

# Metamagneto Ising 3D com Diluição por Quebra de Ligação

J. B. dos Santos-Filho<sup>1</sup>, N. O. Moreno, D. F. de Albuquerque<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais, 30161-970, Belo Horizonte - MG, Brasil

<sup>2</sup> Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe, 49100-000, São Cristóvão-SE, Brasil

<sup>3</sup> Departamento de Matemática, Universidade Federal de Sergipe, 49100-000, São Cristóvão-SE, Brasil

santosfilho@ufmg.br

(Recebido em 24 de julho de 2008; aceito em 21 de agosto de 2008)

---

O Neste trabalho estudamos as propriedades do metamagneto de Ising numa rede tridimensional com diluição por quebra de ligação utilizando simulação Monte Carlo. Utilizando o algoritmo de Glauber obtivemos médias termodinâmicas como: susceptibilidade, magnetização alternada, energia e calor específico. Dos pontos de máximo das curvas de susceptibilidade e das curvas de histerese localizamos os pontos críticos e o ponto tricrítico, traçando dessa forma o diagrama de transição de fase.

Palavras chaves: metamagneto, Monte Carlo, diluição por ligação

In this paper we showed the properties of the Ising metamagnetic of three-dimensional lattice with dilution for break bond by Monte Carlo simulation. Using the Glauber algorithm we obtained thermodynamic averages as: susceptibility, staggered magnetization, energy and specific heat. Of the points of maximum of the susceptibility curves and of the hysteresis curves we located the critical and the tricritical points, drawing in that way the phase transition diagram.

Keywords: metamagnetc, Monte Carlo, bond problem.

---

## 1. INTRODUÇÃO

Metamagneto é uma classe de materiais (sólidos) antiferromagnéticos anisotrópicos. Estes sólidos, tais como  $\text{FeCl}_2$  (cloreto ferroso),  $\text{FeBr}_2$  (brometo ferroso),  $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  (nitrato de níquel di-hidratado), DAG (Dysprosium Aluminium Garnet), possuem uma estrutura de camadas alternadas com uma fraca interação antiferromagnética entre as camadas e uma forte interação ferromagnética intra-camada [1]. Devido a esta estrutura eles apresentam um comportamento não ortodoxo, isto é, podem se comportar de diferentes maneiras: como um ferromagneto ou como um antiferromagneto. À campo nulo ou suficientemente baixo, o metamagneto comporta-se como um antiferromagneto de Ising com uma transição de fase antiferromagnética de segunda ordem. No entanto, para campos suficientemente grandes, a ordem desta transição muda de segunda para primeira ordem separada por um ponto tricrítico.

A posição do ponto tricrítico bem como a curva de transição de fase pode sofrer deslocamento caso a estrutura cristalina não esteja com integra simetria translacional [2-4]. Como se sabe, na natureza, mesmo em cristais produzidos em laboratórios está presente defeitos e impurezas. A presença destas desordens tende a provocar além da alteração no diagrama de fase, o amolecimento da transição de primeira ordem. A influência desses defeitos em vários materiais tem sido estudados através de diluição por sítios, por ligação e pela introdução de um campo aleatório [1, 5-7].

Neste trabalho, estudamos o comportamento de algumas propriedades termodinâmicas do metamagneto de Ising tridimensional com diluição de ligação através de simulação Monte Carlos.

carbono, são os de maior predominância [5]. O fluxo de evaporação de água é um outro parâmetro que, quando comparado ao da pele humana, também apresenta bastante semelhança, embora a permeabilidade da água através da pele de cobra de várias espécies é especialmente dependente das condições de habitat. No entanto, de maneira geral, existe uma grande similaridade na permeabilidade da água entre a pele de cobra e o estrato córneo humano. Fato que sugere a utilização da pele desse animal como modelo de estrato córneo para estudos de permeação, sendo a espécie *Elaphe obsoleta* o modelo mais utilizado [4].

Neste estudo, a espécie *Boa constrictor* foi investigada devido à sua disponibilidade, sendo avaliadas as características de permeabilidade da indometacina em solução. A indometacina foi selecionada como modelo de fármaco para permeação por ser bastante utilizada em estudos que caracterizam outras espécies de pele de cobra como modelo de estrato córneo [6].

