UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

INSTITUTO DE FÍSICA

Transições de Fase em Sistemas Magnéticos Dirigidos por Campos Externos

Márcio Santos

Comissão examinadora

Orientador: Prof. Dr. Mário José de Oliveira, IFUSP

Prof. Dr. Silvio R. A. Salinas, IFUSP

Prof. Dr. Domingos H. Marchetti, IFUSP

Prof. Dr. Lindberg L. Gonçalves, UFC

Prof. Dr. José R. Drugowich de Felício, FFCLRP-USP

Tese apresentada ao Instituto de Física da Universidade de São Paulo para a obtenção do título de Doutor em Ciências

Mario José de Oliveira

Prof. Sylvio Roberto Accioly Canuto
Presidente da Comissão de Pós-Graduação

São Paulo

Março de 1998

SBI-IFUSP
305M810T2797

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
ex. 1
SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO
2797
INSTITUTO DE FÍSICA

538
S237t
D
ex.1

FICHA CATALOGRÁFICA
Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Santos, Marcio

Transições de Fase em Sistemas Magnéticos Dirigidos por Campos Externos. São Paulo, 1998.

Tese Doutoramento - Universidade de São Paulo. Instituto de Física - Departamento de Física Geral.

Orientador: Prof. Dr. Mário José de Oliveira
Área de Concentração: Física do Estado Sólido.

Unitermos: 1. Dinâmica de Sistemas de Spins; 2. Transições de Fase; 3. Sistemas Magnéticos.

USP/IF/SBI-026/98

Agradecimentos

Ao Mario José de Oliveira pela paciente orientação desta tese.

Ao Wagner Figueiredo pelo constante incentivo e pelas imprescindíveis discussões e sugestões.

À Prof. Tânia Tomé pelas discussões iniciais.

À Lilian que pacientemente tem me acompanhado.

Aos colegas do curso de Pós-Graduação do Instituto de Física da USP.

Ao André pelas rápidas hospedagens.

A todos os familiares e amigos que de uma forma ou de outra contribuíram para o término deste trabalho.

A CAPES pelo auxílio financeiro.

Resumo

Neste trabalho analisamos o comportamento dinâmico de um modelo clássico e de um modelo quântico de spins na presença de um campo magnético externo. Para estudar a dinâmica de um sistema de spins clássico utilizamos um modelo de Ising bidimensional com interações entre spins primeiros vizinhos na direção vertical diferente daquelas entre spins primeiros vizinhos na horizontal. Através do formalismo da equação mestra, e considerando o processo estocático de Glauber dentro da aproximação de pares dinâmica, determinamos os diagramas de fases estacionários para o modelo na presença de campos magnéticos estáticos e oscilantes no tempo. Dependendo dos valores da razão entre os acoplamentos na horizontal e na vertical, da frequência e da amplitude do campo oscilante, obtemos diagramas de fases onde estão presentes os ordenamentos ferromagnético, paramagnético e antiferromagnético. Além disso, a transição entre as fases pode ser contínua ou descontínua dependendo dos valores dos parâmetros. O modelo também pode apresentar um comportamento tricrítico. O modelo de Ising em um campo transverso unidimensional à temperatura nula foi o modelo escolhido para estudarmos a resposta de sistemas quânticos de spins sujeitos a campos magnéticos que oscilam periodicamente no tempo. Usamos a aproximação de campo médio e simulações de Monte Carlo para determinar a linha de transição contínua entre as fases ferromagnética e paramagnética presentes no diagrama de fases dinâmico do modelo.

Abstract

In this work we have analized the dynamical behavior of a classical and of a quantum spin model subject external magnetic fields. For a better understanding of the dynamics of a classical spin system we have chosen a two-dimensional Ising model with interactions between first neighbors in the horizontal direction different from that of the vertical direction. By using the master-equation formalism and taking the stochastic Glauber process, within the dynamical pair approximation, we have determined the stationary phase diagrams of the model for static and oscillating magnetic fields. Depending on the values of the ratio between the horizontal and vertical couplings, the frequency and the amplitude of the time dependent field, we have obtained phase diagrams where the ferromagnetic, paramagnetic and antiferromagnetic phases are present. Besides, the transition between these phases can be continuous or discontinuos depending on the values of the parameters. The model may display also a tricritical behavior. We have also chosen the transverse Ising model in one dimension at zero temperature to study the response of the quantum spin systems subject to time dependent external fields. We have used the mean-field approximation and the Monte Carlo simulations to determine the continuous transition line between the ferromagnetic and paramagnetic phases.

Índice

Agradecimentos

Resumo

Abstract

1 - Introdução 1

Parte I

2 - O modelo de Ising com competição 9

2.1 - A aproximação de pares 15

3 - Ausência de campo magnético externo 23

4 - Campo magnético estático 33

5 - Campo magnético dependente do tempo 44

Parte II

6 - O modelo de Ising transverso 65

6.1 - O modelo 67

7 - Análise de campo médio 69

8 - Simulação de Monte Carlo 85

9 - Conclusões 95

APÊNDICE 99

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS 102

CAPÍTULO 1

Introdução

O estudo do comportamento dinâmico de sistemas clássicos de spins teve início na primeira metade da década de 60 quando *Glauber* [1] introduziu uma dinâmica para o modelo de Ising unidimensional cujos spins primeiros vizinhos interagiam ferromagneticamente. O modelo de Glauber descreve um sistema de Ising em contato com um reservatório térmico a uma dada temperatura. O banho térmico induz inversões dos spins da cadeia, mas somente um por vez, de tal forma que as variáveis de spin passam a ser consideradas como variáveis aleatórias temporais ou estocásticas. Utilizando-se do formalismo da equação mestra e da condição de balanceamento detalhado [2], *Glauber* propôs uma expressão para a probabilidade de transição, por unidade de tempo, de inverter um spin que leva em conta as probabilidades de equilíbrio, dadas pela distribuição de Gibbs, das configurações envolvidas no processo. Esta proposta possibilitou a resolução exata das equações de movimento da magnetização e da função de correlação entre dois spins. Entretanto, em dimensões maiores

a solução exata deste modelo ainda não foi encontrada. Os modelos de Ising descritos por esta dinâmica são conhecidos como modelos de Ising cinéticos.

Alguns anos mais tarde, *Kawasaki* [3] propôs uma taxa de transição entre estados que poderia simular um processo de difusão na rede. Nesta prescrição, ao invés de inverter o estado de um único spin, simplesmente trocam-se as posições de dois spins vizinhos que estejam em estados opostos. Infelizmente, nem mesmo em uma dimensão é possível resolver exatamente este modelo.

Apesar das dificuldades matemáticas encontradas para se resolver completamente sistemas de spins mais sofisticados, ou em dimensões maiores, muito se pode conhecer sobre suas características físicas e sobre sua evolução no tempo, estudando grandezas físicas relacionadas com a dinâmica, ou fazendo uso de aproximações. Como um exemplo do primeiro caso, pode-se determinar o expoente crítico dinâmico z [4], que mede a taxa com o qual o sistema evolui em direção aos estados estacionários próximo a uma transição de fases. A determinação deste expoente permite a classificação dos sistemas físicos nas classes de universalidade dinâmica. Em geral, o expoente z além de depender das propriedades estáticas do sistema depende também dos aspectos dinâmicos, através das leis de conservação que definem a dinâmica [5-9]. Exemplos de aproximações usadas para resolver o conjunto de equações de movimento são dados mais abaixo.

Um aspecto interessante no comportamento dinâmico de sistemas de spins aparece quando o sistema é colocado em contato com mais de um reservatório térmico. Neste caso é possível simular a competição entre diferentes dinâmicas, ou mesmo, entre dinâmicas iguais mas em diferentes temperaturas. No primeiro caso têm-se, por exemplo, o

modelo estudado por *Gonzales-Miranda* e colaboradores[10]. Eles simularam a competição entre as dinâmicas de Glauber, a uma dada temperatura, e de Kawasaki, a temperatura infinita, e determinaram o diagrama de fases no plano temperatura versus probabilidade de ocorrência do processo de Kawasaki para o modelo de Ising ferromagnético. O diagrama de fases por eles obtido, via simulação de Monte Carlo, exibe um ponto tricrítico conectando uma linha de transição contínua e uma linha de transição descontínua entre as fases paramagnética e ferromagnética. Utilizando-se do método da aproximação de pares dinâmica [11,12], *Dickman* [13] reproduziu o diagrama de fases deste modelo e obteve o mesmo comportamento tricrítico.

Por sua vez, *Tomé* e *de Oliveira* [14] consideraram um sistema ferromagnético de spins de Ising em contato com um banho térmico, descrito pela dinâmica de Glauber, e sujeito a um fluxo externo de energia, que pode ser simulado pela dinâmica de Kawasaki. Utilizando-se da aproximação de pares dinâmica em um sistema bidimensional mostraram que à medida que o fluxo de energia aumenta, o sistema pode passar de uma fase ferromagnética para uma fase paramagnética, e desta para um estado ordenado antiferromagneticamente, de forma que neste modelo está presente o fenômeno da auto-organização [15]. Entretanto, se o modelo considerado for antiferromagnético, como aquele estudado por *Grandi* e *Figueiredo* [16] o aumento do fluxo externo só é capaz de fazer o sistema passar da fase antiferromagnética para a fase paramagnética. Em ambos os casos simulações de Monte Carlo confirmam os diagramas obtidos via aproximação de pares dinâmica [17,18].

Neste ponto é importante mencionar que, dentro da aproximação de pares dinâmica, a versão unidimensional do modelo estudado por *Tomé* e *de Oliveira* apresenta o

fenômeno da auto-organização, enquanto em simulações de Monte Carlo ele está ausente [19]. Assim, apesar da aproximação de pares fornecer a temperatura crítica exata do modelo de Ising unidimensional em equilíbrio, ela prediz resultados errados quando aplicada a situações de não equilíbrio em uma dimensão.

Outro conjunto interessante de situações que pode levar a estados de não-equilíbrio estacionários decorre da aplicação de um campo magnético dependente do tempo sobre um sistema de spins de Ising em contato com um reservatório de calor. Em geral, as teorias usadas para investigar o comportamento dinâmico de um modelo como este são de dois tipos: num deles, as teorias incorporam as flutuações como no modelo n-vetorial estudado por *Rao*, *Krishnamurthy* e *Pandit*, no limite $n \to \infty$, usando o formalismo da equação de Langevin para descrever o modelo [20]. Incluem-se também nesta categoria as simulações de Monte Carlo [21-23]. Já no outro tipo desconsideram-se as flutuações [24-26] de forma que a dinâmica do sistema é reduzida a uma única equação diferencial. Nesta classe inclui-se o trabalho de *Tomé* e *de Oliveira* [25] os quais, utilizando-se da aproximação de campo médio, estudaram os estados estacionários do modelo de Ising cinético sujeito a um campo magnético externo que varia periodicamente no tempo em torno de um valor médio que é igual zero. De acordo com seus resultados a magnetização instantânea do sistema oscila em torno de zero para valores grandes da amplitude do campo e da temperatura, enquanto que em baixas temperaturas e pequenas amplitudes do campo, ela oscila em torno de um valor médio diferente de zero. A transição entre um e outro regime pode ser contínua ou descontínua dependendo dos valores da temperatura e da amplitude do campo oscilante, de forma que também neste sistema o comportamento tricrítico está presente. Esta transição

foi posteriormente estabelecida para sistemas que incorporam flutuações via simulação de Monte Carlo [21,27].

Uma forma alternativa de incluir algum grau de flutuação nestes modelos é considerar a aproximação de pares dinâmica para desacoplar o conjunto de equações de movimento advindas do formalismo da equação mestra. Assim, por exemplo, *Hoenicke*, *D'Ajello*, e *Figueiredo* [28] estudaram um sistema de spins de Ising em contato com um banho térmico, cujos spins primeiros vizinhos interagiam antiferromagneticamente e sob a influência de um campo magnético que variava senoidalmente no tempo. Seus resultados indicam que a transição entre os regimes dinamicamente ordenado e desordenado é sempre contínuo quaisquer que sejam os valores da amplitude do campo e da temperatura.

Em virtude da sua estreita ligação com o modelo de Ising, o modelo de Ising em um campo transverso [29] tem sido usado para compreender o comportamento dinâmico de sistemas quânticos de spins quando em contato com um reservatório de calor e/ou sujeito a influência de campos externos dependentes do tempo [27,30,31]. Em geral, os diagramas de fases dinâmicos destes modelos são obtidos somente via aproximação de campo médio, e podem exibir ou não comportamento tricrítico dependendo da direção de atuação do campo dependente do tempo.

Um fenômeno de não-equilíbrio típico que ocorre quando campos oscilantes são aplicados sobre sistemas clássicos e quânticos de spins é a chamada histerese magnética. Seu aparecimento está conectado com a resposta tardia do sistema ao campo oscilante devido a algum processo interno de relaxamento. A energia dissipada nestes sistemas, dada pela área sob a curva de histerese, pode ser relacionada com os parâmetros do

modelo através da determinação de expoentes convenientes via leis de escalas apropriadas [20,27,30,31].

Como vimos então, uma série de situações podem levar sistemas magnéticos clássicos e quânticos para estados estacionários de não-equilíbrio que diferem bastante de seus estados de equilíbrio. É nosso interesse neste trabalho procurar compreender melhor os mecanismos que levam tais sistemas para estes novos estados. Assim, na primeira parte deste trabalho, um modelo de Ising numa rede quadrada é estudado através do formalismo da equação mestra, considerando o processo estocástico de Glauber dentro da aproximação de pares dinâmica. Esta aproximação é responsável pela inclusão de algum grau de correlação no modelo. Levamos em conta interações de troca anisotrópicas entre spins primeiros vizinhos, de forma que o modelo de Ising cinético é um caso particular deste modelo.

Após a apresentação do modelo e do uso da aproximação de pares dinâmica para desacoplar o conjunto de equações de movimento, realizados no capítulo 2, passamos a estudar, no capítulo 3, os estados estacionários de equilíbrio do modelo na ausência de um campo magnético externo. No capítulo 4 apresentamos os resultados obtidos pela análise dos estados estacionários de equilíbrio quando um campo magnético estático é aplicado sobre o sistema de spins, particularizado para representar uma situação metamagnética. Para finalizar esta primeira parte estudamos no capítulo 5 o modelo apresentado no capítulo 2 sob a influência de um campo magnético dependente do tempo. Analisamos os estados estacionários de não-equilíbrio e fomos capazes de determinar os diagramas de fases dinâmicos para os diversos parâmetros envolvidos no modelo.

A segunda parte deste trabalho é totalmente dedicada ao estudo do modelo de Ising em um campo transverso na presença de um campo magnético longitudinal que varia periodicamente no tempo em torno de um valor médio zeroà temperatura nula. No capítulo 6 introduzimos o modelo e justificamos a razão de sua escolha para compreender melhor os processos que ocorrem no interior de um sistema quântico dinâmico. A seguir, no capítulo 7, apresentamos os resultados que foram obtidos para este modelo na aproximação de campo médio, enquanto, no capítulo 8, analisamos o mesmo modelo via simulações de Monte Carlo.

Finalmente, no capítulo 9, discutimos as principais conclusões provenientes da análise dos estados estacionários destes dois modelos, nas várias situações estudadas, e apresentamos as perpectivas para a realização de futuros trabalhos nessa linha.

Parte I

Modelo de Ising anisotrópico dirigido por campos externos

CAPÍTULO 2

O Modelo de Ising com anisotropia

O modelo que escolhemos para estudar o comportamento crítico de sistemas magnéticos é baseado no modelo de Ising bidimensional formado por duas subredes intercaladas como mostrado na figura 2.1. Em cada um dos $N = L^2$ sítios de uma rede $L \times L$ colocamos um spin de Ising que pode assumir os valores ± 1. O caráter metamagnético para este sistema de spins aparece devido as diferentes interações de troca entre spins primeiros vizinhos. Em nosso modelo, o acoplamento entre os spins primeiros vizinhos de uma mesma subrede é dado por J_1, enquanto que spins pertencentes a subredes diferentes possuem um valor para a interação de troca dada por J_2. Este modelo pode ser considerado um modelo para metamagnetos quando um dos acoplamentos for ferromagnético e o outro antiferromagnético. Desta forma podemos escrever o seguinte hamiltoniano para o modelo:

$$\mathcal{H} = -\sum_{i,j} \sigma_{i,j}(J_1\sigma_{i+1,j} + J_2\sigma_{i,j+1} + H), \tag{2.1}$$

onde $\sigma_{i,j}$ são as variáveis de spin, e J_1 e J_2 são as integrais de troca mencionadas acima.

Nessa equação H é um campo magnético uniforme aplicado ao sistema. Assumimos que o sistema possui invariância translacional a fim de considerar condições de contorno periódicas

O sistema de spins assim definido é colocado em contato com um reservatório térmico a uma temperatura T. A influência deste banho térmico sobre o sistema de spins se faz sentir nas mudanças de estado que são provocadas nos spins ao longo do tempo, de tal forma que as configurações de spins do sistema vão sendo continuamente modificadas no tempo. Nós associamos a cada uma das 2^N possíveis configurações do sistema de spins uma probabilidade $P(\sigma, t)$ de encontrar o sistema no estado $\sigma = (\sigma_{1,1}, \sigma_{1,2}, ..., \sigma_{i,j}, ...\sigma_{L,L})$ no instante t.

Naturalmente, a evolução temporal de $P(\sigma, t)$ deve levar em conta as taxas de entrada e de saída da configuração de referência σ. Assim, se $W(\sigma, \sigma')$ é a probabilidade condicional de transição, por unidade de tempo, para o sistema ir do estado σ para o estado σ', dado que o sistema esteja em σ, o produto $P(\sigma, t)W(\sigma, \sigma')$ representa a taxa de saída do estado σ e entrada em σ'. Por outro lado, o produto $P(\sigma', t)W(\sigma', \sigma)$ deve representar a taxa de entrada nesta mesma configuração saindo de σ'. Se levarmos em conta que todas as configurações restantes podem levar a configuração σ, ou dela derivar, podemos escrever a equação de evolução para $P(\sigma, t)$ como a diferença entre as taxas de entrada e de saída, somadas sobre todas as possíveis configurações, ou seja,

$$\frac{dP(\sigma, t)}{dt} = \sum_{\sigma'} [P(\sigma', t)W(\sigma', \sigma) - P(\sigma, t)W(\sigma, \sigma')]. \tag{2.2}$$

Esta equação é conhecida como equação mestra [2] e governa a evolução temporal dos estados do sistema.

Nós estamos interessados em obter as propriedades físicas do sistema no

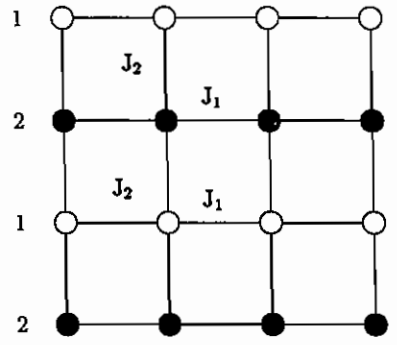

Figura 2.1: Representação esquemática do sistema de spins formado por duas subredes intercaladas. J_1 é o acoplamento intrasubrede e J_2 o acoplamento intersubrede.

estado estacionário, onde o lado esquerdo da equação mestra é nulo. Isto significa dizer que, quando o estado estacionário é atingido, a soma sobre todas as transições, por unidade de tempo, de qualquer estado σ' para σ deve ser balanceada pela soma de todas as transições por unidade de tempo de σ para σ'. Entretanto, quando a condição de balanceamento detalhado (CBD) [2] é válida, o que ocorre para sistemas em equilíbrio termodinâmico, este balanceamento se dá para cada par σ e σ' isoladamente, isto é:

$$P_{eq}(\sigma)W(\sigma,\sigma') = P_{eq}(\sigma')W(\sigma',\sigma)\,, \tag{2.3}$$

onde

$$P_{eq}(\sigma) \propto e^{-\beta\mathcal{H}}\,, \tag{2.4}$$

é a distribuição de probabilidade de Gibbs e $\beta = 1/k_BT$ onde k_B é a constante de Boltzmann.

Em nosso modelo a probabilidade de transição por unidade de tempo entre dois estados segue a bem conhecida dinâmica de Glauber [1]. Nesta prescrição, a

mudança de um estado para outro ocorre devido somente a inversão de sinal de um único spin em cada instante de tempo. Desta forma a probablidade de transição, por unidade de tempo, pode ser escrita como [14,32]:

$$W(\sigma,\sigma') = \sum_{i,j} \delta_{\sigma_{1,1},\sigma'_{1,1}} \delta_{\sigma_{1,2},\sigma'_{1,2}} ... \delta_{\sigma_{i,j},-\sigma'_{i,j}} ... \delta_{\sigma_{L,L},\sigma'_{L,L}} w_{i,j}(\sigma)\,, \tag{2.5}$$

onde $\delta_{\sigma_{i,j},\sigma'_{i,j}}$ são funcões delta de Kronecker e $w_{i,j}(\sigma)$ é a probabilidade, por unidade de tempo, de levar o spin $\sigma_{i,j}$ para $-\sigma_{i,j}$. Substituindo a probabilidade de transição por unidade de tempo acima na equação mestra (2.2), obtemos uma equação mestra particularizada para a dinâmica de Glauber da seguinte forma:

$$\frac{dP(\sigma,t)}{dt} = \sum_{i,j} \left[P(\sigma^{i,j},t) w_{i,j}(\sigma^{i,j}) - P(\sigma,t) w_{i,j}(\sigma)\right], \tag{2.6}$$

onde os estados

$$\sigma = (\sigma_{1,1}, \sigma_{1,2}, ..., \sigma_{i,j}, ..., \sigma_{L,L})\,,$$

e

$$\sigma^{i,j} = (\sigma_{1.1}, \sigma_{1.2}, ..., -\sigma_{i,j}, ..., \sigma_{L,L})\,,$$

diferem apenas pela inversão de sinal do spin $\sigma_{i,j}$.

