéticos é que nos primeiros existe uma forte interação entre momentos de dipolo atômicos vizinhos que os mantêm alinhados, mesmo quando o campo magnético é retirado, ou seja, os momentos magnéticos interagem entre si [14].

Os materiais ferromagnéticos, quando não estão na presença de um campo magnético externo, possuem seus momentos de dipolo seguindo uma orientação aleatória, não alinhados em uma direção preferencial, assim apresentam uma magnetização resultante nula. Mas, aos serem submetidos à presença de um campo externo seus campos magnéticos tendem a se alinharem na direção do campo aplicado, aumentando o momento do dipolo resultante até atingir a saturação. Mesmo após a retirada do campo externo, os momentos de dipolos são capazes de manter uma magnetização remanescente. Apesar disso, é possível encontrar um material ferromagnético em estado desmagnetizado [15]. Isso é possível, pois, os materiais ferromagnéticos podem ser divididos em domínios magnéticos, onde, determinadas regiões do material possuem momentos magnéticos apontando na mesma direção preferencial (Figura 3).



Figura 3: Representação de domínios num material [15].

Os domínios magnéticos do material podem apontar para direções aleatórias, sendo apenas alinhadas na presença de um campo magnético externo.

O ferromagnetismo é caracterizado por, na presença de um campo magnético externo, possuir alinhamento paralelo dos momentos magnéticos e como já foi citado, na mesma direção do campo externo. Na figura 4 é possível observar o alinhamento dos materiais de diferentes ordens magnéticas.

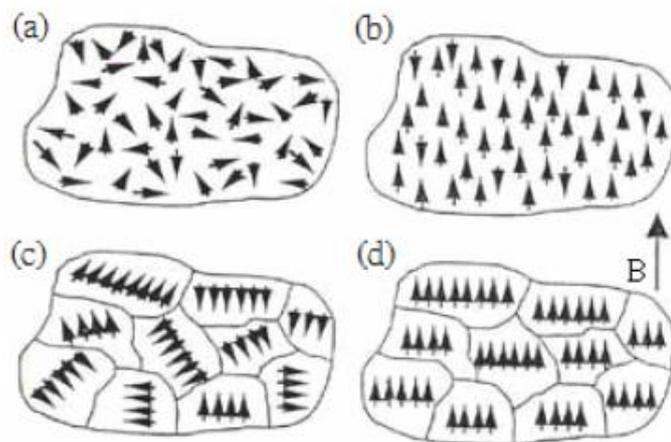


Figura 4: Alinhamento dos momentos magnéticos na presença de um campo magnético externo [16].

Em (a) a direção aleatória dos momentos magnéticos em um material paramagnético e em (b) o alinhamento na presença do campo magnético. Em (c) observa-se os domínios magnéticos de um material ferromagnético e em (d) os momentos magnéticos alinhados em uma direção preferencial na presença do campo magnético externo.

Os materiais antiferromagnéticos caracterizam-se por possuírem momentos de dipolo magnéticos antiparalelos, o que resulta em uma magnetização total nula [15]. A representação pode ser observada na figura 5 abaixo.



Figura 5: Alinhamento dos momentos magnéticos de um material antiferromagnético [16].

2.5.5 Ferromagnetismo

Um material ferromagnético possui momento magnético espontâneo, denominado de momento de saturação [17]. O processo de magnetização de um material ferromagnético consiste em converter os diversos domínios magnéticos, no qual cada domínio aponta para uma determinada direção, em um único domínio magnético, no sentido de que seja magnetizado em uma única direção preferencial. Isso ocorre na presença de um campo magnético externo, onde os domínios são alinhados na mesma direção do campo até o limite da magnetização de saturação. Ao remover o campo externo parte dos domínios ainda permanecem alinhados, resultando em uma magnetização remanescente [15]. O ferromagnetismo ocorre em ferro, cobalto e níquel puros, bem como na liga desses metais uns com os outros. Ele também ocorre com o gadolínio, disprósio e outros compostos. Ele surge de uma forte interação entre elétrons em uma banda parcialmente preenchida em um metal ou entre os elétrons localizados que formam momentos magnéticos em átomos vizinhos. Esta interação, chamada de interação de troca, diminui a energia de um par de elétrons com *spins* paralelos [22]. Quando um material ferromagnético é colocado num campo externo, dois efeitos podem ocorrer: (1) nas fronteiras dos domínios alinhados com o campo, os dipolos alinhados em outros sentidos podem girar até ficar alinhados com o campo e, desse modo, tais domínios crescem à custa dos domínios vizinhos; e (2) os dipolos de domínios não alinhados podem girar em conjunto tendendo a alinhar-se com o campo aplicado (Fig. 6).

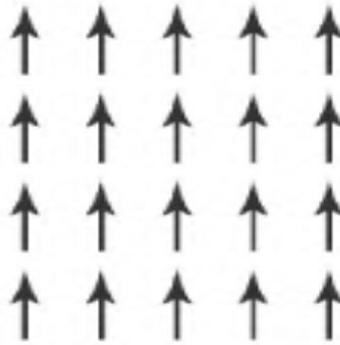


Figura 6: Representação do Ferromagnetismo [16].

A caracterização do ferromagnetismo está relacionada, também, com a temperatura. Por exemplo, o CrO_2 , é ferromagnético, porém, nem o cromo e nem o oxigênio são ferromagnéticos à temperatura ambiente. De acordo com a temperatura, alguns materiais sofrem uma transição de ordem magnética, através da orientação de seus spins. Em baixas temperaturas, alguns sólidos paramagnéticos sofrem uma transição de fase em que grandes domínios de spins se orientam em direções paralelas [17]. Esse alinhamento dá origem ao ferromagnetismo. Essa transição, de paramagnetismo para ferromagnetismo, ocorre na chamada temperatura de Curie. De acordo com Kittel [17], a Temperatura de Curie T_C é a temperatura acima da qual a magnetização espontânea se anula. Essa temperatura separa a fase paramagnética da ferromagnética, conforme representado na figura 7.

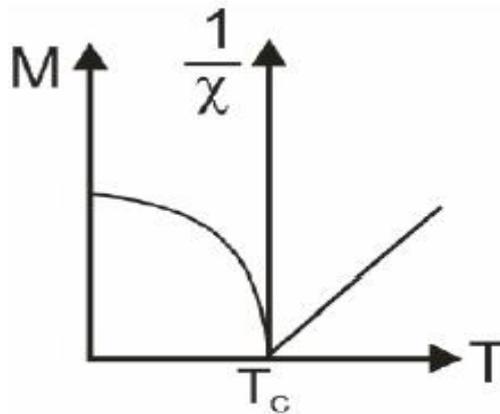


Figura 7: Representação do comportamento da susceptibilidade em função da temperatura. Observa-se que abaixo de T_C o material é ferromagnético e acima de T_C o material em sua fase paramagnética [15].

Em $T=0$, M tem valor igual ao da magnetização de saturação, M_S , porque todos os momentos estão alinhados (Figura 7). À medida que a temperatura aumenta M diminui gradualmente devido à agitação térmica dos momentos. Em $T > T_C$, a energia térmica

predomina sobre a energia de ordenamento, de modo que o material passa a ter comportamento paramagnético, com $M = 0$. A fim de determinar, matematicamente, a temperatura de Curie, considere um material paramagnético. Considerando ainda uma interação interna que tende a alinhar os momentos magnéticos paralelamente uns aos outros, tem-se um material ferromagnético, a essa interação dá-se o nome de campo de troca que pode ter o efeito de orientação contrariada pela agitação térmica e para altas temperaturas a ordem dos spins é destruída.

Suponha o campo de troca sendo equivalente a um campo magnético H_E proporcional à magnetização M . Numa aproximação do campo de troca, supõe-se que o átomo magnético sofra a ação de um campo proporcional à magnetização, sendo dado por:

$$H_E = \lambda M \quad (2.26)$$

onde λ é uma constante independente da temperatura. Na fase paramagnética considerada, um campo magnético B é aplicado, produzindo uma magnetização finita que criará um campo de troca B_E . Tomando χ como sendo a susceptibilidade paramagnética, temos:

$$M = \chi(H + H_E) \quad (2.27)$$

e que:

$$\chi = \frac{C}{T} \quad (2.28)$$

onde a constante C é denominada de constante de Curie.

Substituindo a Eq. 2.28 na Eq. 2.27 e em Eq. 2.26, fica como:

$$M = \frac{C}{T}(H + \lambda M) \rightarrow MT = CH + \lambda MC \rightarrow (MT + \lambda MC) = CH \rightarrow \frac{M}{H} = \frac{C}{T - \lambda C} \quad (2.29)$$

da Eq. 2.22, temos que $\chi = \frac{M}{H}$, dessa forma a equação acima pode ser reescrita como:

$$\chi = \frac{C}{T - \lambda C} \quad (2.30)$$

Chamando $T_c = \lambda C$, observe que quando $T = T_c$ a susceptibilidade magnética apresenta uma divergência, isso significa o começo do ordenamento magnético dentro do material [18]. Podemos escrever a Eq. 2.30 da seguinte forma:

$$\chi = \frac{C}{T - T_c} \quad (2.31)$$

A Eq. 2.31 representa a *Lei de Curie-Weiss* e, de acordo com Martins [16], é uma correção à *Lei de Curie*, Eq. 2.28. Esta expressão descreve muito bem a variação da

susceptibilidade na região paramagnética acima da temperatura de Curie. O sinal para T_c determina se a interação é ferromagnética ou antiferromagnética, a dependência do material magnético com a temperatura é analisada observando a susceptibilidade magnética conforme se varia a temperatura. Assim, para:

- a) $T > T_c \rightarrow \lambda > 0$, a interação é ferromagnética;
- b) $T < T_c \rightarrow \lambda < 0$, a interação é antiferromagnética.

A figura 8 ilustra curvas, χ^{-1} em função da temperatura, que representam as interações ferromagnéticas, antiferromagnéticas e para um paramagnetismo ideal.

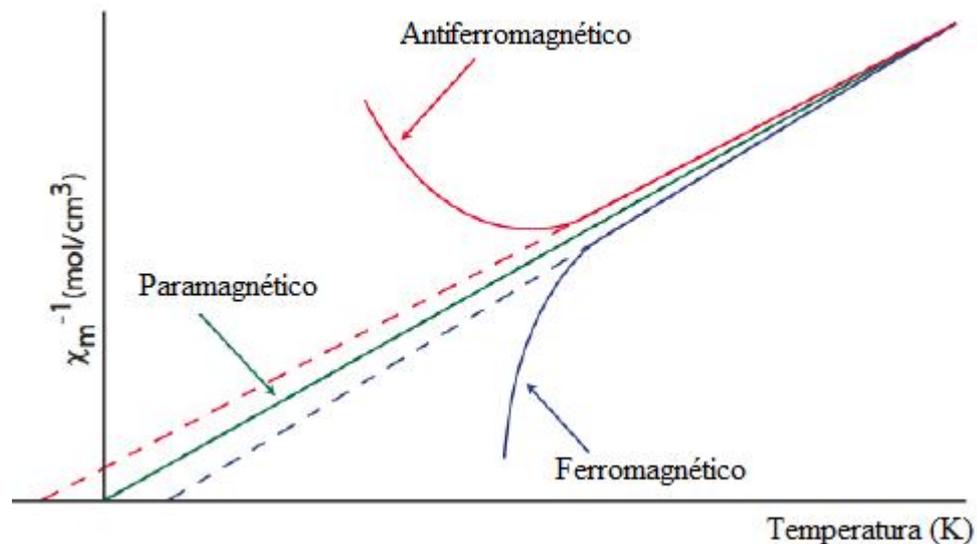


Figura 8: Representação do comportamento ideal para a lei de Curie-Weiss [16].

A T_c é a temperatura na qual o campo molecular começa a operar dentro do sistema, vencendo as variações térmicas dentro do paramagnetismo e levando-o a estado geralmente ordenado, o ferromagnetismo [16]. Definindo assim, a magnetização, chamada espontânea ou de saturação para a temperatura T , que surge em algumas regiões de alcance limitado dentro do material ferromagnético, chamadas de domínios magnéticos.

O conceito de domínios foi originalmente introduzido por P. Weiss para explicar o porquê dos materiais magnéticos poderem estar desmagnetizados enquanto continuam tendo, localmente, uma magnetização espontânea não nula. Este conceito é bastante útil para uma ampla variedade de materiais magnéticos. Quando André-Marie Ampère descobriu que os efeitos magnéticos também poderiam ser produzidos por correntes ele propôs a teoria de que

as propriedades magnéticas de um corpo fossem originadas por um grande número de minúsculas correntes circulares dentro desse corpo. O campo magnético total no material seria, então, a soma do campo gerado pela corrente externa com o campo gerado por estas correntes microscópicas. Mais tarde, foi desenvolvida a teoria dos domínios onde se mostra que, os elétrons apresentam uma propriedade chamada spin que faz com que eles se comportem como pequenos ímãs. Nos materiais magnéticos, o campo total devido aos spins dos elétrons é zero, seja porque eles se anulam naturalmente, seja porque estão orientados de forma aleatória. Em materiais magnéticos, como o ferro e o aço, os campos magnéticos dos elétrons (grupos de até 10^{12} elétrons) se alinham (acoplamento de troca) formando regiões que apresentam magnetismo espontâneo. Essas regiões são chamadas de domínios (Fig. 9). Os domínios estão separados por limites de domínio designados por *paredes de Bloch* (Fig.10).

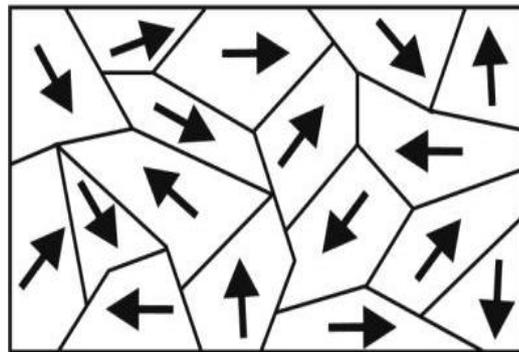


Figura 9: Domínios Magnéticos [23].

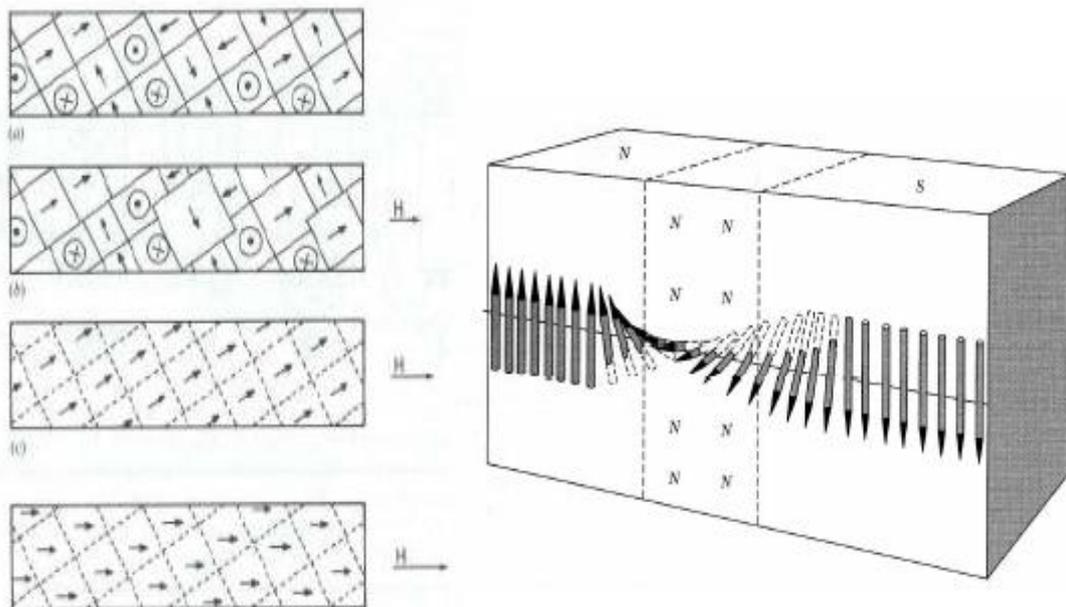


Figura 10: Paredes de Bloch [24].

Em uma amostra não magnetizada de um material magnético os domínios estão distribuídos de forma aleatória e o campo magnético total em qualquer direção é zero. Quando expostos a um campo aplicado externo, os domínios tendem a alinhar-se segundo a direção do campo aplicado, à custa do crescimento dos domínios com orientações favoráveis ou da reorientação dos dipolos (Fig.11). Se o campo externo aplicado for suficientemente intenso, todos os domínios se orientarão nessa direção e, daí em diante, qualquer aumento do campo externo não causará nenhum aumento na magnetização do material. Nesse caso diz-se que o material atingiu a saturação.

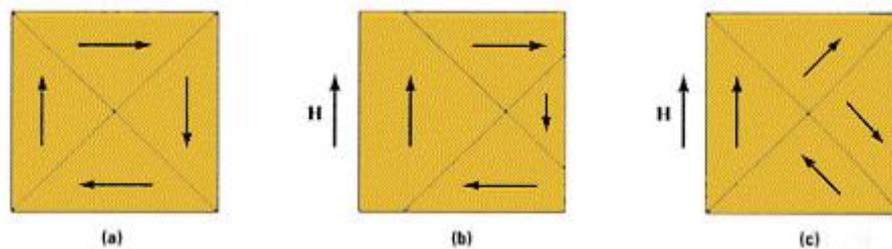


Figura 11: Orientação dos domínios magnéticos com campo H [24].

Quando o campo magnético externo é removido, o grau de alinhamento diminui e o campo no interior do material cai para um valor, não necessariamente igual ao anterior, ou seja, a remoção da força magnetizante faz com que alguns domínios voltem a ficar desalinhados. Essa perda do alinhamento, porém, não é total e os domínios alinhados remanescentes são os responsáveis pela existência dos ímãs permanentes.

Um material ferromagnético, após ser aquecido acima da temperatura de Curie e resfriado, se divide, espontaneamente, em domínios magnéticos nos quais os momentos magnéticos estão alinhados paralelamente. Por outro lado, o material não apresenta um campo magnético externo, uma vez que os domínios magnéticos estão dispostos aleatoriamente de maneira que a resultante externa é nula [11]. A explicação para isso está no balanço das energias magnéticas envolvidas neste processo.

2.5.6 Antiferromagnetismo

O antiferromagnetismo é caracterizado pelo ordenamento de todos os momentos de um material de forma antiparalela (Fig. 1.4). Sua natureza é a mesma do ferromagnetismo,

ou seja, determinado pela interação de troca. Analogamente ao ferromagnetismo, as características antiferromagnéticas desaparecem a alta temperatura devido à entropia, a essa temperatura dá-se o nome de *temperatura de Néel*, T_N , que pode ser observado na figura 8. Acima dessa temperatura os compostos são tipicamente paramagnéticos [19]. De acordo com Marques [18], Néel foi um dos primeiros a prever este tipo de ordenamento magnético, no qual publicou uma série de artigos a partir de 1932.

A temperatura de Néel, T_N , na aproximação do campo é dada por:

$$T_N = \mu C \quad (2.32)$$

Dessa forma, a susceptibilidade na região paramagnética é:

$$\chi = \frac{2C}{T + \mu C} \quad (2.33)$$

que pode ser reescrita como:

$$\chi = \frac{2C}{T + T_N} \quad (2.34)$$

A Figura 12 mostra a dependência com a temperatura de material antiferromagnético, nela é possível observar, em (a), onde ocorre a transição de fase do antiferromagnetismo para o paramagnetismo de Curie-Weiss [16]. A lei de Curie-Weiss é dada pela Eq. 2.31. Em (b), temos que a susceptibilidade atinge seu valor máximo na temperatura de Néel, T_N , onde existe um pico bem definido na curva de χ contra T .

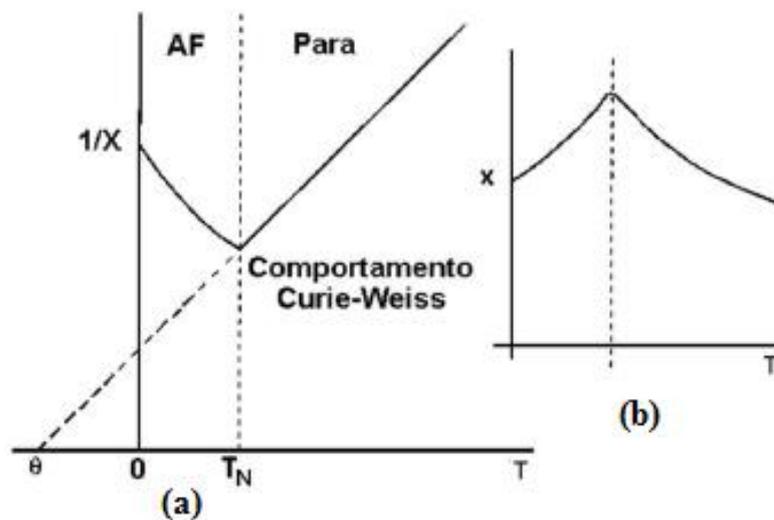


Figura 12 – Comportamento antiferromagnético. O χ^{-1} diminui com o aumento da temperatura até TN, quando este transita para o estado paramagnético, agora, crescendo linearmente com a temperatura [16].

2.5.7 Curva de Histerese

Do ponto de vista experimental, as curvas de magnetização contra a intensidade do campo magnético informam sobre a “dureza” dos materiais magnéticos, que está relacionada com sua anisotropia cristalina. Quando um campo magnético é aplicado sobre um sistema magnético, como um pedaço de ferro, suas paredes de domínio se movimentam, aumentando a região de momentos magnéticos na mesma direção do campo e causando uma diminuição de sua energia interna. Para pequenos valores do campo este processo é reversível. Entretanto, quando o campo não é fraco, o processo torna-se irreversível, impedindo o sistema de retornar a sua configuração inicial quando o campo é removido. Este é o bem conhecido fenômeno de histerese [12].

A histerese é a tendência de um material ou sistema de conservar suas propriedades na ausência do estímulo que as gerou. Podem-se encontrar diferentes manifestações desse fenômeno. Conforme a Figura 12, quando o campo magnético H aplicado em um material ferromagnético inicialmente desmagnetizado for aumentado este seguirá a curva pontilhada até atingir um patamar constante chamado de *magnetização de saturação* (M_S). Em seguida diminuindo o campo a partir deste valor, M decresce mais lentamente seguindo o sentido dado pela seta até um valor residual da magnetização para um campo H nulo, chamado de *magnetização remanente* (M_R). Para que \vec{M} chegue a zero, é necessário aplicar um campo negativo, chamado de força coercitiva. Se H continuar aumentando no sentido negativo, o material é magnetizado com polaridade oposta. Desse modo, a magnetização inicialmente será fácil, até quando se aproxima da saturação, passando a ser cada vez mais difícil. A redução do campo novamente a zero deixa uma densidade de fluxo remanescente, e, para reduzir H a zero, deve-se aplicar uma força coercitiva no sentido positivo. Aumentando-se mais ainda o campo, o material fica novamente saturado, com a polaridade inicial.

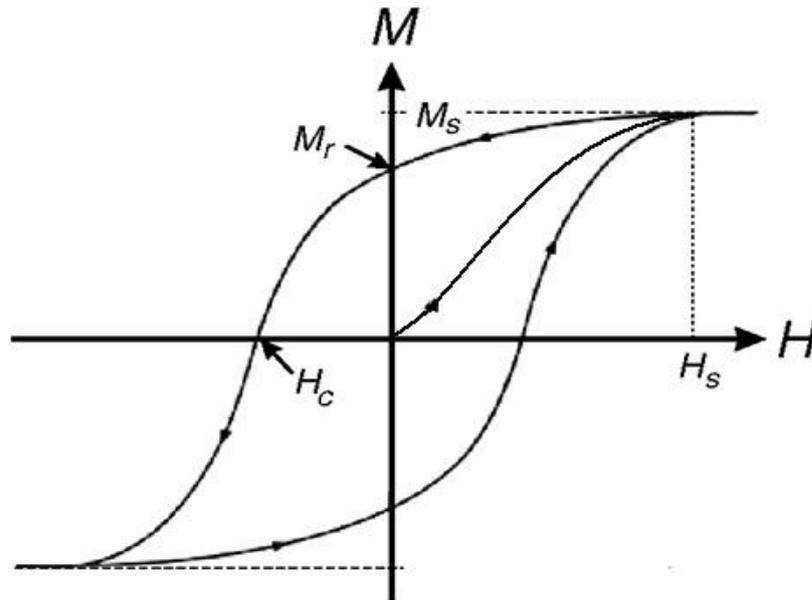


Figura 12: Curva de histerese [16].