## 2. MOBELOS E MÉTODOS

O modelo do metamagneto de Ising utilizado neste trabalho é definido pela seguinte Hamiltoniana:

$$H = -\sum_{i,j} J_{ij}^1 \sigma_i \sigma_j + \sum_{i,j} J_{ij}^2 \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \quad (1)$$

Onde  $\sigma_i = \pm 1$  são as variáveis de spin,  $h$  é o campo externo,  $J_{ij}^1$  é a energia de interação de troca entre vizinhos de um mesmo plano,  $J_{ij}^2$  é a interação de troca entre vizinhos de planos paralelos, sendo  $J_{ij}^1$  e  $J_{ij}^2 \geq 0$ , estando estes diluídos de acordo com a seguinte distribuição de probabilidade:

$$P(J_{ij}^a) = p\delta(J_{ij}^a - J^a) + (1-p)\delta(J_{ij}^a) \quad (2)$$

Baseado neste modelo, utilizamos o algoritmo de Glauber [5] para simular a dinâmica do sistema. Para isso consideramos os sítios distribuídos numa rede cúbica com tamanho linear  $L$  variando num intervalo de  $L=16$  a  $L=42$ . Foram simuladas 1000 amostras para cada valor de temperatura, sendo que para cada amostra foram realizados  $5 \times 10^4$  passo de Monte Carlo (MCs), são desprezados os primeiros  $2,5 \times 10^4$  MCs, que é o tempo necessário para o sistema atingir a estabilidade térmica. Uma vez alcançada a estabilidade calculamos a médias termodinâmicas de interesse. O passo de monte Carlo é definido como uma varredura completa na rede.

Para calcularmos os parâmetros de ordem dividimos a rede em duas sub-redes A e B. Estas são formadas por planos paralelos de forma sítios pertencentes a planos vizinhos pertencem a sub-redes diferentes. Dessa forma calculamos a magnetização em cada sub-rede

$$m_A = \left[ \frac{2}{N} \left\langle \sum_{i \in A} \sigma_i \right\rangle \right]_p \quad (3.a)$$

$$m_B = \left[ \frac{2}{N} \left\langle \sum_{i \in B} \sigma_i \right\rangle \right]_p \quad (3.b)$$

onde  $N=L^3$  é o número de sítios da rede,  $\langle \dots \rangle$  representa a média térmica e  $[\dots]_p$  representa a média configuracional.

Assim calculamos a magnetização alternada  $m_s = m_A - m_B$  sendo esta o parâmetro de ordem da fase superantiferromagnética e a magnetização  $m = m_A + m_B$  que é os parâmetros de ordem para a fase ferromagnética.

### 3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Na Figura 1 observamos as curvas de magnetização em função do campo externo para diferentes temperaturas. Verifica-se que para baixas temperaturas há uma transição de primeira ordem, ao aumentar a temperatura esta transição se torna mais suave até atingir uma transição de segunda ordem. Um efeito semelhante ocorre diminuindo a concentração das interações de troca do sistema, causando assim um “amolecimento” da transição de primeira ordem, que pode ser observado na Figura 2. Para um valor muito baixo de concentrações  $p$  o sistema se tornaria paramagnético.

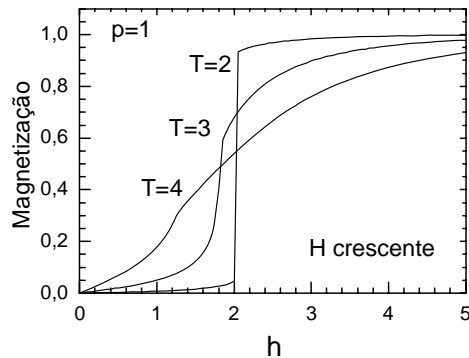


Figura 1: Curvas da magnetização em função do campo externo  $h$  para diferentes valores de temperatura.

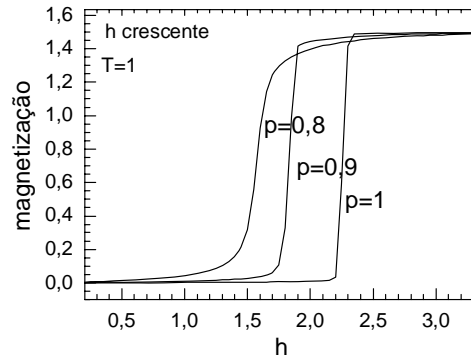


Figura 2: Curvas da magnetização como função do campo para diferentes valores de diluição  $p$ , mantendo a temperatura constante.

Na Figura 3 observamos o comportamento da magnetização e da magnetização alternada com a variação da temperatura. Observamos que a ordem superantiferromagnética caracterizada pela magnetização alternada diferente de zero é destruída com o aumento da temperatura. Na presença de campo magnético a temperatura de transição é menor. Localizando a temperatura de transição para diferentes valores de campo magnético traçamos o diagrama de fase apresentado na figura 4. Observamos que o diagrama de fase apresenta uma linha de transição de primeira ordem separada da linha de transição de segunda ordem por um ponto tricrítico. Observamos no diagrama de fase que há um deslocamento da curva com a diluição das ligações bem como do ponto tricrítico. Para a localização do ponto tricrítico, traçamos as curvas de histerese [6] apresentadas na figuras 5 e 6.