Uma expressão explícita para a probabilidade de transição por unidade de tempo pode ser obtida se nós utilizamos a CBD (2.3), particularizada para a prescrição de Glauber, após a substituição da hamiltoniana (2.1) na distribuição de equilíbrio de Boltzmann (2.4). Após algumas manipulações algébricas é possível mostrar que

$$w_{i,j}(\sigma) = \frac{1}{2\tau}\{1 - \sigma_{i,j} \tanh\left[\frac{1}{k_B T}(J_1(\sigma_{i-1,j} + \sigma_{i+1,j}) + J_2(\sigma_{i,j-1} + \sigma_{i,j+1}) + H)\right]\}, \tag{2.7}$$

onde τ é o tempo de relaxação para um único spin.

Esta expressão representa na realidade uma das possíveis escolhas para a probabilidade de transição entre os estados σ e σ' que leva ao equilíbrio termodinâmico no limite de tempos muitos grandes. Isto ocorre pois, para satisfazer a CBD basta somente que a razão entre as probabilidades de dois estados estacionários seja igual ao inverso da razão entre as respectivas probabilidades de transição por unidade de tempo.

A simples existência de uma expressão explícita para a taxa de transição entre os estados não assegura uma solução exata para a equação mestra. Entretanto, ela passa a ser útil quando utilizamos formas alternativas de acompanhar a evolução do sistema em direção aos estados estacionários. Aqui, nós seguimos o formalismo empregado por *Glauber* [1] para estudar o modelo de Ising ferromagnético unidimensional. Nesse formalismo a probabilidade $P(\sigma, t)$ é reescrita em outra forma a partir da seguinte identidade:

$$P(\sigma_1, \sigma_2, ..., \sigma_N, t) = \frac{1}{2^N}\{\sum_{\{\sigma'\}}(1+\sigma_1\sigma_1')(1+\sigma_2\sigma_2')...(1+\sigma_N\sigma_N')P(\sigma_1', \sigma_2', ..., \sigma_N')\}. \quad (2.8)$$

Como pode ser visto na equação acima, as variáveis de spin foram reindexadas para um único índice a fim de facilitar o seu manuseio. É fácil observar que se $\sigma_i \neq \sigma_i'$, o termo $(1+\sigma_i\sigma_i')$ é nulo. Por outro lado ele é igual a unidade quando as duas variáveis são iguais. Assim o lado esquerdo é exatamente igual ao lado direito quando realizamos a soma sobre as 2^N possíveis configurações σ'.

Se, ao invés de somarmos, efetuarmos o produto dos N termos dentro do somatório, obtemos a seguinte relação :

$$P(\sigma_1, \sigma_2, ..., \sigma_N, t) = \frac{1}{2^N}\{1 + \sum_i \sigma_i m_i + \sum_{i,j} \sigma_i\sigma_j r_{i,j} + ...\}, \quad (2.9)$$

onde

$$m_i = \sum_{\{\sigma\}} \sigma_i P(\sigma_1, \sigma_2, ..., \sigma_N, t)\,, \tag{2.10}$$

e

$$r_{i,j} = \sum_{\{\sigma\}} \sigma_i \sigma_j P(\sigma_1, \sigma_2, ..., \sigma_N, t)\,, \tag{2.11}$$

são os valores esperados de somente um e de um par de spins do sistema, respectivamente. Assim, a determinação destas duas funções, juntamente com a solução de todas as outras funções de correlação, fornece uma expressão exata para a probabilidade $P(\sigma, t)$. A obtenção de equações de evolução para todas as funções de correlação pode ser feita da seguinte maneira: Seja $g(\sigma)$ uma função qualquer dos spins do sistema. Multiplicando ambos os lados da equação mestra (2.6) por $g(\sigma)$ e somando sobre todas as possíveis configurações de spins encontramos que

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\sum_{\{\sigma\}}[g(\sigma)P(\sigma,t)] = \sum_{\{\sigma\}}\Big(&+ \sum_i g(\sigma)P(\sigma^i,t)w_i(\sigma^i) \\ &- \sum_i g(\sigma)P(\sigma,t)w_i(\sigma)\Big). \end{aligned} \tag{2.12}$$

O primeiro termo do lado direito desta equação pode ter a soma sobre σ_i trocada por uma soma sobre $-\sigma_i$, sem que o resultado final seja alterado. Se isto é realizado e o somatório sobre todas as possíveis configurações efetuado, podemos , finalmente, mostrar que [32]

$$\frac{d < g(\sigma) >}{dt} = \sum_i < [g(\sigma^i) - g(\sigma)]w_i(\sigma) >, \tag{2.13}$$

fornece a evolução temporal para qualquer função que dependa de σ.

Em particular, se $g(\sigma) = \sigma_i$, ou então, o produto entre dois spins quaisquer, as equações de evolução tanto para a magnetização $m_i =< \sigma_i >$, como para a função

de correlação $r_{ij} =< \sigma_i \sigma_j >$ são dadas por

$$\frac{dm_i}{dt} = -2 < \sigma_i w_i(\sigma) > , \tag{2.14}$$

e

$$\frac{dr_{ij}}{dt} = -2 < \sigma_i \sigma_j [w_i(\sigma) + w_j(\sigma)] > . \tag{2.15}$$

O mesmo procedimento pode ser seguido para obter a equação de evolução para qualquer outra função de correlação de ordem superior a dois.

Entretanto, a substituição da probabilidade de transição $w_i(\sigma)$, dada pela equação (2.7), nas equações (2.14) e (2.15) acima, resulta num sistema de equações diferenciais acopladas envolvendo todas as funções de correlação quando tomamos o limite termodinâmico $N \to \infty$. De fato, a equação de movimento para um único spin depende de funções de correlação entre dois spins. Por outro lado, escrevendo explicitamente as equações de evolução para a função de correlação entre dois spins, aparecem termos de correlação entre quatro spins e assim sucessivamente. Então, empregamos a mais simples das aproximações que inclui algum grau de correlação entre spins vizinhos, a chamada aproximação de pares dinâmica, comumente utilizada em problemas de dinâmicas de spins, como sendo uma aproximação superior à aproximação usual de campo médio [11-14,32].

2.1 A Aproximação de pares dinâmica

A fim de calcular os valores médios de interesse na aproximação de pares dinâmica associamos as magnetizações m_1 e m_2 às subredes 1 e 2, respectivamente. Além

disso, também precisamos considerar diferentes funções de correlação entre spins primeiros vizinhos. Para a função de correlação entre spins pertencentes a subredes diferentes definimos a função de correlação intersubredes r_v. Por outro lado, quando os spins pertencem à mesma subrede, temos que considerar dois tipos de função de correlação intrasubrede: a função de correlação entre spins primeiros vizinhos da subrede 1, r_{h1}, e a função de correlação entre dois spins vizinhos da subrede 2, r_{h2}. Em geral estas duas funções são diferentes devido a presença do campo magnético externo quando os acoplamentos J_1 e J_2 possuem sinais diferentes.

A função probabilidade reduzida que fornece a probabilidade de um único spin σ_a $(a = 1, 2)$ estar no estado σ_a, pode ser relacionada com m_a através da equação (2.9), resultando em:

$$P_a(\sigma_a) = \frac{1}{2}(1 + m_a\sigma_a)\,. \tag{2.16}$$

Já a probabilidade reduzida para o par de spins vizinhos σ_a e σ_b assumirem os valores σ_a e σ_b, respectivamente, pode ser escrita como

$$P_v(\sigma_a, \sigma_b) = \frac{1}{4}(1 + m_a\sigma_a + m_b\sigma_b + r_v\sigma_a\sigma_b)\,, \tag{2.17}$$

se eles pertencerem à diferentes subredes. Por outro lado, se eles pertencerem à mesma subrede, a probabilidade reduzida para o par é dada por

$$P_{hi}(\sigma_a, \sigma_b) = \frac{1}{4}(1 + m_i\sigma_a + m_i\sigma_b + r_{hi}\sigma_a\sigma_b) \tag{2.18}$$

onde o índice i pode assumir os valores 1 ou 2, dependendo sobre qual subrede estão os spins.

Entretanto, para calcular as médias no lado direito das equacões (2.14) e (2.15), precisamos considerar expressões apropriadas para a probabilidade de aglomerados de

spins. Assim, se σ_a e seus k primeiros vizinhos formarem um destes aglomerados, podemos escrever a sua probabilidade P_A como o produto da probabilidade de σ_a estar no estado σ_a pela probabilidade condicional dos seus vizinhos estarem em seus respectivos estados, quando σ_a assume o valor σ_a, ou seja:

$$P_A = P(\sigma_a)P(\sigma_{1a}, ..., \sigma_{ka}|\sigma_a)\,. \tag{2.19}$$

Na aproximação de pares a probabilidade condicional acima é então substituída pelo produto entre as probabilidades dos diferentes pares de spins, tendo o spin central do bloco o valor σ_a, isto é,

$$P(\sigma_{1a}, ..., \sigma_{ka}|\sigma_a) \approx P(\sigma_{1a}|\sigma_a)...P(\sigma_{kb}|\sigma_a)\,. \tag{2.20}$$

Assim, usando a eq. (2.19) para reescrever as probabilidades condicionais entre pares de spins, e levando em conta que σ_a está cercado por spins de ambas as subredes, obtemos a seguinte expressão aproximada para a probabilidade do aglomerado:

$$P_a(\sigma_a)\prod_j \frac{P_v(\sigma_a, \sigma_j)}{P_a(\sigma_a)} \prod_i \frac{P_{ha}(\sigma_a, \sigma_i)}{P_a(\sigma_a)}\,. \tag{2.21}$$

Agora, se nós substituirmos a eq. (2.7) da probabilidade de transição por unidade de tempo nas eqs. (2.14) e (2.15), e somarmos sobre todas as configurações, levando-se em conta a expressão (2.21) para a probabilidade do aglomerado, obtemos as seguintes equações de movimento para as grandezas físicas de interesse:

$$
\begin{aligned}
\tau\frac{d}{dt}m_1 = & - m_1 + \gamma_1(\frac{u_1^2 z_1^2}{x_1^3} + \frac{q_1^2 v_2^2}{y_1^3}) + 2\gamma_2(\frac{u_1^2 z_1 v_1}{x_1^3} + \frac{q_1^2 w_1 v_2}{y_1^3}) \\
& + 2\gamma_3(\frac{q_1 u_1 z_1^2}{x_1^3} + \frac{q_1 u_2 v_2^2}{y_1^3}) + 4\gamma_4(\frac{q_1 u_1 v_1 z_1}{x_1^3} + \frac{u_2 q_1 v_2 w_1}{y_1^3}) \\
& + \gamma_5(\frac{q_1^2 z_1^2}{x_1^3} + \frac{u_2^2 v_2^2}{y_1^3}) + \gamma_6(\frac{u_1^2 v_1^2}{x_1^3} + \frac{q_1^2 w_1^2}{y_1^3}) \\
& + 2\gamma_7(\frac{u_1 v_1^2 q_1}{x_1^3} + \frac{q_1 u_2 w_1^2}{y_1^3}) + 2\gamma_8(\frac{q_1^2 z_1 v_1}{x_1^3} + \frac{u_2^2 w_1 v_2}{y_1^3}) \\
& + \gamma_9(\frac{q_1^2 v_1^2}{x_1^3} + \frac{u_2^2 w_1^2}{y_1^3}),
\end{aligned} \tag{2.22}
$$

$$
\begin{aligned}
\tau\frac{d}{dt}m_2 = & - m_2 + \gamma_1(\frac{t_1^2 z_1^2}{x_2^3} + \frac{q_2^2 v_1^2}{y_2^3}) + 2\gamma_2(\frac{t_1^2 z_1 v_2}{x_2^3} + \frac{q_2^2 w_1 v_1}{y_1^3}) \\
& + 2\gamma_3(\frac{q_2 t_1 z_1^2}{x_2^3} + \frac{q_2 t_2 v_1^2}{y_2^3}) + 4\gamma_4(\frac{q_2 t_1 v_2 z_1}{x_2^3} + \frac{t_2 q_2 v_1 w_1}{y_2^3}) \\
& + \gamma_5(\frac{q_2^2 z_1^2}{x_2^3} + \frac{t_2^2 v_1^2}{y_2^3}) + \gamma_6(\frac{t_1^2 v_2^2}{x_2^3} + \frac{q_2^2 w_1^2}{y_2^3}) \\
& + 2\gamma_7(\frac{t_1 v_2^2 q_2}{x_2^3} + \frac{q_2 t_2 w_1^2}{y_2^3}) + 2\gamma_8(\frac{q_2^2 z_1 v_2}{x_2^3} + \frac{t_2^2 w_1 v_1}{y_2^3}) \\
& + \gamma_9(\frac{q_2^2 v_2^2}{x_2^3} + \frac{t_2^2 w_1^2}{y_2^3}),
\end{aligned} \tag{2.23}
$$

$$
\begin{aligned}
\tau\frac{d}{dt}r_{h1} = & - 2r_{h1} + 2\gamma_1(\frac{u_1^2 z_1^2}{x_1^3} + \frac{q_1^2 v_2^2}{y_1^3}) + 4\gamma_2(\frac{u_1^2 v_1 z_1}{x_1^3} + \frac{q_1^2 v_2 w_1}{y_1^3}) \\
& - 2\gamma_5(\frac{q_1^2 z_1^2}{x_1^3} + \frac{u_2^2 v_2^2}{y_1^3}) + 2\gamma_6(\frac{u_1^2 v_1^2}{x_1^3} + \frac{q_1^2 w_1^2}{y_1^3}) \\
& - 4\gamma_8(\frac{q_1^2 z_1 v_1}{x_1^3} + \frac{u_2^2 v_2 w_1}{y_1^3}) - 2\gamma_9(\frac{q_1^2 v_1^2}{x_1^3} + \frac{w_1^2 u_2^2}{y_1^3}),
\end{aligned} \tag{2.24}
$$

$$\begin{aligned}\tau\frac{d}{dt}\tau_{h2} = & - 2\tau_{h2} + 2\gamma_1(\frac{t_1^2z_1^2}{x_2^3} + \frac{q_2^2v_1^2}{y_2^3}) + 4\gamma_2(\frac{t_1^2v_2z_1}{x_2^3} + \frac{q_2^2v_1w_1}{y_2^3}) \\ & - 2\gamma_5(\frac{q_2^2z_1^2}{x_2^3} + \frac{t_2^2v_1^2}{y_2^3}) + 2\gamma_6(\frac{t_1^2v_2^2}{x_2^3} + \frac{q_2^2w_1^2}{y_2^3}) \\ & - 4\gamma_8(\frac{q_2^2z_1v_2}{x_2^3} + \frac{t_2^2v_1w_1}{y_2^3}) - 2\gamma_9(\frac{q_2^2v_2^2}{x_2^3} + \frac{w_1^2t_2^2}{y_2^3}),\end{aligned} \tag{2.25}$$

e

$$\begin{aligned}\tau\frac{d}{dt}\tau_v = & - 2\tau_v + \gamma_1(\frac{u_1^2z_1^2}{x_1^3} + \frac{q_1^2v_2^2}{y_1^3} + \frac{t_1^2z_1^2}{x_2^3} + \frac{q_2^2v_1^2}{y_2^3}) \\ & + 2\gamma_3(\frac{u_1q_1z_1^2}{x_1^3} + \frac{q_1u_2v_2^2}{y_1^3} + \frac{t_1q_2z_1^2}{x_2^3} + \frac{q_2t_2v_1^2}{y_2^3}) \\ & + \gamma_5(\frac{q_1^2z_1^2}{x_1^3} + \frac{u_2^2v_2^2}{y_1^3} + \frac{q_2^2z_1^2}{x_2^3} + \frac{t_2^2v_1^2}{y_2^3}) \\ & - \gamma_6(\frac{u_1^2v_1^2}{x_1^3} + \frac{q_1^2w_1^2}{y_1^3} + \frac{t_1^2v_2^2}{x_2^3} + \frac{q_2^2w_1^2}{y_2^3}) \\ & - 2\gamma_7(\frac{u_1q_1v_1^2}{x_1^3} + \frac{q_1u_2w_1^2}{y_1^3} + \frac{t_1q_2v_2^2}{x_2^3} + \frac{q_2t_2w_1^2}{y_2^3}) \\ & - \gamma_9(\frac{q_1^2v_1^2}{x_1^3} + \frac{u_2^2w_1^2}{y_1^3} + \frac{q_2^2v_2^2}{x_2^3} + \frac{t_2^2w_1^2}{y_2^3}),\end{aligned} \tag{2.26}$$

onde

$$\gamma_{1.9} = \tanh\left[\frac{1}{\theta}(\pm 2 \pm 2\tau + h)\right],$$

$$\gamma_{2,8} = \tanh\left[\frac{1}{\theta}(\pm 2 + h)\right],$$

$$\gamma_{3.7} = \tanh\left[\frac{1}{\theta}(\pm 2\tau + h)\right],$$

$$\gamma_4 = \tanh(\frac{h}{\theta}),$$

$$\gamma_{5,6} \;=\; \tanh\left[\frac{1}{\theta}(\mp 2 \pm 2r + h)\right].$$

As grandezas auxiliares presentes nas equações de movimento acima foram definidas como:

$$x_{1,2} = \frac{1}{2}(1 + m_{1,2}),$$

$$y_{1.2} = \frac{1}{2}(1 - m_{1,2}),$$

$$v_{1,2} = \frac{1}{4}(1 \pm m_1 \mp m_2 - r_v),$$

$$u_{1.2} = \frac{1}{4}(1 \pm 2m_1 + r_{h1}),$$

$$t_{1.2} = \frac{1}{4}(1 \pm 2m_2 + r_{h2}),$$

$$z_1 = \frac{1}{4}(1 + m_1 + m_2 + r_v),$$

$$w_1 = \frac{1}{4}(1 - m_1 - m_2 + r_v),$$

$$q_{1,2} = \frac{1}{4}(1 - r_{h1,h2}),$$

Além disso, definimos as seguintes variáveis reduzidas: $\theta = \frac{k_B T}{J_1}$, $r = -\frac{J_2}{J_1}$ $h = \frac{H}{J_1}$.

O conjunto de equações (2.22-2.26) pode ser resolvido numericamente através de algoritmos numéricos, como por exemplo, o método de Runge-Kutta de quarta ordem [33]. De fato, utilizamos este método para resolver o conjunto de equações acima para diferentes valores do parâmetro microscópico r, que mede a competição entre os acoplamentos nas direções vertical (J_2) e horizontal (J_1), da temperatura reduzida θ, e do campo magnético externo h. A análise das soluções estacionárias deste conjunto de equações é detalhadamente realizada nos próximos três capítulos.

A aplicação de um campo magnético externo sobre um sistema de spins modifica drasticamente a estrutura do diagrama de fases do modelo. É o caso, por exemplo, do modelo de Ising ferromagnético em duas dimensões. Quando não existe campo magnético externo agindo sobre o sistema de spins, o sistema passa continuamente de uma fase ferromagneticamente ordenada para uma fase completamente desordenada numa temperatura crítica bem definida [34]. A aplicação de um campo magnético externo uniforme sobre este sistema destrói a transição de fases, permanecendo uma única fase. Por outro lado, quando o campo magnético externo oscila contínua e periodicamente no tempo em torno de um valor médio igual a zero, a transição de fases volta a ocorrer [25]. Neste caso, temos uma transição contínua entre as fases ferromagnética e paramagnética em altas temperaturas, quando o valor da amplitude do campo externo é pequena. Em contrapartida, quando aumentamos

o valor da amplitude do campo externo e diminuímos a temperatura, a transição passa a ser descontínua, de tal modo que o diagrama de fases apresenta uma região de coexistência das fases ferromagnética e paramagnética. O ponto de encontro entre estas duas linhas de transição é conhecido na literatura como ponto tricrítico.

Como esperamos que nosso modelo também apresente mudanças significativas na estrutura do seu diagrama de fases achamos conveniente estudá-lo nos três casos citados acima para o modelo de Ising ferromagnético, separadamente.

CAPÍTULO 3

Ausência de campo magnético externo

O primeiro e mais simples dos casos é aquele em que o campo magnético externo está ausente. Neste caso as equações de movimento simplificam-se bastante e, inclusive, as funções de correlação intrasubrede tornam-se iguais e que denotamos por r_h. Assim, colocando $H = 0$ nas eqs. (2.22-2.26) obtemos o seguinte conjunto de equações acopladas:

$$\frac{d}{dt}m_1 = -m_1 + \frac{1}{2}G_1(m_1, m_2, r_h, r_v, \theta, r), \tag{3.1}$$

$$\frac{d}{dt}m_2 = -m_2 + \frac{1}{2}G_2(m_1, m_2, r_h, , r_v, \theta, r), \tag{3.2}$$

$$\frac{d}{dt}r_h = -2r_h + G_3(m_1, m_2, r_h, r_v, \theta, r), \tag{3.3}$$

e

$$\frac{d}{dt}r_v = -2r_v + G_4(m_1, m_2, r_h, r_v, \theta, r), \tag{3.4}$$

onde as funções G_i são obtidas diretamente das eqs. (2.22-2.26).

Resolvemos numericamente o conjunto de equações acima a fim de seguir a evolução temporal das variáveis do sistema em direção aos seus valores de equilíbrio. Medimos o tempo em unidades do tempo de relaxação τ, que escolhemos ser igual a unidade.