A magnetização apresenta valores diferentes para um mesmo campo magnético aplicado dependendo do estado magnético anterior da estrutura. Há duas grandezas que merecem destaque na curva de magnetização:

A Remanência que é a magnetização do material quando removido o campo externo a partir da saturação e a coercividade que indica o campo magnético onde ocorre a reversão da magnetização de uma saturação para outra.

2.6 ENERGIAS MAGNÉTICAS

As energias magnéticas explicam a configuração magnética do material em estudo. Como o mínimo de energia se dá quando o momento magnético aponta na direção do respectivo campo local, assim, a configuração deve ser sempre a que apresente a menor energia possível ou que os momentos magnéticos apontem para o campo efetivo local [20].

2.6.1 Energia de Troca (Exchange)

Forças eletrostáticas são geralmente, muito mais intensas que forças magnéticas de interação. A mecânica quântica fornece a explicação para essas interações eletrostáticas pela interação de troca. De acordo com o princípio de exclusão de Pauli, dois elétrons não podem existir em um mesmo estado quântico, portanto devem ter momentos magnéticos intrínsecos contrários. De maneira oposta, a repulsão eletrostática entre dois elétrons tende a manter os momentos magnéticos alinhados paralelamente.

Para os materiais ferromagnéticos, o equilíbrio destas forças, faz com que haja um momento magnético intrínseco resultante. O alinhamento varia se o coeficiente de troca (J) for positivo (para ferromagnéticos) e negativo (para antiferromagnéticos).

A energia de troca de um dado átomo i com seus vizinhos é dado por:

$$H_e = -\sum_j J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (2.35)$$

Se a integral de troca é isotrópica igual à J_e , temos:

$$H_e = -J_e \sum_j \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (2.36)$$

2.6.2 Energia Zeeman

A energia Zeeman nos informa como o momento magnético atômico interage com um campo magnético externo \vec{H} . Quando um campo magnético externo é aplicado, a magnetização sofre um torque fazendo com que os momentos magnéticos se alinhem na direção do campo. No entanto a orientação de cada momento magnético será dada pela minimização da energia magnética total do sistema [21].

3 SISTEMAS QUASIPERIÓDICOS

3.1 ESTRUTURAS PERIÓDICAS E QUASIPERIÓDICAS

Em um trabalho de 1984, Dan Schechtman [70] e colaboradores [26] mostraram a existência de um sólido metálico que exibia um padrão de difração de um cristal monocristalino, mas com simetria icosaédrica, inconsistente com as translações da rede cristalina conhecidas para um cristal. Estudos teóricos desenvolvidos por Levine e Steinhardt [27] explicaram esta simetria mediante as figuras geométricas de Penrose em 2D e 3D [28], que preenchem todo o espaço, mas que são aperiódicas, ou seja, não exibem uma estrutura periódica regular. O desafio colocado pelos estudos experimentais foi desenvolver modelos teóricos para caracterizar estas estruturas artificiais.

Este novo sólido cristalino, sem periodicidade translacional, foi denominado de *quasicristal* ou cristal aperiódico. Embora o termo quasicristal seja mais apropriado quando aplicado aos compostos naturais ou as ligas artificiais, em 1D, não há diferenças entre este e as estruturas quasiperiódicas formadas pelo arranjo incomensurável de células unitárias periódicas. Uma motivação para o estudo destas estruturas é que elas exibem um espectro de energia fragmentado semelhante ao conjunto de Cantor [34], revelando um padrão de auto similaridade, que é uma característica fundamental em sistemas fractais. Outro aspecto fascinante é devido às propriedades coletivas nestes sistemas, como as correlações de longo alcance que são observadas em quasicristais e que também estão presentes em sistemas quasiperiódicos, fornecendo uma nova descrição de desordem [29,30], tema bastante investigado em física estatística.

De fato, a análise dos espectros da propagação da luz, da transmissão eletrônica, da densidade de estados, dos polaritons, por exemplo, mostra que estes espectros são fractais [31]. Em outras palavras, o comportamento macroscópico do sistema é distinto do comportamento das suas partes constituintes tomadas separadamente. Uma consequência importante, é que sistemas distintos podem exibir o mesmo comportamento crítico, ou seja, podemos classificar os vários sistemas físicos em poucas classes de universalidade [32]. Por analogia, podemos considerar o tópico de transições de fase contínua: sabe-se que o comportamento crítico depende somente das propriedades globais, isto é, da dimensão

geométrica do sistema e das simetrias de seus parâmetros de ordem, sendo insensível aos detalhes das interações microscópicas entre átomos ou moléculas [33]. Um exemplo é o uso do modelo de Ising de interação entre spins para descrever um fluido. O modelo de spins clássicos de Ising orientados para cima (up) ou para baixo (down) é escolhido para indicar a presença (ou ausência) de uma molécula no sítio da rede, enquanto as complicadas interações entre estas moléculas são substituídas por um acoplamento de troca entre primeiros vizinhos. Apesar da sua simplicidade, este modelo reproduz completamente muitos aspectos do comportamento do fluido próximo da sua temperatura crítica [34, 35].

Neste contexto, os trabalhos pioneiros de Merlin e colaboradores em sistemas quasiperiódicos para a sequência de Fibonacci [2],[36-37] e a sequência de Thue-Morse [38] em super-redes nanoestruturadas de GaAs-AlAs têm gerado uma atividade de pesquisa expressiva no campo dos quasicristais. Basicamente, estes sistemas envolvem a definição de dois blocos constituintes (A e B, por exemplo), cada um deles contendo a informação física necessária, ordenados segundo uma determinada sequência. Isto é, eles podem ser descritos em termos de uma série de gerações que obedecem a uma relação recursiva particular. Além disso, eles podem ser considerados como sistemas intermediários entre os cristais periódicos e os sólidos amorfos [39], sendo um dos aspectos que tornam estes materiais interessantes para estudo.

3.2 APLICAÇÕES DAS ESTRUTURAS QUASIPERIÓDICAS

As estruturas quasiperiódicas consideradas ao longo deste trabalho são conhecidas como sequências substitucionais, as quais têm sido estudadas em muitas áreas da matemática [40-42], da ciência da computação [43-44] e da criptografia [45]. Apesar de utilizar conceitos elementares, a abordagem a ser apresentada produziu resultados de bastante interesse na matemática e na física. Seguem então algumas definições importantes quanto à quase periodicidade das sequências de substituição.

Definição 1: Um conjunto finito ξ , cujos elementos são $\xi = \{A, B\}$, (com **A** e **B** sendo dois blocos constituintes diferentes), que denominamos de alfabeto.

Definição 2: Chamamos de ζ^* o conjunto de todas as palavras de comprimento finito (tal como **AABAB**) que podem ser escritas a partir do alfabeto.

Definição 3: Definimos como ζ como uma quantidade que age sobre uma palavra, substituindo cada letra (por exemplo, **A**) desta palavra por uma imagem correspondente, chamada de $\zeta(A)$.

Uma sequência é então denominada de sequência substitucional se ela é um ponto fixo de ζ , isto é, se ela permanece invariante quando cada letra na sequência é substituída por sua imagem em ζ . As sequências substitucionais mais interessantes e que têm atraído a atenção dos físicos são:

- a) A sequência de Cantor, onde as regras de substituição são $A \rightarrow \zeta(A) = ABA$, $B \rightarrow \zeta(B) = BBB$;
- b) A sequência de Fibonacci, onde $A \rightarrow \zeta(A) = AB$, $B \rightarrow \zeta(B) = A$;
- c) A sequência de Thue-Morse, onde $A \rightarrow \zeta(A) = AB$, $B \rightarrow \zeta(B) = BA$;
- d) E a sequência de período duplo, onde $A \rightarrow \zeta(A) = AB$, $B \rightarrow \zeta(B) = AA$.

Vamos agora continuar as definições das sequências de substituição mencionadas.

3.3 SEQUÊNCIA DE CANTOR

Provavelmente a mais conhecida e simples geometria fractal determinística é a triádica sequência de Cantor [46]. Esse conjunto é obtido através da repetição de uma regra simples: dividir qualquer segmento em três partes iguais, e em seguida, eliminar a central (podemos chamar isso de sequência de Cantor inicial), e com isso repetir este processo continuamente. Por exemplo, se começarmos algebricamente com o conjunto fechado $S_0 = [0, 3]$ de todos os números de 0 a 3 e retira-se o terço central aberto, ficamos com um par de intervalos fechados $[0, 1]$ e $[2, 3]$ representando S_1 . Os terços médio abertos em cada um destes intervalos seria removido novamente para produzir quatro intervalos menores representando S_2 , e assim por diante. Depois de diversas etapas, teríamos um grande número de pequenos intervalos, separados por intervalos de vários tamanhos.

Para aplicações em blocos de construção de estruturas de multicamadas, é mais apropriado considerar em vez disso a chamada sequência de Cantor de saída. Isto tem sua n -ésima fase definida em termos da fase anterior pelo $S_n = S_{n-1} B_n S_{n-1}$, com as condições iniciais considerando $S_0 = A$ e $S_1 = AB_1A$. Nesse caso B_n , para uma sequência de n -ésima fase difere da base B_1 ($\equiv B$) para a primeira fase só pela sua espessura, $d_{B_n} = 3^{n-1} d_{B_1}$. Podemos também construir a mesma sequência, mais diretamente usando as transformações $A \rightarrow ABA$, $B \rightarrow BBB$.

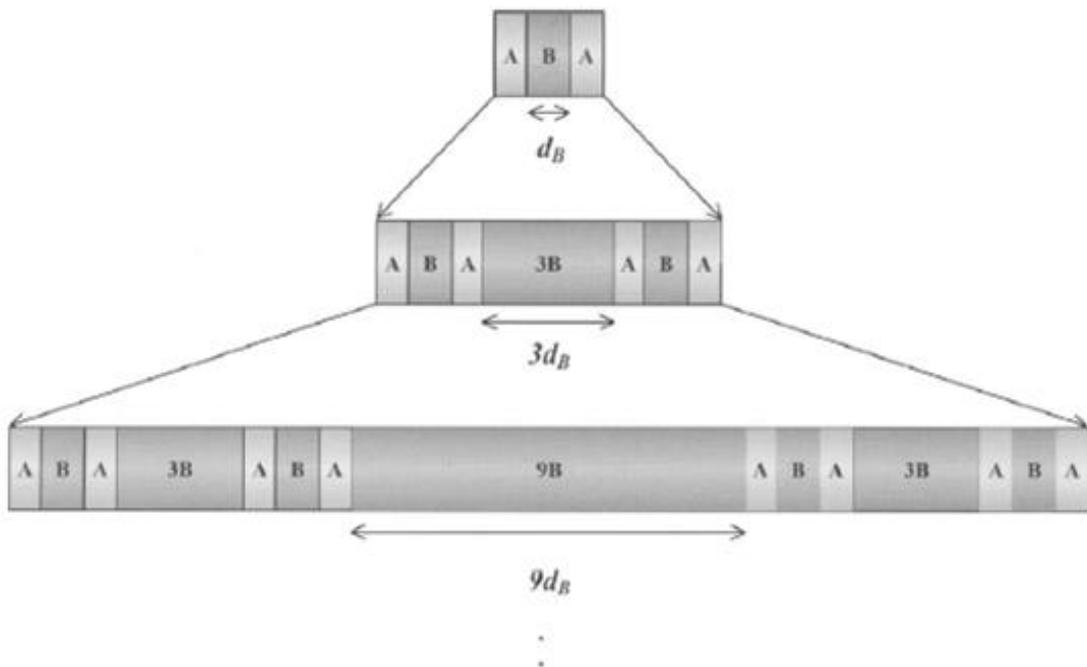


Figura 13: Ilustração esquemática da sequência de Cantor [47].

As gerações de Cantor são (Fig. 14)

$$S_0 = A; \quad S_1 = ABA; \quad S_2 = ABABBBABA; \quad \text{etc.} \quad (3.1)$$

e são mais claramente representados pelo esquema de expansão diagramática mostrado na figura 2.

3.4 SEQUÊNCIA DE FIBONACCI

A sequência de Fibonacci é o exemplo mais antigo de uma cadeia aperiódica de números. Ela foi desenvolvida pelo matemático e comerciante Leonardo de Pisa em 1202,

cujo apelido era Fibonacci, que significa filho de Bonacci. Essa sequência surgiu quando ele investigava o crescimento de uma população de coelhos em um cenário ideal, onde um casal inicial de coelhos em um ambiente fechado, sem mortes e admitindo que cada casal de coelhos nasce de um par fértil depois de dois meses, dá origem a uma população que cresce segundo uma sequência bem definida, que é: $\{1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, \dots\}$, onde o próximo termo da série é obtido somando os dois termos anteriores [47]. Na literatura, vamos encontrar estudos que mostram que a sequência de Fibonacci está associada aos voos das aves predadoras que descem sobre suas presas seguindo uma espiral, à disposição dos galhos nos troncos das árvores e das folhas nos galhos, as espirais formadas pelos gomos na casca do abacaxi, entre outras evidências [48,49]. Este é o aspecto particularmente interessante da sequência de Fibonacci, pois instiga o pesquisador a procurar entender a razão da escolha pela natureza desta sequência específica.

Na Física de materiais, a estrutura de Fibonacci pode ser realizada experimentalmente por justaposição de dois blocos constituintes de base A e B, de tal forma que a n -ésima fase do processo, S_n , é dada pela regra recursiva: $S_n = S_{n-1}S_{n-2}$ para $n \geq 2$, começando com $S_0 = B$ e $S_1 = A$. Ela tem a propriedade de ser invariante sob a transformação: $A \rightarrow AB$ e $B \rightarrow A$.

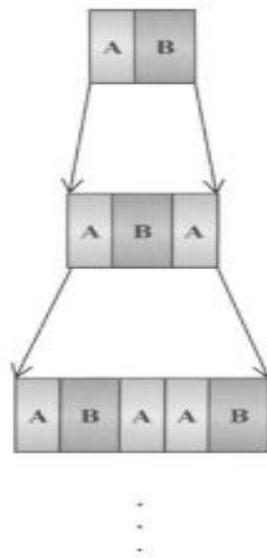


Figura 14: Ilustração esquemática da sequência de Fibonacci a partir da geração S_2 [47].

As gerações de Fibonacci são (Fig. 15):

$$S_0 = B; S_1 = A; S_2 = AB; S_3 = ABA; S_4 = ABAAB; \text{ etc.} \quad (3.2).$$

O número de blocos aumenta em conformidade com o número de Fibonacci: $F_n = F_{n-1} + F_{n-2}$, com $F_0 = F_1 = 1$. Além disso, a razão entre o número de blocos de **A** e o número de blocos de **B** na sequência tende ao número conhecido como “razão áurea”; $\tau = (1 + \sqrt{5})/2 \cong 1,62$, para n grande. É interessante notar que todos os números de Fibonacci podem ser gerados a partir da razão áurea da relação: $F_n = [\tau^n - (-\tau)^{-n}] / \sqrt{5}$. Isso significa que uma sequência de números racionais, ou seja, os números de Fibonacci de valores inteiros podem ser obtidos de potências de números irracionais [47].

3.5 SEQUÊNCIA DE THUE-MORSE

A sequência de Thue-Morse surgiu a partir dos resultados de estudos sistemáticos sobre cadeias aperiódicas iniciadas por Thue [46] em 1906. Depois, em 1921, Morse [51,52] fez uma importante contribuição para esta sequência no contexto da dinâmica topológica. Embora haja várias maneiras de definir a sequência de Thue-Morse, pode-se provar que todas são equivalentes. Em sua forma mais simples, a sequência de Thue-Morse pode ser definida pela relação recursiva: $S_n = S_{n-1} S_{n-1}^+$ e $S_n^+ = S_{n-1}^+ S_{n-1}$ (para $n \geq 1$), com $S_0 = A$ e $S_0^+ = B$. Outro modo de construir esta sequência é através da regra de inflação: $A \rightarrow AB$ e $B \rightarrow BA$.

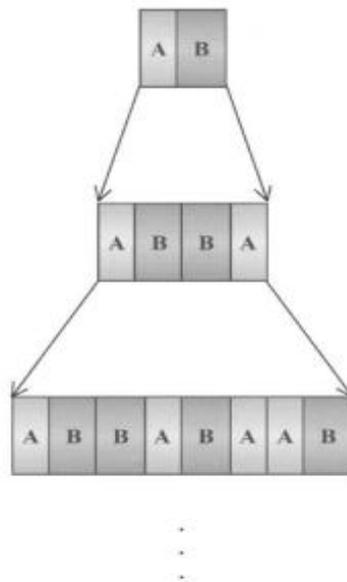


Figura 15: Ilustração esquemática da sequência de Thue-Morse a partir da geração S_1 [47].

As gerações de Thue-Morse são (Fig. 16):

$$S_0 = A; \quad S_1 = AB; \quad S_2 = ABBA; \quad S_3 = ABBABAAB; \quad \text{etc.} \quad (3.3)$$

O número de blocos neste sistema quasiperiódico aumenta com 2^n , onde $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ indica a geração da sequência de Thue-Morse, enquanto a razão do número de blocos de **A** em relação ao número de blocos de **B** é constante e igual a unidade.

3.6 SEQUÊNCIA DE PERÍODO DUPLO

A sequência de período duplo é uma das cadeias aperiódicas mais recentes. Ela tem origem no estudo de sistemas dinâmicos [53] e em aplicações a laser para fibras ópticas não lineares [54]. Sua relação recursiva é um pouco semelhante ao caso de Thue-Morse: o n -ésimo estágio é dado por $S_n = S_{n-1} S_{n-1}^+$ e $S_n^+ = S_{n-1} S_{n-1}$ para $n \geq 1$, com $S_0 = A$ e $S_0^+ = B$. É também invariante sob a transformação $A \rightarrow AB$ e $B \rightarrow AA$, o que torna a distinção mais clara.

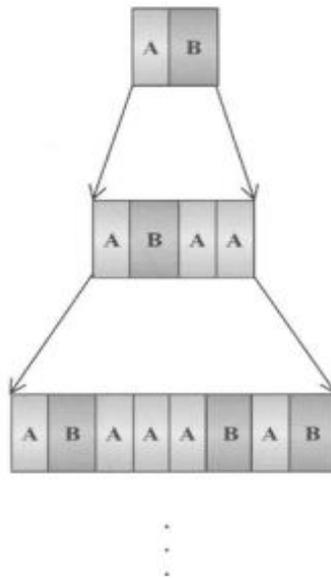


Figura 16: Ilustração esquemática da sequência de Período Duplo [47].

As gerações de período duplo são (Fig. 17):

$$S_0 = A; \quad S_1 = AB; \quad S_2 = ABAA; \quad S_3 = ABAAABAB; \quad \text{etc.} \quad (3.4)$$

O número de blocos para esta sequência aumenta com n como na sequência de Thue-Morse, ou seja, 2^n , onde n é o número da geração. Contudo, a razão entre o número de blocos de **A** em relação ao número de blocos de **B** não é constante: ela tende a 2 quando o

número de gerações vai para infinito. Além disso, os blocos **B** ocorrem sempre isoladamente, como no caso da sequência de Fibonacci, mas ao contrário da sequência de Thue-Morse.

4 MÉTODO DE MONTE CARLO

4.1 INTRODUÇÃO

Nos últimos anos, graças aos avanços dos computadores (“hardware”), das técnicas de programação (“software”) em contraposição das grandes dificuldades exigidas dos métodos tradicionais experimentais de alterar certos parâmetros físicos aplicados ao estudo das propriedades dos fenômenos críticos, as simulações computacionais, que antes usavam um conjunto de operações no qual deveria se repetir centenas de vezes, agora passou a ser feita de uma única vez facilitando a obtenção dos resultados, passando a exercer uma profunda influência no progresso das pesquisas em Mecânica Estatística [55].

Na Mecânica Estatística as simulações computacionais têm como princípio de que com um computador e um programa que tenha sido construído apropriadamente, irá servir para simular um comportamento real de um ensemble de sistemas, de forma a obter uma análise estatística da trajetória nos permitindo estimar determinadas previsões das propriedades do mesmo.

Há duas classes gerais de simulações: O Método da Dinâmica Molecular, e o Método de Monte Carlo (MMC). Este último é muito utilizado para o estudo do comportamento termodinâmico de sistemas macroscópicos, cuja diferença do método de dinâmica molecular é o uso de uma sequência de números aleatórios [56]. Neste trabalho usaremos o MMC em modelos de rede de Ising. O MMC em física computacional é possivelmente uma das mais importantes ferramentas de abordagens numéricas para estudar os problemas matemáticos que abrangem todas as disciplinas científicas, tais como, física, química e até das ciências sociais e econômicas [57,58]. A ideia desse método baseia-se na realização de experimentos de amostragem estatística em computador das configurações do sistema a ser estudado, que dependem de parâmetros com N -pontos em M -dimensões de espaço para calcular os valores aproximados das grandezas desse sistema usando números aleatórios.

4.2 HISTÓRIA DO MÉTODO DE MONTE CARLO

O MMC surgiu nos anos quarenta durante o projeto Manhattan na Segunda Guerra Mundial pelos físicos S. Ulam, E. Fermi, J Von Neumann e N. Metropolis (entre outros) trabalhando no projeto de armas nucleares no laboratório Nacional Los Alamos. Eles consideraram a possibilidade da utilização desse método, que envolvia a simulação direta de problemas probabilísticos relacionados com o coeficiente de difusão do nêutron em certos materiais. Apesar de chamar a atenção dos cientistas, o desenvolvimento ordenado dessa ideia teve de aguardar o trabalho de Harris e Herman Kahn em 1948 no qual Fermi, Metropolis e Ulam usaram o MMC para determinar estimativas para autovalores da equação de Schrodinger. Muito antes disso, números e grandezas aleatórias já tinham sido usados na investigação de problemas matemáticos, mas Von Neumann e Ulam em 1945 contribuíram para mostrar que vários problemas matemáticos poderiam ser tratados através de um análogo probabilístico [59].

O nome desse método é uma referência ao principado de Mônaco, por causa de uma roleta, um gerador de números aleatório simples. O nome e o desenvolvimento sistemático do método de Monte Carlo datam de cerca de 1940.

4.3 MEDIDAS DE GRANDEZAS TERMODINÂMICAS

A mecânica estatística de equilíbrio tem por objetivo descrever as propriedades macroscópicas de um sistema por meio de médias sobre os seus estados microscópicos e descritas por meio do *ensemble* canônico. A função de partição, a partir da qual é possível obter as propriedades termodinâmicas do sistema, para um sistema em contato com um reservatório térmico à temperatura T , pode ser escrita como:

$$Z = \sum_i e^{-E_i/k_B T} = \sum_i e^{-\beta E_i} \quad (4.1)$$

onde $\beta = \frac{1}{k_B T}$, (k_B é a constante de Boltzmann) e T é a temperatura e onde a soma é feita sobre todos os estados i do sistema com energia E_i e, portanto, depende do tamanho do sistema e o número de graus de liberdade para cada partícula. Também é possível escrever a

função de partição para sistemas sujeitos a alguma outra restrição além da temperatura, como por exemplo, serem mantidos a pressão constante ou submetidos a campos magnéticos.

Uma quantidade que pode ser definida a partir da Eq. (4.1) e que estabelece a relação entre a termodinâmica e a parte estatística é chamada *distribuição de Boltzmann*, a qual é dada pela seguinte expressão:

$$p_i = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_i} \quad (4.2)$$

e estabelece a probabilidade do sistema ser encontrado em um dado estado microscópico i . Com o conhecimento desta probabilidade, é possível calcular o valor esperado $\langle Q \rangle$ do observável Q por meio da expressão:

$$\langle Q \rangle = \sum_i Q_i p_i = \frac{1}{Z} \sum_i Q_i e^{-\beta E_i} \quad ; \quad \sum p_i = 1 \quad (4.3)$$

ou seja, a média do observável os microestados i é ponderada pelo peso de Boltzmann de cada estado.