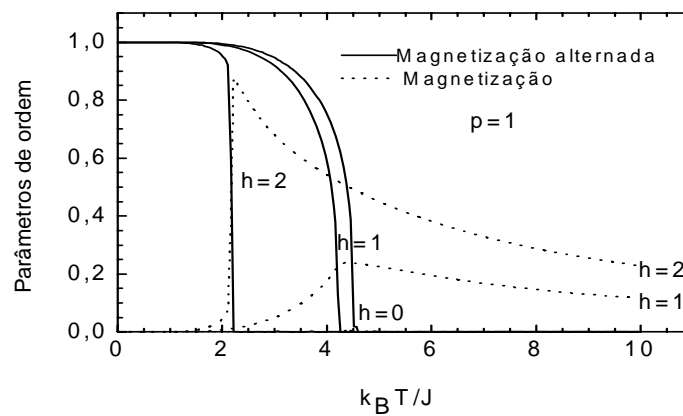


Figura 3: Curvas dos parâmetros de ordem em função da temperatura com campo externo  $h=0; 1$  ou  $2$

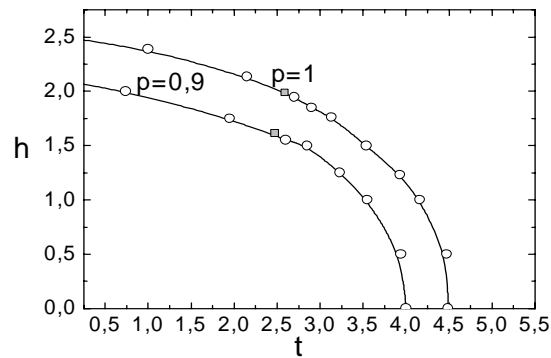


Figura 4: Diagrama de fase do modelo Metamagneto de Ising, Onde as linhas cheias representam a transição de fase de segunda ordem, as linhas pontilhadas a transição de primeira ordem e o ponto tricrítico é representado por um quadrado.

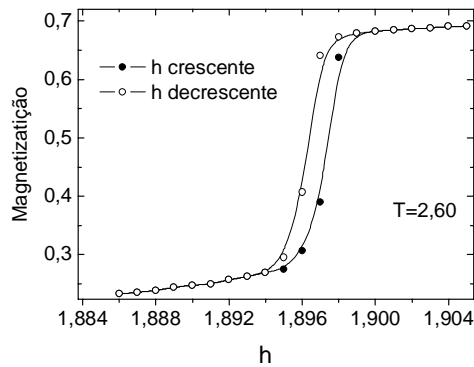


Figura 5: Curva de histerese para  $T < T_{\text{tricritical}}$

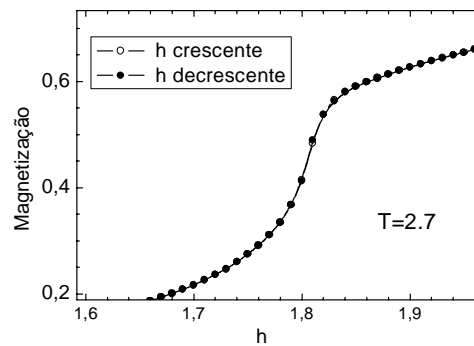


Figura 6: Curva de histerese para  $T > T_{\text{tricritical}}$

#### 4. CONCLUSÃO

Apresentamos, através de um estudo computacional, a influência da presença de uma diluição aleatória no comportamento do metamagneto de Ising Eq.(1) sob regime temperado ditado pela distribuição de probabilidade Eq.(2). Dentro deste contexto, obtivemos resultados satisfatórios usando o algoritmo de Glauber. Mostramos que as técnicas utilizadas para estudar a propriedades foram apropriadas para tratar o problema.

Semelhante ao que ocorre para outros materiais, no metamagneto a diluição por quebra de ligações altera o diagrama de transição de fase e a posição do ponto tricrítico. Neste problema a diluição do metamagneto produziu resultados muito semelhantes aos de metamagneto na presença de um campo aleatório [1].

1. A. Weizenmann, M. Godoy, and A. S. de Arruda, *Braz J. Phys*, 36, 3A (2006).
2. J.B. Santos-Filho, N.O. Moreno, D.F. de Albuquerque, *Physica B* 398 294–296 (2007)
3. J.B. Santos-Filho, N.O. Moreno, D.F. de Albuquerque, *SCIENTIA PLENA* v.2, n7 (2006)
4. J.B. Santos-Filho, N.O. Moreno, D.F. de Albuquerque, *SCIENTIA PLENA*. V.3, n7 (2007)
5. M. Santosand e W.Figueiredo, 62, 2. *Phys. Rev. E*. (2000)
6. A. S. de Arruda, W. Figueiredo, R. M. Sebastianes, and V. K. Saxena, *Phys. Rev. B* 39 4409 (1989)
7. J. R. L. de Almeida and D. J. Thouless, *J. Phys. A* 11, 983 (1978).