Na figura 3.1 exibimos o comportamento das magnetizações m_1 e m_2 em função do tempo para um valor fixo da temperatura reduzida θ e quatro valores diferentes da razão entre os acoplamentos J_1 e J_2. Dependendo do valor deste parâmetro podemos observar três situações estacionárias distintas: *i*) A solução $m_1 = m_2 \neq 0$, que caracteriza a situação ferromagnética, *ii*) a solução $m_1 = m_2 = 0$ que define a fase paramagnética, e finalmente, *iii*) a solução $m_1 = -m_2 \neq 0$ que fornece um estado ordenado antiferromagneticamente. Para o mesmo conjunto de parâmetros da figura 3.1, também estudamos a evolução em direção aos estados de equilíbrio das funções de correlação r_v e r_h, como pode ser visto nas figuras 3.2 e 3.3, respectivamente. Como era esperado, notamos na figura 3.3 que o valor de equilíbrio de r_h depende somente do valor absoluto do parâmetro r. A única diferença para dois valores simétricos de r está no modo como eles se aproximam do estado de equilíbrio. Já o valor de equilíbrio da função de correlação intersubrede r_v é sempre simétrico para dois valores simétricos de r. Fixados os valores de r e de θ, as soluções estacionárias deste modelo são sempre as mesmas, independente das condições iniciais que são usadas.

Os estados estacionários de equilíbrio são determinados quando as magnetizações das subredes e as funções de correlação tornam-se independentes do tempo. Portanto, para obtermos os estados estáveis devemos impor que o lado direito das eqs. (3.1-3.4) tornem-se nulos. Além disso, sabemos que na fase paramagnética tanto m_1 quanto m_2 são

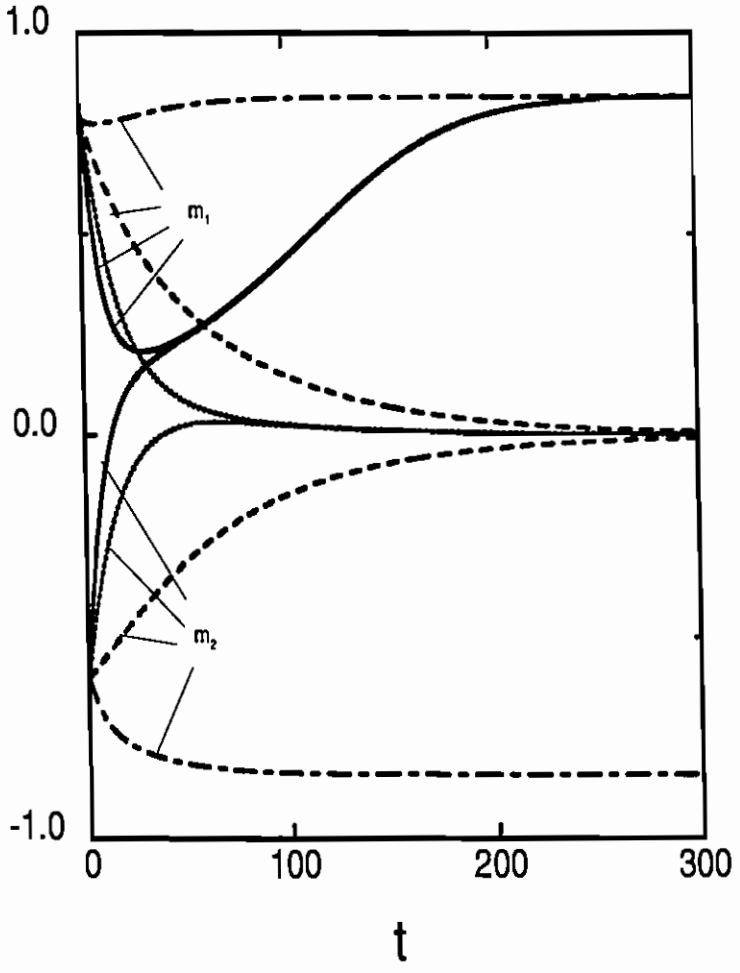

Figura 3.1: Magnetização das subredes, m_1 e m_2, em função do tempo para temperatura reduzida $\theta = 2.0$ e quatro valores diferentes de τ. As linhas sólidas são para $\tau = -0.75$, as linhas pontilhadas são para $\tau = -0.25$, as linhas tracejadas para $\tau = 0.25$ e as linhas pontilhadas-tracejadas são para $\tau = 0.75$.

nulos, de tal modo que as funções de correlação na horizontal e na vertical podem ser explicitamente escritas. Após alguma manipulação algébrica podemos mostrar que elas são dadas por

$$\begin{aligned} r_h &= \frac{1}{8}[\gamma_1(1+r_v^2+r_h^2+4r_vr_h+r_v^2r_h^2) \\ &+ \gamma_3(1+r_v^2+r_h^2-4r_vr_h+r_v^2r_h^2) \\ &+ 2\gamma_4(1-r_v^2+r_h^2-r_v^2r_h^2)], \end{aligned} \tag{3.5}$$

e

$$\begin{aligned} r_v &= \frac{1}{8}[\gamma_1(1+r_v^2+r_h^2+4r_vr_h+r_v^2r_h^2) \\ &+ 2\gamma_2(1+r_v^2-r_h^2-r_v^2r_h^2) \\ &- \gamma_3(1+r_v^2+r_h^2-4r_vr_h+r_v^2r_h^2)]. \end{aligned} \tag{3.6}$$

As condições que caracterizam as fases ferromagnética e antiferromagnética sugerem a definição das grandezas

$$m_f = \frac{1}{2}(m_1+m_2)\,, \tag{3.7}$$

e

$$m_a = \frac{1}{2}(m_1-m_2)\,, \tag{3.8}$$

como sendo os parâmetros de ordem adequados para as respectivas fases. Assim, se somamos as eqs. (3.1) e (3.2) obteremos uma equação de evolução para a magnetização da fase ferromagnética. Por outro lado, a diferença entre essas equações, fornece a evolução temporal da magnetização alternante, que caracteriza a fase antiferromagnética. Na transição

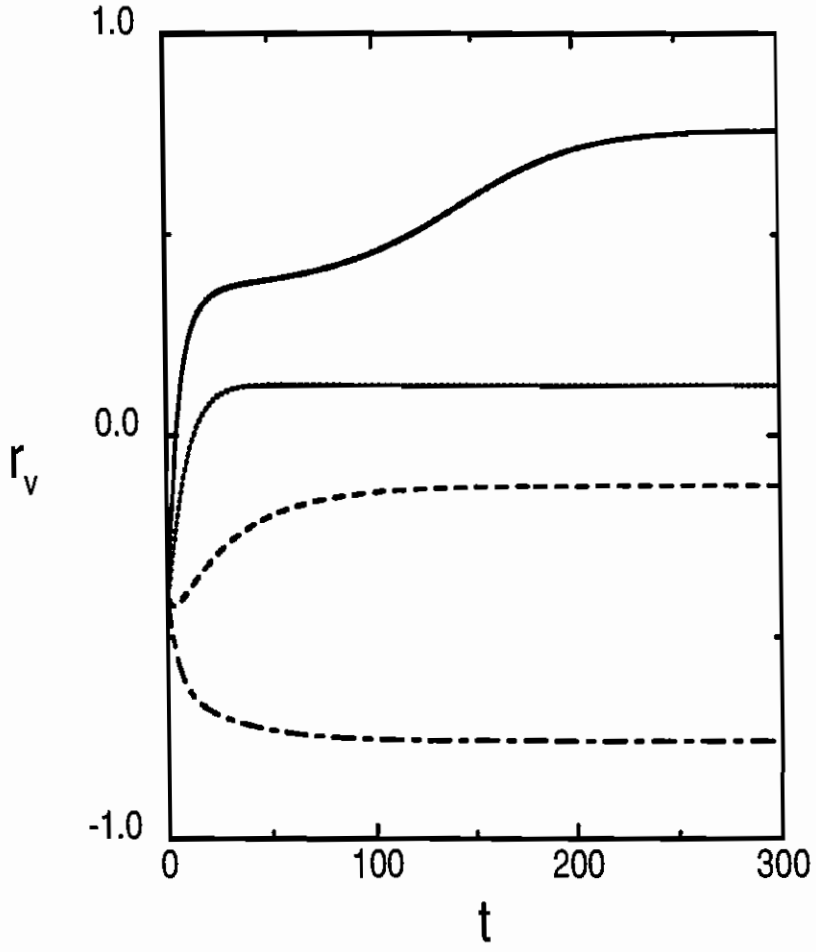

Figura 3.2: Função de correlação intersubrede r_v em função do tempo. Utilizamos os mesmos parâmetros definidos na legenda da figura 3.1.

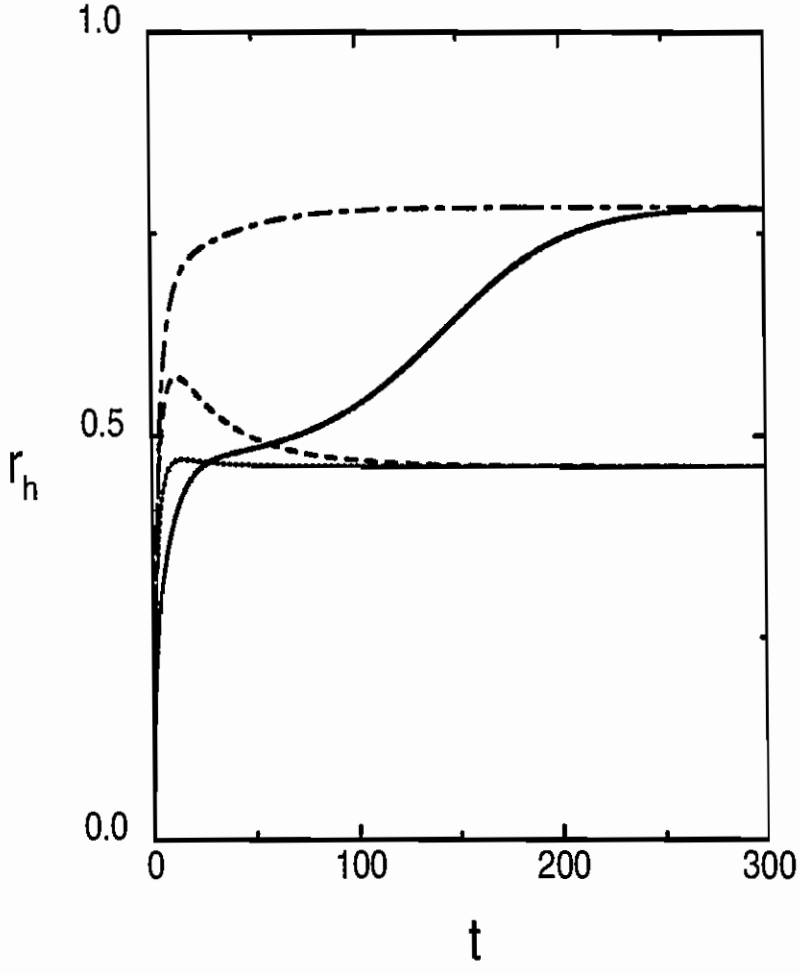

Figura 3.3: Função de correlação intrasubrede r_h em função do tempo. Utilizamos os mesmos parâmetros definidos na legenda da figura 3.1.

entre as fases ordenada e desordenada o parâmetro de ordem que caracteriza a transição é muito pequeno. Após alguma manipulação algébrica podemos linearizar essas equações de movimento para obter

$$\frac{d}{dt}m_\alpha = \lambda_\alpha m_\alpha \ , \alpha = a\,, f \tag{3.9}$$

onde

$$\begin{aligned}\lambda_f = -1 \ &+ \ \frac{1}{2}\gamma_1[1 + 2r_v r_h + \frac{1}{2}(r_v^2 + r_h^2) - r_v r_h^2 - r_v^2 r_h] \\ &+ \ \frac{1}{2}\gamma_2[1 - 2r_v r_h - r_h^2 + 2r_v r_h^2] \\ &+ \ \frac{1}{2}\gamma_3[\frac{1}{2}(r_v^2 - r_h^2) + r_v r_h^2 - r_v^2 r_h] \\ &+ \ \frac{1}{2}\gamma_4[1 - 2r_v r_h - r_v^2 + 2r_v^2 r_h],\end{aligned} \tag{3.10}$$

e

$$\begin{aligned}\lambda_a = -1 \ &+ \ \frac{1}{2}\gamma_1[\frac{1}{2}(r_v^2 - r_h^2) - r_v r_h^2 - r_v^2 r_h] \\ &- \ \frac{1}{2}\gamma_2[1 + 2r_v r_h - r_h^2 - 2r_v r_h^2] \\ &+ \ \frac{1}{2}\gamma_3[1 + \frac{1}{2}(r_v^2 + r_h^2) - 2r_v r_h + r_v r_h^2 - r_v^2 r_h] \\ &+ \ \frac{1}{2}\gamma_4[1 + 2r_v r_h - r_v^2 + 2r_v^2 r_h].\end{aligned} \tag{3.11}$$

Se $\lambda_f < 0$ e $\lambda_a < 0$ a fase paramagnética é a única fase estável. Por outro lado, se $\lambda_f\,(\lambda_a) > 0$ a fase ferromagnética (antiferromagnética) é que passa a ser estável. Portanto a solução simultânea da equação $\lambda_f = 0$ $(\lambda_a = 0)$ com as eqs. (3.5) e (3.6) fornece a linha de transição entre as fases ferromagnética (antiferromagnética) e paramagnética. O diagrama de fases resultante do modelo é exibido na figura 3.4. Se fixamos o valor do acoplamento horizontal J_1 num dado valor maior que zero, e se diminuirmos o valor do

acoplamento vertical J_2, podemos passar continuamente da fase ferromagnética para a fase paramagnética enquanto $J_2 > 0$. Para o caso especial $J_2 = 0$, as subredes são desacopladas e o sistema se reduz a uma coleção de cadeias de Ising independentes. Como podemos ver na figura 3.4, a temperatura crítica neste caso é zero de forma que a aproximação de pares dinâmica dá a temperatura crítica correta para um sistema de Ising unidimensional. Quando J_2 vai a zero, a temperatura crítica é nula. Se $J_1 = J_2$ (modelo de Ising isotrópico) é fácil verificar que obtemos a temperatura crítica da aproximação de Bethe-Peirls [34].

Por outro lado, quando J_2 torna-se negativo, obtemos uma transição contínua da fase paramagnética para a fase ordenada antiferromagneticamente. Embora não exista um campo externo aplicado sobre o sistema, a mudança contínua do parâmetro J_2 produz um fenômeno semelhante ao da auto-organização [15], observado, por exemplo, no modelo de Ising cinético sujeito à competição entre as dinâmicas de Glauber e de Kawasaki [14,17,32]. De fato, podemos imaginar que a mudança do acoplamento intersubrede J_2 é devido à aplicação de algum campo de força externo. Isto é possível para modelos de Ising compressíveis, onde o acoplamento entre as subredes depende da distância entre as cadeias lineares.

Por exemplo, podemos imaginar o seguinte modelo para o acoplamento magneto-elástico: vamos deixar a interação de troca ao longo da direção vertical J_2 depender linearmente da distância entre os spins vizinhos e introduzir uma energia potencial elástica harmônica entre os íons correspondentes. Se desconsiderarmos as oscilações dos íons na direção horizontal, este modelo é a versão uniaxial daquele proposto por Baker e Essam [35].

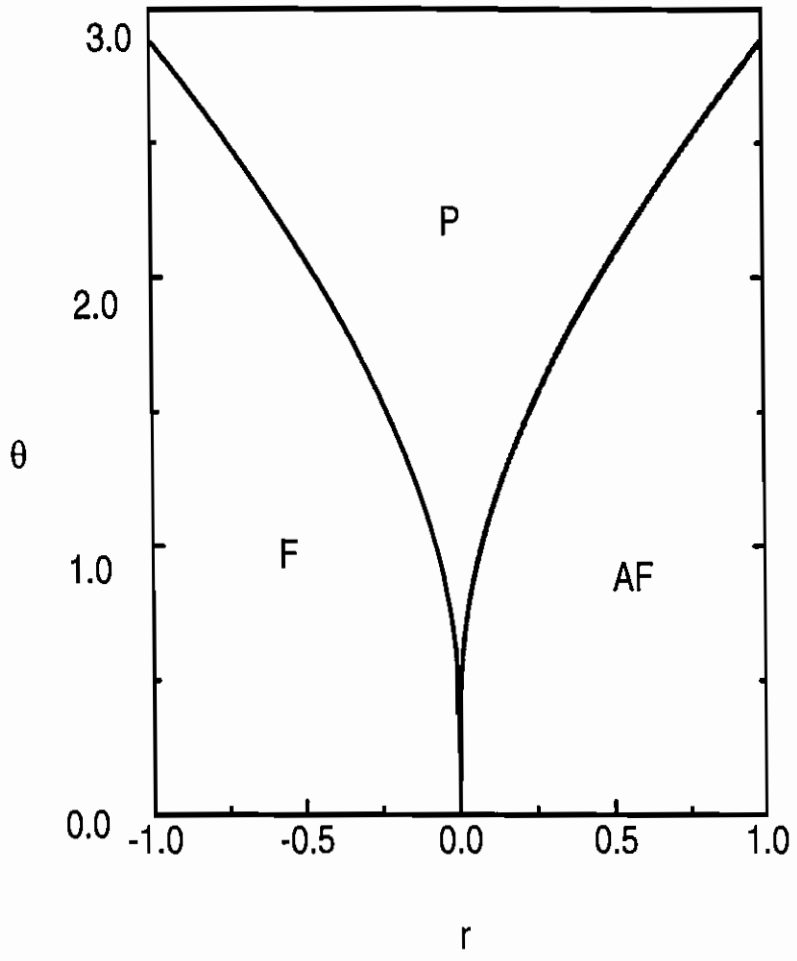

Figura 3.4: Diagrama de fases do modelo de Ising bidimensional no plano temperatura reduzida versus parâmetro de competição. P, F e AF representam as fases paramagnética, ferromagnética e antiferromagnética, respectivamente.

Nesse modelo as forças de cisalhamento são desprezadas a fim de tornar o modelo exatamente solúvel no ensemble de forças, onde a força externa Λ é o parâmetro termodinâmico convenientemente fixado. Deste modo podemos obter um hamiltoniano efetivo de spins como aquele da eq. (2.1), mas com um acoplamento vertical dado por

$$J_2 = J_0 - c\Lambda \tag{3.12}$$

onde a constante $c > 0$ é o acoplamento magneto-elástico do modelo. Então, se aumentarmos o valor da força externa Λ sobre o sistema, poderemos desacoplar magneticamente as cadeias horizontais de spins no valor crítico $\Lambda_c = J_0/c$. Isto é, poderemos mecanicamente induzir uma mudança no comportamento magnético de duas para uma dimensão. A aplicação de forças externas convenientes sobre o sistema pode então, simular a mudança de sinal da interação de troca intersubrede efetiva devido ao acoplamento magneto-elástico, como pode ser visto para o metamagneto $FeCl_2$ [36,37].

Mostramos que quando mudamos o acoplamento intersubrede é possível passar continuamente da fase ferromagnética para a paramagnética, e desta para uma fase antiferromagnética [38]. Neste sentido, nosso diagrama de fases é similar àquele obtido para um sistema magnético auto-organizado onde um fluxo externo de energia é aplicado ao sistema. Em nosso caso a mudança do acoplamento intersubrede pode ser realizada pela aplicação de uma força externa sobre o modelo de Ising compressível.

CAPÍTULO 4

Campo magnético estático

A aplicação de um campo magnético uniforme sobre o sistema de spins que estamos considerando só é interessante quando, no mínimo, um dos acoplamentos for antiferromagnético. Se isto não acontecer o sistema estará sempre numa única fase e nenhuma transição será observada. Nesta seção vamos considerar o caso no qual os spins pertencentes a diferentes subredes interagem antiferromagneticamente, ou seja, vamos tomar J_2 menor que zero, mantendo o acoplamento na horizontal sempre positivo. O sistema assim definido é um modelo teórico apropriado para o estudo de materiais metamagnéticos.

A estrutura do diagrama de fases de um sistema metamagnético sujeito a aplicação de um campo magnético externo depende fortemente da direção de aplicação do campo. Se a direção de aplicação do campo é transversal à direção dos spins, então a linha de transição entre as fases ordenada e desordenada é contínua. Por outro lado, quando o campo magnético externo é longitudinal à direção dos spins, além da linha contínua que separa as

duas fases temos ainda uma região em que as fases coexistem, de tal forma que a transição entre essas fases torna-se descontínua. Neste caso ainda existe uma aparente discrepância entre os resultados teóricos e experimentais.

De fato, experimentalmente [39,40] os materiais metamagnéticos apresentam dois tipos de transição de fase na presença de um campo magnético longitudinal: em altas temperaturas a transição entre as fases ordenada e desordenada é contínua enquanto ela é descontínua em baixas temperaturas. O ponto que separa estes dois comportamentos distintos é o bem conhecido ponto tricrítico. Este ponto aparece como consequência da competição entre os acoplamentos de troca antiferro e ferromagnético.