Uma vez que determinamos os potenciais de interação entre as partículas e os vínculos aos quais o sistema está submetido, podemos escrever a função de partição. O problema está na realização explícita do cálculo devido ao número muito grande de microestados no somatório da Eq. (3.1). Neste contexto, modelos bastante simplificados se tornam importantes na tentativa de descrever os fenômenos físicos observados em sistemas reais (muito mais complexos), dentre os quais destacamos o modelo de Ising [60]. A solução usual para sistemas grandes é realizar o cálculo utilizando apenas um subespaço dos estados do sistema, o que implica em tornar os resultados imprecisos. Nas simulações de MC escolhe-se aleatoriamente um subconjunto com N estados de acordo com uma dada distribuição de probabilidade p_i . A estimativa é dada pela quantidade Q_N , medida por:

$$Q_N = \frac{\sum_{i=1}^N Q_i p_i^{-1} e^{-\beta E_i}}{\sum_{i=1}^N p_i^{-1} e^{-\beta E_i}} \quad (4.4)$$

Q_N , é o *estimador de Q* , torna-se uma estimativa mais precisa de $\langle Q \rangle$ a medida que N aumenta, no limite em que $N \rightarrow \infty$, temos $Q_N = \langle Q \rangle$. Dois detalhes a considerar: (1) se os N estados forem escolhidos ao acaso, isto é, todos tem a mesma probabilidade, apenas uma fração muito pequena do espaço de fase do sistema será usada no calculo do estimador; (2) diz respeito a contribuição dos estados visitados no cálculo do estimador, já que o peso de

Boltzmann é uma função exponencial, somente estados com energias próximas à do estado de equilíbrio terão uma contribuição expressiva na soma.

Com a função de partição podemos determinar as funções termodinâmicas. Assim vamos definir: Energia interna, calor específico, entropia e susceptibilidade magnética.

A energia interna U do sistema é calculado pelo valor médio de $\langle E \rangle$ esperado para a energia, da seguinte forma,

$$U = \frac{1}{Z} \sum_i E_i e^{-\beta E_i} \quad (4.5)$$

Com as equações (4.2) e (4.4) temos:

$$\frac{\partial Z}{\partial \beta} = \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_i e^{-\beta E_i} = -\sum_i E_i e^{-\beta E_i} = -ZU \quad (4.6)$$

ou seja,

$$U = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial \log Z}{\partial \beta}. \quad (4.7)$$

Já o calor específico C é obtido através da derivação da energia interna U , assim:

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{\partial \beta}{\partial T} \frac{\partial U}{\partial \beta} = -\frac{1}{k_B T^2} \frac{\partial U}{\partial \beta}. \quad (4.8)$$

Partindo da equação (3.6), conclui-se que:

$$C = k_B \beta^2 \frac{\partial^2 \log Z}{\partial \beta^2} \quad (4.9)$$

A entropia é determinada por:

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = k_B \left(\ln Z - \frac{\beta}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right) \quad (4.10)$$

onde $F = -k_0 T \ln Z$ é a energia livre de Helmholtz.

A susceptibilidade magnética mede a resposta na magnetização devido à variação do campo magnético. Assim temos:

$$\chi_T \equiv \left(\frac{\partial M}{\partial H} \right)_T = \left(\frac{\partial H}{\partial M} \right)_T^{-1} = \left(\frac{\partial^2 F}{\partial M^2} \right)_T^{-1} \quad (4.11)$$

já que,

$$\chi = -\left(\frac{\partial F}{\partial M} \right)_H \quad (4.12)$$

Com isso, temos.

$$\chi = \beta^2 \mu_B \left(\langle S_z^2 \rangle - \langle S_z \rangle^2 \right) = \beta^2 \mu_B (\Delta S_z)^2 \quad (4.13)$$

4.4 AMOSTRAGEM E ALEATORIEDADE

A amostragem aleatória simples é o tipo de amostragem probabilística mais utilizada. Dá exatidão e eficácia à amostragem, além de ser o procedimento mais fácil de ser aplicado a todos os elementos do sistema a ser estudado, que tem a mesma probabilidade de pertencerem à amostra. O processo consiste em selecionar uma amostra “ n ” a partir de um sistema “ N ”. Geralmente a seleção é feita sem reposição e cada amostra é feita unidade a unidade até que se atinja o número pré-determinado.

A palavra aleatoriedade é utilizada para exprimir quebra de ordem, propósito, causa, ou imprevisibilidade em uma terminologia não científica. Um processo aleatório é o processo repetitivo cujo resultado não descreve um padrão determinístico, mas segue uma distribuição de probabilidade. O termo aleatório é frequentemente utilizado em estatística para designar uma propriedade estatística bem definida tal como uma quebra de uma neutralidade ou correlação. Um número aleatório é um número que pertence a uma série numérica e não pode ser previsto a partir dos membros anteriores da série. O conceito de número aleatório é um conceito relativo à série numérica a que o número pertence. Um número pode ser aleatório numa série numérica e não aleatório noutra.

O fato dos sistemas reais terem um número muito grande de estados microscópicos faz com que o resultado das observações experimentais seja uma manifestação de somente uma parte dos estados do sistema, notadamente aqueles que foram visitados durante a realização da simulação. Esta observação é um indício de que o sistema está realizando uma espécie de amostragem por importância, o que fortalece a ideia da possibilidade de determinação das propriedades termodinâmicas de interesse, utilizando apenas uma pequena fração dos estados presentes no sistema e com isso preservando a semelhança entre a simulação e experimento.

A forma usual de reproduzir as observações nas simulações é feita por meio da utilização de um algoritmo capaz de gerar, a partir de um estado inicial, outros estados semelhantes de acordo com o seu peso de Boltzmann. Então, ao invés de escolher os estados de forma uniforme, isso é feito de forma que um dado estado i seja escolhido de acordo com a *distribuição de Boltzmann*. Esta escolha fará com que a Eq. (4.4) seja:

$$Q_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Q_i \quad (4.14)$$

Resultando em uma equação mais simples onde os fatores de Boltzmann foram cancelados e não há referência explícita à função de partição. Como esta expressão funciona muito melhor que a Eq. (4.4) devido o sistema estar passando a maior parte do tempo em um número pequeno de estados já que estes estados serão escolhidos mais frequentemente e que possuem pesos expressos no cálculo do estimador. Será necessário um mecanismo que permita que cada estado escolhido tenha o mesmo peso de Boltzmann, para isso vamos fazer uso dos *processos de Markov* [60,65].

4.4.1 Processos de Markov

Este consiste em uma ferramenta matemática, na qual se podem gerar sucessivos estados independentes do estado anterior. Esse tipo de processo (estocástico) é aplicado a um sistema no estado μ num determinado tempo, o qual gera um estado ν num tempo seguinte de forma que, se partirmos do mesmo estado inicial, nem sempre será gerado o mesmo estado final. A probabilidade do estado final ν ser gerado a partir do estado μ é denominada de *probabilidade de transição* $P(\mu \rightarrow \nu)$ que é caracterizada por depender somente das propriedades dos estados inicial e final, não mais do tempo. O significado é que uma vez que o sistema esteja no estado μ a probabilidade do sistema gerar o estado ν é sempre a mesma, não importando o que tenha acontecido anteriormente. As probabilidades de transição estão sujeitas aos vínculos.

$$P(\mu \rightarrow \nu) \geq 0, \quad \sum_{\nu} P(\mu \rightarrow \nu) = 1 \quad (4.15)$$

pois a partir do estado ν , outro estado é gerado ou o sistema permanece no estado ν .

Numa simulação de Monte Carlo, uma sequência de passos é realizada nos processos de Markov, o qual dá origem a uma *cadeia de Markov de estados* [60]. A Figura 18 mostra um exemplo dessa cadeia de um sistema com apenas quatro estados.

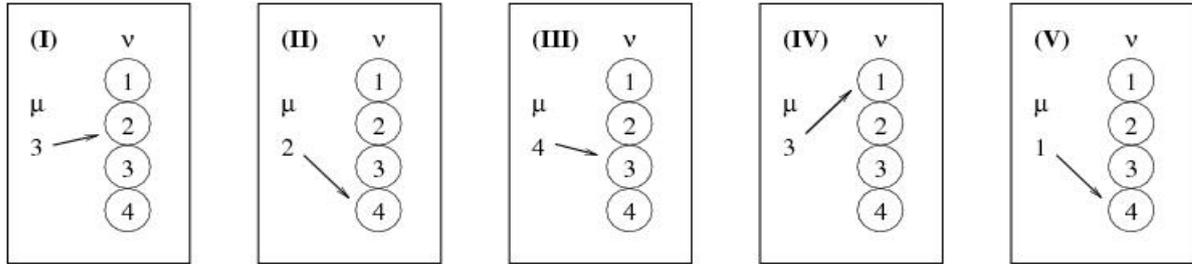


Figura 17: Cinco sucessivos processos de Markov, formando uma Cadeia de Markov de estados.

Temos um sistema com apenas quatro estados e inicialmente ele se encontra no estado $\mu = 3$, e a partir deste escolhemos aleatoriamente um novo estado ν seguindo as condições do processo de Markov [63].

Partindo desta cadeia podemos estimar a probabilidade p_ν de o sistema estar no estado ν no tempo t_n , $p_\nu(t_n)$, dado que este se encontrava num estado μ anteriormente, t_{n-1} ,

$$p_\nu(t_n) = p_\mu(t_{n-1})P(\mu \rightarrow \nu) \quad (4.16)$$

A chamada equação mestra considera a mudança desta probabilidade, com o tempo, $p_\nu(t_n)$, tratado de forma contínua ao invés de discreta [6].

$$\frac{dp_\nu(t)}{dt} = -\sum_{\mu} p_\nu(t)P(\nu \rightarrow \mu) + \sum_{\mu} p_\mu(t)P(\mu \rightarrow \nu) \quad (4.17)$$

A característica principal do processo de Markov pode ser vista na equação mestra: conhecendo o estado inicial do sistema no tempo t podemos estimar completamente a evolução temporal da distribuição de probabilidades que está associada a ele, isto é, uma vez que o próximo estado é gerado com base no conhecimento do estado anterior.

Os processos de Markov são indispensáveis quando são executados por um tempo relativamente grande, pois é possível gerar a começar deles uma sucessão de estados com probabilidades obedecendo à distribuição de Boltzmann. Para que isto ocorra outras duas condições devem ser satisfeitas: *a ergodicidade e o balanço detalhado*.

4.4.2 Ergodicidade

A condição de ergodicidade assegura que qualquer estado do sistema pode ser atingido a partir de qualquer outro estado via sequência de processos de Markov. Esta condição permite que algumas das probabilidades de transição entre estados sejam zero, mas deve existir pelo menos um caminho de probabilidades de transição diferente de zero entre quaisquer dois estados do sistema. Se isto não ocorrer, um estado λ não poderá ser gerado a partir do estado inicial e a probabilidade do estado p_λ será zero e não o valor correspondente à distribuição de Boltzmann [60].

4.4.3 Balanço Detalhado

O balanço detalhado consiste na garantia que quando uma longa cadeia de Markov é realizada, a distribuição obtida é a distribuição de Boltzmann. Desde que o sistema atinja o equilíbrio, as probabilidades de o sistema ir para o estado μ e sair deste devem ser iguais, isto é:

$$\sum_v p_\mu P(\mu \rightarrow v) = \sum_\mu p_v P(v \rightarrow \mu) \quad (4.18)$$

Esta condição garante a existência de uma distribuição de equilíbrio [61]. Esta é a chamada *condição de balanço detalhado* e nos diz que na média o sistema deve ir de μ para v da mesma forma que ele vai de v para μ . Esta condição garantirá que a cadeia de Markov irá gerar uma distribuição de probabilidade única para tempos longos. Desejamos que a distribuição obtida seja a distribuição de Boltzmann, devemos escolher as probabilidades de transição entre os estados μ para v de acordo com a condição:

$$\frac{P(\mu \rightarrow v)}{P(v \rightarrow \mu)} = \frac{p_v}{p_\mu} = e^{-\beta(E_v - E_\mu)} \quad (4.19)$$

Nessas condições, agora se faz a escolha conveniente para a distribuição de probabilidades $P(\mu \rightarrow v)$ que deve satisfazer as Equações 4.15 e 4.19. Feito isso, só nos resta desenvolver um algoritmo que implemente a criação da cadeia de Markov de estados, obedecendo a condição de ergodicidade. Em seguida, esperamos que o sistema alcance o equilíbrio de forma que a distribuição de probabilidades de estados p_μ , da Equação 4.17 seja

uma distribuição de Boltzmann. Passado esse tempo podemos calcular o valor médio da grandeza Q da Equação 4.3.

4.4.4 Dinâmicas de Evolução

Considerando o modelo de Ising e que a probabilidade de transição não se dá de uma única forma, existem várias maneiras de escolher como o spin irá ser invertido (“flip”) para analisar os diversos estados microscópicos do sistema. Entre estas maneiras, conhecidas como dinâmicas de evolução, estão a dinâmica de Metropolis, a dinâmica de Glauber e o Banho Térmico. A seguir será apresentada uma tabela que representa a probabilidade de inversão de um spin [60]:

Dinâmica	Probabilidade
Banho Térmico	$S_i = \text{sign} \left(\xi - \frac{e^{-\frac{2J}{k_B T} \sum_{\langle i,j \rangle} S_j}}{1 + e^{-\frac{2J}{k_B T} \sum_{\langle i,j \rangle} S_j}} \right); \xi \text{ é um número aleatório uniformemente distribuído entre 0 e 1.}$
Glauber	$\frac{1}{2} \left[1 - S_i \tanh \left(\frac{J}{k_B T} \sum_{\langle i,j \rangle} S_j \right) \right]$
Metropolis	$\min \left(1, e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}} \right)$

Tabela 2: Distribuição de probabilidades nas dinâmicas de Banho Térmico, Metropolis e Glauber.

Segundo Stanley e colaboradores [66], a forma como o spin irá ser invertido (“flip”) para analisar os diversos estados microscópicos de um sistema dinâmico produz uma discrepância nos resultados, isso decorre da diferença nas definições de probabilidade de cada dinâmica, o mesmo não ocorre no estudo de propriedades de equilíbrio.

4.4.5 Algoritmo de Metropolis

No método clássico de Metropolis, apresentado inicialmente em 1953 em seu artigo [62], as configurações são geradas a partir de um estado anterior usando uma probabilidade de transição que depende da diferença de energia entre os estados inicial e final. Esse método é utilizado com o objetivo de determinar valores esperados de propriedades do sistema simulado, através de uma média sobre uma amostra. As probabilidades de transição são dadas por

$$W(S_j \rightarrow S_i) = \begin{cases} e^{-\beta(E_i - E_j)} & \text{se } \Delta E > 0 \\ 1 & \text{se } \Delta E < 0 \end{cases} \quad (4.20)$$

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

Previamente devem ser escolhidos o tipo de rede e as condições de contorno usadas na simulação. As configurações iniciais usuais são aquelas com os spins completamente ordenados ou desordenados. Um novo estado resulta da mudança do valor do spin [64]. Para sistemas de spins, a sequência do algoritmo de Metropolis consiste no seguinte:

1. Especifica-se uma configuração inicial aleatória para os spins, ou seja, com valores aleatórios para todos os graus de liberdade do sistema, respeitando as suas restrições.
2. Um sítio de rede é escolhido (aleatoriamente ou sequencialmente).
3. Calcula-se a variação de energia do sistema ΔE resultante da mudança do valor do spin.
4. Se $\Delta E < 0$, a configuração é de aceitar; já que este estado é mais provável que o anterior, segue-se para o passo 8. Se $\Delta E > 0$, a configuração deste estado é menos provável, mas não é impossível, segue-se para o passo 5.
5. Calcula-se a razão entre as probabilidades que dá a transição entre estados devido a uma flutuação.
6. Decide-se se a configuração do passo 4 é de aceitar ou não: para isso, gera-se um número aleatório $0 < A < 1$.
7. Se $A < e^{-\beta \Delta E}$, o novo estado é aceito, caso contrário ele é recusado, e se mantém o estado anterior.

8. Retorna-se até o passo (2), até que algum critério de parada seja satisfeito. Cada uma dessas repetições é dita um passo Monte Carlo (MC).
9. Calculam-se as grandezas físicas que quisermos (energia do sistema naquela configuração, valor de magnetização, calor específico, etc.) para que se possa fazer a média no fim. Volta-se depois ao passo **1**, para gerar nova configuração.

O intervalo entre duas configurações sucessivas geradas pelo algoritmo é no mínimo de um passo de MC por sítio, definido como o tempo necessário para se percorrer a rede inteira.

Outro fator relevante neste método, além das exigências impostas pela dinâmica de evolução, como ergodicidade e balanceamento detalhado, é a maneira pela qual os spins são atualizados pela rede. A atualização usada na literatura varia desde a escolha aleatória de cada spin individualmente para inversão, até a inversão aleatória paralela, ou seja, vários spins ao mesmo tempo, e a atualização seguindo uma determinada sequência pré-definida não aleatória. Outro ponto importante é quanto à inicialização do sistema, que pode ser ordenado ou desordenado.

5 MÉTODO MONTE CARLO APLICADO AO MODELO DE ISING QUASIPERIÓDICO

5.1 INTRODUÇÃO

Neste capítulo apresentaremos o modelo de Ising quase periódico para sistemas bidimensionais, utilizando simulações de Monte Carlo. Sabe-se que, quando se implementa uma rede de spins em simulação computacional é usual estabelecermos algumas condições de contorno para amenizar os efeitos do tamanho finito da rede e eventualmente eliminar os efeitos de borda. É conveniente ressaltar que devido os spins interagirem somente com seus vizinhos, devemos assegurar que todos os spins tenham o mesmo número de vizinhos, portanto, todos os spins são equivalentes e o sistema é invariante por translação.

Ao final apresentaremos os resultados das simulações e a análise dos dados obtidos, os gráficos da energia, magnetização, calor específico e susceptibilidade no intervalo da temperatura estudado onde as transições de fase são observadas. Os resultados podem então ser comparados com outros encontrados na literatura.

5.2 APRESENTAÇÃO DO MODELO

O modelo de Ising é o mais simples e por isso o mais estudado na Mecânica Estatística. Ele representa um magneto no qual os spins S_i estão fixos nos sítios i de uma determinada rede. Em nosso caso, vamos considerar uma rede quadrada ($L \times L$) em duas dimensões. Cada dipolo dela pode possuir apenas dois valores ($S_i = \pm 1$), representando a componente do momento atômico ou molecular na direção do eixo de fácil magnetização do sistema. Desse modo, este possui 2^N estados, onde N é o número total de sítios. A energia, portanto, de qualquer estado particular destes pode ser extraída diretamente do Hamiltoniano de Ising \mathcal{H} . O hamiltoniano do modelo de Ising clássico deste trabalho é apresentado a seguir:

$$H = -\frac{J}{k_B T} \left(\sum_{\langle i,j \rangle} S_{i_A} S_{j_A} + \lambda \sum_{\langle i,j \rangle} S_{i_B} S_{j_B} \right) + H \left(\sum_i S_{i_A} + \sum_i S_{i_B} \right) \quad (5.1)$$

Podemos simplificar, e reescrever da seguinte forma:

$$H = -\frac{J}{k_B T} \sum_{\langle i,j \rangle} (S_{i_A} S_{j_A} + \lambda S_{i_B} S_{j_B}) + H \sum_i (S_{i_A} + S_{i_B}) \quad (5.2)$$

onde o primeiro termo é a energia de troca entre dois materiais e o segundo termo é a energia Zeeman. A e B representam os materiais magnéticos e λ é a razão entre as constantes de troca J_B/J_A , de cada material. Cada nova geração é obtida por meio de dizimação, visto que um aumento no tamanho da rede pode inviabilizar a simulação. Os materiais magnéticos A e B são sequenciados a partir de uma sequência de Cantor, conforme apresenta o capítulo 3.

Em temperaturas baixas, dificilmente os spins trocam de orientação, pois a probabilidade é desfavorável. Com o aumento da temperatura, alguns spins mudam de sentido e ao passar pela T_C , o sistema tende a anular a magnetização total. Através de simulação numérica, vamos analisar as propriedades de equilíbrio, inicialmente para o caso simples de um único domínio ferromagnético na ausência de campo externo ($H = 0$). Utilizamos para isso uma dinâmica de single-spin-flip, na qual viramos um spin por passo na simulação de Monte Carlo. O sistema só entra em equilíbrio depois de um determinado número de passos durante a simulação, denominado tempo de relaxamento, antes que medidas de quantidades termodinâmicas sejam realizadas. A convergência para configurações de equilíbrio depende de alguns fatores como o tipo de sistema (interações, dimensionalidade da rede e dos spins), temperatura (distância à temperatura crítica), algoritmo utilizado, etc.

Existem vários procedimentos para estimar o número de configurações que devem ser descartadas antes das medidas serem realizadas. No entanto, o método mais utilizado para estimar este número é fazer um gráfico de algumas quantidades de interesse (tal como, magnetização, energia total, calor específico) em função da temperatura. Observando esses gráficos devemos perceber qual o momento em que a grandeza começa a flutuar em torno de um valor fixo.

A existência de picos acentuados no calor específico e susceptibilidade, é uma outra evidência da transição de fases. Esses picos estão presentes devido a grandes flutuações na energia e na magnetização na região crítica. Com o aumento da rede, a altura dos picos cresce e a largura diminui tal que no limite termodinâmico essas quantidades devem divergir em $T = T_C$.

5.3 RESULTADOS

A seguir, serão apresentados os resultados deste trabalho, baseados nas informações apresentadas na seção anterior. Modelos de Ising aperiódicos unidimensionais são exatamente solúveis [67] a [69], porém modelos bidimensionais aperiódicos oferecem uma dificuldade muito maior. Nestes modelos, por serem quânticos, surgem termos de energias discretas, o mesmo não ocorre neste trabalho, por ser clássico.

5.3.1 Verificação dos Valores mais Adequados para as Simulações

Com o interesse de definir valores mínimos adequados para o trabalho, foram realizadas algumas simulações para comparação de tamanho adequado à rede, quantidade de passos de Monte Carlo e Temperatura Crítica (T_C). Nas figuras 19 a 21 apresentam os comportamentos da energia, magnetização, calor específico e susceptibilidade com relação ao tamanho da rede. Percebemos que redes de tamanho 50x50 já apresentam resultados satisfatórios, com uma temperatura crítica igual a 2,3 ($K_B T_C / J$), que é próximo do resultado exato obtido por Onsager (2,2692) [8], o que dá um erro próximo de 1%. É possível obter erros menores com o aumento do tamanho da rede e com uma maior discretização da temperatura. Por estes motivos escolhemos redes de dimensões maiores que 100x100.

Nas figuras 22 a 25, são apresentados resultados para diversas quantidades de passos de Monte Carlo, e percebe-se que com 1000 passos o sistema já converge satisfatoriamente, exceto para a susceptibilidade, mas com 10.000 passos o sistema já converge totalmente para os valores desejados. Mesmo que a amplitude do calor específico e da susceptibilidade sejam diferentes, a temperatura crítica é do valor esperado. Para este trabalho, adotamos 10.000 passos de iteração para cada cálculo, pois este valor já se mostrou adequado.

Também foi analisada a quantidade adequada de passos para termalização, apresentada nas figuras 26 a 29. Variaram-se os passos de termalização mantendo-se todo o restante dos parâmetros constantes, e verificou-se que para um sistema de tamanho razoável, e com uma quantidade de passos de Monte Carlo adequada, a termalização não se torna crítica. Ou seja, o sistema não é muito sensível a valores pequenos de termalização, o que era de se

esperar, quando se tem uma quantidade razoável de passos de Monte Carlo. Por este motivo, adotou-se uma quantidade de termalização igual a 10% da quantidade de passos de Monte Carlo.

O efeito do campo magnético externo sobre as propriedades do sistema foi verificado nas figuras 30 a 33. Nestas figuras percebe-se que na presença de campo magnético não há transição de fases, como se verifica pela ausência de picos nas curvas do calor específico e da magnetização. Na curva de magnetização se vê que o sistema fica no estado ordenado, quando se tem a presença do campo magnético, como era de se esperar.

Por fim, levantou-se uma curva de histerese e do comportamento da energia neste processo, figuras 34 e 35. Verifica-se que próximo da temperatura crítica ($J/K_B T_C = 0,44068$) a energia mostra um patamar que tende a ficar horizontal na localização do pico, mostrando a transição de fase. E no outro gráfico é apresentada a formação da histerese abaixo da temperatura crítica. Nestes gráficos optou-se por apresentar o inverso da temperatura, devido ser mais adequado para se analisar o que ocorre a temperaturas muito altas, além do que é o que se usa normalmente na literatura da área de Mecânica Estatística.

