

Estudo do Comportamento Crítico do Modelo Ising com Interações Mistas Através de Técnicas Analíticas e Computacionais

J. B. Santos-Filho¹, N. O. Moreno¹, D. F. de Albuquerque²

¹ Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe, 49100-00, São Cristóvão, SE, Brazil

² Departamento de Matemática, Universidade Federal de Sergipe, 49100-000, São Cristóvão, SE, Brazil.
(Recebido em 01 de outubro de 2007; aceito em 22 de novembro de 2007)

As propriedades críticas do modelo de Ising com ligações mistas (*Mixed-bond*) numa rede cúbica são estudadas tanto numericamente com analiticamente. Analiticamente estudos do modelo de Ising *mixed-bond* através da técnica de grupo de renormalização predizem a existência de reentrâncias magnéticas em certos valores do parâmetro de competição. Este fenômeno é tipicamente encontrado em sistemas que apresentam fase vidro-de-spin (*spin-glass*). Neste trabalho, usamos o algoritmo cluster de Wolff para simular a dinâmica do sistema. Empregando a técnica do Histograma obtemos as quantidades termodinâmicas de interesse e baseados na teoria de escala de tamanho finito encontramos as temperaturas críticas, os diagramas de fase e os expoentes críticos do modelo. Nossos resultados foram comparados com os obtidos pelo método da teoria de Campo Efetivo que emprega uma distribuição de probabilidade similar dentro de uma estrutura de cluster com dois spins.

Palavras-chave: Monte Carlo; teoria de campo efetivo; modelo de Ising.

The critical properties of a random mixed-bond Ising model on a cubic lattice are studied so much numerically with analytically. Analytical studies on Mixed-bond Ising model through renormalization group technique predict the existence of reentrant magnetism in certain range of values of the competition parameter α . This phenomenon typically found in systems that present spin-glass phase. In this work, did we use the algorithm cluster of Wolff to simulate the dynamics of the system. Using the technique of the Histogram obtains the thermodynamic amounts of interest and based on the theory finite size scaling found the critical temperatures, the phase diagrams and the critical exponents of the model. Our results were compared with those obtained using a new technique in effective field theory which employs similar probability distribution within the framework of two-site clusters.

Keywords: Monte Carlo method; effective field theory; Ising model.

1. INTRODUÇÃO

O estudo experimental do comportamento crítico de materiais reais é freqüentemente confrontado com a influência de impurezas. Sendo assim, é de grande importância desenvolver um sólido conhecimento teórico do efeito de tais perturbações. Esse conhecimento possibilitara uma melhor interpretação das medidas experimentais, por isso diversos modelos teóricos delineiam algum tipo de desordem [1, 2, 3]. Os dois modelos comumente usados são os de diluição por sítios e os de diluição por ligação. O modelo de diluição por sítio podem ser ilustrados através de muitas substâncias: Mn_pZn_{1-p} , $Rb_pMn_{1-p}F_4$, $Fe_pMg_{1-p}Cl_2$, entre outros. Apesar do problema de diluição por ligações mistas (*mixed-bond*) [2, 4], ser experimentalmente mais complicado encontramos um bom exemplo com o caso do $Co(S_pSe_{1-p})_2$, [5] em que átomos de cobalto interagem essencialmente através de super-troca via átomos de S ou de Se (simulando dois tipos de interação J_1 e J_2). Este modelo já havia sido estudado por aproximação de Campo Efetivo (EF) que apesar de ser uma das melhores técnicas de aproximação ainda possui um erro considerável quando comparada com expansões em série de alta temperatura e simulação Monte Carlo. O modelo de Ising utilizado neste trabalho é definido pela seguinte Hamiltoniana:

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j, \quad (1)$$

em que $\sigma_i = \pm 1$ é o autovalor do operador de spin no i -ésimo sítio, o somatório é realizado em todos os pares primeiros vizinhos, e J_{ij} a interações de troca entre os spins, esta por sua vez é dada pela distribuição de probabilidade:

$$P(J_{ij}) = p\delta(J_{ij} - J_1) + (1 - p)\delta(J_{ij} - J_2), \tag{2}$$

onde p é o parâmetro de diluição, e para uma melhor apresentação do trabalho defini-se uma constante $\lambda = \frac{J_1}{J_2}$.