Kincaid e *Cohen* [41] apresentaram uma extensiva revisão teórica das propriedades de campo médio do modelo metamagnético de Ising. Eles consideraram um modelo de duas subredes com interações ferromagnética (intrasubrede) e antiferromagnética (intersubrede) competindo entre sí. Dependendo do valor da razão entre estes dois acoplamentos, o diagrama de fases teórico pode exibir uma variedade de pontos críticos. Além do ponto tricrítico usual, um ponto crítico final e um ponto bicrítico final também aparecem no diagrama de fases para valores convenientes daquela razão. Embora o ponto tricrítico apareça em todos os sistemas metamagnéticos reais conhecidos, os pontos crítico e bicrítico finais ainda não foram encontrados em qualquer sistema real. Desde o início da década passada, alguns trabalhos utilizando simulações de Monte Carlo [42-45] foram realizados a fim de investigar as propriedades críticas de sistemas metamagnéticos. Os resultados encontrados nessas simulações não favorecem a idéia da decomposição do ponto tricrítico em pontos crítico e bicrítico finais. Estes pontos podem ser um artifício da aproximação de campo

médio.

Neste capítulo consideraremos nosso modelo particularizado a um sistema metamagnético sujeito à presença de um campo magnético externo longitudinal e constante no tempo. Para este modelo de duas subredes o parâmetro de ordem que descreve a transição entre as fases ordenada e desordenada é a magnetização alternante m_a, ao invés da magnetização m_f, anteriormente definidas. Substituindo estas novas variáveis no conjunto de equações de movimento (2.22-2.26) e após algumas manipulações algébricas podemos verificar que estas variáveis evoluem no tempo na seguinte forma

$$\frac{dm_a}{dt} = -m_a + \frac{1}{2}F_1(m_a, m_f, r_{h1}, r_{h2}, r_v, \theta, h, r), \tag{4.1}$$

$$\frac{dm_f}{dt} = -m + \frac{1}{2}F_2(m_a, m_f, r_{h1}, r_{h2}, r_v, \theta, h, r), \tag{4.2}$$

$$\frac{dr_{h1}}{dt} = -2r_{h1} + F_3(m_a, m_f, r_{h1}, r_{h2}, r_v, \theta, h, r), \tag{4.3}$$

$$\frac{dr_{h2}}{dt} = -2r_{h2} + F_4(m_a, m_f, r_{h1}, r_{h2}, r_v, \theta, h, r), \tag{4.4}$$

$$\frac{dr_v}{dt} = -2r_v + F_5(m_a, m_f, r_{h1}, r_{h2}, r_v, \theta, h, r), \tag{4.5}$$

onde as funções $F_i(m_a, m_f, r_{h1}, r_{h2}, r_v, \theta, h, r)$ são obtidas diretamente das eqs. (2.22-2.26).

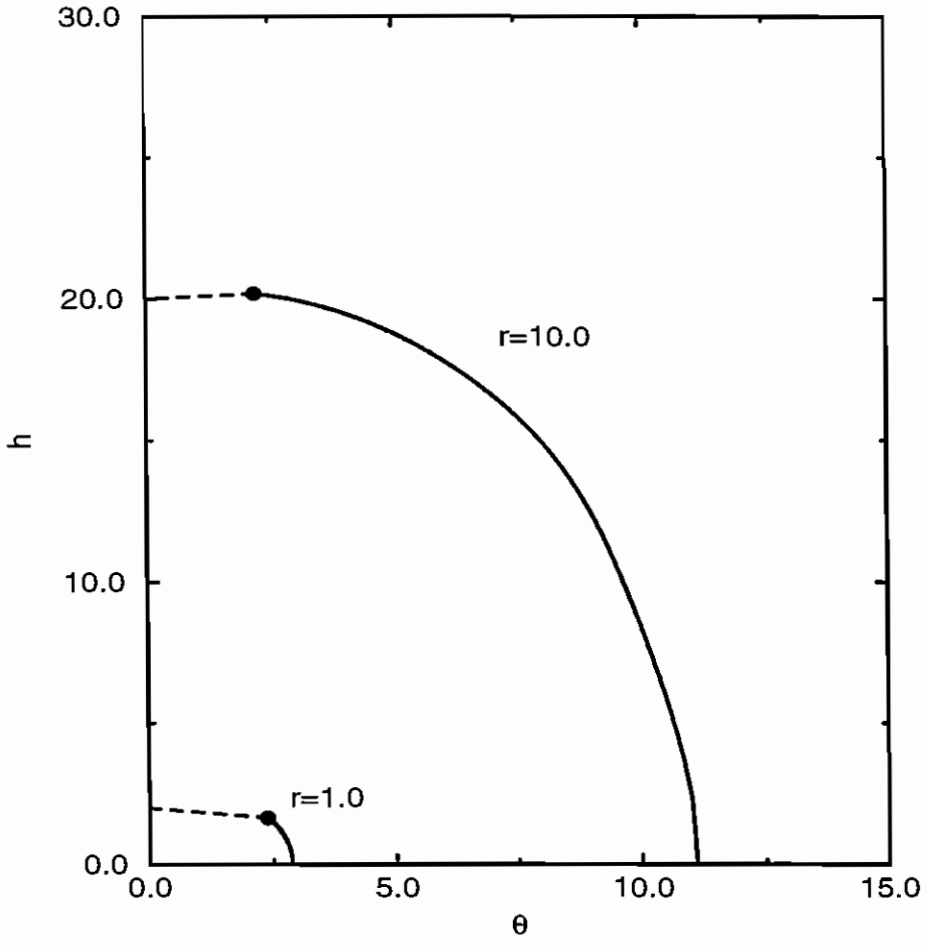

Figura 4.1: Diagrama de fases do modelo metamagnético no plano campo magnético reduzido versus temperatura reduzida para dois valores da razão entre os acoplamentos antiferro- e ferromagnético $r = -J_2/J_1$. As linhas cheias fornecem a transição de fases contínua, enquanto as linhas pontilhadas fornecem os valores de h e de θ em que m_a vai descontinuamente a zero. Os círculos cheios denotam os respectivos pontos tricríticos.

Não apresentamos explicitamente estas expressões porque elas são bastante grandes. De novo, tomamos o tempo em unidades do tempo de relaxação τ que é definido como sendo a unidade.

Novamente, nosso interesse recai sobre os estados estacionários onde o lado direito das equações acima é nulo. Como nós também estamos interessados na transição entre as fases ordenada e desordenada, onde o parâmetro de ordem m_a é muito pequeno, expandimos o lado direito da eq. (4.1) em série de potências de m_a. Obtemos a seguinte expressão correspondente aos estados estacionários:

$$0 = -2m_a + c_1 m_a + c_3 m_a^3 + c_5 m_a^5 + c_7 m_a^7 + \dots, \tag{4.6}$$

onde os coeficientes c_n são a n-ésima derivada de F_1 avaliados em $m_a = 0$. Estes coeficientes dependem de θ, h e r. Eles também são dados por expressões muito extensas e foram obtidos através de manipulações com o programa Maple. Pela simetria do problema, todos os coeficientes pares deveriam ser nulos. De fato, isto foi verificado numericamente em todos os nossos cálculos. Podemos obter muita informação relativa ao comportamento crítico do modelo estudando a dependência dos coeficientes acima com a temperatura, campo magnético e com o parâmetro de competição r. A análise que realizamos está baseada na teoria usual de Landau para as transições de fases contínuas [46]. Uma expansão equivalente foi realizada por *Dutta*, *Chakrabarti* e *Stinchcombe* [47] em seus estudos sobre a transição de fases no modelo de Ising em campo aleatório sujeito à presença de um campo transverso. Assim, se colocarmos c_1=2, e resolvermos esta equação juntamente com as eq. (4.2-4.5) para $m_a = 0$, uma linha de transição de fases contínua é encontrada enquanto $c_3 > 0$. Se $c_3 < 0$ a transição entre as fases torna-se descontínua. Deste modo, a equação $c_3 = 0$ define o ponto tricrítico.

Exibimos na figura 4.1 o diagrama de fases no plano $h \times \theta$ para dois valores selecionados do parâmetro de competição r. De acordo com a teoria de campo médio [41] esperaríamos a presença do ponto tricrítico para $r = 1$, enquanto que para $r = 10$ teríamos a decomposição do ponto tricrítico nos pontos crítico e bicrítico finais.

Em nossos cálculos, os coeficientes c_1, c_3, c_5 e c_7, encontrados para todos os valores de r, exibem o mesmo comportamento como função de h e θ, isto é, quando $c_1 = 2$ e $c_3 = 0$, os coeficientes c_5 e c_7 possuem sempre o mesmo sinal confirmando a estabilidade do ponto tricrítico. Na figura 4.2 exibimos o comportamento destes coeficientes em função de r, no ponto tricrítico de cada valor de r. Para todos os valores de $r > 0$ não existe evidência da decomposição do ponto tricrítico nos dois pontos especiais citados acima. Exibimos na figura 4.3 o campo h_t e a temperatura θ_t do ponto tricrítico em função do parâmetro r. Podemos observar que o comportamento tricrítico é encontrado para todos os valores de r. Notamos, também, um comportamento bastante interessante quando o acoplamento antiferromagnético é muito maior que o acoplamento ferromagnético. Neste caso, a inclinação da curva de h_t é igual a 2. O campo tricrítico em função de r pode ser escrito como

$$H_t = \frac{J_2 h_t}{r} \tag{4.7}$$

e a temperatura tricrítica como

$$k_B T_t = \frac{J_2 \theta_t}{r}. \tag{4.8}$$

Então, para valores fixos do acoplamento intersubrede antiferromagnético J_2, $T_t \to 0$ e

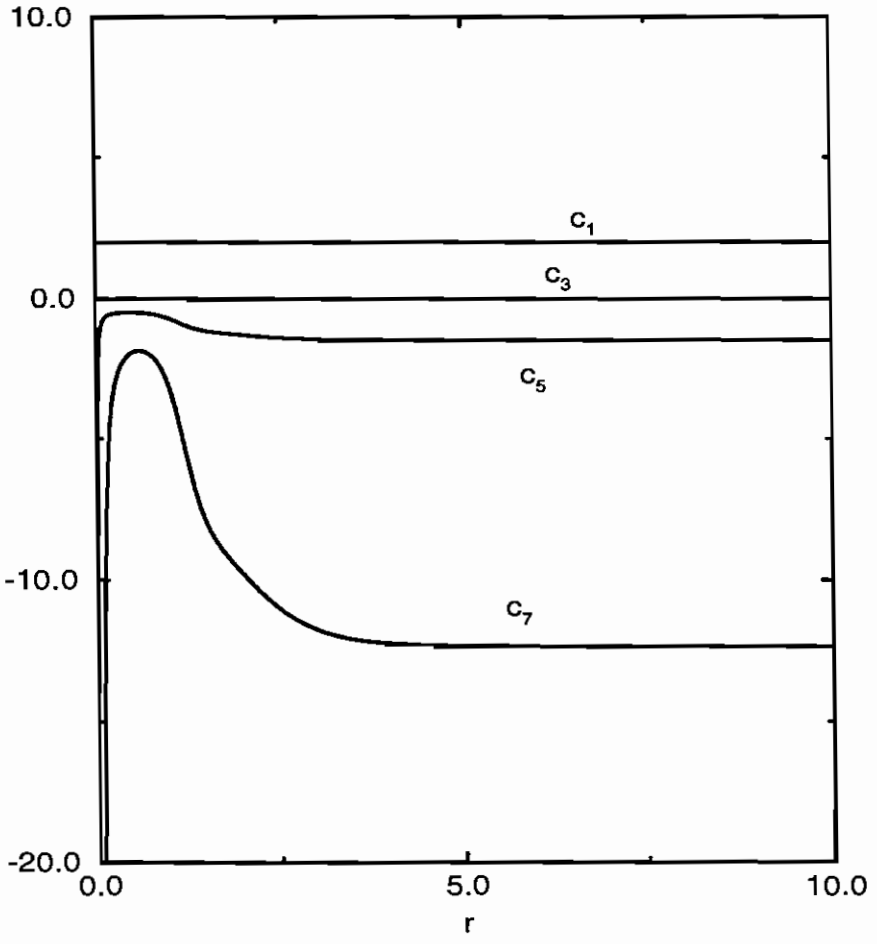

Figura 4.2: Coeficientes da expansão de m_a em função de r, nos pontos tricríticos associados a cada valor de r .

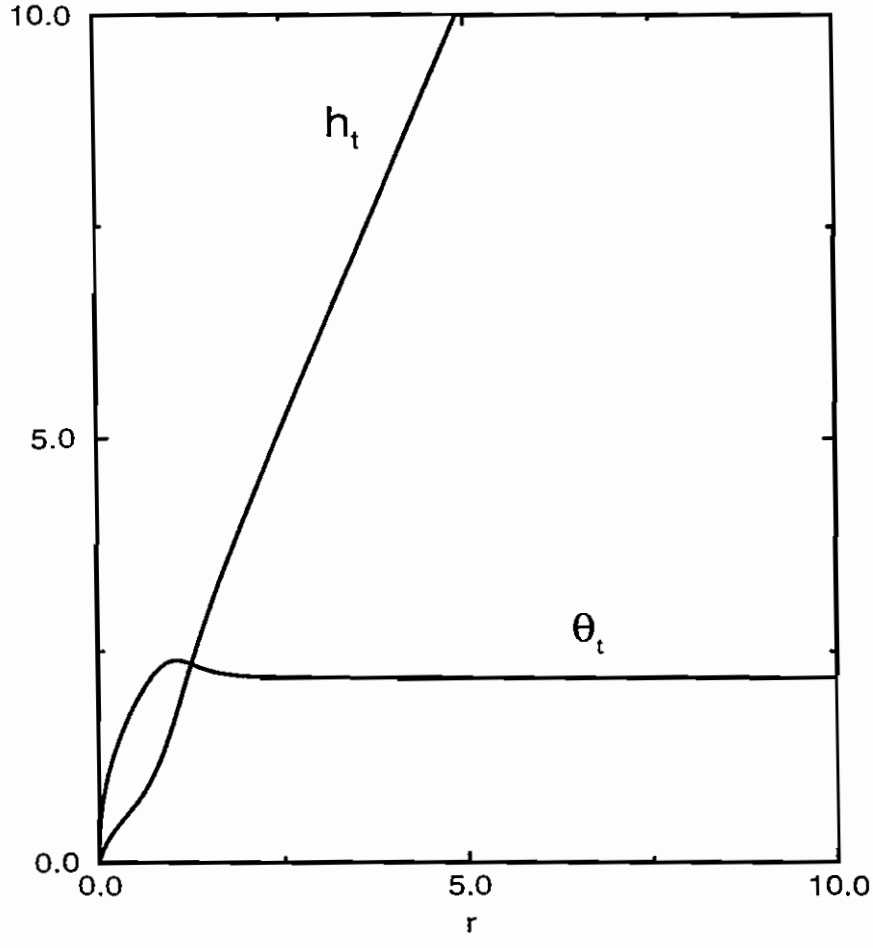

Figura 4.3: Campo magnético e temperatura tricríticos reduzidos em função da razão entre os acoplamentos r.

$H_t \rightarrow 2J_2$ para valores muito grandes de r. Isto significa que a transição entre as fases antiferromagnética e paramagnética é contínua para todos os valores de temperatura, exceto em $T = 0$, onde a transição torna-se de primeira ordem. Por exemplo, em $T = 0$, a energia por spin na fase antiferromagnética é dada por

$$E_{af} = -J_1 - J_2 , \tag{4.9}$$

enquanto que na fase paramagnética é dada por

$$E_p = -J_1 + J_2 - H . \tag{4.10}$$

Assim, o campo crítico na transição é determinado por $E_{af} = E_p$, que fornece $H_c = 2J_2$. Então, quando r torna-se muito grande o ponto tricrítico tende ao ponto de temperatura zero onde existe a coexistência das duas fases. Na figura 4.1, ligamos o ponto tricrítico ao ponto de temperatura nula por meio de uma linha tracejada. Determinamos o valor do campo para cada valor de temperatura observando a descontinuidade da magnetização alternante m_a nestes pontos. Na figura 4.4 apresentamos um exemplo de como um destes pontos é obtido. Portanto, a linha tracejada da figura 4.1 não é a linha de primeira ordem verdadeira porque dentro da aproximação usada não é possível encontrar a energia livre do modelo. A ausência dos pontos crítico e bicrítico finais em nosso diagrama de fases está de acordo com recentes simulações de Monte Carlo [44,45] realizadas em modelos metamagnéticos equivalentes ao que estudamos aqui. No trabalho de *Hermann* e *Landau* [44] foi investigado a presença destes pontos especiais, realizando simulações para valores de r até $r = 20$. Mesmo para este grande valor de r, existe uma clara evidência para a presença única e exclusiva do ponto tricrítico. Além disso, seus resultados mostram que o ponto tricrítico

move-se para o ponto de temperatura nula à medida que aumentamos os valores da razão entre os acoplamentos antiferro- e ferromagnético.

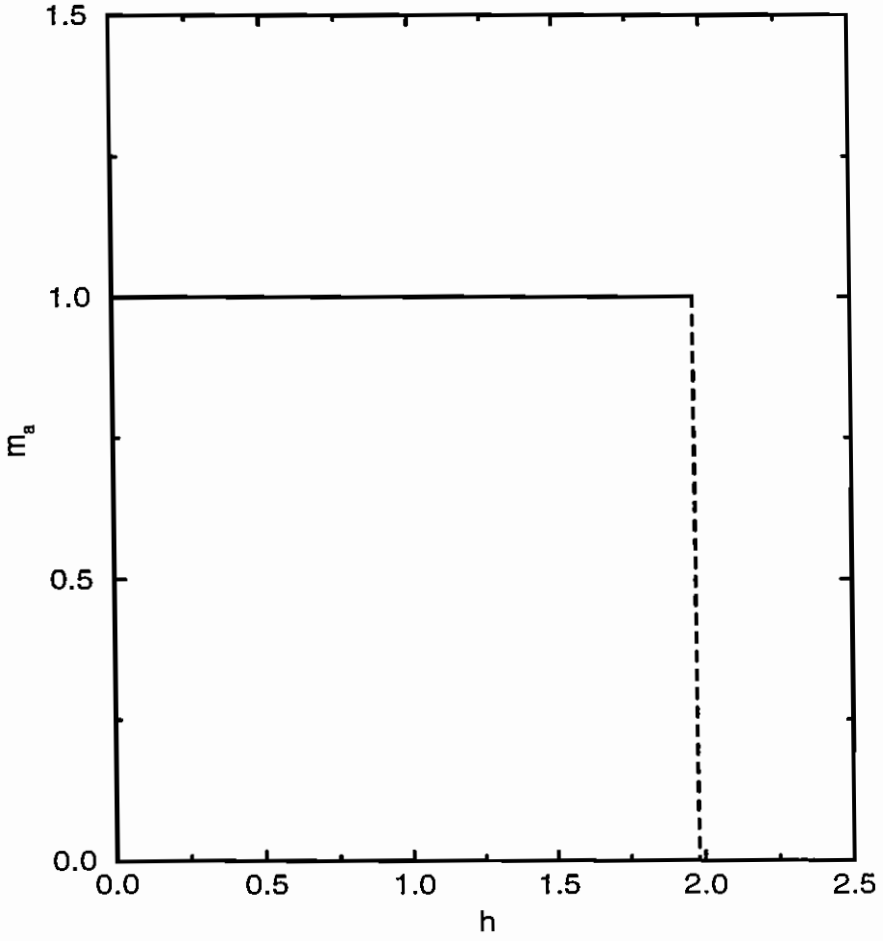

Figura 4.4: Magnetização alternante m_a em função de h para $\tau = 1.0$ e $\theta = 0.2$.

CAPÍTULO 5

Campo magnético dependente do tempo

Já observamos anteriormente, e vimos no capítulo antecedente, que as propriedades magnéticas de um sistema de spins sujeito a influência de um campo magnético estático são bastante diferentes daquelas onde o campo está ausente. Da mesma forma, se o campo magnético externo apresenta dependência temporal, o comportamento do sistema pode ser sensivelmente distinto daquele em que o campo permanece estático. De fato, *Tomé* e *de Oliveira* [25], analisando os estados estacionários do modelo de Ising cinético descrito pela dinâmica de Glauber [1], sujeito à influência de um campo magnético externo que varia senoidalmente com o tempo, e dentro da aproximação de campo médio, demonstraram que a magnetização do sistema oscila no tempo em torno de valores médios que dependem da temperatura e da amplitude do campo oscilante. Assim, para valores grandes destas

duas grandezas, eles encontraram que o sistema acompanha o campo, oscilando em torno de um valor médio que é zero. No limite oposto, entretanto, o sistema oscila em torno de valores médios diferentes de zero. A transição entre um e outro regime, o que corresponde a uma quebra espontânea de simetria, é contínua para valores suficientemente pequenos da amplitude do campo externo. Por outro lado, para valores maiores da amplitude e em baixas temperaturas, a transição torna-se descontínua e então, o sistema exibe um ponto tricrítico dinâmico conectando os dois comportamentos. Tal comportamento, observado no diagrama de fases dinâmico obtido via aproximação de campo médio, também é visto quando o diagrama de fases dinâmico é determinado através de simulações de Monte Carlo [26,27].

Neste capítulo analisaremos o comportamento magnético do sistema de spins definido no capítulo dois assumindo que o campo magnético externo aplicado sobre o sistema apresenta uma dependência temporal. Nosso interesse é determinar diagramas de fases dinâmicos, no plano amplitude do campo oscilante versus temperatura, para diferentes valores da razão entre os acoplamentos r (incluindo o já conhecido caso para ferromagnetos), e da frequência do campo externo.