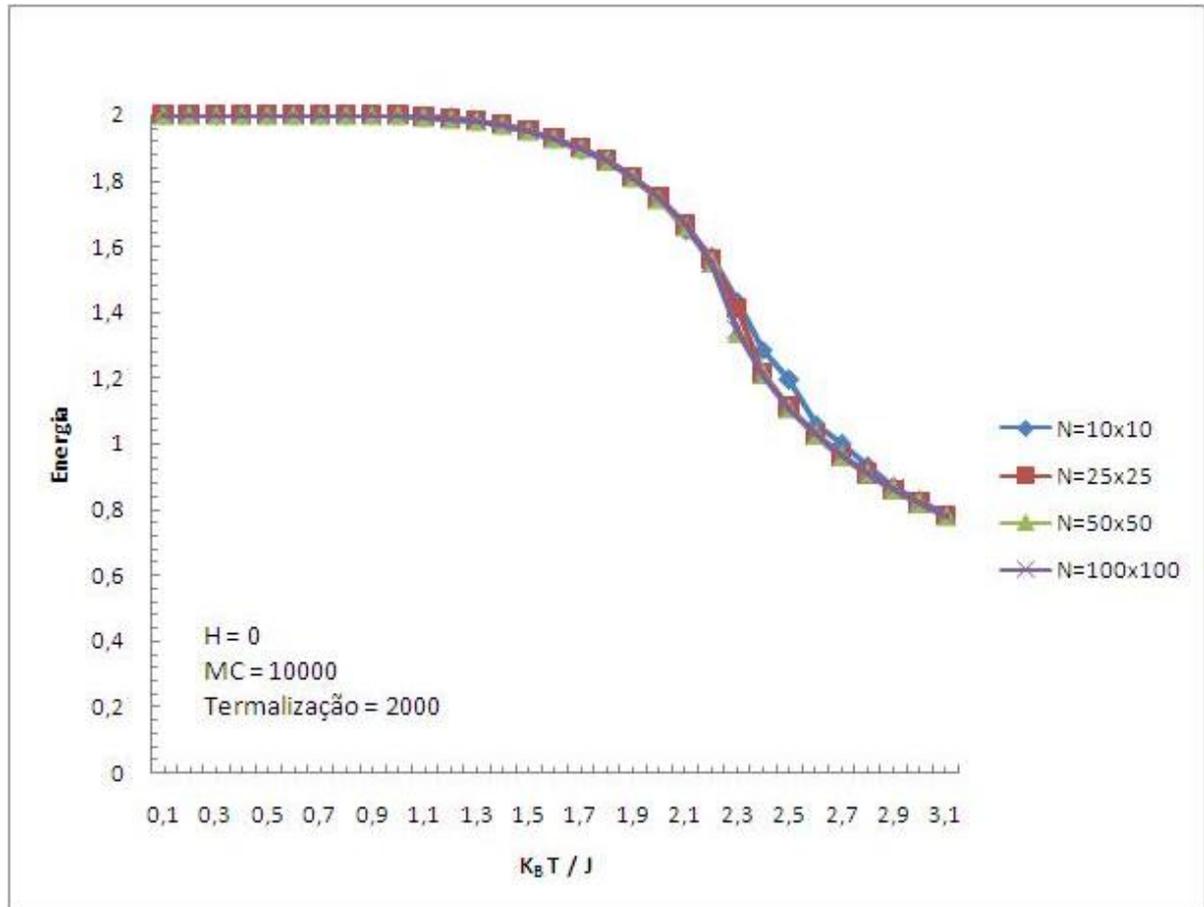


Figura 18: Energia para o modelo de Ising na rede quadrada para vários tamanhos de rede.

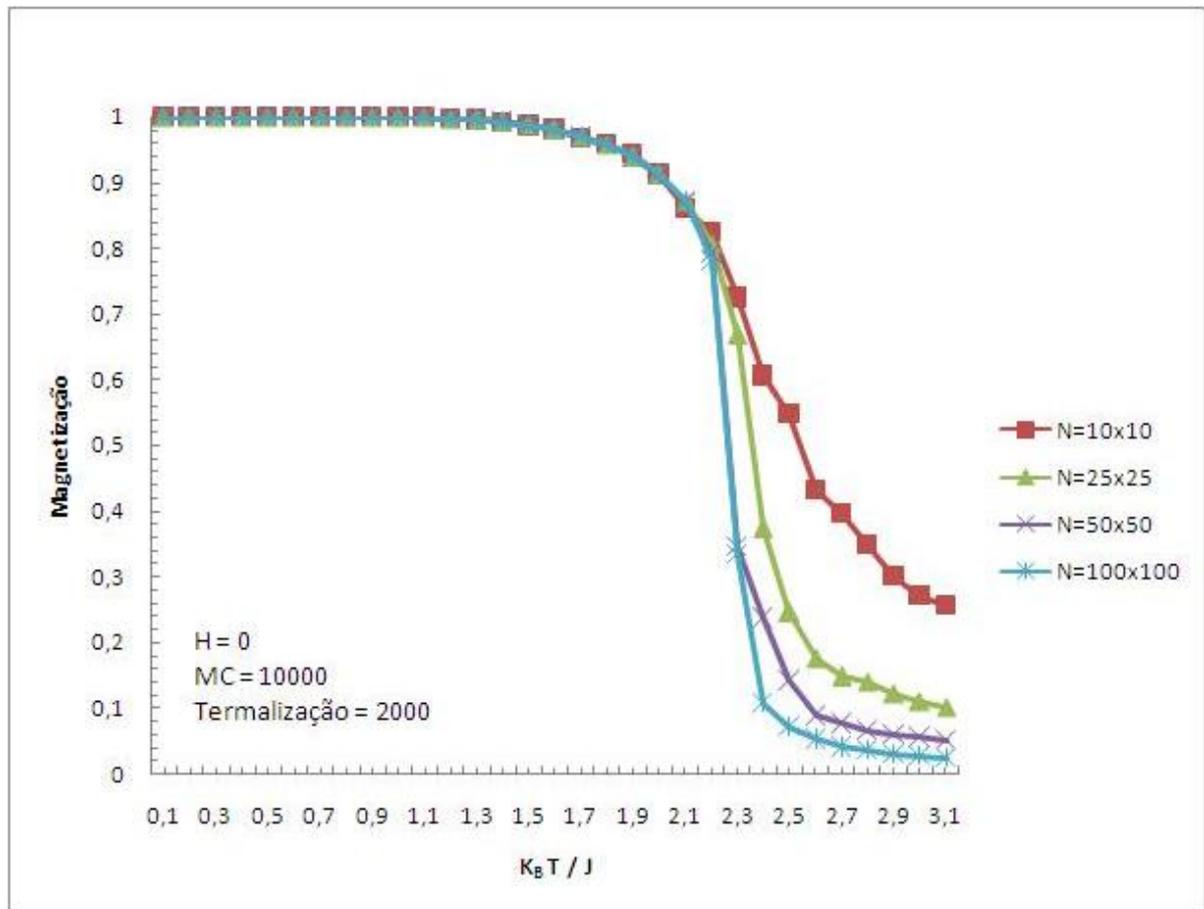


Figura 19: Magnetização para o modelo de Ising na rede quadrada para vários tamanhos de rede.

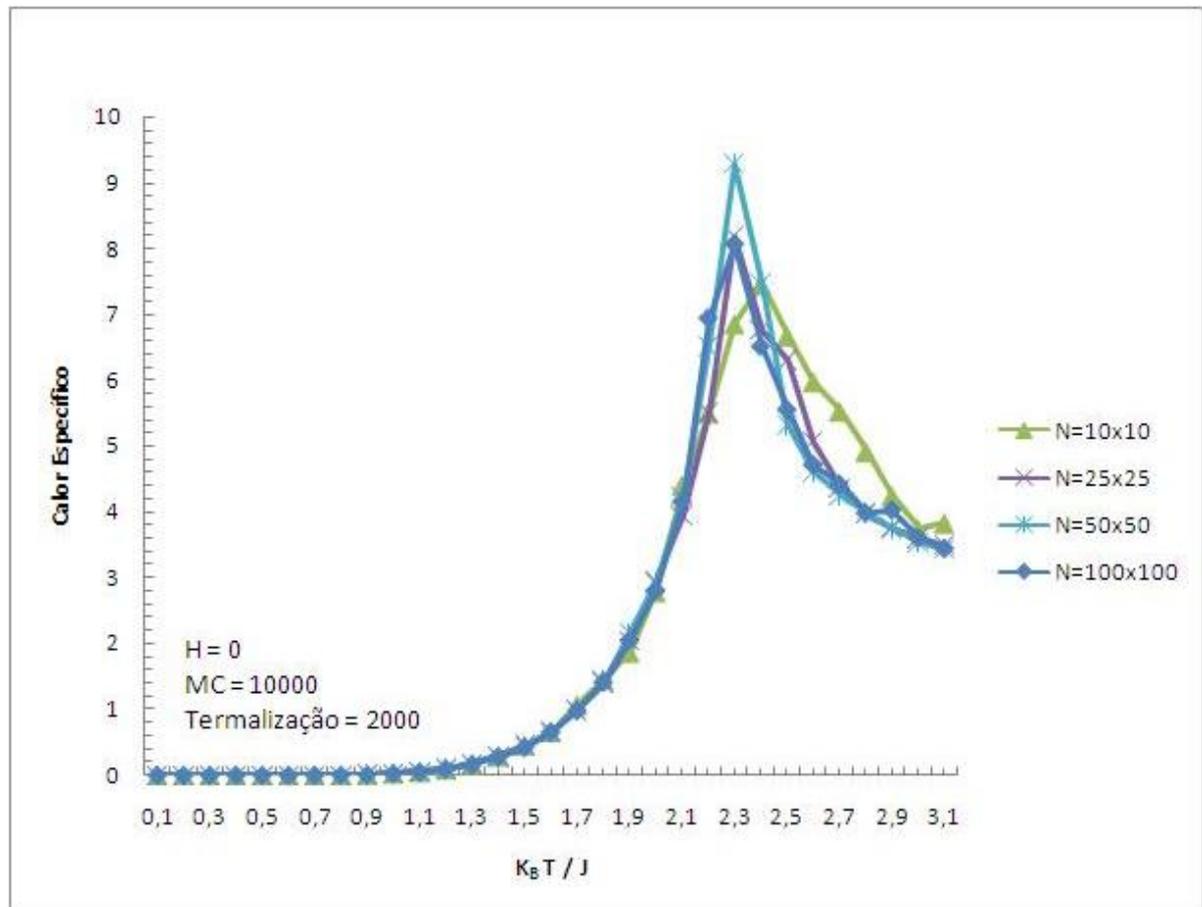


Figura 20: Calor específico para o modelo de Ising na rede quadrada para vários tamanhos de rede.

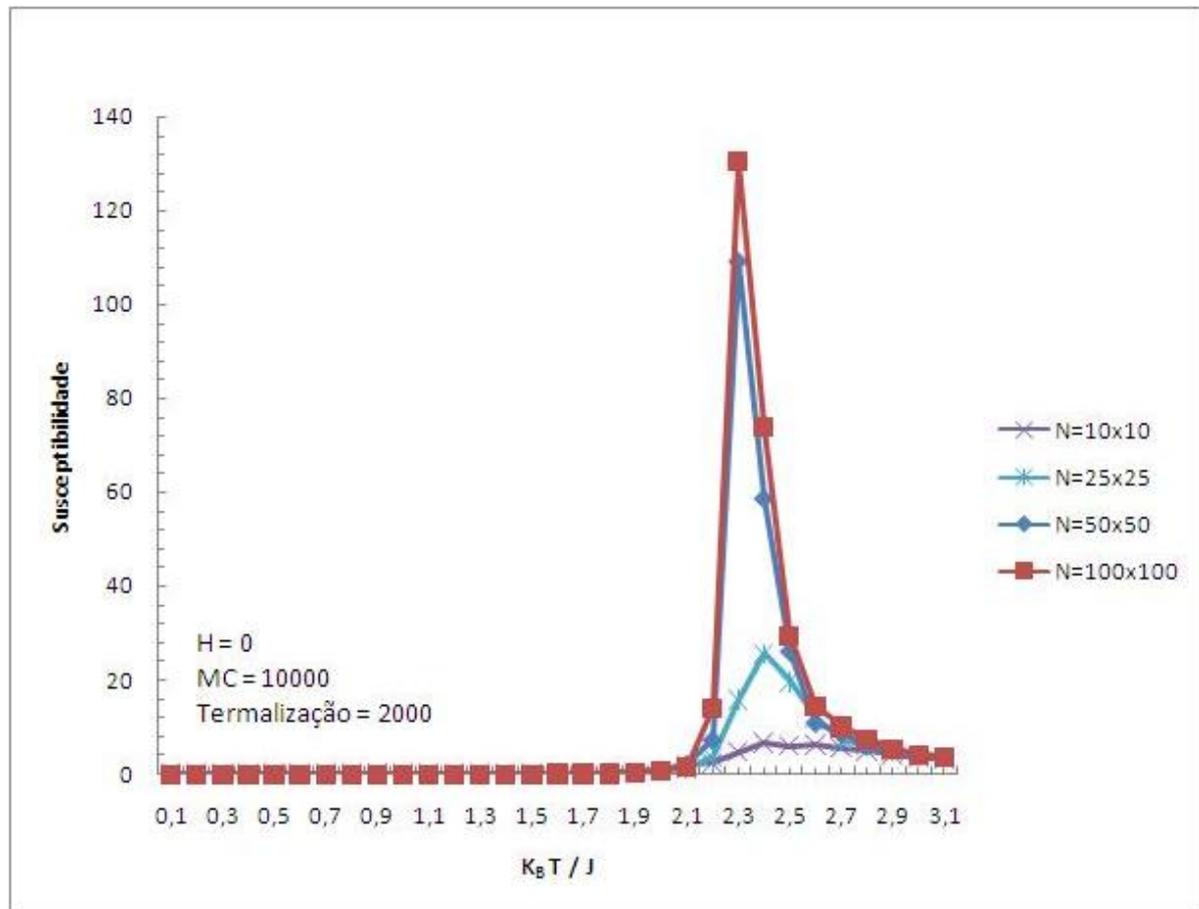


Figura 21: Susceptibilidade para o modelo de Ising na rede quadrada para vários tamanhos de rede.

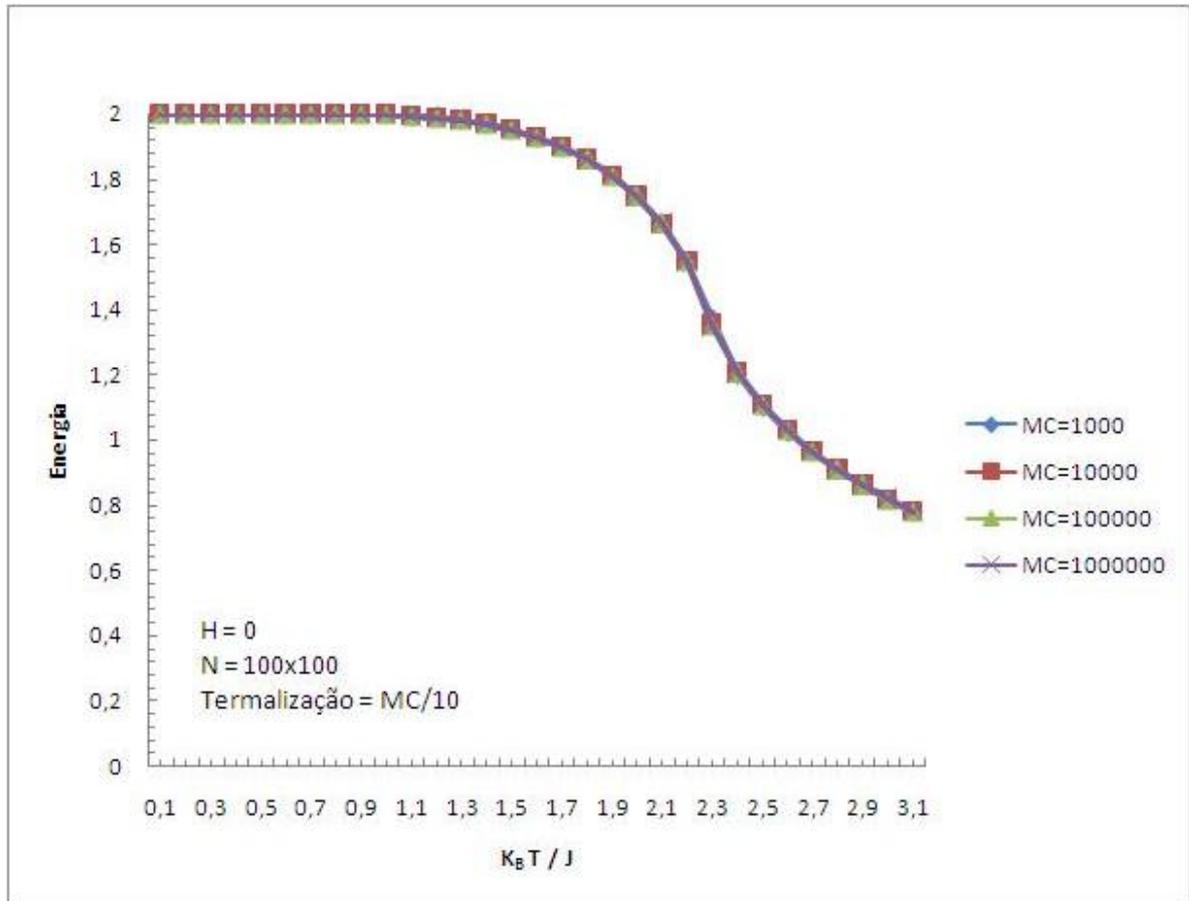


Figura 22: Energia para o modelo de Ising na rede quadrada para vários passos de Monte Carlo.

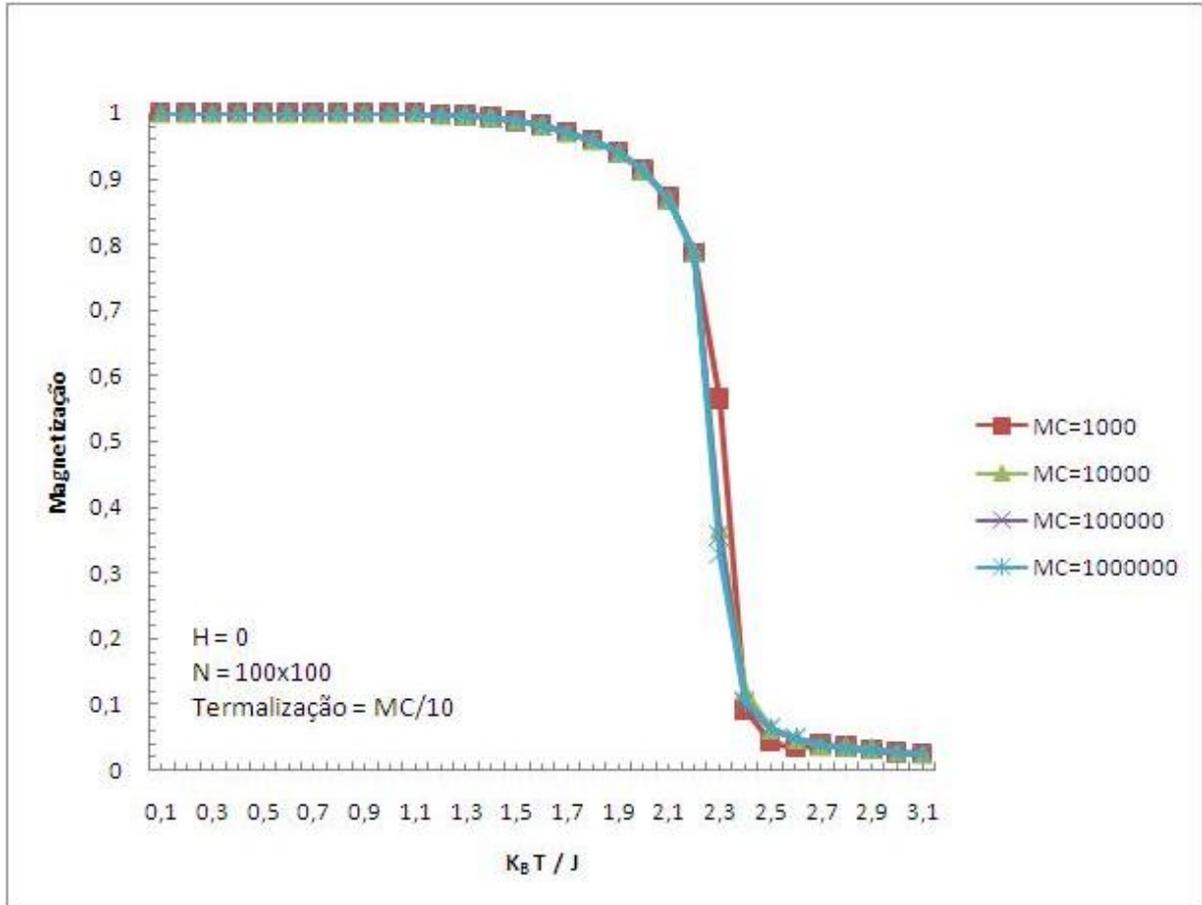


Figura 23: Magnetização para o modelo de Ising na rede quadrada para vários passos de Monte Carlo.

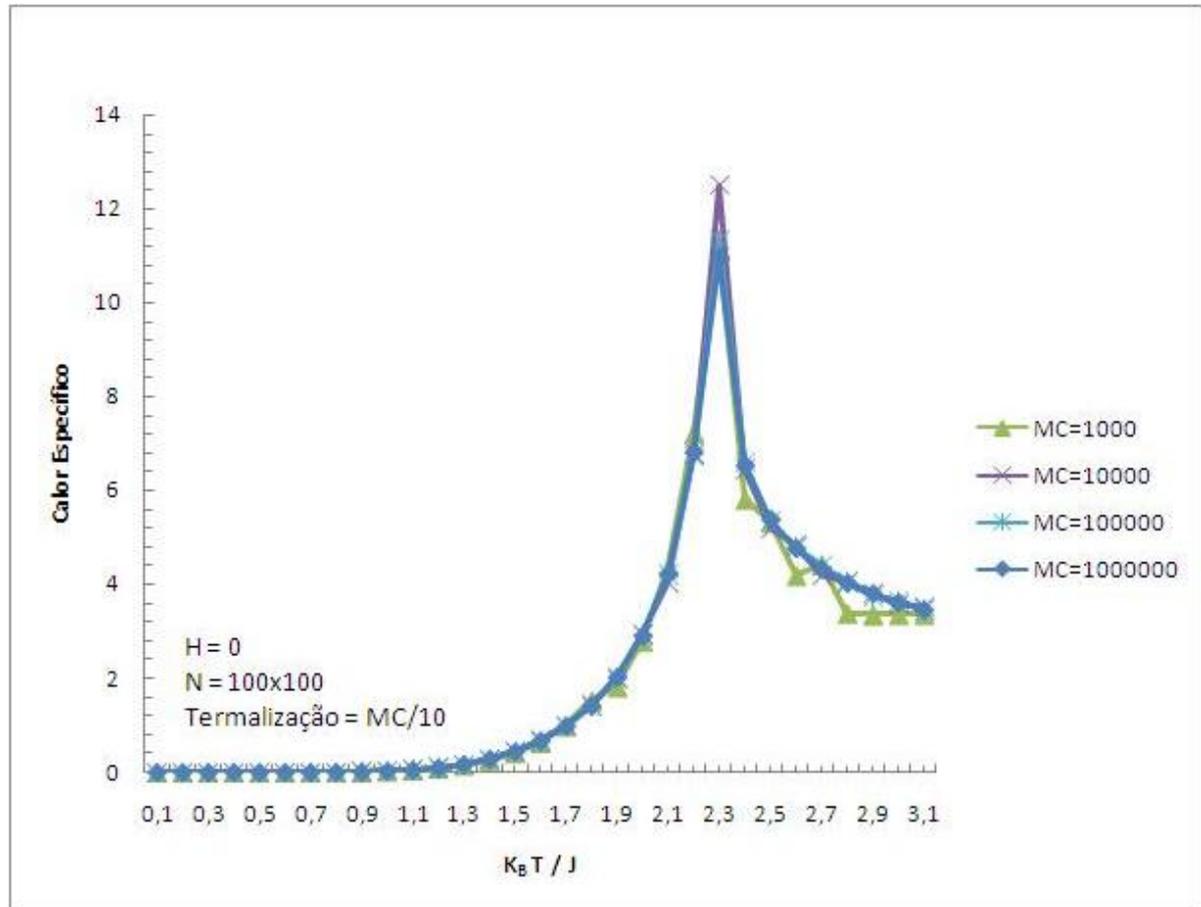


Figura 24: Calor específico para o modelo de Ising na rede quadrada para vários passos de Monte Carlo.