Neste trabalho buscamos traçar os diagramas através de simulação Monte Carlo e compará-los com os resultados obtidos com EF. Simultaneamente, realizamos uma análise das magnetizações de sub-redes, susceptibilidade magnética, energia, calor específico e expoentes críticos.

2. MÉTODO

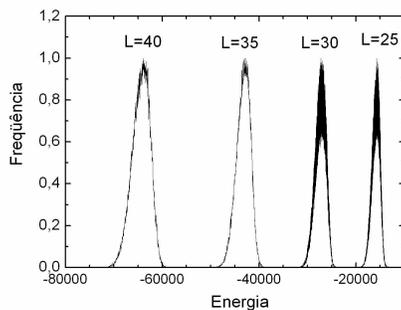
Para simular o referido modelo, foi utilizada uma matriz representando as variáveis de spin e outra representando as interações entre os sítios da rede. Os sítios foram organizados numa rede cúbica com tamanho linear L . Os valores de L variaram num intervalo de $L=10$ a $L=40$. A este modelo também se aplicou condições de contorno periódicas.

O primeiro passo é criar a amostra a ser simulada, esta etapa consiste em diluir a matriz que representa as ligações entre os sítios. A diluição é feita de acordo com o valor do parâmetro de diluição p , dessa forma, preenche-se a matriz com $p \times 3L^3$ ligações J_1 e $(1-p) \times 3L^3$ ligações J_2 distribuídas aleatoriamente.

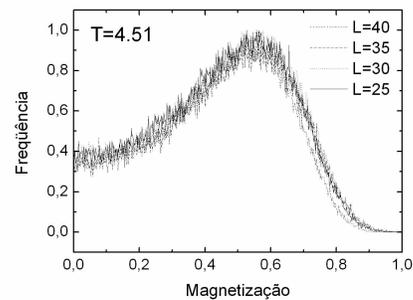
Uma vez criada a amostra, escolhe-se uma temperatura e inicia-se a simulação com os spins organizados numa direção. A cada passo de Monte Carlo uma nova configuração é gerada com a inversão (*flipping*) de um agrupamento (*cluster*) de spins, dessa forma a correlação entre as configurações sucessiva é minimizada. Os clusters são formados usando os passos do algoritmo de Wolff [6].

Para cada amostra foram realizados 5×10^3 passo de Monte Carlo (MCs), sendo desprezados os primeiros $2,5 \times 10^3$ MCs necessários para o sistema atingir o estado estacionário. A escolha do número de MCs é justificada pelo comportamento do tempo de correlação da energia com função de p e L . Considerou-se neste trabalho um passo de Monte Carlo como a formação e inversão de um cluster criado a partir de um sítio escolhido aleatoriamente na rede.

Após o sistema atingir a estabilidade, utilizando as configurações geradas com o algoritmo de Wolff constrói-se um histograma dos valores da energia e magnetização para uma determinada temperatura (Figura 1).



(a) Histograma da Energia



(b) Histograma da Magnetização

Figura 1: Histograma com 125×10^4 pontos obtidos da simulação Monte Carlo

Considerando o histograma obtido como uma densidade de estados na temperatura T_0 pode-se encontrar a probabilidade da magnetização e da energia para uma temperatura arbitraria que é dada pela Equação:

$$P_T(E, M) = \frac{H(E, M)e^{E\Delta T}}{\sum H(E, M)e^{E\Delta T}}, \tag{3}$$

A Equação (3) foi utilizada para encontrar as medias das derivadas termodinâmicas que dependam da energia ou da magnetização, não só para a temperatura na qual o histograma foi calculado, mas para qualquer temperatura da vizinhança (Figura 2). Portanto podemos calcular as quantidades termodinâmicas de interesse como: magnetização média por spin (Equação 4), susceptibilidade magnética (Equação 5), cumulante de binder de quarta ordem (Equação 6).

$$M = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n \sigma_n, \tag{4}$$

$$\chi = \frac{J}{K_B T} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \tag{5}$$

$$U_4 = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3 \langle M^2 \rangle^2} \tag{6}$$

Nas transições de fase de segunda ordem, de acordo com a teoria de escala de tamanho finito, o comportamento crítico do sistema no limite termodinâmico pode ser extraído da dependência de uma parte singular da energia livre com o tamanho do sistema. Assim sendo, admitindo a homogeneidade do sistema e usando L e T com variáveis temos as seguintes relações de escala nas vizinhanças da temperatura crítica estacionária T_C .