Assim, vamos reescrever as eqs. (2.22-2.26) considerando que o campo magnético $H = H_0 \cos wt$ varia periodicamente no tempo com frequência w e amplitude H_0, ou seja:

$$\Omega\frac{dm_a}{d\xi} = -m_a + \frac{1}{2}F_1(m_a, m_f, r_{h1}, r_{h2}, r_v, \theta, h_0, r, \xi), \tag{5.1}$$

$$\Omega\frac{dm_f}{d\xi} = -m_f + \frac{1}{2}F_2(m_a, m_f, r_{h1}, r_{h2}, r_v, \theta, h_0, r, \xi), \tag{5.2}$$

$$\Omega\frac{dr_{h1}}{d\xi} = -2r_{h1} + F_3(m_a, m_f, r_{h1}, r_{h2}, r_v, \theta, h_0, r, \xi), \tag{5.3}$$

$$\Omega\frac{dr_{h2}}{d\xi} = -2r_{h2} + F_4(m_a, m_f, r_{h1}, r_{h2}, r_v, \theta, h_0, r, \xi), \tag{5.4}$$

e

$$\Omega\frac{dr_v}{d\xi} = -2r_v + F_5(m_a, m_f, r_{h1}, r_{h2}, r_v, \theta, h_0, r, \xi), \tag{5.5}$$

onde $\Omega = w\tau$, $\xi = wt$ e $h_0 = \frac{H_0}{J_1}$. Como antes, evitamos escrever explicitamente as funções F_i pois são demasiadamente grandes. Podemos observar a evolução temporal do sistema em direção aos estados estacionários, resolvendo numericamente o conjunto de equações acopladas acima . Assim, usando o método de Runge-Kutta [33] para valores fixos dos parâmetros θ, h_0, r e Ω é possível verificar uma quebra de simetria como ocorre no modelo ferromagnético estudado por *Tomé* e *de Oliveira* [25]. Ou seja, dependendo dos valores considerados dos parâmetros do modelo, podemos verificar que o sistema oscila em torno de um valor médio que pode ser igual ou diferente de zero. Neste ponto é importante diferenciar qual a resposta do sistema quando $r < 0$ daquela quando $r > 0$. Enquanto no

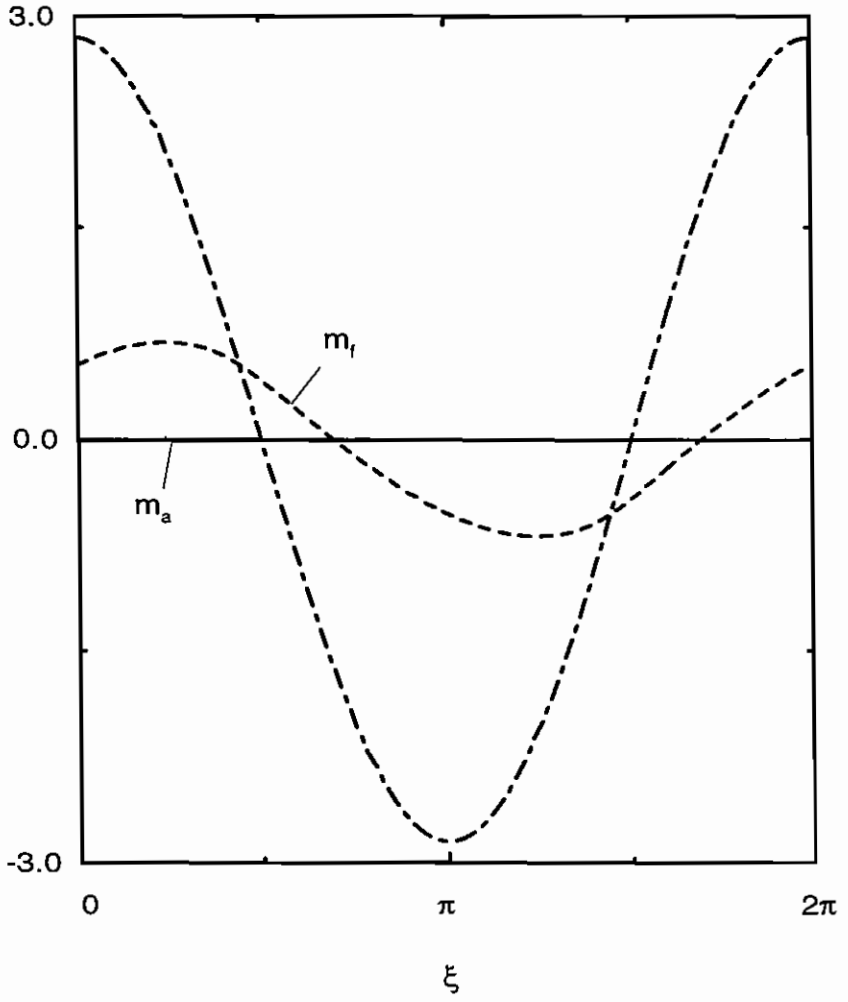

Figura 5.1: Soluções estacionárias da magnetização (linha tracejada) e da magnetização alternante (linha cheia) em funç ao de ξ para $r = 1.0$, $\frac{\Omega}{2\pi} = 0.1$, $\theta = 1.5$ e $h_0 = 2.85$. A linha tracejada-pontilhada corresponde ao campo magnético $h_0 \cos\xi$.

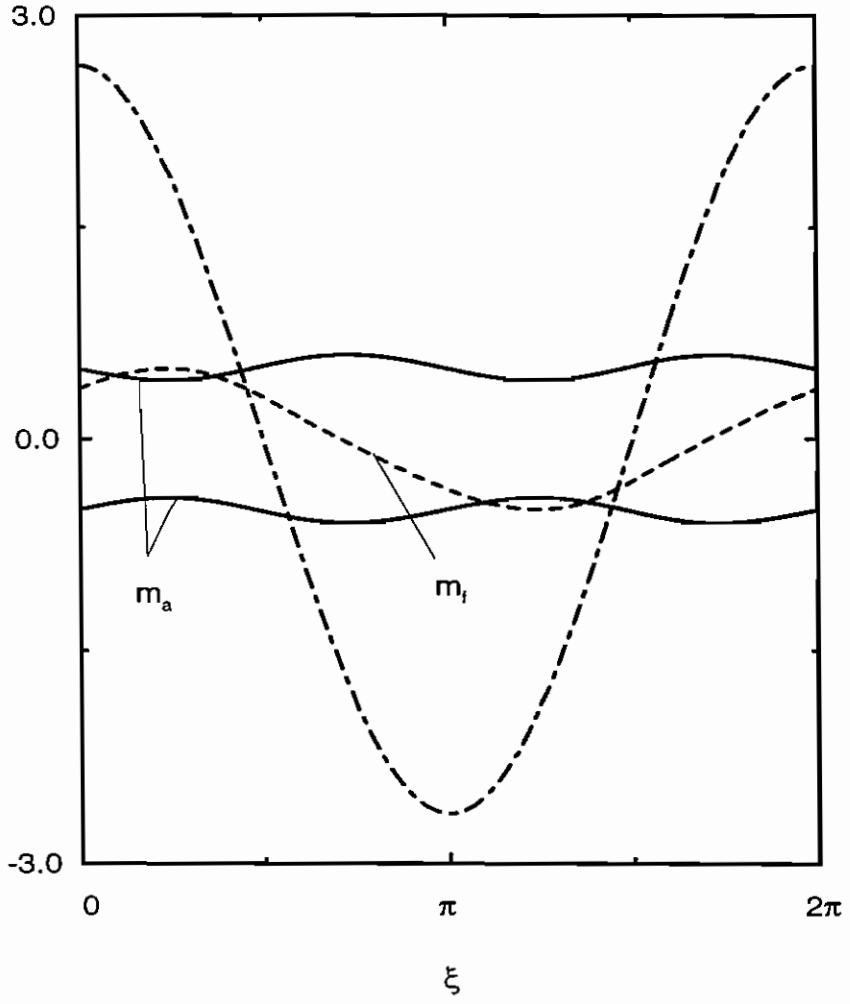

Figura 5.2: Soluções estacionárias da magnetização (linha tracejada) e da magnetização alternante (linha cheia) em funç ao de ξ para $\tau = 1.0$, $\frac{\Omega}{2\pi} = 0.1$, $\theta = 1.5$ e $h_0 = 2.65$. A linha tracejada-pontilhada corresponde ao campo magnético $h_0 \cos\xi$.

primeiro caso trata-se de um sistema ferromagnético cuja resposta é dada pela magnetização $m_f = \frac{1}{2}(m_1 + m_2)$, no segundo ela é obtida através da determinação da magnetização alternante $m_a = \frac{1}{2}(m_1 - m_2)$.

Então, por exemplo, se fixarmos $r > 0$ (sistema metamagnético), Ω, e a temperatura θ e variarmos a amplitude do campo oscilante h_0, podemos notar que as soluções estacionárias da magnetização alternante serão de dois tipos: no primeiro deles, a solução m_a será sempre zero, da tal forma que as magnetizações das subredes 1 e 2 serão sempre iguais em qualquer instante de tempo. A uma solução com esta propriedade chamamos de simétrica ou paramagnética. Ela ocorre para valores grandes da temperatura e da amplitude do campo externo. Um exemplo deste tipo de solução pode ser visto na figura 5.1. Entretanto, se mantivermos a temperatura (além de r e de Ω) fixa, e diminuirmos a amplitude do campo oscilante, esta solução torna-se instável e uma outra solução estável é obtida. Neste caso a magnetização alternante oscila em torno de um valor médio que é diferente de zero com uma frequência duas vezes maior que a do campo. A esta solução chamamos de não-simétrica ou antiferromagnética, e notamos ainda que ela apresenta sempre dois ramos independentes e defasados entre si de $\frac{\pi}{4}$. Na figura 5.2 podemos ver um exemplo deste tipo de comportamento. Também podemos observar nas figuras 5.1 e 5.2 que a magnetização m_f do sistema acompanha o campo oscilante qualquer que seja o tipo de solução encontrada para a magnetização alternante e, portanto, seu valor médio é sempre igual a zero.

Se ao invés de buscar as soluções estacionárias estáveis de um sistema metamagnético, como foi feito acima, buscássemos as soluções estacionárias estáveis para um sistema ferromagnético, encontraríamos, também, uma quebra de simetria. Porém, no

caso da solução simétrica, a magnetização m_f oscilaria em torno de zero, enquanto na solução não-simétrica, as duas soluções estáveis e independentes, mas defasadas entre si, oscilariam com a mesma frequência do campo magnético, em torno de um valor médio diferente de zero. A solução estável m_a seria sempre nula.

O comportamento descrito acima sugere, então, uma definição para o parâmetro de ordem dinâmico do sistema. Assim, se calcularmos o valor médio da magnetização alternante em um ciclo de oscilação, após o sistema ter alcançado o estado estacionário, naturalmente obteríamos um parâmetro de ordenamento dinâmico que poderia identificar a quebra de simetria em sistemas metamagnéticos. Por outro lado, calculando o valor médio da magnetização, poderíamos obter um parâmetro de ordenamento dinâmico apropriado para sistemas ferromagnéticos. Obviamente, usamos um ou outro conforme o valor de r. Podemos facilmente calcular estes valores médios através das seguintes integrais:

$$M_{a,f} = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} m_{a,f}(\xi)d\xi\,. \tag{5.6}$$

Assim, nas figuras 5.3 e 5.4 mostramos o comportamento do parâmetro de ordem dinâmico M_f em função da amplitude do campo oscilante para $r = -1.0$, $\frac{\Omega}{2\pi} = 0.1$, e dois valores diferentes da temperatura, $\theta = 0.55$, e $\theta = 0.40$. Podemos observar na figura 5.3 que a magnetização média diminui continuamente em direção a zero quando aumentamos o valor de h_0. Porém, na figura 5.4 ela salta de um valor não nulo para zero, ou seja, a quebra de simetria ocorre de forma descontínua.

Assim como é possível determinar o valor médio em torno do qual as magnetizações oscilam é possível examinar se estas soluções são estáveis ou instáveis pois, a estabilidade de uma solução pode ser verificada através do expoente de Liapunov λ associado

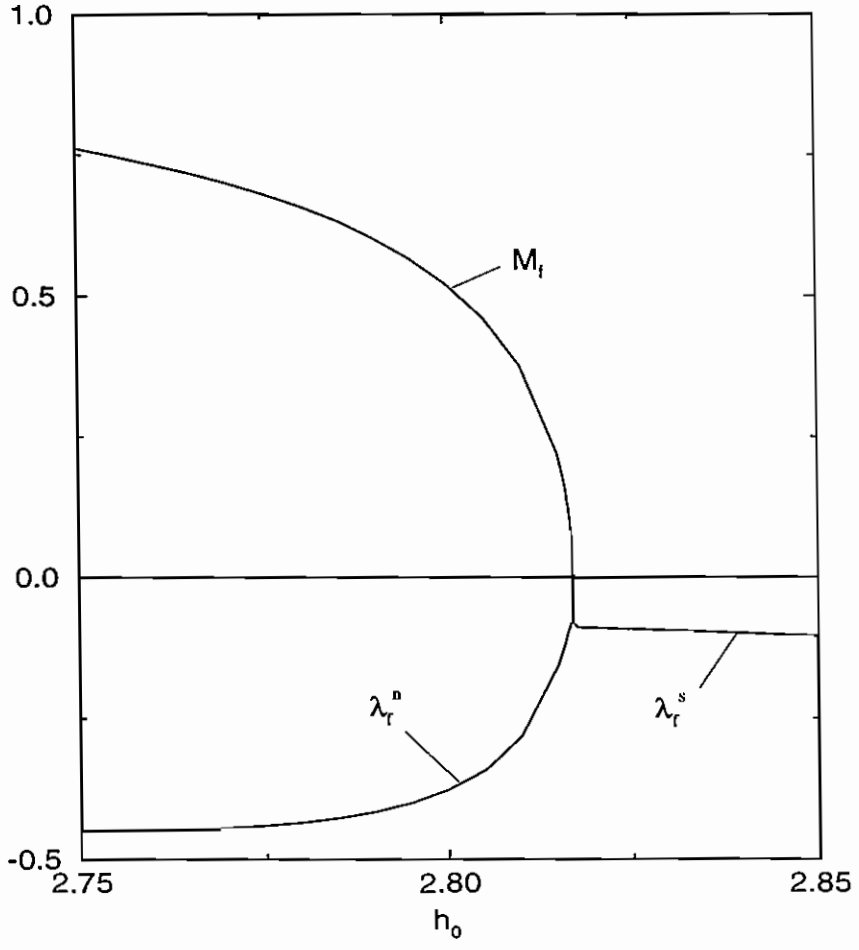

Figura 5.3: Parâmetro de ordem M_f e os expoentes de Liapunov λ_f^s e λ_f^n são mostrados como função da amplitude do campo oscilante para $r = -1.0$, $\frac{\Omega}{2\pi} = 0.1$ e $\theta = 0.55$.

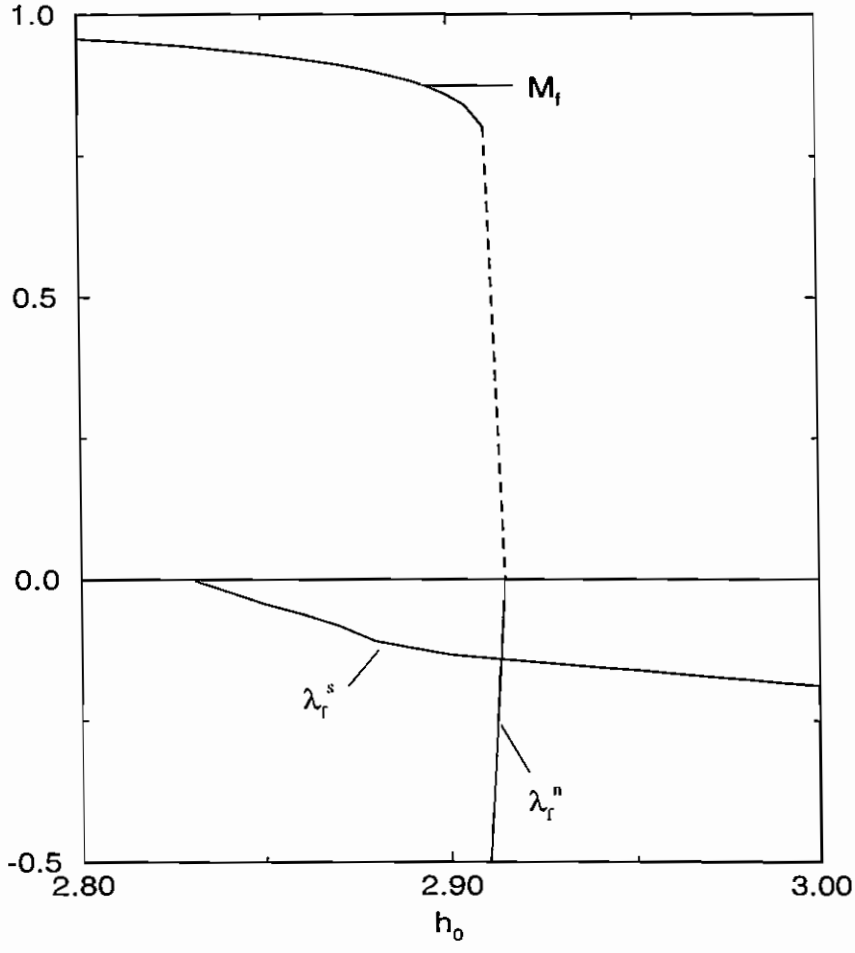

Figura 5.4: Parâmetro de ordem M_f e os expoentes de Liapunov λ_f^s e λ_f^n são mostrados como função da amplitude do campo oscilante para $\tau = -1.0$, $\frac{\Omega}{2\pi} = 0.1$ e $\theta = 0.40$.

a esta solução [48]. Se reescrevemos as eqs. (5.1) e (5.2) na forma

$$\Omega \frac{dm_{a,f}}{d\xi} = G_{a,f}(m_a, m_f, rh_1, rh_2, r_v, \theta, h_0, r, \xi)\,, \tag{5.7}$$

podemos mostrar (ver apêndice) que o expoente de Liapunov para cada variável pode ser escrito como

$$\Omega \lambda_{a,f} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{\partial G_{a,f}}{\partial m_{a,f}} d\xi\,. \tag{5.8}$$

Se a variável $\lambda_{a,f}$ é negativa a solução correspondente é estável.

Entretanto, como vimos acima, dado um valor de r o modelo pode apresentar duas soluções, uma simétrica e outra não-simétrica e, portanto, devemos encontrar os expoentes para determinar a estabilidade de cada uma das soluções. Então definimos $\lambda^s_{a,f}$ como o expoente de Liapunov associado a solução simétrica, correspondente a uma solução paramagnética, e $\lambda^n_{a,f}$ como o expoente da solução não simétrica, que fornece a estabilidade da fase ferromagnética ($r < 0$) ou da fase antiferromagnética ($r > 0$). Um exemplo do comportamento de λ^s_f e λ^n_f como função da amplitude do campo magnético para $r < 0$, Ω, e θ fixos, é mostrado nas figuras 5.3 e 5.4 juntamente com M_f. Conforme podemos ver na figura 5.3, somente a solução não-simétrica é estável enquanto $M_f \neq 0$. Para $M_f = 0$ a única solução estável é a solução simétrica. Por outro lado, observando a figura 5.4 podemos notar que existe um intervalo de valores de h_0 onde ambas as soluções são estáveis. Então podemos concluir que existe um intervalo de valores de h_0 onde as fases paramagnética e ferromagnética coexistem simultaneamente.

Além disso, observamos que a linha de fronteira da fase paramagnética

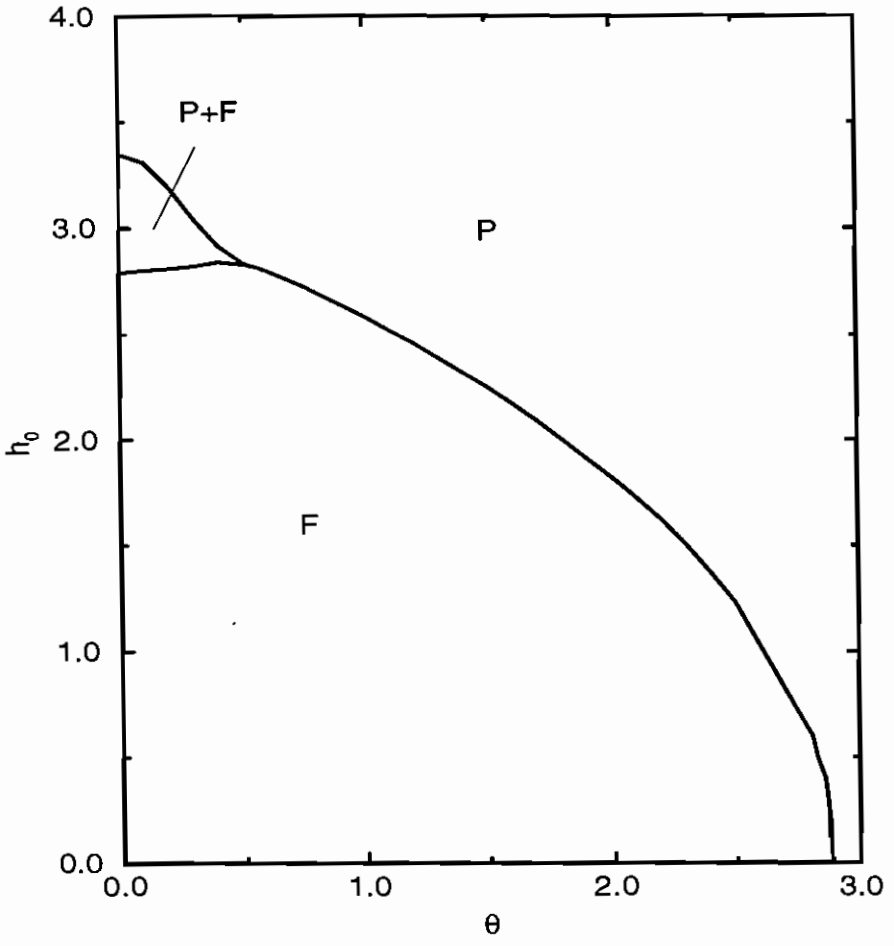

Figura 5.5: Diagrama de fases dinâmico no plano amplitude do campo oscilante versus temperatura para $r = -1.0$ e $\frac{\Omega}{2\pi} = 0.1$. P e F representam as fases paramagnética e ferromagnética, respectivamente, enquanto $P + F$ indica a região de coexistência das duas fases .

coincide com a linha de fronteira da fase ferromagnética sempre que os valores da amplitude do campo magnético externo são pequenos. Por outro lado, aumentando-se o valor da amplitude do campo elas são distintas, de tal modo que o diagrama de fases dinâmico, no plano temperatura versus amplitude do campo apresenta uma região de coexistência das duas fases. O diagrama de fases dinâmico apresenta, então, um ponto tricrítico conectando os dois comportamentos. Na figura 5.5 mostramos o diagrama de fases dinâmico para nosso modelo, considerando $r = -1.0$ e $\frac{\Omega}{2\pi} = 0.1$. Este diagrama representa o comportamento de um ferromagneto na presença de um campo oscilante, quando os acoplamentos vertical e horizontal são iguais. Se aumentarmos ou diminuirmos o módulo de r (mantendo o mesmo sempre negativo), não esperaríamos nenhuma mudança siginificativa na estrutura do diagrama mas, apenas uma mudança nos valores da temperatura e da amplitude dos campos críticos.