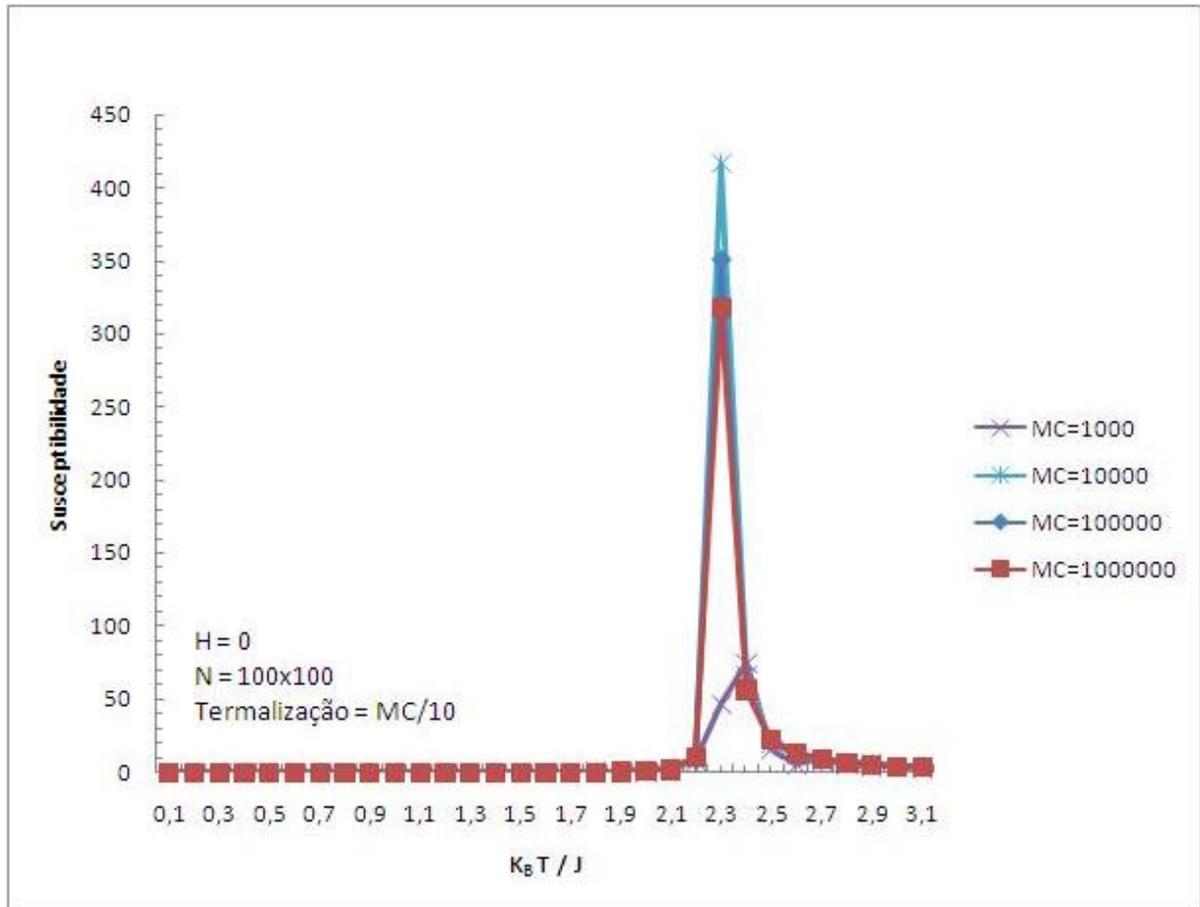


Figura 25: Susceptibilidade para o modelo de Ising na rede quadrada para vários passos de Monte Carlo.

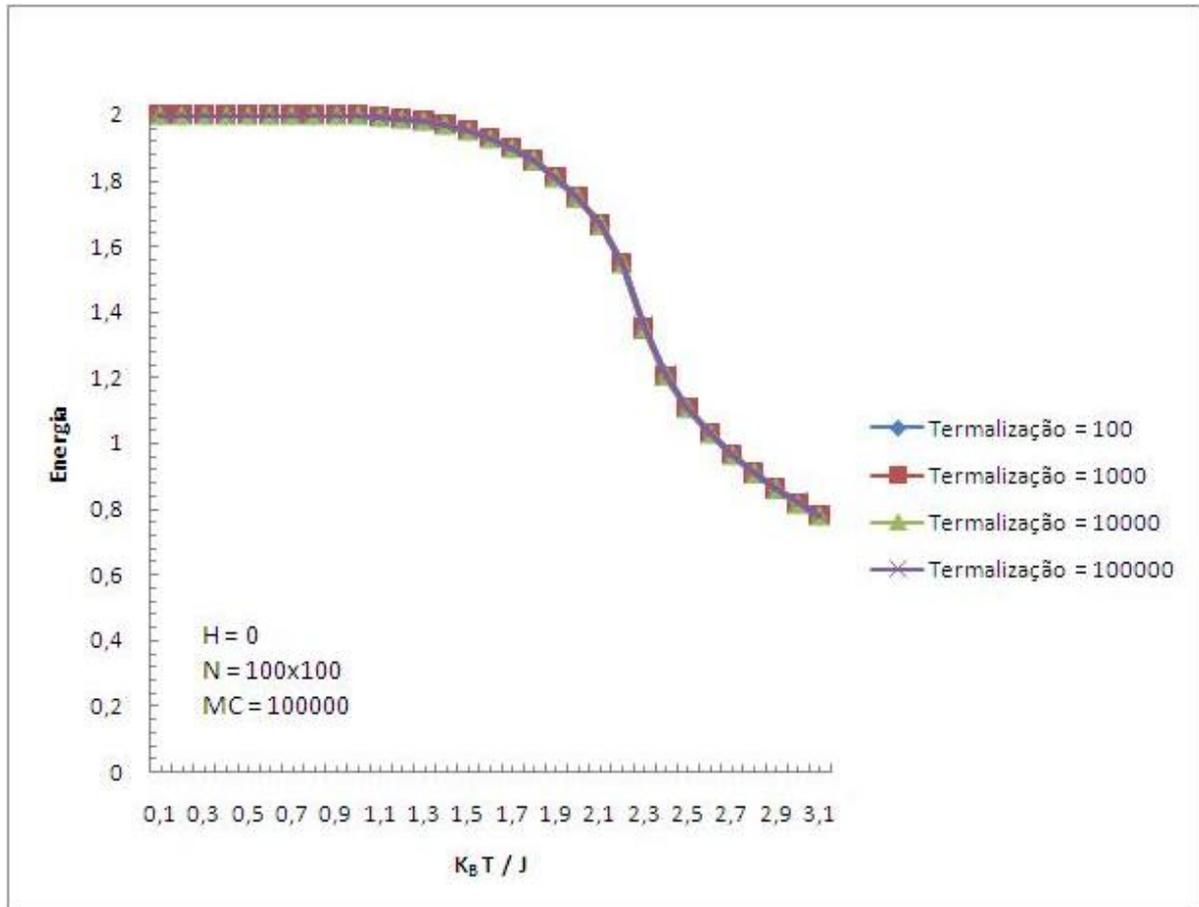


Figura 26: Energia para o modelo de Ising na rede quadrada para vários valores de Termalização.

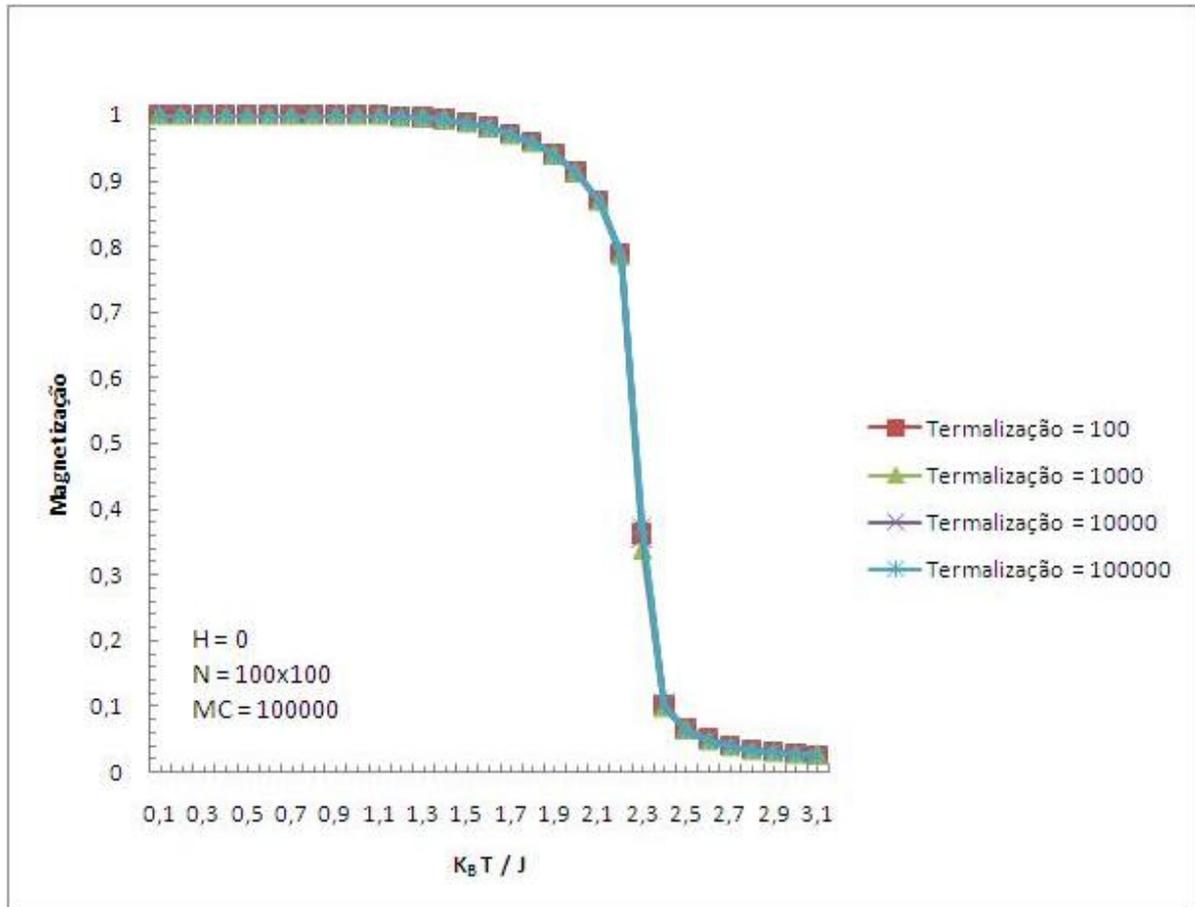


Figura 27: Magnetização para o modelo de Ising na rede quadrada para vários valores de Termalização.

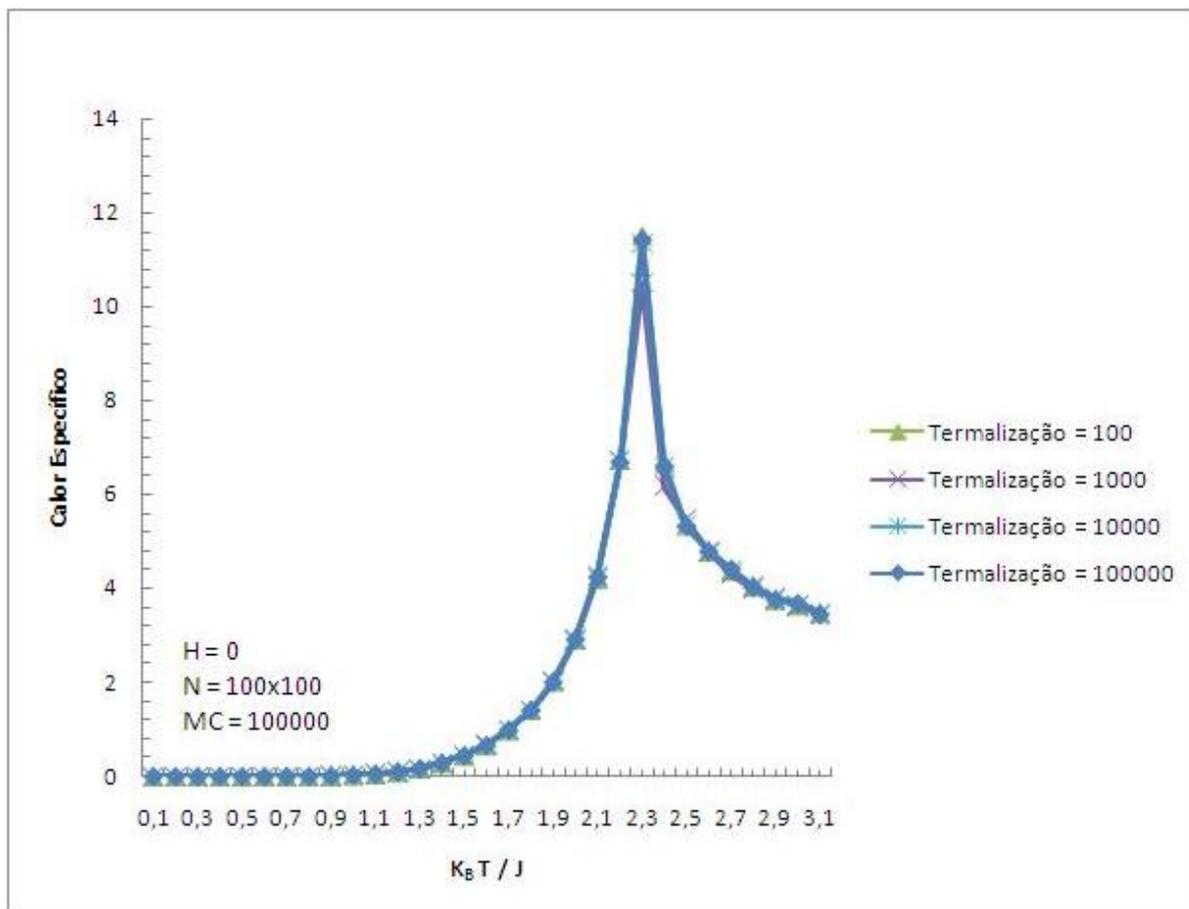


Figura 28: Calor específico para o modelo de Ising na rede quadrada para vários valores de Termalização.

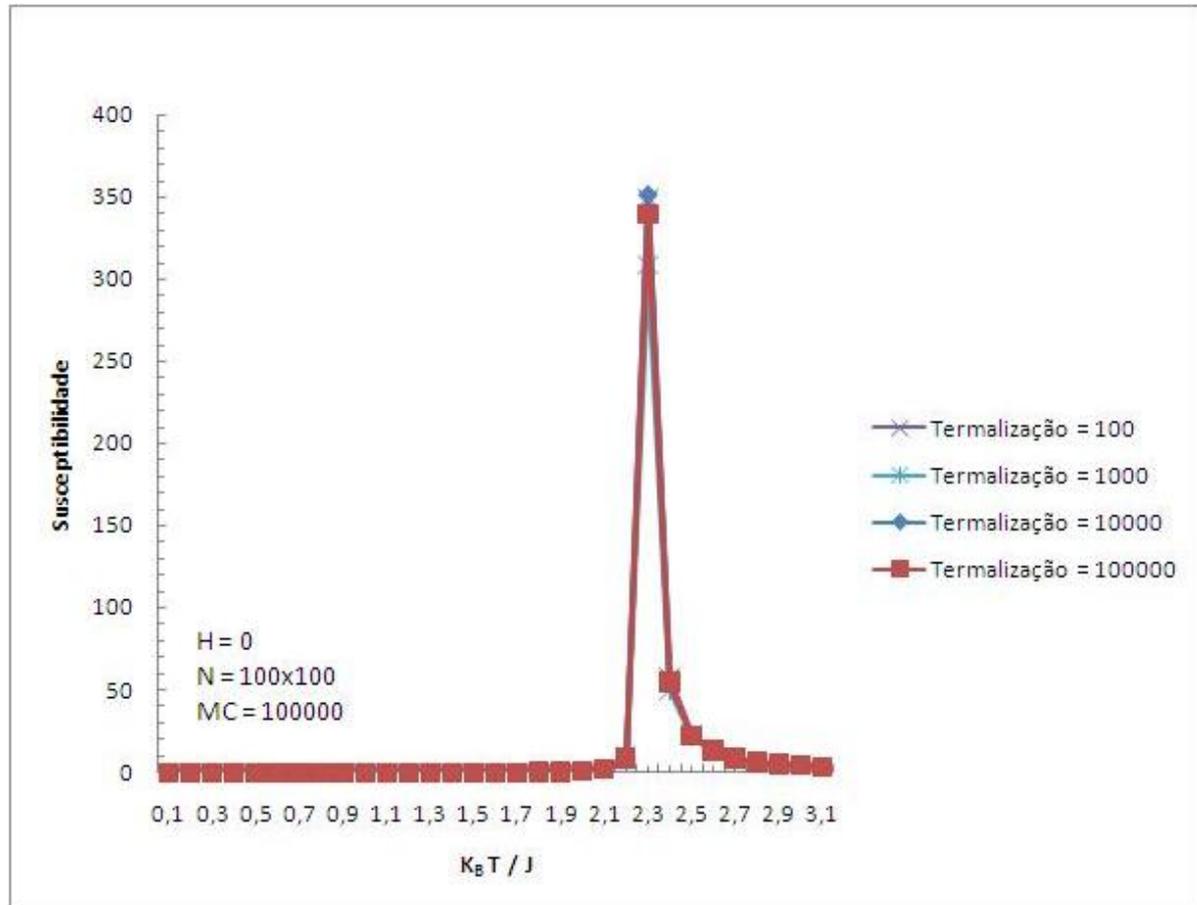


Figura 29: Susceptibilidade para o modelo de Ising na rede quadrada para vários valores de Termalização.

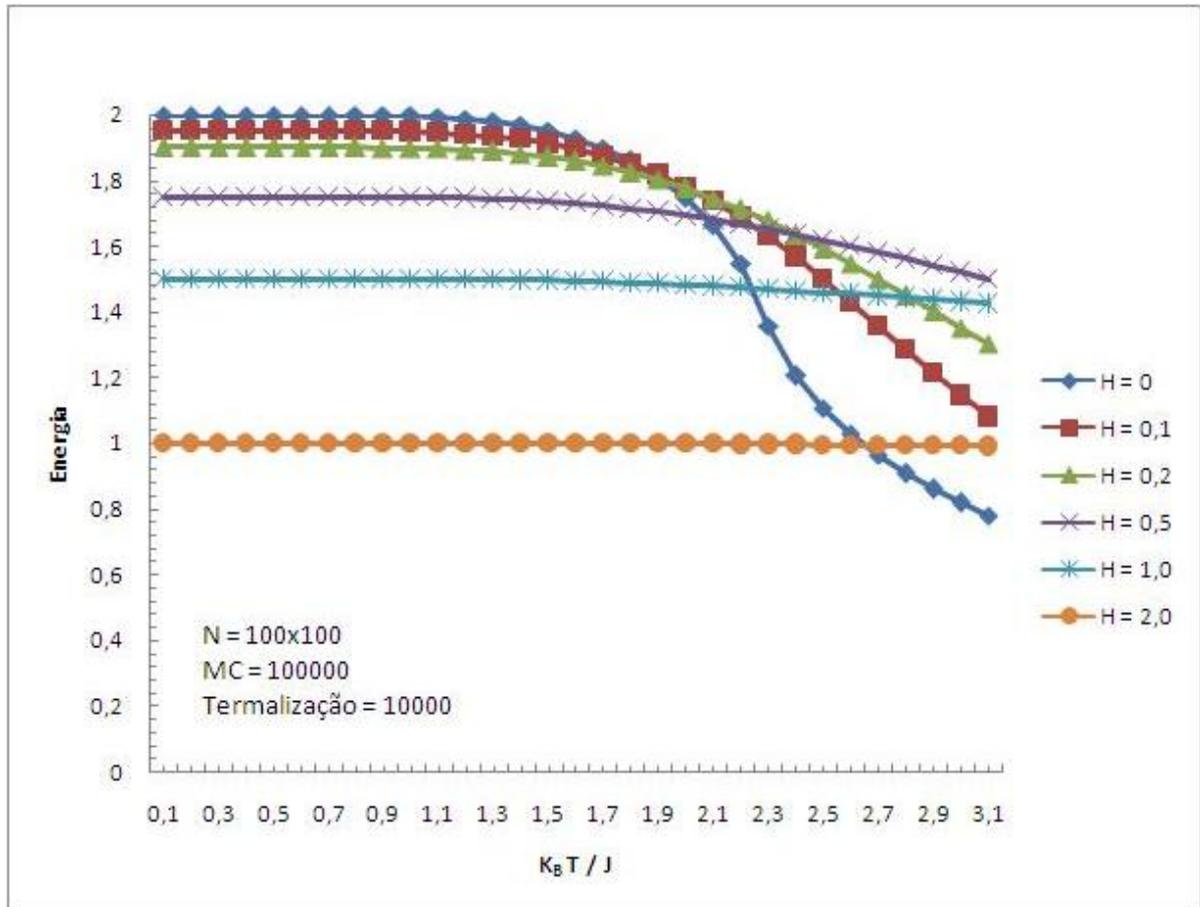


Figura 30: Energia para o modelo de Ising na rede quadrada para vários valores de campo externo.

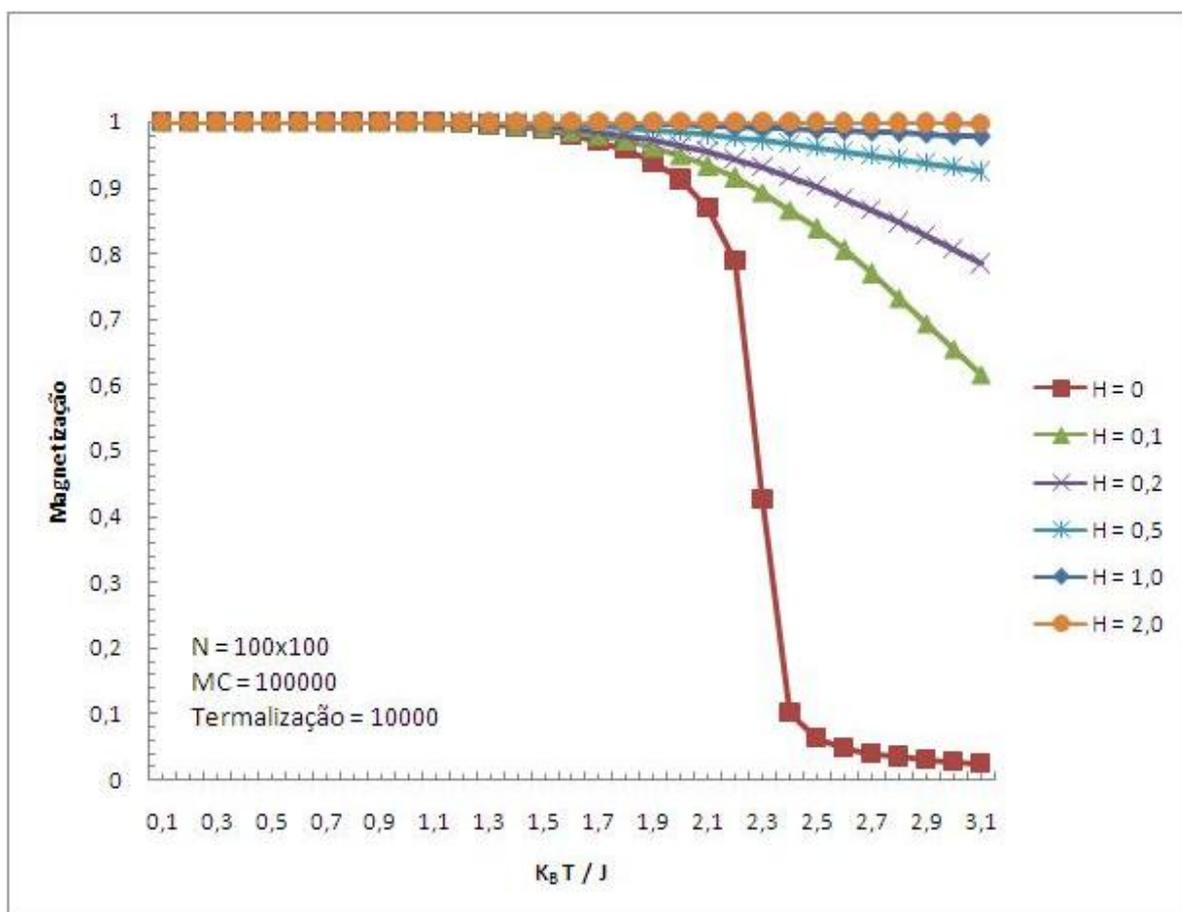


Figura 31: Magnetização para o modelo de Ising na rede quadrada para vários valores de campo externo.