$$M = L^{-\beta/\nu} M_0(\varepsilon L^{-1/\nu}), \tag{7}$$

$$\chi = L^{-\gamma/\nu} \chi_0(\varepsilon L^{-1/\nu}) \tag{8}$$

$$\frac{\partial}{\partial T} U_4 = \frac{L^{-1/\nu}}{T_C} U_4^0(\varepsilon L^{-1/\nu}) \tag{9}$$

$$T_c(L) = T_C + qL^{-1/\nu} \tag{10}$$

em que $\varepsilon = \frac{T - T_C}{T_C}$. Pode-se, portanto, determinar o expoente crítico ν , β e γ do gráfico de *log-log* das relações citadas além da temperatura crítica pela Equação (10).

3. RESULTADOS E DISCUSSÕES

O diagrama de fase do modelo em estudo foi obtido numericamente da localização do máximo da susceptibilidade magnética $\chi_L(T)$ (Figura 2). Focalizou-se em $\chi_L(T)$ porque em sistemas randômicos o erro no calor específico é tipicamente maior que o da susceptibilidade.

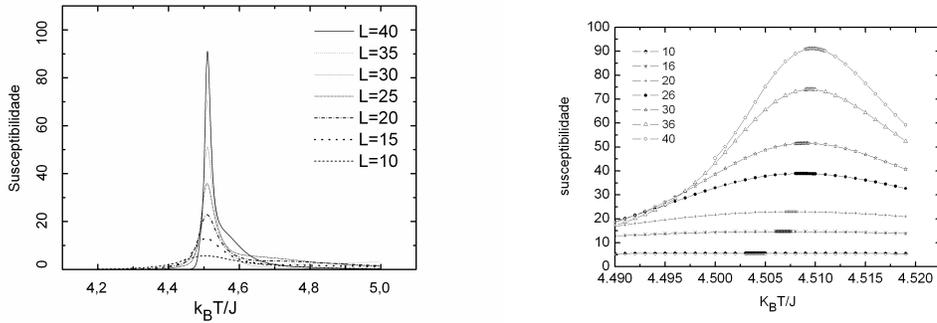
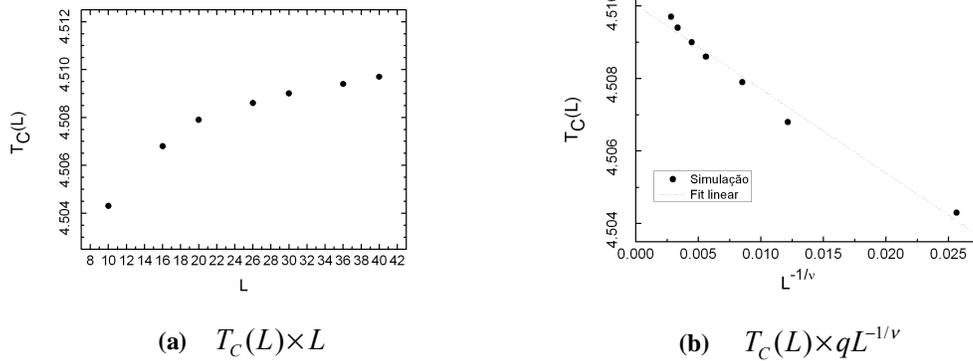


Figura 2: Susceptibilidade obtida com o método do histograma



(a) $T_C(L) \times L$

(b) $T_C(L) \times qL^{-1/\nu}$

Figura 3: Variação da temperatura crítica estimada com o tamanho de L

Na Figura 3(a) pode-se observar a dependência da temperatura crítica estimada $T_C(L)$ versus tamanho do sistema L . Esta dependência é descrita pela Equação (10) vinda da teoria de escala de tamanho finito. Para encontrar a temperatura crítica no limite termodinâmico ($L \rightarrow \infty$) calcula-se o expoente crítico ν e traça o gráfico Log-Log de $T_C(L) \times L^{1/\nu}$ sendo o coeficiente linear a temperatura crítica no limite termodinâmico (Figura 3(b)).

Variando a concentração p e mantendo λ constante, obtemos diferentes temperaturas críticas e com isso foi traçado o diagrama de fase.