Por outro lado, se considerarmos um sistema metamagnético sujeito à influência de um campo externo dependente do tempo, observaremos que a estrutura do diagrama de fases é bastante diferente dependendo do valor dado ao parâmetro de competição r. Assim, por exemplo, se considerarmos $r = 1.0$ e $\frac{\Omega}{2\pi} = 0.1$ verificaremos um comportamento semelhante àquele do ferromagneto. No diagrama de fases dinâmico da figura 5.6 podemos ver que existe uma região de valores de h_0 e de θ onde as fases paramagnética e antiferromagnética coexistem mutuamente. Esta região de coexistência é encontrada para valores baixos da temperatura. Para valores maiores, as linhas de estabilidade de ambas as fases tornam-se idênticas. Entretanto, se considerarmos $r = 10.0$, veremos que as fronteiras paramagnética e antiferromagnética coincidem sempre, quaisquer que sejam os valores da temperatura e da

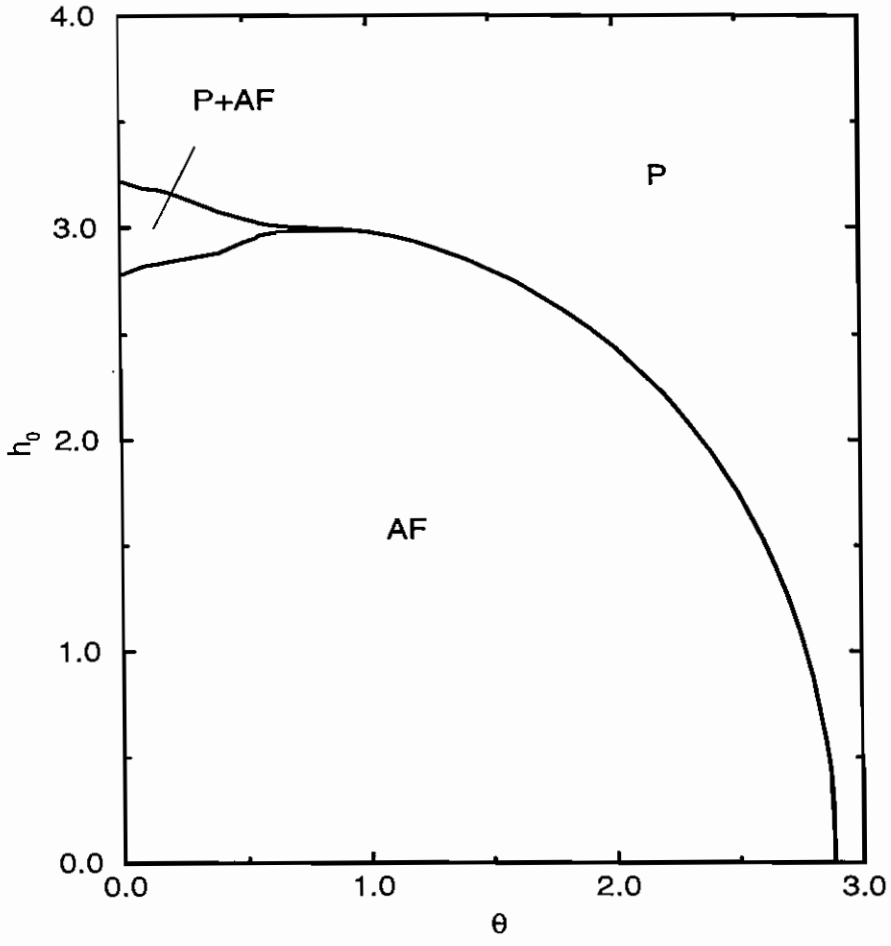

Figura 5.6: Diagrama de fases dinâmico no plano amplitude do campo oscilante versus temperatura para $r = 1.0$ e $\frac{\Omega}{2\pi} = 0.1$. P e AF representam as fases paramagnética e antiferromagnética, respectivamente, enquanto $P + F$ indica a região de coexistência das duas fases .

amplitude do campo oscilante. Então, para este valor do parâmetro de competição entre os acoplamentos ferro e antiferromagnético, não existe coexistência de duas fases distintas, de tal forma que o ponto tricrítico não está mais presente. Na figura 5.7 representamos o diagrama de fases dinâmico para este valor de r, usando o mesmo valor de Ω do diagrama anterior.

Neste valor de r, o acoplamento antiferromagnético da direção vertical é bem maior que o acoplamento ferromagnético da horizontal, de tal forma que o sistema se comporta tipicamente como um antiferromagneto puro. De fato, em um estudo realizado anteriormente por *Hoenicke*, *D'Ajello* e *Figueiredo* [28] não foi encontrada nenhuma região no diagrama de fases dinâmico do modelo de Ising cinético antiferromagnético sujeito à um campo oscilante, que fosse compatível com a coexistência de duas fases distintas, como no modelo de Ising cinético ferromagnético. Exibimos na figura 5.8 os valores das amplitudes dos campos críticos estáveis h_0^c em função do parâmetro r à temperatura nula. Podemos verificar que para valores pequenos de r, existem dois campos estáveis: um deles fornece o valor da amplitude crítica do limite de estabilidade da fase paramagnética e o outro da fase antiferromagnética. Entretanto, aumentando o valor de r, observamos que o intervalo entre uma amplitude crítica e outra vai diminuindo, até que nenhuma diferença entre elas seja observada. Ou seja, os dois limites de estabilidade convergem para um único ponto e apenas uma transição contínua ocorre entre as fases paramagnética e antiferromagnética. Este não é o caso se tomarmos $\Omega << 1$. Neste limite o campo oscilante tende a se tornar estático e portanto, de acordo com os resultados encontrados no capítulo anterior, devemos observar uma transição descontínua entre as duas fases em $\theta = 0$ para qualquer valor do parâmetro

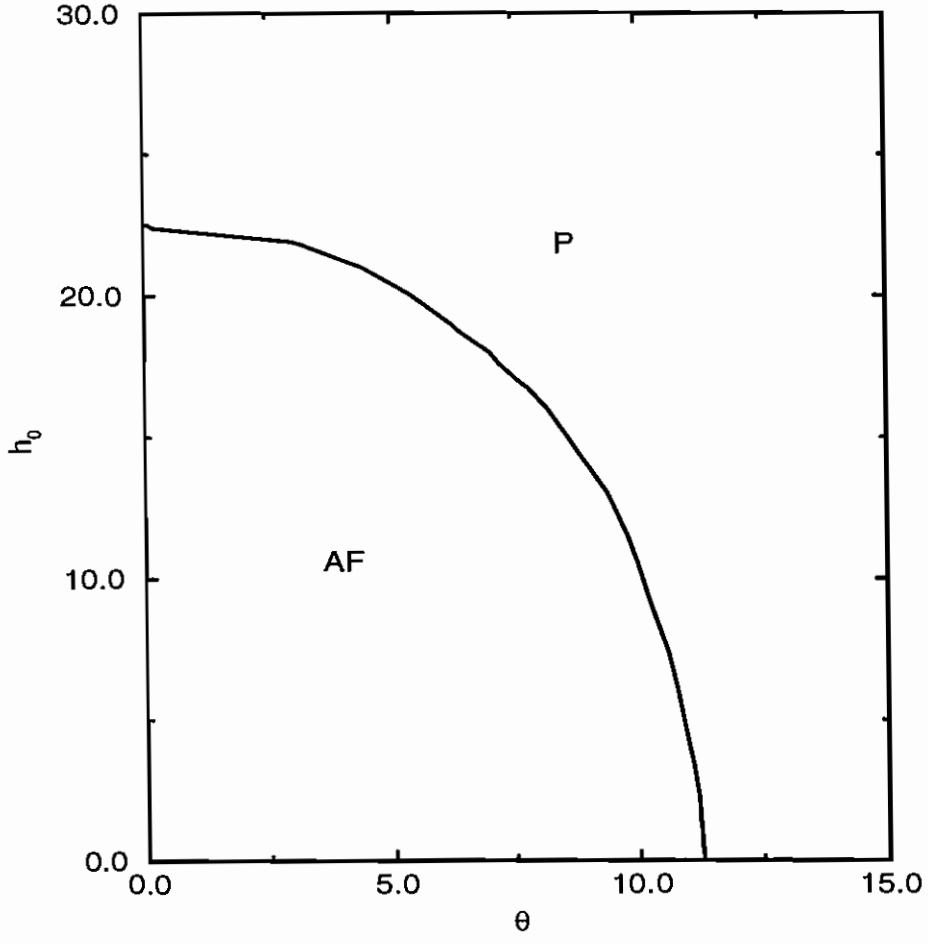

Figura 5.7: Diagrama de fases dinâmico no plano amplitude do campo oscilante versus temperatura para $\tau = 10.0$ e $\frac{\Omega}{2\pi} = 0.1$. P e AF representam as fases paramagnética e ferromagnética, respectivamente. .

de competição τ. Isto é, devemos encontrar valores diferentes para as amplitudes críticas estáveis das fases paramagnética e antiferromagnética independente do valor assumido por τ. Conforme pode ser visto na figura 5.9, as linhas de estabilidade para as amplitudes dos campos críticos, para um pequeno valor do parâmetro Ω, ainda em $\theta = 0$, seguem paralelas entre sí, de tal forma que a região entre elas corresponde à uma região de coexistência das duas fases. Podemos observar, ainda, nestas duas últimas figuras que, no limite em que $\tau \to 0$ o campo crítico reduzido h_c vai à 2. Em princípio este resultado pode parecer um pouco estranho pois, neste limite, o sistema torna-se unidimensional e apesar da temperatura ser nula, o sistema passa por uma transição de fases, cujo amplitude do campo crítico é dada por $H_0^c = 2J_1$, ou seja, duas vezes o valor do acoplamento ferromagnético entre dois spins vizinhos. Entretanto é fácil entender o que está acontecendo se focalizarmos nossa atenção no modelo de Ising ferromagnético unidimensional de N spins que está sujeito a um campo magnético variando periodicamente com o tempo e à temperatura zero. Seja J_1 a constante de acoplamento entre dois spins primeiros vizinhos. Partindo do princípio que exista uma transição entre as fases ferro e paramagnética, o parâmetro de ordem dinâmico M_f, dado pela eq. (5.6), deve ser diferente de zero abaixo de um certo valor crítico da amplitude do campo e zero acima. Para M_f ser igual a zero num período de tempo, é necessário que $m_f(\xi)$ seja zero em todo o intervalo, ou então que oscile periodicamente em torno de zero neste período. Para que isto ocorra é necessário que metade dos spins do sistema tenham sido invertidos. Vejamos, então, se é possível de se inverter um dos spins do sistema.

Supomos que todos os spins estejam alinhados na direção oposta do campo e que a amplitude seja a máxima. Nesta situação a energia do sistema é dada por

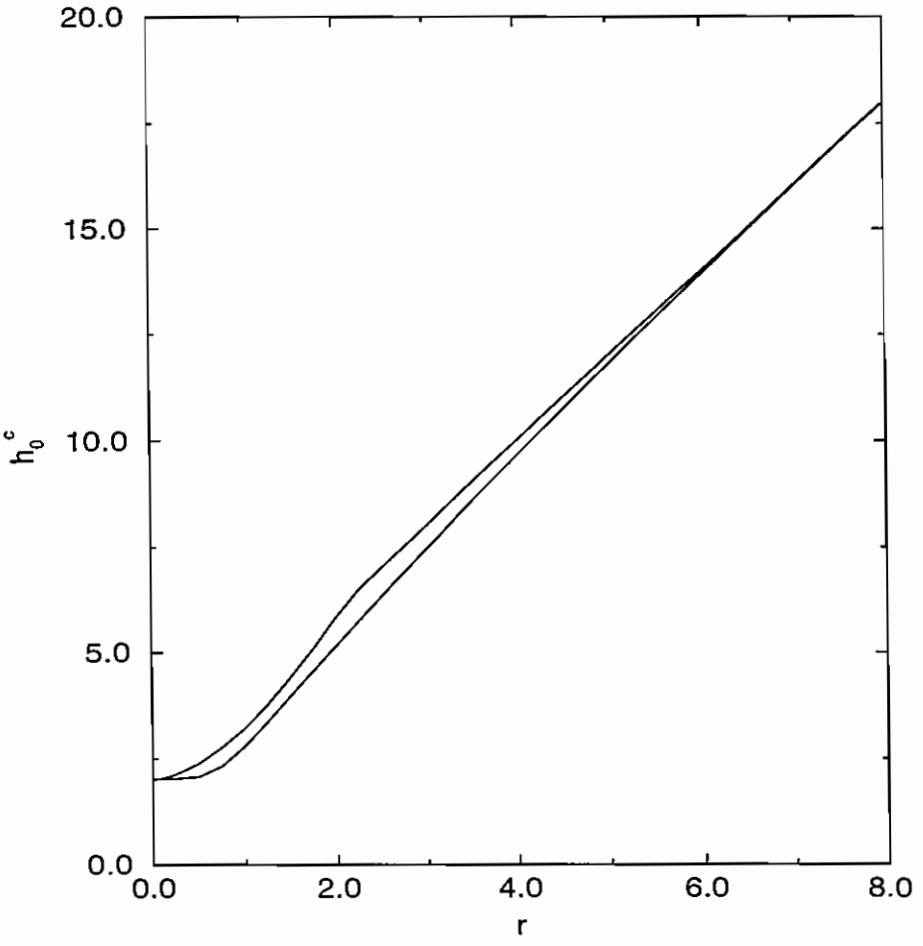

Figura 5.8: Amplitude crítica do campo oscilante em função do parâmetro de competição r à temperatura zero para $\frac{\Omega}{2\pi} = 0.1$.

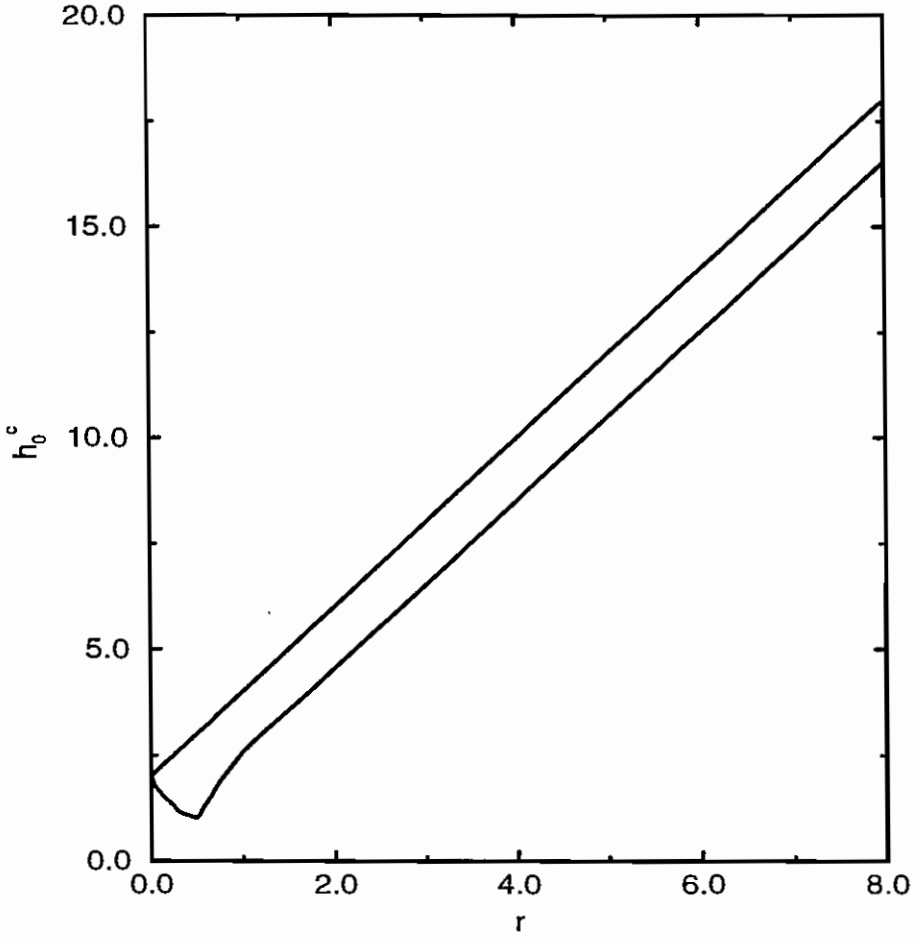

Figura 5.9: Amplitude crítica do campo oscilante em função do parâmetro de competição r à temperatura zero para $\frac{\Omega}{2\pi} = 0.01$.

$E = (-J_1 + H)N$. Podemos calcular também a energia que o sistema teria se, por acaso, um dos spins tivesse sido invertido nesta situação. Neste caso obteríamos um valor dado por $E' = E + 2(2J_1 - H)$. Agora, se aplicarmos um campo cuja amplitude H_0 for maior que $2J_1$, a energia desta última configuração será menor que a da primeira, ou seja, $E' < E$. Neste caso o spin é naturalmente invertido e a segunda configuração é obtida. Se o campo continuar na mesma direção, outros spins serão invertidos até que a metade deles estejam no sentido do campo e a outra metade contrária ao campo. Se o campo ainda continuar no mesmo sentido, porém podendo até estar diminuindo sua amplitude, a metade dos spins contrários deverá continuar sendo invertida, até que a configuração de mínima energia seja atingida. Nesta configuração todos os spins do sistema estão alinhados com o campo magnético. Se o campo magnético inverter sua direção, todo o procedimento acima é novamente realizado, de tal forma que em um período do oscilação a magnetização instantânea $m(\xi)$ varia entre 1 e -1 sobre um valor médio que é zero. Este resultado permite então, concluir que o modelo de Ising ferromagnético unidimensional sujeito a um campo magnético que varia periodicamente com o tempo em torno de um valor médio igual a zero pode sofrer uma transição de fases em temperatura nula.

Em resumo, mostramos neste capítulo que a aproximação de pares fornece um diagrama de fases dinâmico estruturalmente idêntico àquele obtido via aproximação de campo médio para o modelo de Ising cinético ferromagnético. Também verificamos que um sistema metamagnético pode apresentar comportamentos dinâmicos completamente distintos entre si, dependendo dos valores usados para o parâmetro de competição r e da frequência do campo oscilante. Isto é, mostramos que o sistema pode exibir, ou não o ponto tricrítico.

Além disso, mostramos que mesmo um modelo de Ising ferromagnético unidimensional pode passar por uma transição de fases dinâmica em $\theta = 0$

Parte II

Modelo de Ising transverso dirigido por campo oscilante no tempo

CAPÍTULO 6

O modelo de Ising transverso

Entre os vários métodos matemáticos empregados para se obter a solução exata do modelo de Ising bidimensional, na ausência de campo externo, está aquele desenvolvido por *Mattis*, *Schultz* e *Lieb* [29] no qual o modelo de Ising ferromagnético é mapeado num modelo de Ising em campo transverso, através do uso da matriz de transferência, e então resolvido como um problema de muitos férmions. Posteriormente à esta solução, *Elliot* e coloboradores [49] demonstraram a equivalência entre o modelo de Ising ferromagnético em $(d+1)$-dimensões e o estado fundamental de um modelo de Ising em campo transverso em d-dimensões. Entretanto, foi *Suzuki* [50], utilizando o formalismo de Trotter [51], quem primeiro obteve os expoentes críticos associados com a transição de ordem-desordem do estado fundamental do modelo quântico que são idênticos àqueles associados à transição de fase térmica do modelo de Ising ferromagnético, de tal forma que os dois modelos pertencem à mesma classe de universalidade. Neste mapeamento a amplitude do campo transverso faz

o papel da temperatura [52], sendo a responsável pelas flutuações quânticas.