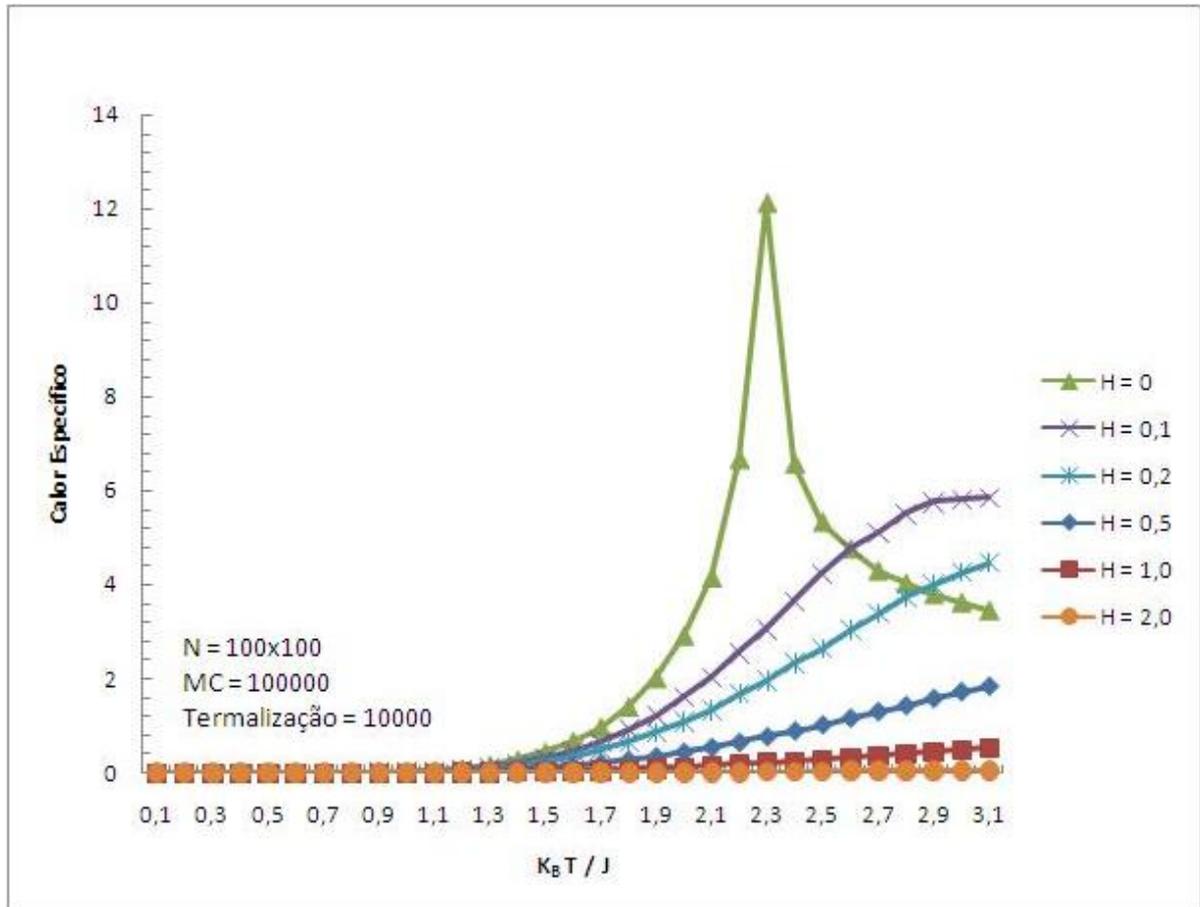


Figura 32: Calor específico para o modelo de Ising na rede quadrada para vários valores de campo externo.

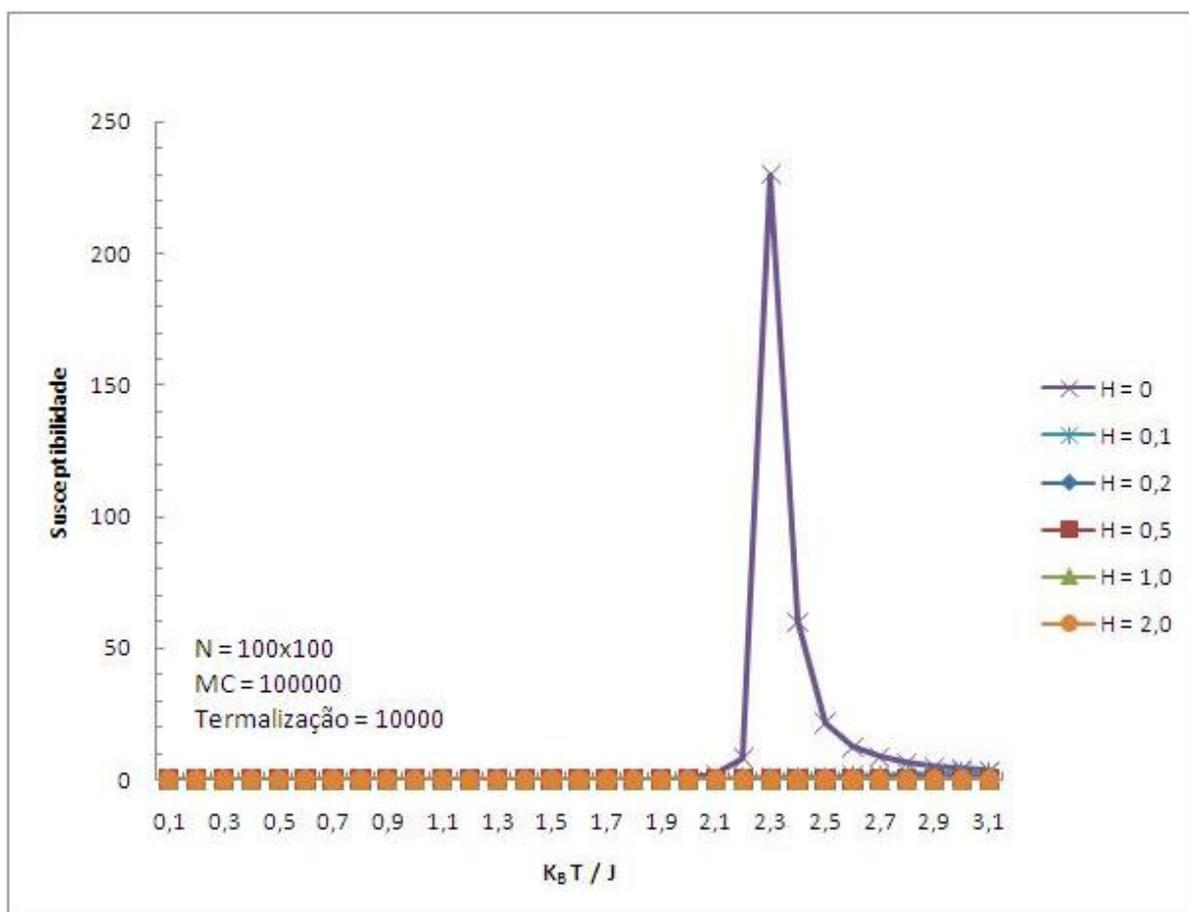


Figura 33: Susceptibilidade para o modelo de Ising na rede quadrada para vários valores de campo externo.

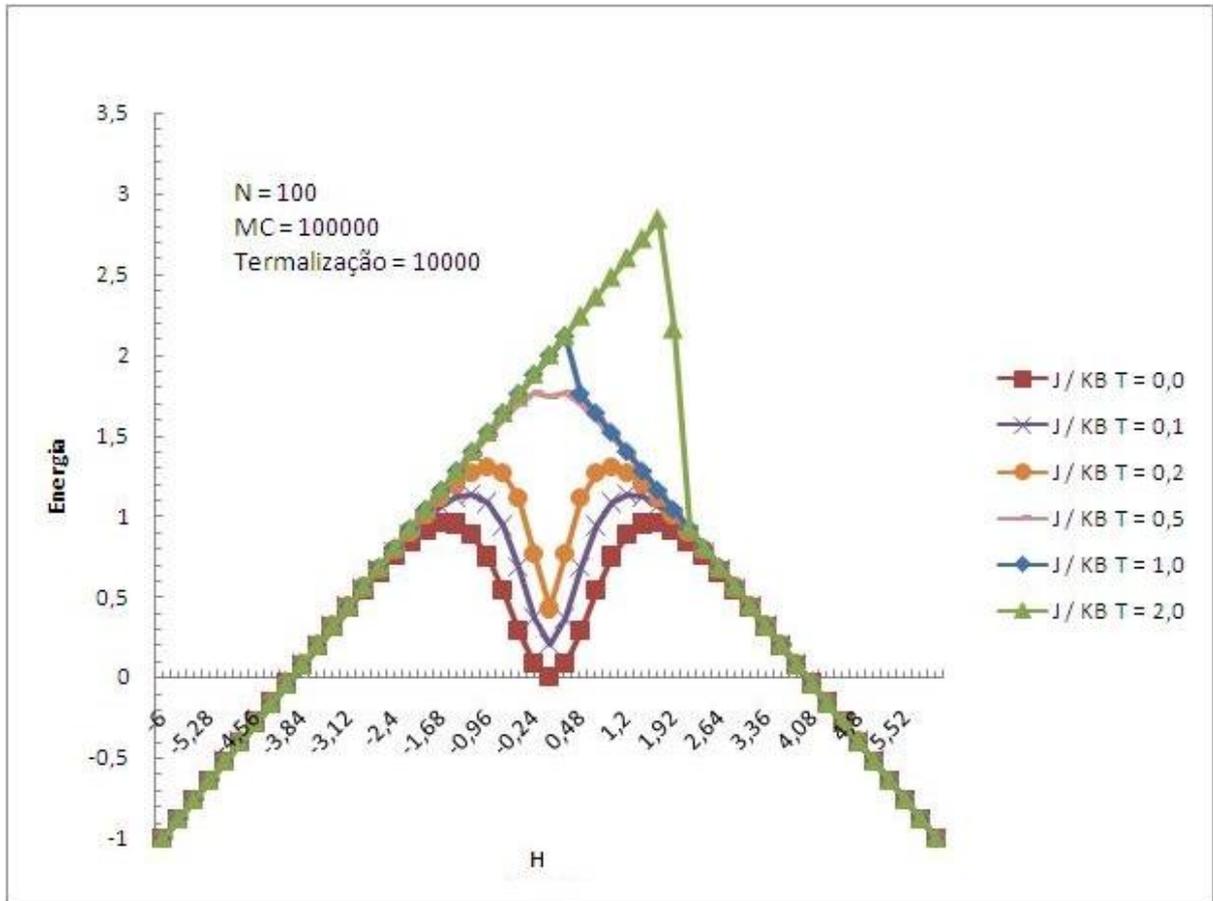


Figura 34: Energia versus campo para o modelo de Ising na rede quadrada para vários valores de temperatura.

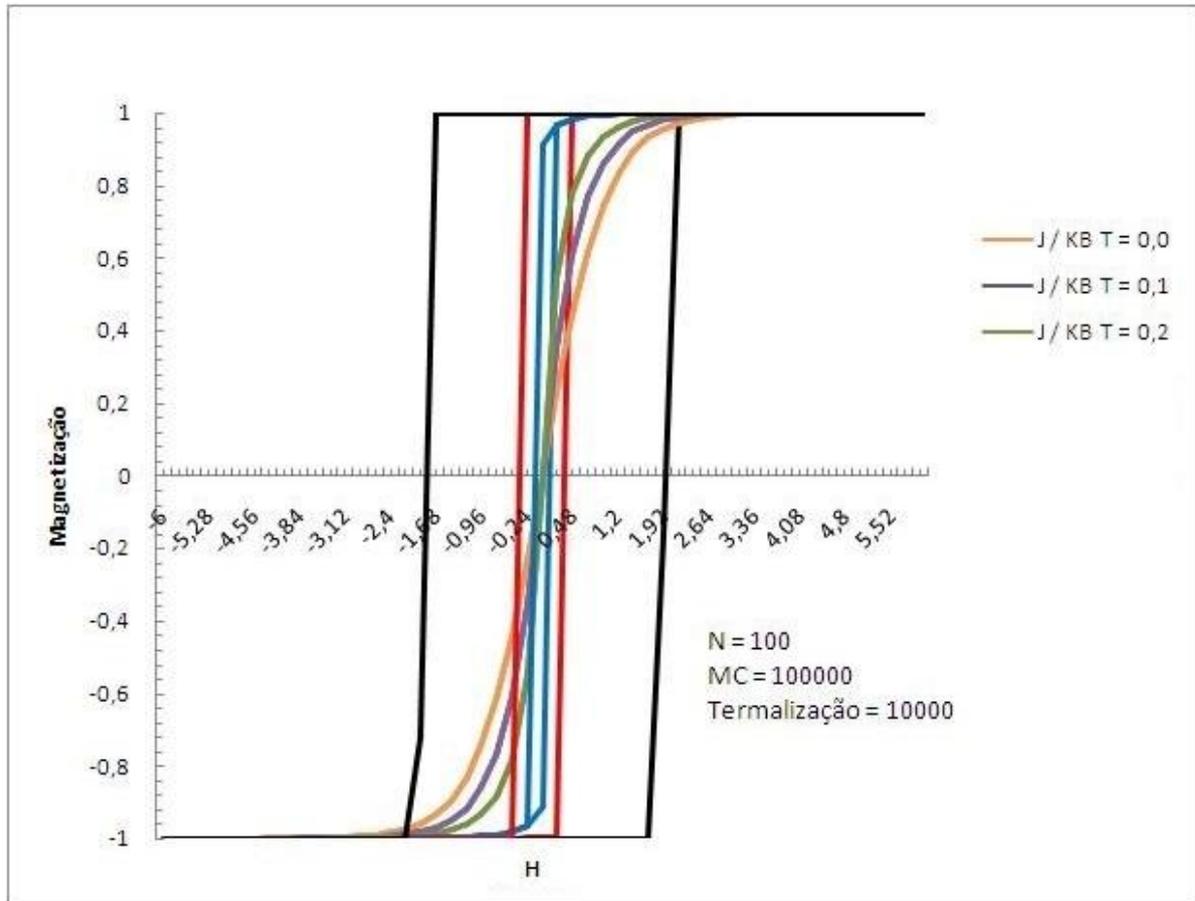


Figura 35: Histerese magnética para o modelo de Ising na rede quadrada para vários valores de temperatura.

5.3.2 Resultados deste Trabalho

Aqui estudamos os efeitos do sequenciamento aperiódico de estruturas magnéticas no modelo de Ising. Percebe-se claramente uma competição entre as camadas magnéticas quando as mesmas são ferromagnéticas, com o surgimento de mais de uma temperatura de transição de fases. No caso de um material ferromagnético com um material antiferromagnético, se percebe uma competição mais fraca, visto que o antiferromagneto tem magnetização nula, por isto, surge apenas uma temperatura de transição, visto que adotou-se o mesmo valor, em módulo, para os termos de exchange das duas estruturas.

Neste modelo chamamos de 1ª geração de Cantor o modelo de Ising clássico puro, com um material magnético A. Chamamos de 2ª geração, o sequenciamento ABA, a 3ª geração será ABABBBABA, conforme apresenta o capítulo 3, e assim por diante. O material magnético A é diferenciado do material B, apenas pelo termo de exchange.

Devido a presença de dois materiais ferromagnéticos diferentes, percebe-se das figuras 36 a 41, a presença de duas transições de fase, devido aos picos no calor específico e nos "degraus" formados na curva de magnetização. O valor de λ é o responsável pelo aparecimento da segunda temperatura de transição, e de seu valor.

As figuras 42 a 47 apresentam histereses magnéticas para vários valores de λ . Quando $\lambda > 0$, temos o aparecimento de uma competição entre os materiais A e B. Quanto menor a geração de Cantor, maior quantidade do material A, por isso a histerese dominante e a temperatura crítica dominante são deste material, mas com o aumento da geração, há um aumento gradual e predomínio do material B. Com isso, a histerese é radicalmente alterada tornando-se aos poucos, igual a histerese magnética do material B, se ele tomasse conta de toda a rede. Quando $\lambda < 0$, percebe-se que a histerese magnética surge de forma tímida, com baixo campo coercivo e baixo campo remanente, porém aumentando a coercividade e a remanência, com o aumento de $J / k_B T$. Percebe-se também que, quando se compara cada geração, a remanência e a coercividade são menores, quanto maior for a geração, pois o material A, que é ferromagnético, está sendo gradualmente substituído pelo material B, que é antiferromagnético.

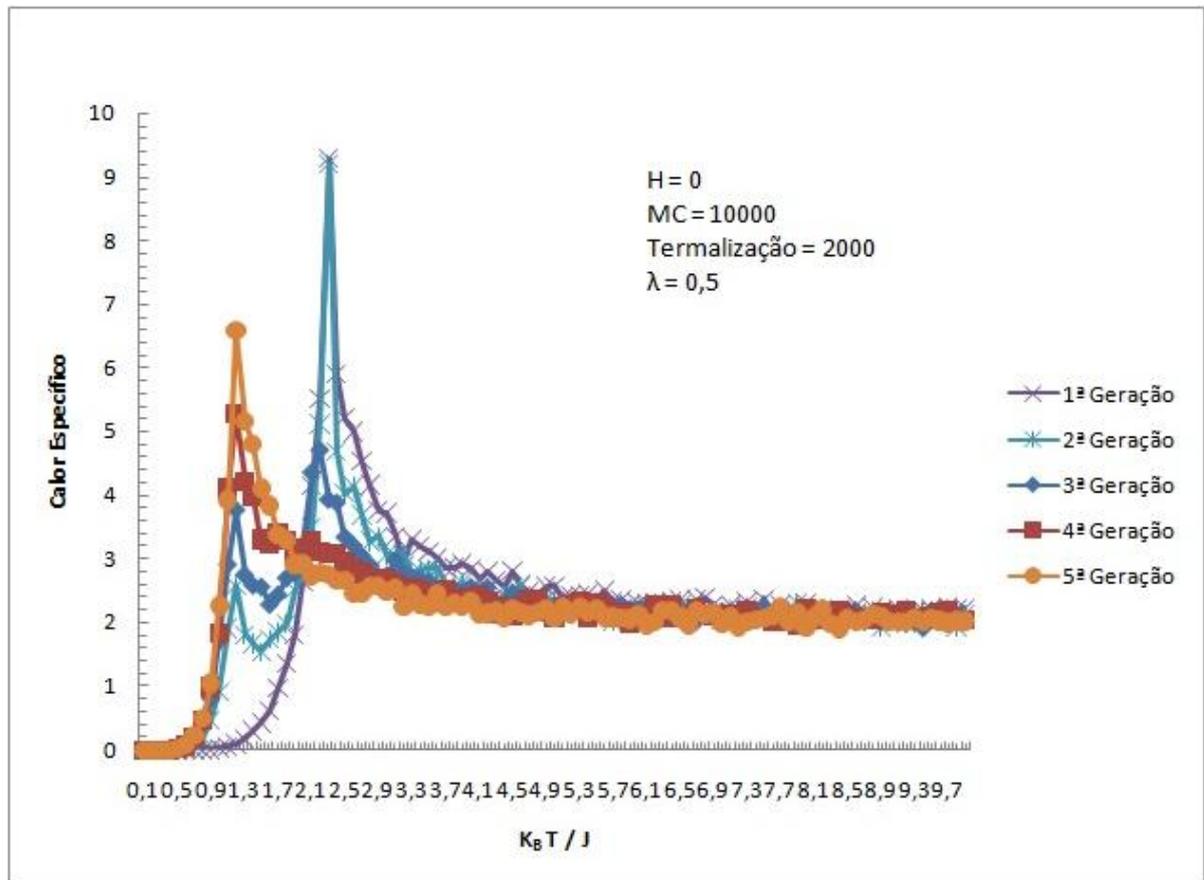


Figura 36: Calor específico para o modelo de Ising na rede quadrada para $\lambda = 0,5$ e para as gerações de 1 a 5.

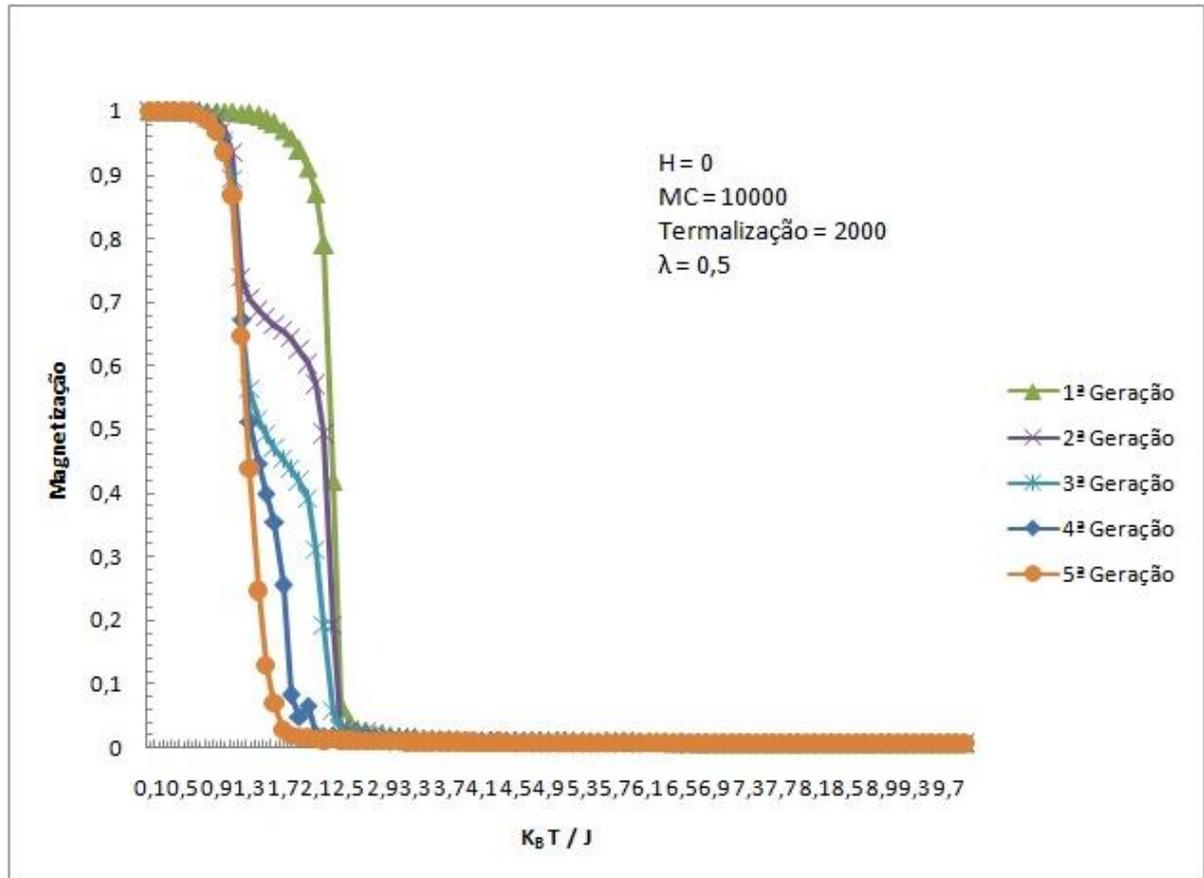


Figura 37: Magnetização para o modelo de Ising na rede quadrada para $\lambda = 0,5$ e para as gerações de 1 a 5.