Na Figura 5 temos o diagrama de fase para diferentes valores de λ . Podemos observar que os valores encontrados com a simulação são qualitativamente semelhantes aos obtidos com teoria de campo efetivo (EFT). Contudo mesmo normalizados os resultados apresentam-se quantitativamente diferentes, percebemos que quanto menor o valor de λ maior a diferença entre os resultados obtidos da simulação e os obtidos de EFT. Para valores negativos de λ encontramos a mesma tendência.

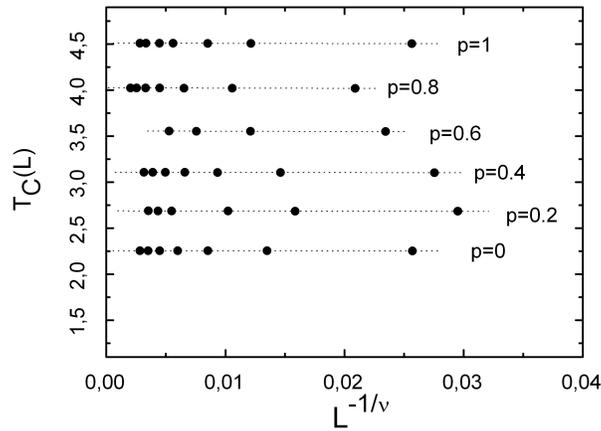


Figura 4: Variação da temperatura crítica estimada com o tamanho de L para diferentes concentrações p e $\lambda=0.5$

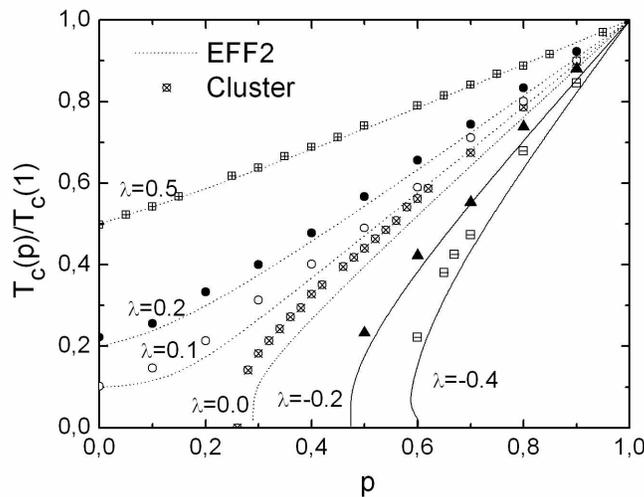


Figura 5: Diagrama de transição de fase para diferentes valores de λ .

4. CONCLUSÕES

Apresentamos, através de um estudo analítico-numérico, a influencia da diluição por ligações mistas para o comportamento termodinâmico do sistema (1) sob regime temperado ditado pela distribuição de probabilidade (2). Dentro deste contexto, obtivemos resultados satisfatórios usando o algoritmo de Wolff, a técnica do histograma e a teoria de escala de tamanho finito. Mostramos que as técnicas utilizadas para estudar a propriedades foram apropriadas para tratar o problema *Mixed-bond*. Observamos que os resultados obtidos com a técnica aproximação de Campo Efetivo são qualitativamente semelhantes aos obtidos com simulação Monte Carlo, contudo as diferenças entre os resultados obtidos com as duas técnicas aumentam com o valor de λ .

AGRADECIMENTOS

Ao professor João Antonio Plascak pela contribuição fundamental para a realização desse trabalho.

Os autores J. B. Santos Filho e N. O. Moreno agradecem o apoio parcial das agências CAPES e CNPq, respectivamente.

-
1. P.E. Berche, C. Chatelain, B. Berche, W. Janke, *Eur. Phys. J. B* 38, 463-474 (2004).
 2. B. Santos Filho, N.O. Moreno, D.F. de Albuquerque, A.S. de Arruda, aceito em *Phys. B* (2007).
 3. C.F. Baillie and P.D. Coddington, *Phys. Rev. B* 43, 10617 (1991).
 4. E. F. Sarmiento, Constantino Tsallis, *Phys. Rev. B* 27, 9, (1983).
 5. K. Adachi, K Sato, M. Matsuura, and M. Ohashi, *J. Phys.Soc.Jpn.* 29, 323 (1970).
 6. U. Wolff, *Phys. Rev. Lett.* 62, 4, 361 (1989).