Além de sua equivalência com um modelo de Ising em dimensão maior, o modelo de Ising em campo transverso, introduzido por *de Gennes* [53] para estudar a transição de fases em sistemas ferroelétricos, tem sido utilizado para modelar teoricamente uma grande variedade de sistemas físicos que apresentam transição de fases do tipo ordem-desordem. [53-59]. Exemplos da aplicação do modelo podem ser encontrados em ferroelétricos com pontes de hidrogênio, tal como no cristal KDP, e em terras-raras. Então, devido à sua conexão com uma grande variedade de sistemas encontrados em física da matéria condensada, o modelo de Ising em um campo transverso tem sido usado para compreender, também, a resposta de sistemas quânticos de spins a campos externos dependentes do tempo, especialmente com respeito a histerese observada nestes casos [27,30,31,59].

Neste e nos dois próximos capítulos, estudaremos uma cadeia linear de spins de Ising com acoplamento ferromagnético entre spins primeiros vizinhos em um campo transverso à direção dos spins. Além disso, este sistema estará sujeito à um campo magnético externo, longitudinal, que varia senoidalmente com o tempo. Como discutimos acima, as propriedades do estado fundamental deste modelo correspondem às propriedades do modelo de Ising ferromagnético em duas dimensões, quando o campo magnético externo está ausente em ambos os sistemas. Então, a fim de conectar esta segunda parte com a primeira, vamos nos ater ao estudo deste modelo em $T = 0$, de tal forma a considerar apenas as flutuações quânticas. Neste estudo empregamos um método de Monte Carlo recentemente desenvolvido para estudar as propriedades do estado fundamental de sistemas quânticos de spin no estado de equilíbrio [60,61], e a aproximação de campo médio. Nosso interesse reside

em determinar a linha crítica entre as fases ordenada e desordenada, no plano das amplitudes dos campos transversal e longitudinal. Também investigaremos a dissipação de energia do sistema sobre um ciclo completo de oscilação, representada pela área da curva de histerese longitudinal, para vários parâmetros do modelo a fim de encontrar expoentes que mostrem a dependência desta área com os parâmetros de controle do modelo.

6.1 O modelo

Consideramos o seguinte hamiltoniano com acoplamento ferromagnético entre spins primeiros vizinhos para descrever uma cadeia de N spins sujeita a dois tipos de campos externos: um campo externo transverso de magnitude constante, e um campo magnético longitudinal externo que depende do tempo:

$$\mathcal{H} = -\sum_{i}^{N} J_i \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - \Gamma \sum_{i}^{N} \sigma_i^x - H_t \sum_{i}^{N} \sigma_i^z \,, \tag{6.1}$$

onde J_i é a constante de acoplamento ferromagnético entre o spins das posições i e $i+1$, Γ representa a amplitude do campo transverso e $H_t = h_0 \cos wt$ é o campo magnético longitudinal que varia periodicamente no tempo com frequência w e amplitude h_0. Os operadores de spin $\sigma_i^{z,x}$ são os operadores de Pauli.

O formalismo matemático usado para determinar a evolução temporal do sistema em direção aos estados estacionários, os quais possibilitam obter as propriedades do estado fundamental do modelo, está baseado na determinação dos autovetores $|\Psi(t)>$ e autovalores $E(t)$ do sistema, tanto para a aproximação de campo médio, que será estudado no próximo capítulo, como para o método de Monte Carlo, que será objeto de estudo no

capítulo 8.

CAPÍTULO 7

Análise de campo médio

A aproximação mais simples que podemos obter consiste em escrever o vetor de onda total $|\Psi(t)>$ como o produto direto dos vetores de onda dos spins individuais, isto é:

$$|\Psi(t)>=\prod_i |\phi_i(t)>, \tag{7.1}$$

onde o vetor $|\phi_i(t)>$ é uma combinação linear dos vetores da base tais que os operadores de spin σ_i^z são diagonais, ou seja,

$$|\phi_i(t)>= a_i(t)|+>_i +b_i(t)|->_i \ . \tag{7.2}$$

Os coeficientes desta expansão são normalizados através da condição de normalização

$$<\Psi(t)|\Psi(t)>=1.$$

A energia média do sistema no instante t $E(t)=<\Psi(t)|\mathcal{H}|\Psi(t)>$, é

dada por

$$E(t) = -\sum_{i}^{N}[J_i < \psi(t)|\sigma_i^z\sigma_{i+1}^z|\psi(t) >$$
$$+\Gamma < \psi(t)|\sigma_i^x|\psi(t) >$$
$$+H_t < \psi(t)|\sigma_i^z|\psi(t) >]. \tag{7.3}$$

Cada termo no lado direito da equação acima pode ser calculado separadamente usando-se a aproximação (7.1). Por exemplo, obtemos a seguinte expressão para o primeiro termo:

$$< \psi(t)|\sigma_i^z\sigma_{i+1}^z|\psi(t) >=< \phi_i(t)|\sigma_i^z|\phi_i(t) >< \phi_{i+1}(t)|\sigma_{i+1}^z|\phi_{i+1}(t) > .$$

onde usamos a relação $< \phi_j(t)|\phi_k(t) >= \delta_{j,k}$. Analogamente para os outros termos

$$< \psi(t)|\sigma_i^x|\psi(t) >=< \phi_i(t)|\sigma_i^x|\phi_i(t) >,$$

e

$$< \psi(t)|\sigma_i^z|\psi(t) >=< \phi_i(t)|\sigma_i^z|\phi_i(t) > .$$

Os operadores de Pauli satisfazem as seguintes relações

$$\sigma^z|\pm >= \pm|\pm >,$$

e

$$\sigma^x|\pm >= |\mp > .$$

Agora, levando em conta a combinação linear do vetor $|\phi_i(t) >$ e as relações acima podemos escrever a energia média do sistema no instante t como

$$E(t) = -\sum_{i}\Big\{J_i[a_i^2(t) - b_i^2(t)][a_{i+1}^2(t) - b_{i+1}^2(t)]$$
$$+ 2\Gamma a_i(t)b_i(t) + H_t[a_i^2(t) - b_i^2(t)]\Big\}. \tag{7.4}$$

Além do valor médio do operador hamiltoniano podemos calcular os valores médios associados aos operadores $\sigma_i^{z,x}$. Assim, seguindo os mesmos procedimentos adotados acima é possível mostrar, após algumas manipulações algébricas que

$$< \psi(t)|\sigma_i^z|\psi(t) >=< \sigma_i^z >= a_i^2(t) - b_i^2(t)\,, \tag{7.5}$$

e que

$$< \psi(t)|\sigma_i^x|\psi(t) >=< \sigma_i^x >= 2a_i(t)b_i(t)\,. \tag{7.6}$$

A condição de normalização da função de onda $|\Psi(t) >$ relaciona os coeficientes da expansão de $|\phi_i(t) >$ através de:

$$a_i^2(t) + b_i^2(t) = 1\,, \tag{7.7}$$

logo, é possível parametrizar nosso problema em função de uma única variável para cada sítio. Portanto, se escrevermos que

$$\begin{aligned} a_i(t) &= \cos\alpha_i\,, \\ b_i(t) &= \sin\alpha_i\,, \end{aligned}$$

e se, além disso, fizermos uma transformação do tipo $2\alpha_i = \frac{\pi}{2} - \theta_i$, encontraremos as seguintes equações para os valores médios:

$$E(t) = -\sum_i \{J_i \sin\theta_i \sin\theta_{i+1} + \Gamma\cos\theta_i + H_t \sin\theta_i\}\,, \tag{7.8}$$

$$< \sigma_i^z >= \sin\theta_i\,, \tag{7.9}$$

e

$$< \sigma_i^x >= \cos\theta_i\,. \tag{7.10}$$

O caso particular em que todos os acoplamentos J_i tornam-se iguais à J, permite assumir que a evolução temporal de um único spin em direção aos estados estacionários, é equivalente a evolução do sistema como um todo. Assim, tomando $\theta_i = \theta$ podemos escrever a equação para a energia média por spin, $\varepsilon = E/N$, e as magnetizações transversal $m_x =< \sigma_i^x >$ e longitudinal $m_z =< \sigma_i^z >$, da seguinte forma:

$$\varepsilon = -J\sin^2\theta - \Gamma\cos\theta - H_t\sin\theta\,, \tag{7.11}$$

$$m_z = \sin\theta\,, \tag{7.12}$$

e

$$m_x = \cos\theta\,. \tag{7.13}$$

Quando o campo magnético longitudinal não está presente, a minimização da energia média com relação a θ nos leva a seguinte solução

$$\cos\theta = \frac{\Gamma}{2J}\,, \tag{7.14}$$

se $\Gamma \leq 2J$. Caso contrário $\theta = 0$. Dessa forma é possível facilmente mostrar que

$$m_z = \sqrt{1 - \left(\frac{\Gamma}{2J}\right)^2}\,, \tag{7.15}$$

o que sugere uma transição entre as fases ordenada ($m_z > 0$) e desordenada ($m_z = 0$) em $\frac{\Gamma_c}{J} = 2$.

Vamos retornar ao problema considerando a presença do campo magnético longitudinal dependente do tempo. Neste caso, as equações para os valores da energia e das magnetizações, eqs. (7.11-7.13), dependem somente do parâmetro θ. Deste modo, para se

obter a evolução temporal destes valores médios em direção aos estados estacionários devemos primeiro encontrar a evolução temporal de θ. Então, propomos o seguinte *ansatz* para a evolução temporal do parâmetro θ:

$$\tau\frac{d\theta}{dt} = -\frac{d\varepsilon}{d\theta}, \tag{7.16}$$

onde τ é uma constante que representa o tempo de ralaxação para um único spin. Portanto, a equação de movimento para θ é dada por:

$$\Omega\frac{d\theta}{d\xi} = \sin\theta\cos\theta - \Gamma\sin\theta + H_\xi\cos\theta\,, \tag{7.17}$$

onde $\Omega = w\tau$, $\xi = wt$, e $2J = 1$.

Resolvemos numericamente a equação diferencial não linear acima, usando o método de Runge-Kutta de quarta ordem [33] e substituímos o valor estacionário de θ nas eqs. (7.12) e (7.13). Observavamos que, no estado estacionário, a resposta do sistema ao campo oscilante, além de ser sempre retardada, apresenta comportamentos distintos conforme os valores assumidos por Γ e h_0, mantendo-se Ω fixo. Num primeiro caso é possível notar que a magnetização longitudinal apresenta duas soluções não simétricas oscilando defasadas entre si mas com a mesma frequência do campo externo, porém retardadas em relação a ele. A magnetização transversal, por sua vez, também oscila com a frequência do campo externo, porém suas duas soluções não simétricas oscilam defasadas entre si. Exibimos este tipo de comportamento para as duas grandezas nas figuras 7.1 e 7.2. No segundo caso, uma única solução é encontrada para cada uma das magnetizações. Porém as diferenças entre elas já ocorrem com relação à simetria. Enquanto a magnetização longitudinal passa a oscilar simetricamente, com a mesma frequência do campo oscilante, a magnetização transversal

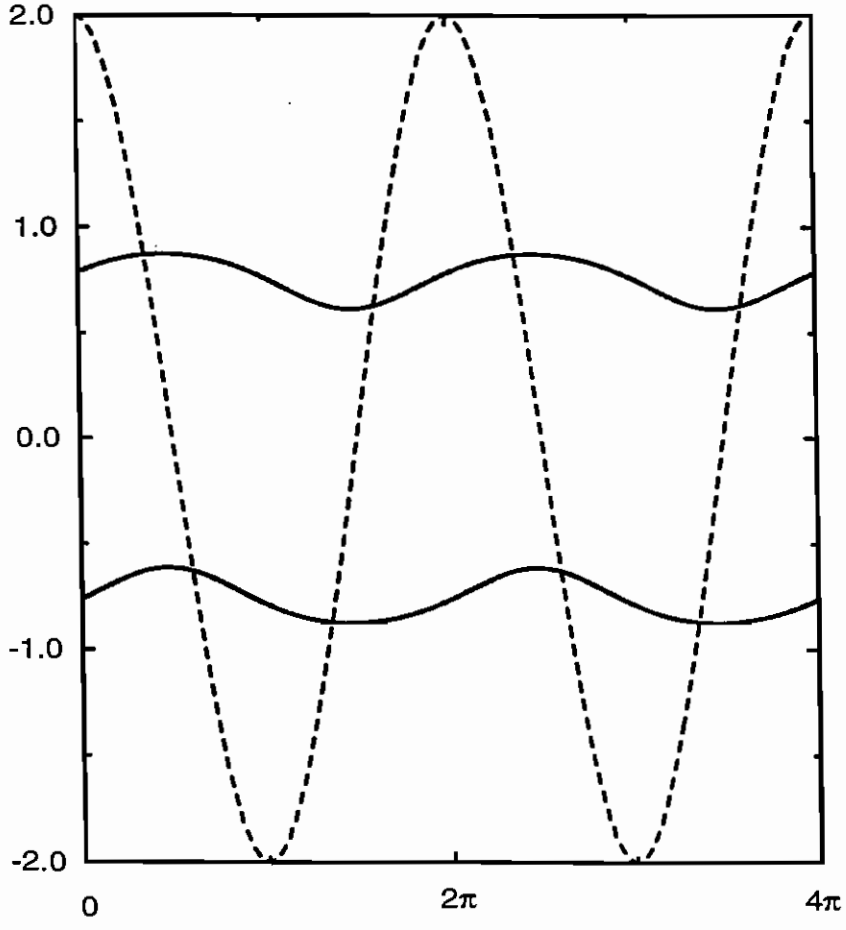

Figura 7.1: Magnetização longitudinal m_z em função de ξ para $h_0 = 2.0$, $\Gamma = 0.6$ e $\Omega = 2\pi$. As linhas tracejadas representam o campo magnético

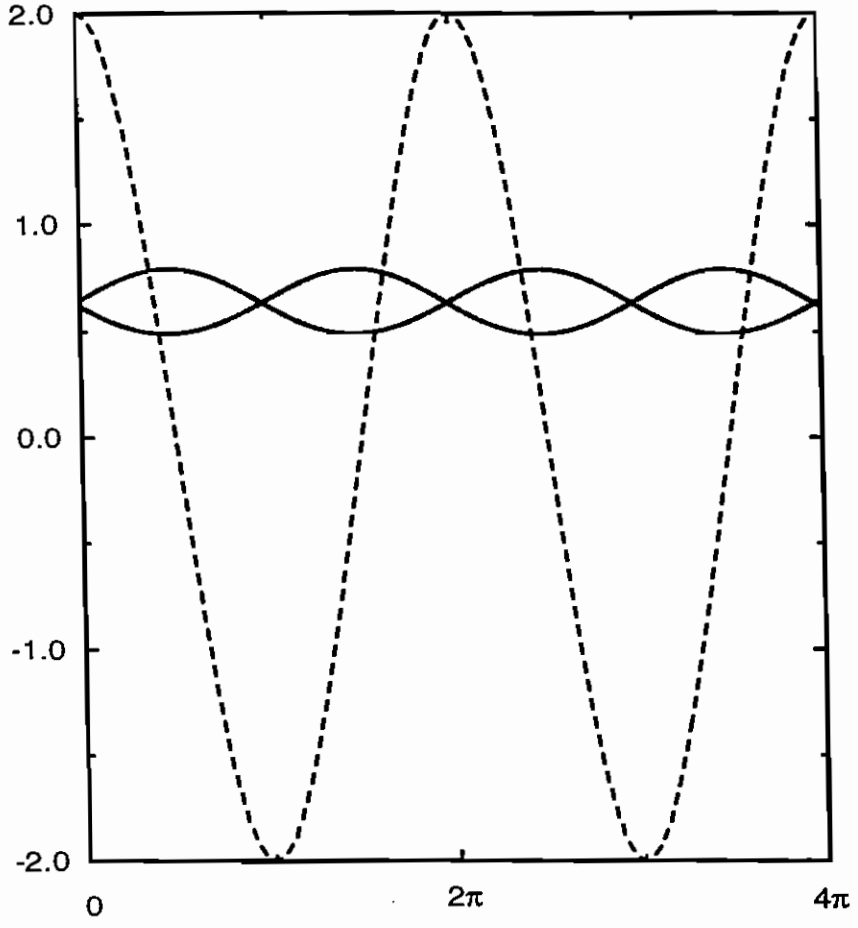

Figura 7.2: Magnetização transversal m_x em função de ξ para $h_0 = 2.0$, $\Gamma = 0.6$ e $\Omega = 2\pi$. As linhas tracejadas representam o campo magnético

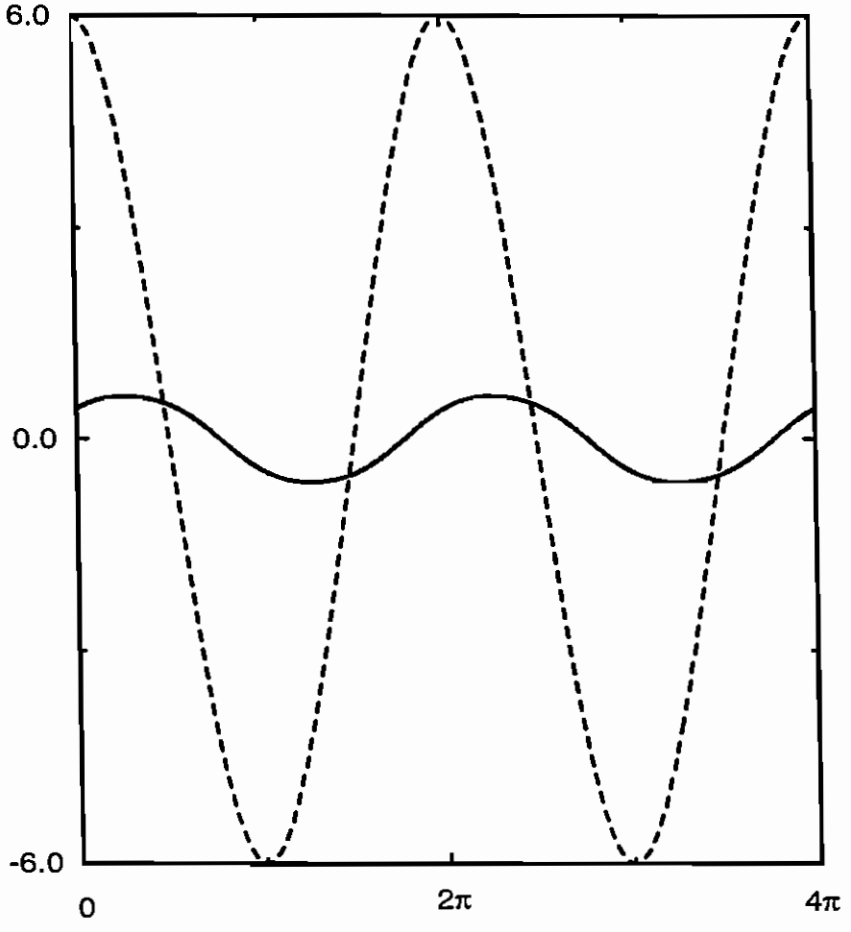

Figura 7.3: Magnetização longitudinal m_z em função de ξ para $h_0 = 6.0$, $\Gamma = 0.6$ e $\Omega = 2\pi$. As linhas tracejadas representam o campo magnético

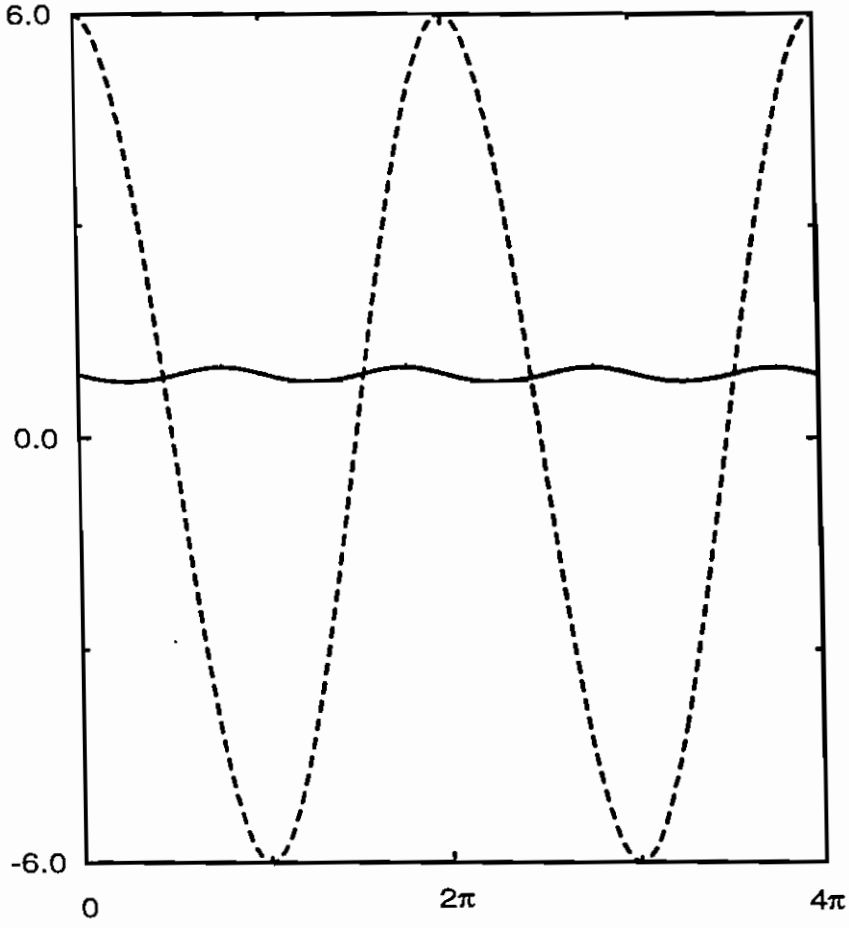

Figura 7.4: Magnetização transversal m_x em função de ξ para $h_0 = 6.0$, $\Gamma = 0.6$ e $\Omega = 2\pi$. As linhas tracejadas representam o campo magnético

continua não simétrica. Porém, sua frequência de oscilação passa a ser duas vezes maior que a frequência do campo externo. Este tipo de comportamento pode ser visto nas figuras 7.3 e 7.4. Agora, levando-se em conta tais considerações é possível imaginar a existência de uma transição de fase dinâmica entre as soluções não simétrica (ferromagnética) e simétrica (paramagnética) caracterizada pelas magnetizações longitudinal e transversal. Como em ambos os casos as propriedades físicas do sistema devem ser a mesma, resolvemos escolher a primeira delas como forma de obter a linha de transição entre as fases ferromagnética e paramagnética. Assim, se definirmos o parâmetro de ordem dinâmico M_z, no estado estacionário, como

$$M_z = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} m_z d\xi \,, \tag{7.18}$$

podemos observar, de acordo com as figuras 7.5 e 7.6, uma diminuição contínua deste parâmetro de ordenamento em direção a zero quando Γ aumenta, independentemente do valor assumido por h_0. No diagrama de fase dinâmico da figura 7.7, no plano $h_0 \times \Gamma$, podemos ver a linha de transições contínuas entre as fases ferromagnética ($M_z \neq 0$) e paramagnética ($M_z = 0$), para dois valores diferentes do parâmetro Ω.