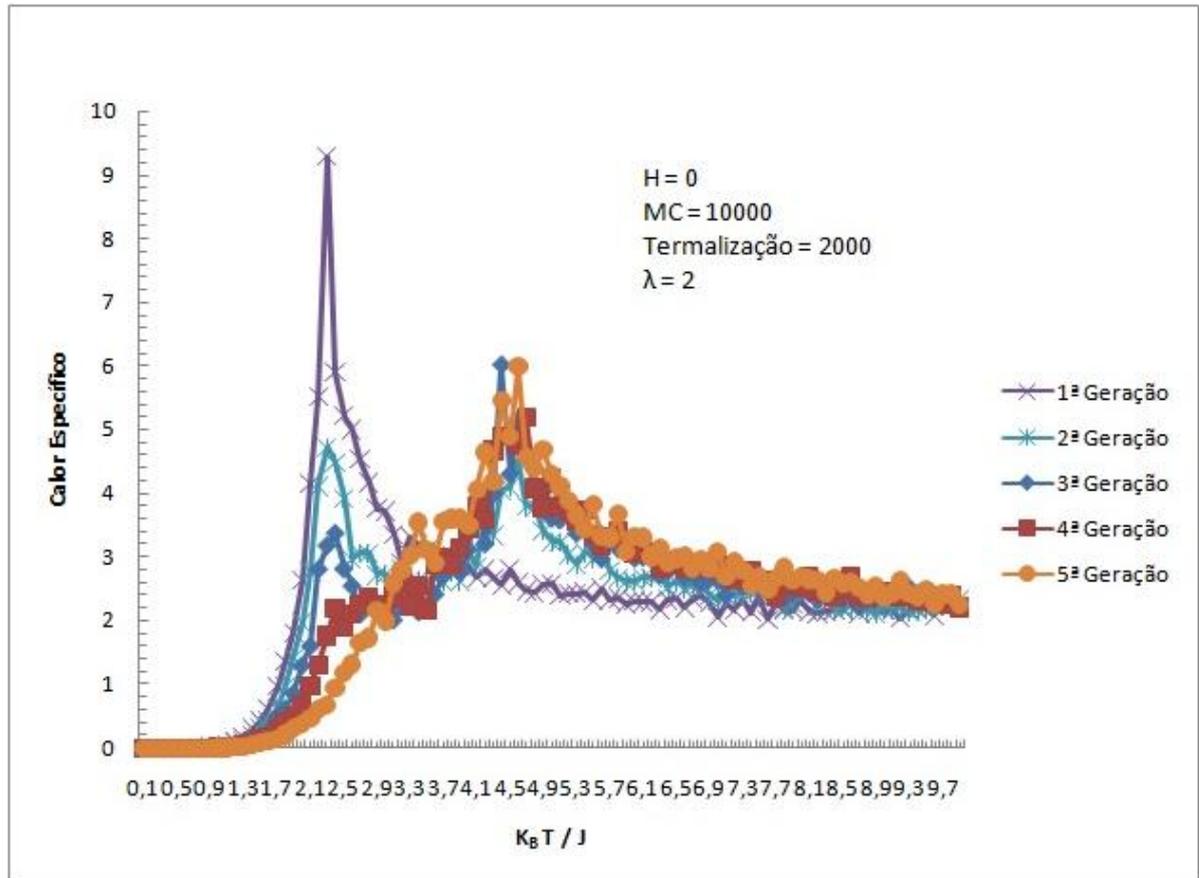


Figura 38: Calor específico para o modelo de Ising na rede quadrada para $\lambda = 2$ e para as gerações de 1 a 5.

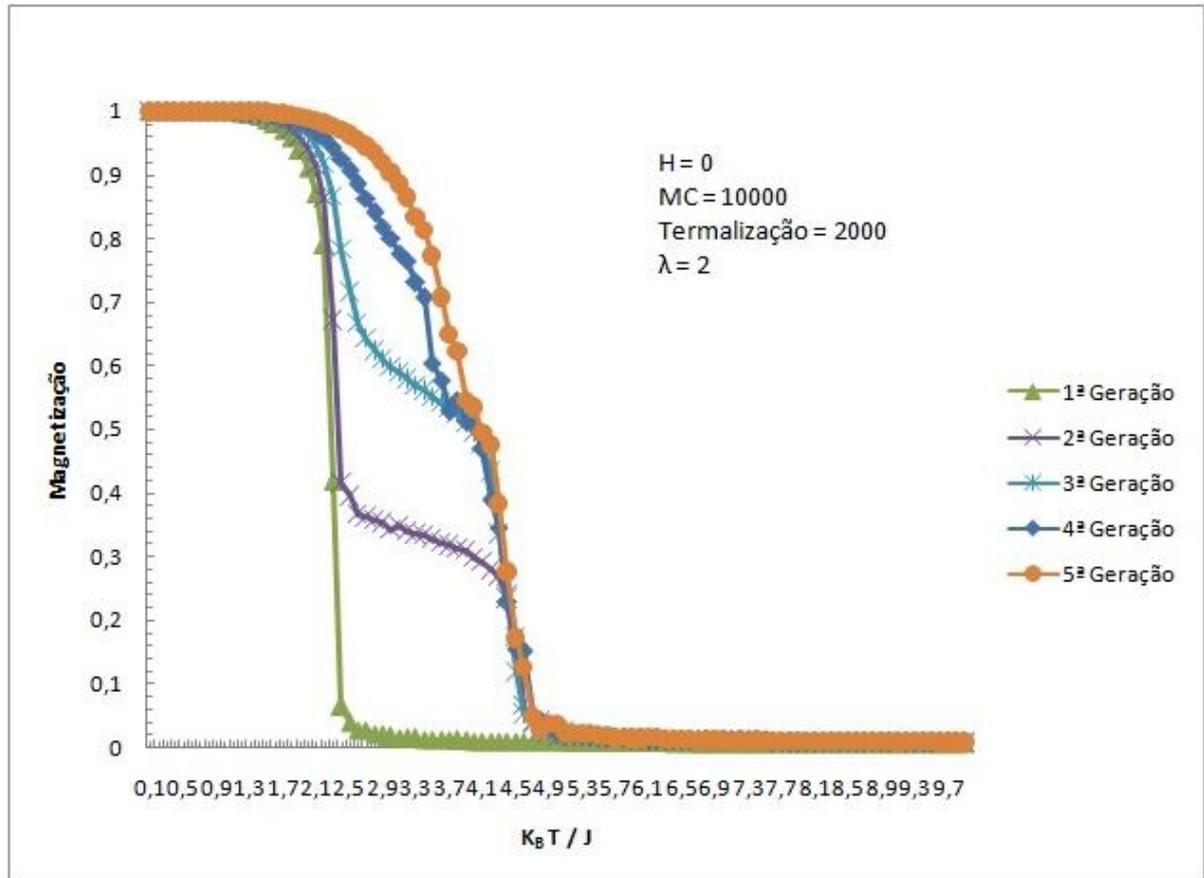


Figura 39: Magnetização para o modelo de Ising na rede quadrada para $\lambda = 2$ e para as gerações de 1 a 5.

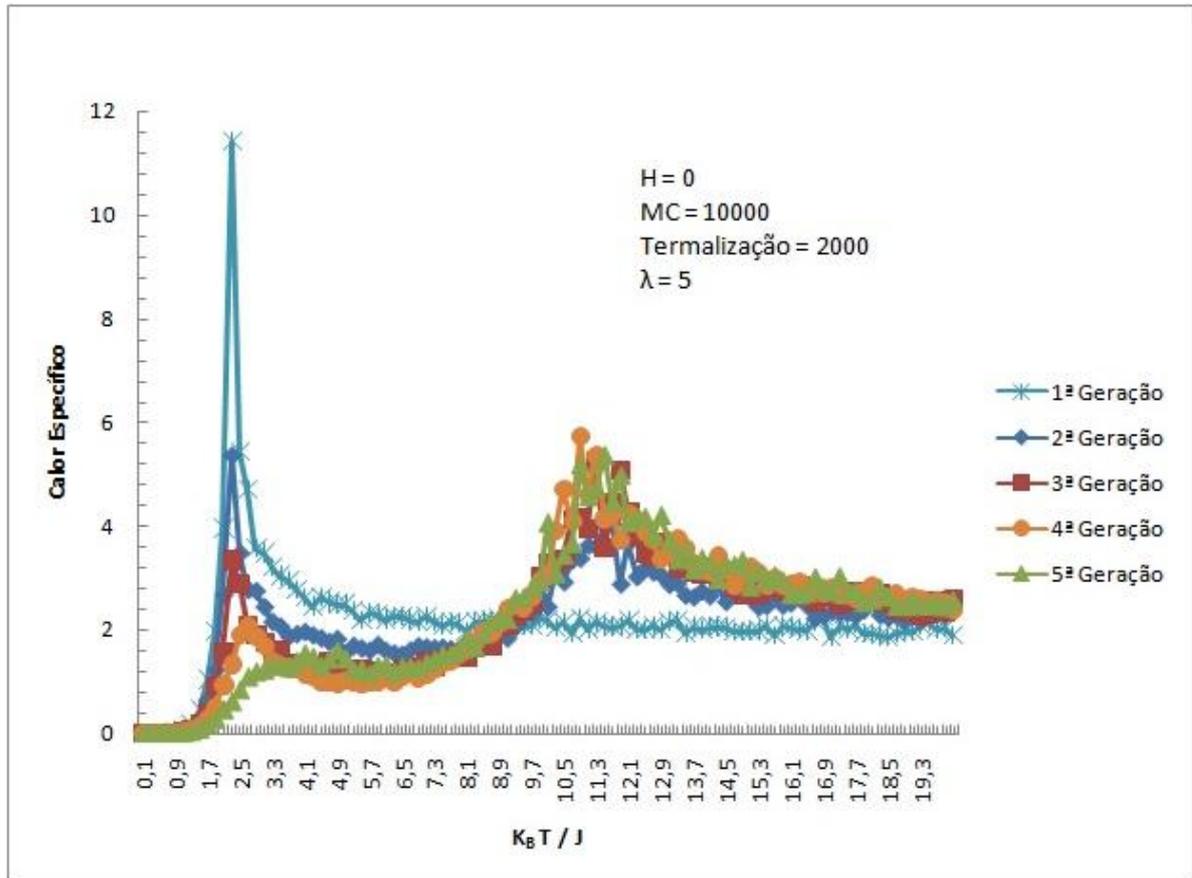
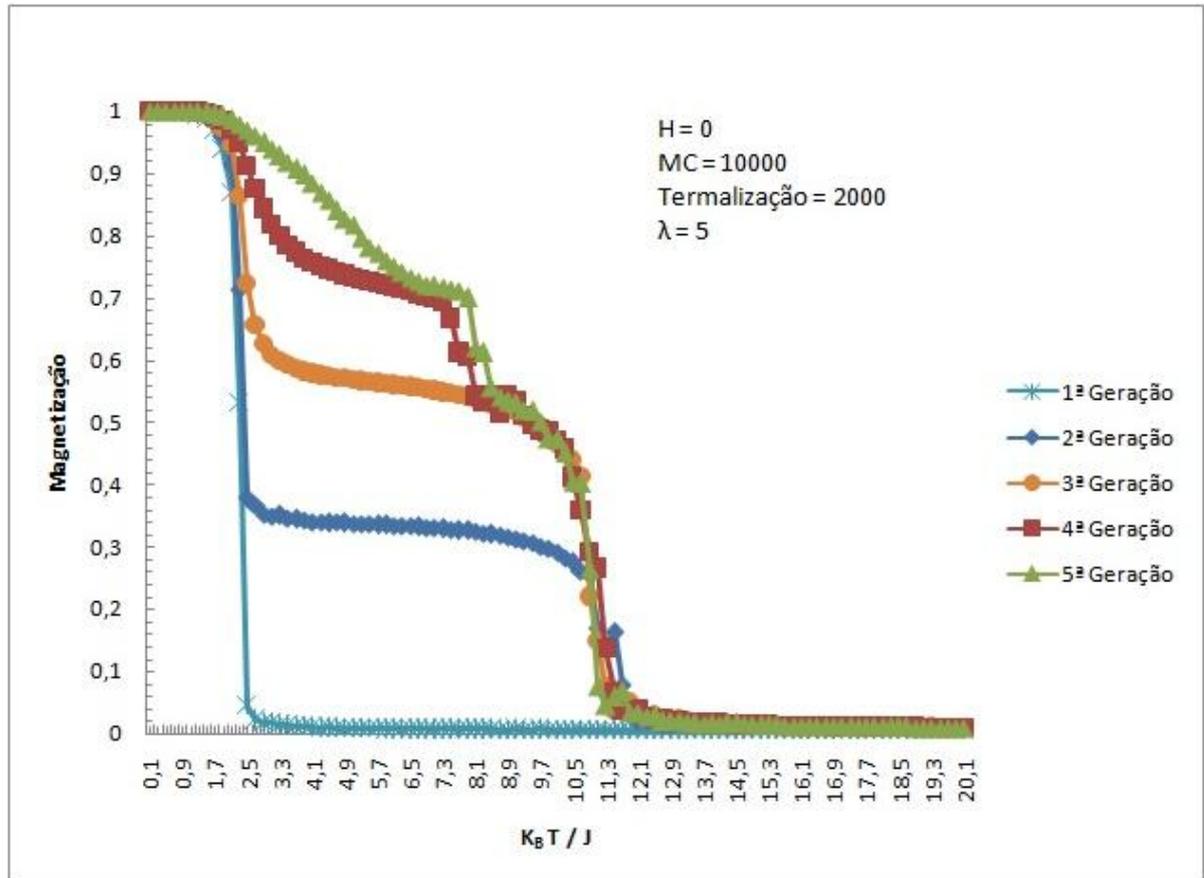


Figura 40: Calor específico para o modelo de Ising na rede quadrada para $\lambda = 5$ e para as gerações de 1 a 5.



(b)

Figura 41: Magnetização para o modelo de Ising na rede quadrada para $\lambda = 5$ e para as gerações de 1 a 5.

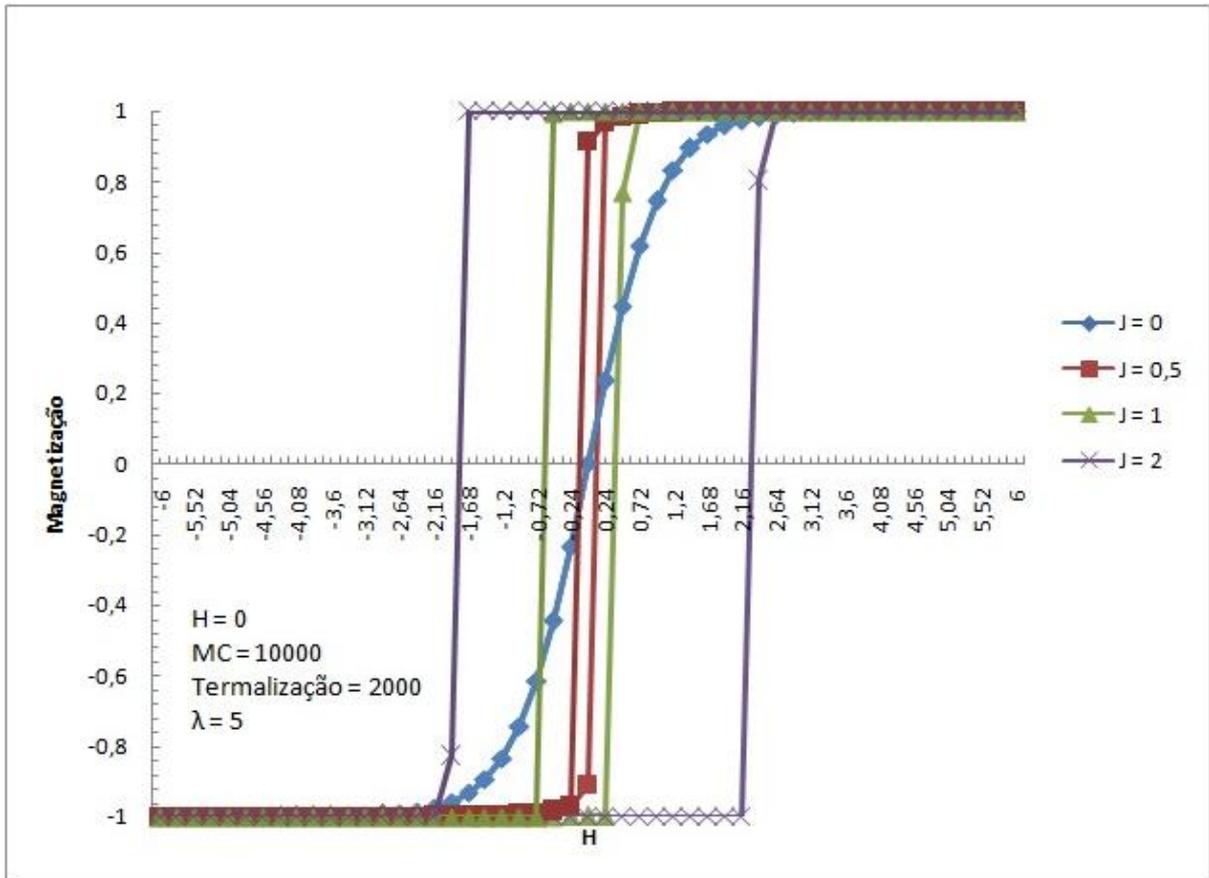


Figura 42: Histerese magnética para o modelo de Ising na rede quadrada para $\lambda = 5$ e para a 1ª geração.

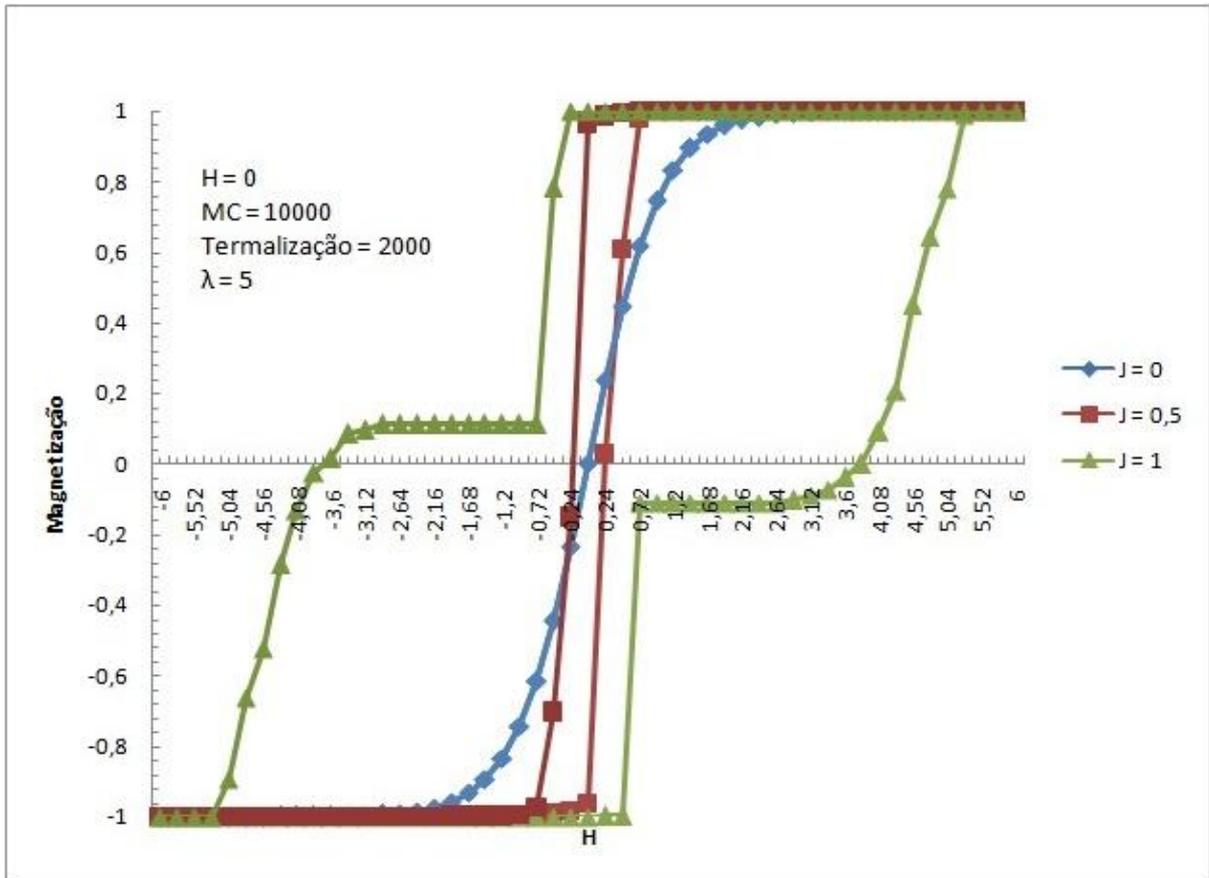


Figura 43: Histerese magnética para o modelo de Ising na rede quadrada para $\lambda = 5$ e para a 3ª geração.

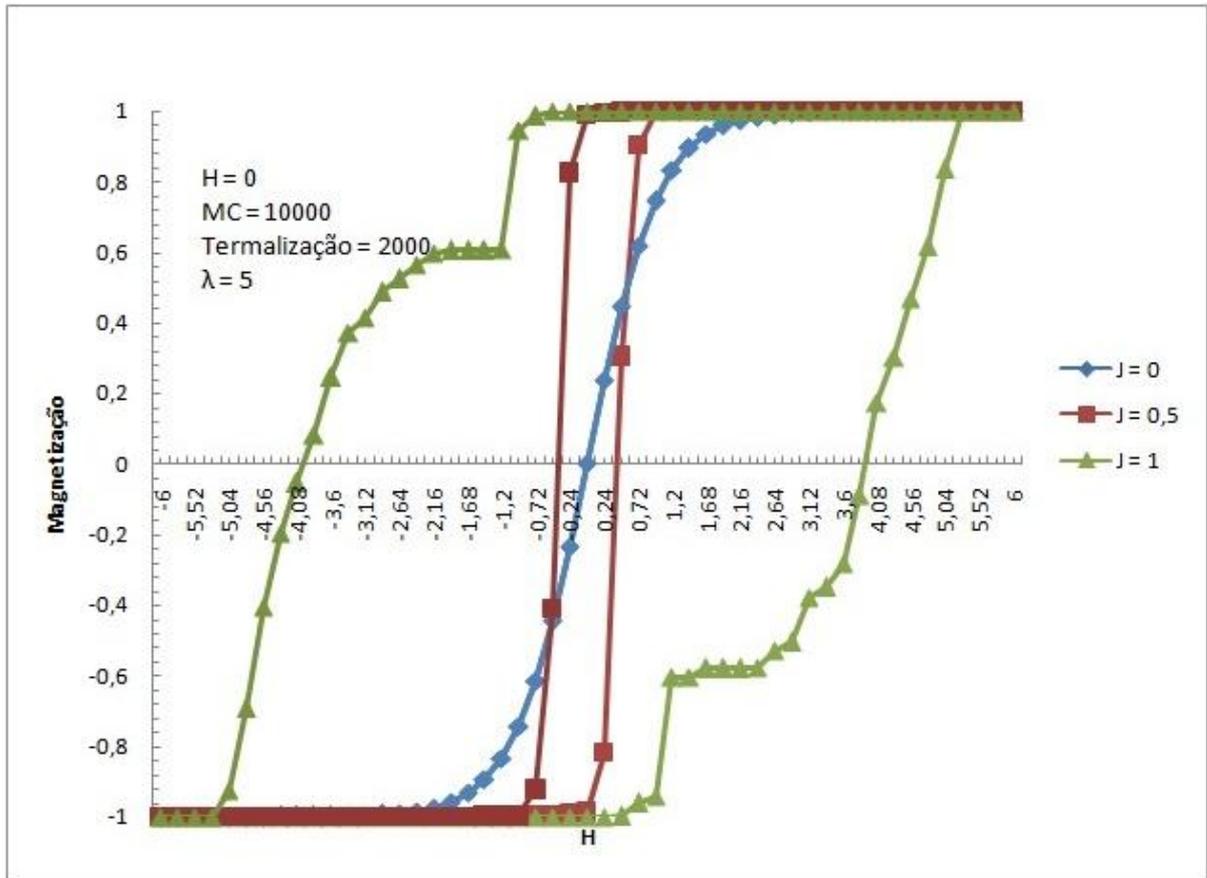


Figura 44: Histerese magnética para o modelo de Ising na rede quadrada para $\lambda = 5$ e para a 5ª geração.

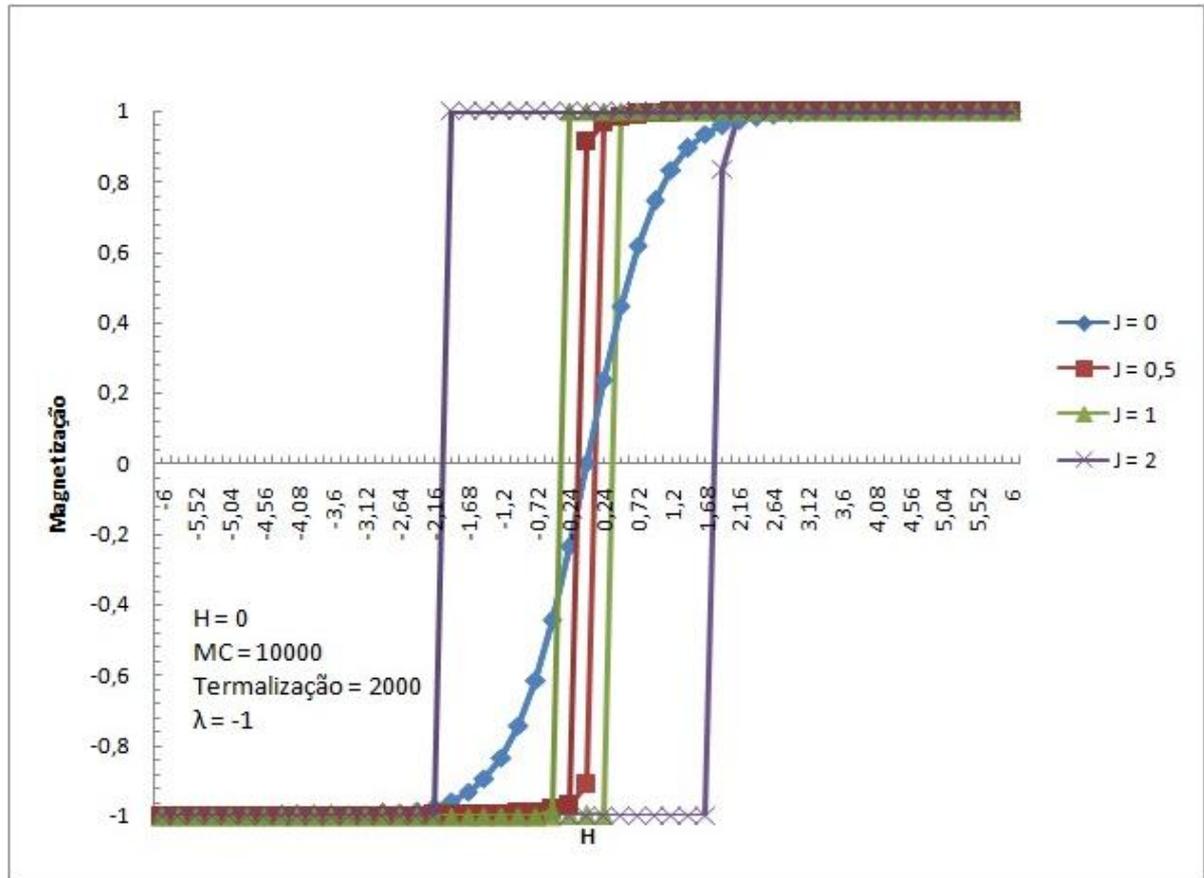


Figura 45: Histerese magnética para o modelo de Ising na rede quadrada para $\lambda = -1$ e para a 1ª geração.

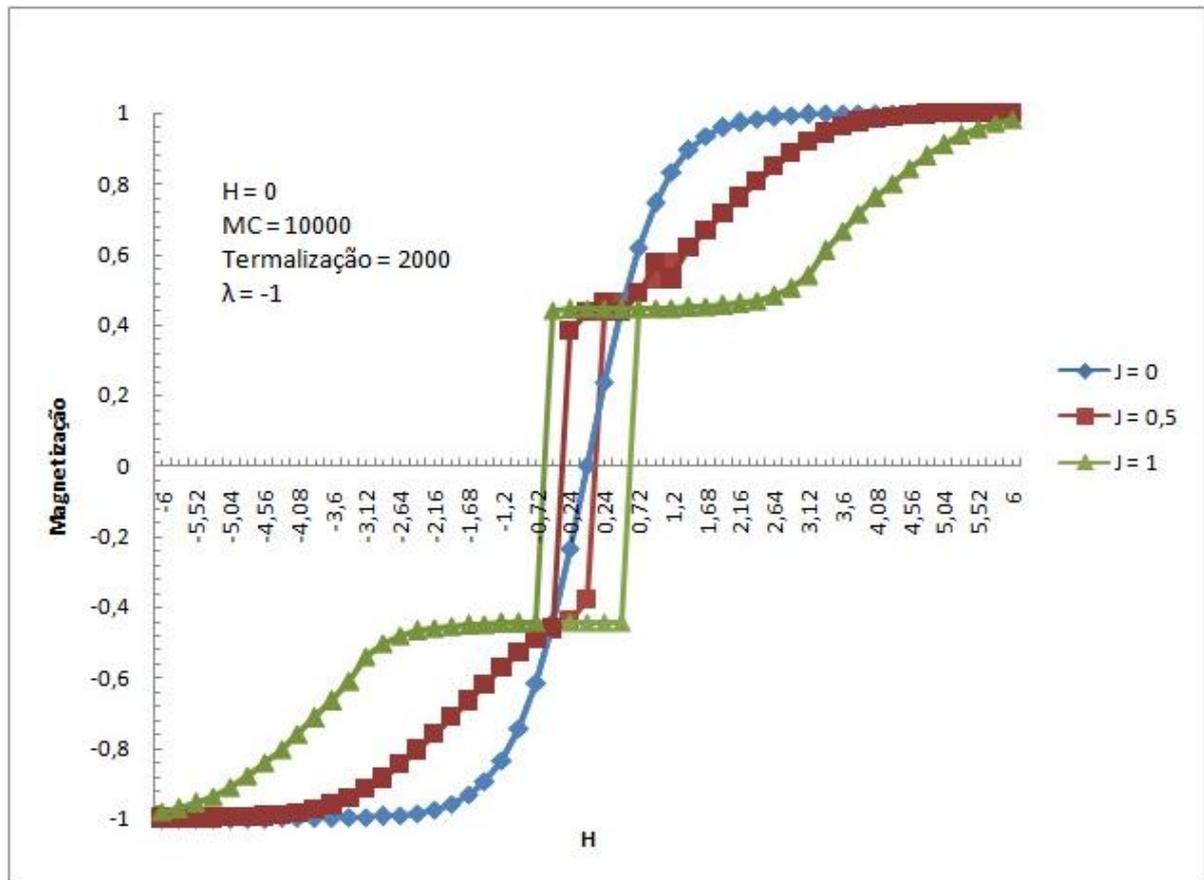


Figura 46: Histerese magnética para o modelo de Ising na rede quadrada para $\lambda = -1$ e para a 3ª geração.

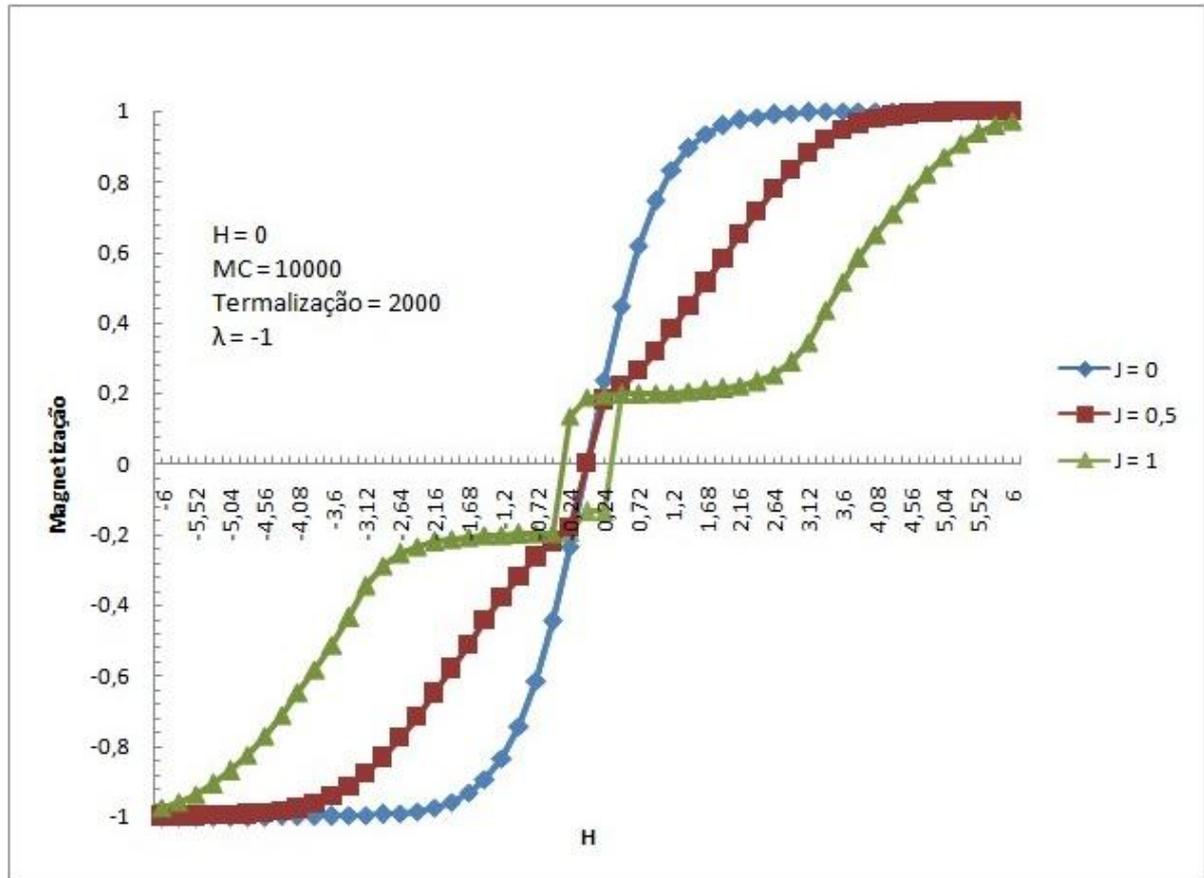


Figura 47: Histerese magnética para o modelo de Ising na rede quadrada para $\lambda = -1$ e para a 5ª geração.

Analisando-se o comportamento da temperatura crítica com os diversos valores de λ , e com o aumento da geração, pode-se perceber que há uma região de competição entre as temperaturas críticas, na qual os materiais A e B, ainda estão em ordens de grandeza aproximadas, o suficiente para tornarem o sistema indefinido magneticamente. Isto pode ser visto na tabela a seguir:

Geração	$k_B T_{C1} / J$	$k_B T_{C2} / J$
1	2,3	
2	2,3	1,2
3	2,3	1,2
4		1,2
5		1,2

Tabela 3: Temperaturas críticas $\lambda = 0,5$.

Geração	$k_B T_{C1} / J$	$k_B T_{C2} / J$
1	2,3	
2	2,3	4,6
3	2,3	4,6
4		4,6
5		4,6

Tabela 4: Temperaturas críticas $\lambda = 2$.

Geração	$k_B T_{C1} / J$	$k_B T_{C2} / J$
1	2,3	
2	2,3	11,7
3	2,3	11,7
4		11,7
5		11,7

Tabela 5: Temperaturas críticas $\lambda = 5$.

Os resultados apresentados neste capítulo mostram que tanto a geração da sequência quanto a relação entre os termos de exchange dos materiais (λ) podem alterar sensivelmente o comportamento do sistema magnético, gerando diversidade tanto na temperatura crítica, quanto na formação da histerese magnética do sistema. Um estudo mais aprofundado do diagrama de fases pode apresentar o limiar da região de predominância de cada material magnético com mais precisão.

6 CONCLUSÃO

Neste trabalho, apresentamos o modelo de Ising clássico quasiperiódico, sob o sequenciamento de Cantor. Apresentou-se curvas de energia, magnetização, calor específico e susceptibilidade, além da histerese magnética para diversos valores de temperatura normalizada, geração de Cantor, campo magnético externo e razão dos termos de exchange (λ).

Foi usado para a simulação o método de Monte Carlo sob a evolução de Metropolis. Foi escolhido para a inicialização, o estado já esperado para o sistema, ordenado quando se inicia com campo externo ou baixa temperatura, e desordenado quando se inicia com altas temperaturas sem campo externo. A atualização do sistema foi o single-spin-flip para a dinâmica, ou seja, inversão de spins simples, de forma aleatória. As médias foram realizadas para 10.000 passos de Monte Carlo, e 2.000 passo de termalização, que neste caso se mostraram adequados, sendo que, para sistemas mais complexos, com termos de anisotropia, espera-se que sejam necessários mais passos. E os cálculos das grandezas termodinâmicas foram feitas tomando-se como base a teoria apresentada nos capítulo 2 e 4.

Foi mostrado que os resultados para sistemas simples estão de acordo com o que é apresentado na literatura especializada. Mostrou-se que tanto o termo λ , quanto a geração de Cantor influenciam de forma sensível os resultados, principalmente com o aumento destes parâmetros.

Este trabalho contribui para a compreensão da competição entre materiais magnéticos organizados de forma quasiperiódica no sequenciamento de Cantor, com a apresentação das grandezas termodinâmicas e magnéticas, além das histereses observadas.

Como propostas para novos trabalhos, podemos elencar as seguintes extensões e melhorias:

1. Levantamento do diagrama de fases do sistema como função de λ e da geração de Cantor;
2. Uso de outras formas de sequenciamento quase periódicas, como Fibonacci, por exemplo;
3. O acréscimo de termos de anisotropia;
4. Uso dos modelos XY e Heisenberg;
5. O estudo do surgimento de paredes de domínio no modelo XY ou Heisenberg;
6. Análise de nucleação de vórtices no modelo XY ou Heisenberg.

7 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] A.S.J. Filho. Dissertação de Mestrado. Danos e Propriedades Termodinâmicas no Modelo de Ashkin-Teller de N cores. UFRN. Natal-RN. 2004.
- [2] R. Merlin, K. Bajema, R. Clarke, F.-Y. Juang and P. K. Bhattacharya, Phys. Rev. Lett. 55, 1768 (1985).
- [3] H. Tsunetsugu and K. Ueda . Ising spin system on the Fibonacci chain. Phys. Rev. B 36 (1987).
- [4] M.M. Doria, F. Nori, and I.I. Satija. Thue-Morse quantum Ising model. Phys. Rev. B 39 (1989).
- [5] U. Grimm e M. Baake, Aperiodic Ising Models - The Mathematics of Long-Range Aperiodic Order, editado por R. V. Moody, Kluwer Academic Publisher, Amsterdam (1997).
- [6] U. Grimm and M. Baake. A periodic ising model. Cond-Mat 9604116 18-04-1996.
- [7] S. Salinas, Introdução à Física Estatística, Ed. USP (1999).
- [8] Onsager, L. A two-dimensional model with an order-disorder transition. Physical Review, v. 65, p. 117, 1944.
- [9] E. Ising, Z. Physik 31, 253 (1925).
- [10] Huang, K. Statistical Mechanics. 2. Ed. John Wiley & Sons, 1987.
- [11] R. N. Faria & L.F.C.P. Lima, Introdução ao Magnetismo dos Materiais. Ed. Livraria da Física, 2005.
- [12] N.W. Ashcroft and N.D. Mermin, Física do Estado Sólido, Cengage Learning, Brasil, 2011.
- [13] Miguel A. Novak. Introdução ao Magnetismo. Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro, IF-UFRJ.
- [14] Halliday, D; Resnick, R; Krane, K.S. Física 3. 4ª Edição. Editora LTC, Rio de Janeiro, 1996.
- [15] Dias, G.S, Mecanossíntese e caracterização de cerâmicas de $\text{Bi}(1-x)\text{LaxFeO}_3$ obtidas por diferentes rotas de sinterização. Dissertação (Programa de Pós-Graduação em Física) – Universidade Estadual de Maringá, Maringá-PR, 2010.

- [16] Martins, N. Novos Materiais com Propriedades Magnéticas. Dissertação (Departamento de Física) – Faculdade de Ciências de Tecnologia da Universidade de Coimbra, Coimbra, 2008.
- [17] Kittel, C. Introdução à Física do Estado Sólido. 7ª Edição. Editora LTC. Rio de Janeiro, 2008.
- [18] Marques, C. Anisotropia magnética de troca unidirecional no sistema Fe/MnO₂ obtido por mecanossíntese. Dissertação (Programa de Pós-graduação em Física) – Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, 2006.
- [19] Sá, D.H.G.S. Preparação e medidas magnéticas do sistema magnético frustrado Fe_xNi_{1-x}TiO₃. Dissertação (Núcleo de Pós-graduação em Física) – Universidade Federal de Sergipe. São Cristovão, 2008.
- [20] Rebouças, G.O.G. Nucleação de vórtices e paredes de domínio em nanoestruturas magnéticas. Tese de Doutorado em Física, Pós-graduação em Física, UFRN, Natal/RN, 2010.
- [21] Sales, F.H.S. Fases Magnéticas de Sistemas Nanoestruturados de Terras-Raras. Tese de Doutorado em Física, Pós-graduação em Física, UFRN, Natal/RN, 2011
- [22] Paul A. Tipler & Gene Mosca, Física para Cientistas e Engenheiros, Vol. 2: Eletricidade e Magnetismo, Óptica, 6ª Edição, Ed. LTC, 2009.
- [23] Getzlaff, Mathias, Fundamentals of Magnetism, Springer Berlin Heidelberg New York, 2008.
- [24] Ribeiro, G.A.P. As Propriedades Magnéticas da Matéria: Um primeiro contato, Revista Brasileira de Ensino de Física, Vol 22, Nº 3, Páginas 299-305. Florianópolis, Setembro 2000.
- [25] J. C. Anderson, K. D. Leaver, R. D. Rawlings and J. M. Alexander. Materials Science. Fourth Edition - Chapman and Hall - London - 1990.
- [26] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, J. W. Cahn, Phys. Rev. Lett. 53, 1951 (1984).
- [27] D. Levine, P. J. Steinhardt, Phys. Rev. Lett. 53, 2477 (1984).
- [28] R. Penrose, Bull. Inst. Math. Appl. 10, 266 (1984).
- [29] F. Axel, J. Peyrière, C. R. Acad. Sci. de Paris 306, 179 (1988).
- [30] F. Axel, H. Terauchi, Phys. Rev. 66, 2223 (1991).
- [31] E. Maciá, F. Domínguez-Adame, Electrons, Phonons and Excitons in Low Dimensional Aperiodic Systems, Editorial Complutense, Madrid, 2000.
- [32] L. E. Reichl, A Modern Course in Statistical Physics, Texas University Press, Austin, 1980.

- [33] H. E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Oxford University Press, Oxford, 1971.
- [34] J. C. Sartorelli, W. M. Gonçalves, R. D. Pinto. *Phys. Rev. B*, 49, 3963 (1994).
- [35] T. J. P. Penna, P. M. C. de Oliveira, J. C. Sartorelli, W. M. Gonçalves, R. D. Pinto, *Phys. Rev. E*, 52 R2168 (1995).
- [36] J. Todd, R. Merlin, R. Clark, K.M. Mohanty and J.D. Axe, *Phys. Rev. Lett.* 57, 1157 (1986).
- [37] K. Bajema and R. Merlin, *Phys. Rev. B*, 36, 4555 (1987).
- [38] Z. Cheng, R. Savit, R. Merlin. *Phys. Rev. B*, 37, 4375 (1988).
- [39] M. Kohmoto and J.R. Banavar, *Phys. Rev. B* 34, 563 (1984).
- [40] F. M. Dekking, *J. Comb. Theory* 27A, 292 (1976).
- [41] F. M. Dekking, *C. R. Acad. Sci. de Paris* 285 (1977) 157.
- [42] G. Christol, T. Kamae, M. Mendes-France and G. Rauzy, *Bull. SOC. Math. (France)* 108, 401 (1980).
- [43] A. Cobham, *Math. Syst. Theory* 3, 186 (1969).
- [44] A. Cobham, *Math. Syst. Theory* 6, 164 (1972).
- [45] G. T. Herman and G. Hozenberg, *Developmental Systems and Languages*, North-Holland, Amsterdam, 1975.
- [46] B. B. Mandelbrot, *The Fractal Geometry of Nature*, Freeman, New York, 1982.
- [47] E. L. Albuquerque, M. G. Cottan, *Polaritons in Periodic and Quasiperiodic Structures*, Elsevier, Amsterdam, 2004.
- [48] M. I. Al-Suwaiyel, A. Alani, A. Al-Swailem, *International Journal of Nonlinear Sciences and Numerical Simulation* 7, 133 (2006).
- [49] T. J. Cooke, *Botanical Journal of the Linnean Society* 150, 3 (2006).
- [50] A. Thue, *Norske Vididensk, Selsk, Skr, I.* 7, 1 (1906).
- [51] M. Morse, *Trans. Am. J. Math. Soc.* 22, 84 (1921).
- [52] M. Morse, *Am. J. Math. Soc.* 43, 35 (1921).
- [53] J. M. Luck, *Phys. Rev. B* 39, 5834 (1989).
- [54] G. Steinmeyer, D. Jaspert, F. Mitschke, *Opt. Commun.* 104, 379 (1994).
- [55] *Revista Brasileira de Ensino de Física, Simulação Monte Carlo com Repesagem Aplicada ao Calor Específico de Sólidos*, vol. 24, nº 2, página 103, Junho, 2002.
- [56] Binder K. and Heerman D. W., “Monte Carlo Simulation in Statistical Physics” (Spring-Verlag, Berlin, 1992); *Spring Series in Solid-States Sciences*, Vol. 80.

- [57] K. Bitter, "The Monte Carlo Method in Condensed Matter Physics", Topics in Applied Physics 71, Springer, Berlin (1992).
- [58] C. Z. Mooney, "Monte Carlo Simulation", Series: Quantitative Applications in the Social Sciences 116, Sage University Paper, Iowa (1997).
- [59] M. P. Allen, D. J. Tildesley, "Computer Simulation of Liquids", Oxford Science Publications, Nova York (1987, 2003).
- [60] D. Landau and K. Binder. "A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics (Cambridge University Press. Cambridge UK, 2000).
- [61] M. Newman and G. Barkema, "Monte Carlo Methods in Statistical Physics", (Oxford University Press, New York, USA, 1999).
- [62] N.Metropolis, A.Rosenbluth, M.Rosenbluth, A.Teller and E.Teller. J. Chem. Phys., 21:1087,1953.
- [63] George Frederick Tavares da Silva. Método de Monte Carlo no Estudo de Sistemas Magnéticos Bidimensionais. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Ceará, 2008.
- [64] Marcella Rapini Braga. Estudo de filmes magnéticos ultrafinos pelo método de monte carlo. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Minas Gerais, 2006.
- [65] K Binder. "Applications of Monte Carlo methods to statistical physics". Rep. Prog. Phys. 60 (1997) 487–559
- [66] H.E. Stanley, D. Stauffer, J. Kertész e H.J. Herrmann. "Dynamics on Spreading Phenomena in Two-Dimensional Ising Model. Phys. Rev. Lett., 59 (20) 1987
- [67] Z. Lin and R. Tao. "Quantum Ising model on Thue-Morse aperiodic chain". Physics Letters A Vol 150, no 1, 1990.
- [68] H. Tsunetsugu and K. Ueda. "Ising spin system on the Fibonacci chain". Phys. Rev. B 36, 5493–5499 (1987).
- [69] Y. Achiam, T.C. Lubensky, and E.W. Marshall. "Ising model on a quasiperiodic chain". Physical Review B 33 N° 9 1986.
- [70] Laureado com o Prêmio Wolf de Física de 1999 e com o Nobel de Química de 2011, ambos pela descoberta dos quasicristais.