Uma expressão analítica para a linha de transições críticas da figura 7.7 pode ser obtida no limite em que $h_0 \to 0$ se analisarmos o comportamento do expoente de Liapunov [48], associado a θ, e que é definido por:

$$\Omega\lambda = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} \frac{\partial F(\theta,\xi)}{\partial\theta} d\xi \,, \tag{7.19}$$

onde

$$\Omega\frac{d\theta}{d\xi} = F(\theta,\xi) \,. \tag{7.20}$$

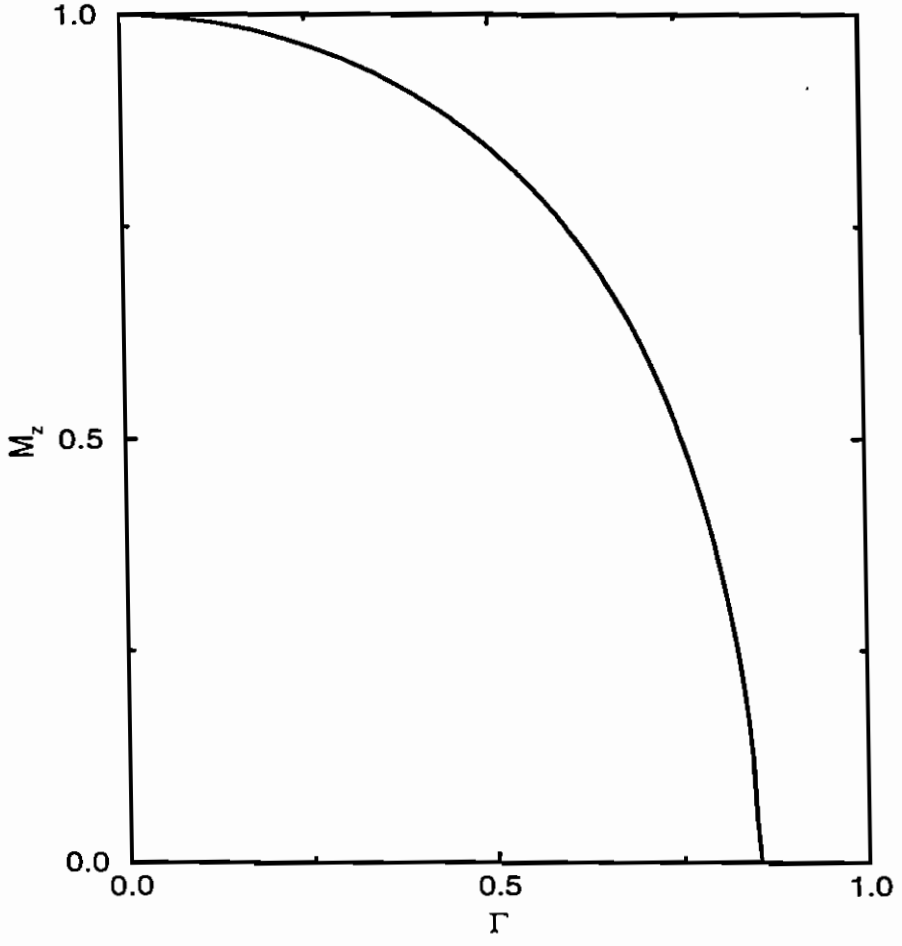

Figura 7.5: Parâmetro de ordenamento dinâmico M_z em função de Γ para $h_0 = 0.3$ e $\Omega = 0.2\pi$.

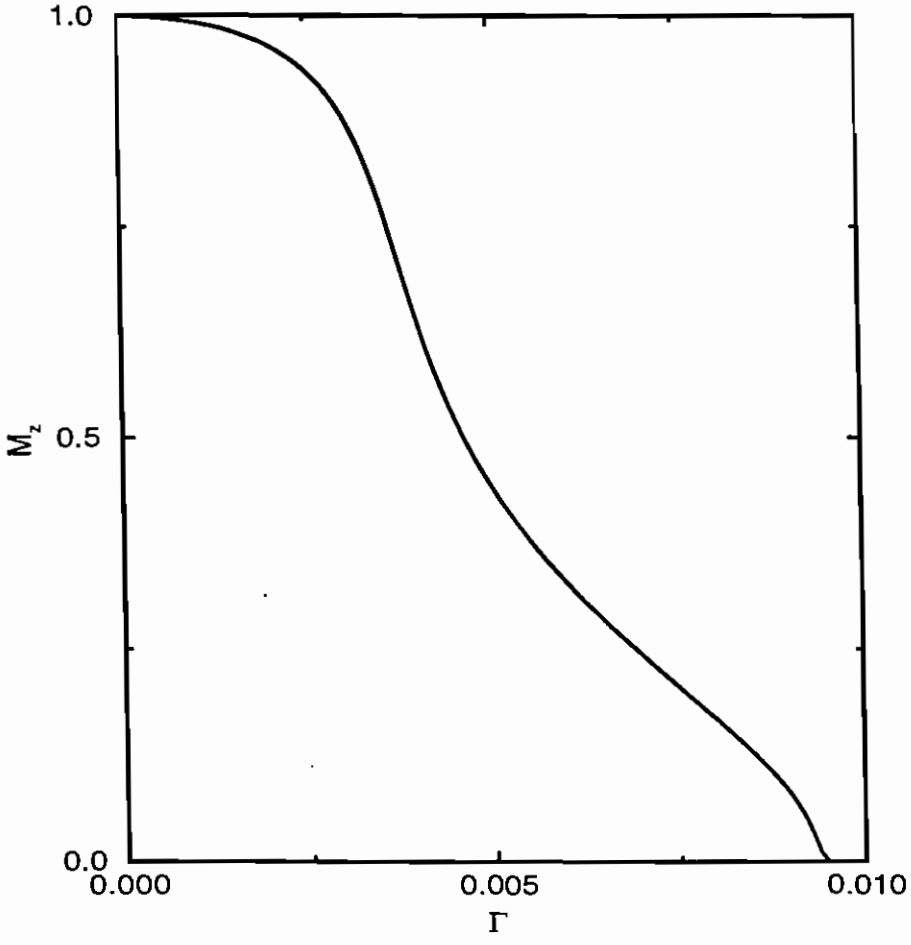

Figura 7.6: Parâmetro de ordenamento dinâmico M_z em função de Γ para $h_0 = 3.0$ e $\Omega = 0.2\pi$.

Nas vizinhanças da linha crítica o parâmetro de ordem é muito pequeno e, portanto, podemos expandir $\sin\theta$ e $\cos\theta$ em série de Taylor. Após algumas manipulações algébricas podemos mostrar que

$$F(\theta,\xi) = H_\xi + (1-\Gamma)\theta - \frac{H_\xi}{2}\theta^2 - \frac{1}{3}(2-\frac{\Gamma}{2})\theta^3 + \dots . \tag{7.21}$$

Além disso, como estamos tomando h_0 muito pequeno, podemos supor que

$$\theta \approx h_0 F_1(\xi) + h_0^3 F_3(\xi) . \tag{7.22}$$

Assim, se fizermos a derivada da eq. (7.21) com relação a θ e levarmos em conta a eq. (7.22) podemos reescrever a eq. (7.19), no limite considerado, como:

$$\Omega\Lambda = \frac{1}{2\pi}\cdot\int_0^{2\pi}\left[(1-\Gamma) - h_0^2\cos\xi F_1(\xi) - (2-\frac{\Gamma}{2})h_0^2 F_1^2(\xi)\right]d\xi , \tag{7.23}$$

onde os termos de ordem maior que h_0^3 foram desprezados. $F_1(\xi)$ é obtida através da seguinte equação diferencial:

$$\Omega\frac{dF_1(\xi)}{d\xi} = \cos\xi - (\Gamma-1)F_1(\xi) , \tag{7.24}$$

cuja solução é facilmente obtida e dada por:

$$F_1(\xi) = \frac{a\cos\xi + \sin\xi}{\Omega(a^2+1)} , \tag{7.25}$$

sendo $a = \frac{\Gamma-1}{\Omega}$. Substituindo esta solução na eq. (7.23), é fácil encontrar a seguinte equação para o expoente de Liapunov:

$$\Omega\Lambda = \frac{4\Omega^2(a^2+1)(1-\Gamma) - (2\Omega a + 4 - \Gamma)h_0^2}{4\Omega^2(a^2+1)} . \tag{7.26}$$

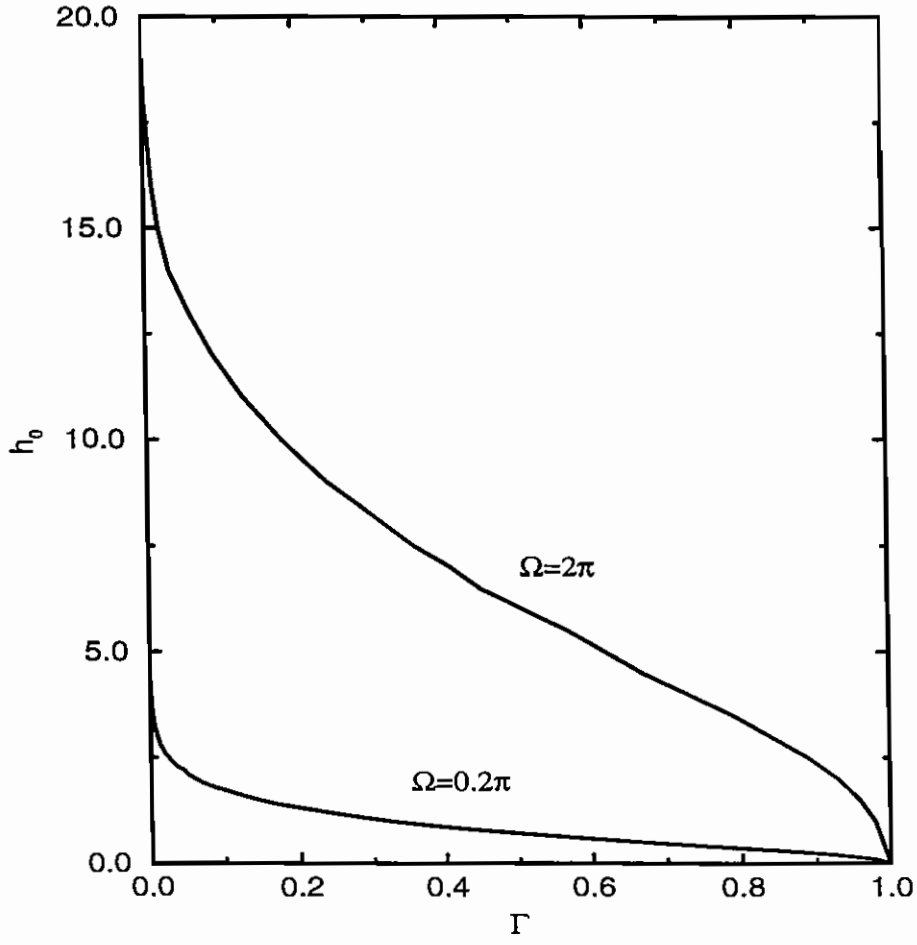

Figura 7.7: Diagrama de fases dinâmico no plano h_0 x Γ para dois valores do parâmetro Ω.

Como $\Lambda < 0$ fornece as soluções estáveis e $\Lambda > 0$ as soluções instáveis, a condição $\Lambda = 0$ fornece a linha crítica que separa as fases ferromagnética e paramagnética. Então, se aplicarmos esta condição a equação acima podemos ver que

$$h_0^c = \left[\frac{4(\Gamma^2 - 2\Gamma + 1 + \Omega^2)(1-\Gamma)}{\Gamma + 2}\right]^{\frac{1}{2}}. \tag{7.27}$$

fornece a linha de transição crítica entre as fases ferro e paramagnética no limite em que $h_0 \to 0$.

Previamente vimos que a resposta do sistema, dada pela magnetização longitudinal, a um campo variando periodicamente no tempo também era periódica, com a mesma frequência do campo externo. Este é o comportamento do bem conhecido fenômeno de não-equilíbrio de histerese magnética, e aparece devido à competição entre a frequência de relaxação do sistema e o período do campo oscilante. Este comportamento pode ser visto através de figuras de Lissajous construídas com a função resposta $m_z(\xi)$ e o campo magnético H_ξ. Entretanto, é mais conveniente, investigar o comportamento da área delimitada pela curva de histerese, que fornece a energia dissipada pelo sistema sobre um ciclo completo de oscilação. A dependência desta grandeza nos parâmetros do sistema pode ser imediatamente obtida se avaliarmos a seguinte integral:

$$A_z = \int_0^{2\pi} m_z(\xi) dH_\xi \ , \tag{7.28}$$

que pode rapidamente ser resolvida próximo a linha de transição de fases no limite em que $h_0 \to 0$. De fato, nesta região θ é pequeno e portanto $\sin\theta \approx \theta - \frac{1}{6}\theta^3$. Diferenciando H_ξ e substituindo a aproximação para $\sin\theta$ podemos mostrar que

$$A_z = h_0 \int_0^{2\pi} \theta \sin\xi d\xi + \frac{1}{6} h_0 \int_0^{2\pi} \theta^3 \sin\xi d\xi \ . \tag{7.29}$$

Agora, usando a eq. (7.22) e mantendo termos até ordem de h_0^3 obtemos:

$$A_z = h_0^2 \int_0^{2\pi} F_1(\xi) \sin \xi d\xi \ . \tag{7.30}$$

Como a função $F_1(\xi)$ é dada através da eq. (7.25), podemos resolver a integral acima e encontrar a seguinte expressão para a área de histerese magnética longitudinal:

$$A_z = \frac{\pi h_0^2 \Omega}{(1-\Gamma)^2 + \Omega^2} \ . \tag{7.31}$$

Entretanto, é comum encontrarmos na literatura leis de escala que relacionam a área de histerese com os parâmetros do modelo através de uma série de expoentes [20,21,27,30,31,59]. Assim, se reescrevermos a eq. (7.31) obtida acima como a seguinte forma de escala

$$A_z = h_0^\alpha \Delta\Gamma^\beta g(\frac{\Omega}{h_0^\delta \Delta\Gamma^\gamma}) \ , \tag{7.32}$$

vemos que

$$g(x) = \frac{\pi x}{1+x^2} \ , \tag{7.33}$$

é uma função lorentziana com $\Delta\Gamma = |\Gamma - 1|$. Podemos ver diretamente que $\alpha = 2, \beta = 1, \delta = 0$ e $\gamma = 1$ como os expoentes associados a lei de escala (7.32) próximo à linha de transição de fases e no limite em que $h_0 \to 0$.

CAPÍTULO 8

Simulação de Monte Carlo

Como observamos no início do capítulo 6, modelos baseados no modelo de Ising em $d+1$-dimensões podem ser mapeados em modelos de spins quânticos em d-dimensões a temperatura zero [29]. Obviamente, o inverso também é verdadeiro [52]. Esta é a idéia usada por *de Oliveira* [60,61] para desenvolver um método de Monte Carlo específico para determinar as propriedades do estado fundamental de sistemas quânticos de spins. Tal método é baseado no fato de que matrizes, cujos elementos são não negativos, poderem ser consideradas como matrizes de transferência de algum modelo mecânico-estatístico. As propriedades estatísticas de um modelo são determinadas pelo autovalor e pelo autovetor dominantes. Assim, um algoritmo de Monte Carlo que simule tal modelo fornecerá informações sobre o maior o autovetor dominante. Se o autovetor dominante coincide com o do estado fundamental, teremos as propriedades do sistema à temperatura zero. Na ausência de campos dependentes do tempo, os resultados obtidos com este método são equivalentes àqueles

obtidos por outras técnicas a temperatura nula [62-65].

O método de Monte Carlo é construído como um processo de Markov tal que a probabilidade estacionária de uma dada configuração $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, ..., \sigma_k)$ seja escrita como um produto de k matrizes de transferência, cujos elementos são não negativos, ou seja:

$$P(\sigma) = \frac{1}{Z} T(\sigma_1, \sigma_2) T(\sigma_2, \sigma_3) \ldots T(\sigma_{k-1}, \sigma_k) T(\sigma_k, \sigma_1) \,, \tag{8.1}$$

onde Z é uma constante de normalização. A probabilidade de transição $W(\sigma \rightarrow \sigma')$ do processo é construído de forma a obedecer a condição de balanceamento detalhado. Assim sendo, ela necessita apenas da razão entre as probabilidades estacionárias dos respectivos estados, $P(\sigma')/P(\sigma)$, o que possibilita a realização de uma simulação baseada no algoritmo de Metrópolis [66]. Pode-se mostrar que a probabilidade de transição $W(\sigma \rightarrow \sigma')$ definida por

$$W(\sigma \rightarrow \sigma') = min\{\frac{T(\sigma_{l-1}, \sigma'_l) T(\sigma'_l, \sigma_{l+1})}{T(\sigma_{l-1}, \sigma_l) T(\sigma_l, \sigma_{l+1})}, 1\} \,, \tag{8.2}$$

possui os requisitos acima. Como já era esperado, a taxa de transição será função somente dos elementos das matrizes de transferência.

A fim de determinar uma matriz com elementos não negativos e cujo autovetor coincida com o estado fundamental de $\mathcal{H}$, definimos o operador

$$\mathcal{T} = -\mathcal{H} + C \,, \tag{8.3}$$

onde C é uma constante positiva e $\mathcal{H}$ é o hamiltoniano do nosso sistema, ou seja,

$$\mathcal{H} = -\sum_i \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - \Gamma \sum_i \sigma_i^x - H_t \sum_i \sigma_i^z . \tag{8.4}$$

Com esta definição podemos ver diretamente que o autovetor dominante de $\mathcal{T}$ será o autovetor do estado fundamental de $\mathcal{H}$, e que os elementos da matriz podem ser facilmente calculados, usando-se

$$T(\sigma, \sigma') = < \sigma | \mathcal{T} | \sigma' > . \tag{8.5}$$

Substituindo o hamiltoniano e usando as propriedades das matrizes de Pauli, podemos mostrar que os elementos não nulos de $\mathcal{T}$ são dados por:

$$T(\sigma, \sigma') = \begin{cases} \Gamma \\ D(\sigma) \end{cases}$$

onde

$$D(\sigma) = \sum_{i=1}^{N} \left(C + \sigma_i \sigma_{i+1} + H_t \sigma_i \right) . \tag{8.6}$$

A escolha de $C = N$, onde N é o número de spins da cadeia é suficiente para garantir que $D(\sigma)$ seja sempre não negativo.

Para a implementação do algoritmo definimos uma rede retangular de K colunas com N pontos em cada uma delas. Cada ponto possui uma variável de spin que pode assumir os valores ± 1. De acordo com as regras apresentadas anteriormente, uma coluna deve ser igual à sua vizinha ou, no máximo, diferir em um único ponto. Esta propriedade será conservada durante todo o processo se, depois de escolhermos aleatoriamente uma das K colunas (E = coluna escolhida, A = coluna anterior à escolhida e P = coluna posterior à escolhida) de uma certa configuração, seguirmos as seguintes regras para obter a próxima configuração:

1 - Se $A = E = P$

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 & \sigma_1 & \sigma_1 \\ \sigma_2 & \sigma_2 & \sigma_2 \\ \sigma_3 & \sigma_3 & \sigma_3 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \sigma_1 & \sigma_1 & \sigma_1 \\ \sigma_2 & -\sigma_2 & \sigma_2 \\ \sigma_3 & \sigma_3 & \sigma_3 \end{pmatrix}.$$

Escolhemos aleatoriamente um ponto de E e invertemos o seu spin com probabilidade dada por

$$min\{\frac{N\Gamma^2}{D^2(P)}, 1\}. \tag{8.7}$$

2 - Se $A \neq E \neq P$ mas $A = P$

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 & \sigma_1 & \sigma_1 \\ \sigma_2 & -\sigma_2 & \sigma_2 \\ \sigma_3 & \sigma_3 & \sigma_3 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \sigma_1 & \sigma_1 & \sigma_1 \\ \sigma_2 & \sigma_2 & \sigma_2 \\ \sigma_3 & \sigma_3 & \sigma_3 \end{pmatrix}.$$

O spin do ponto que difere das duas colunas será invertido com probabilidade dada por

$$min\{\frac{D^2(P)}{N\Gamma^2}, 1\}. \tag{8.8}$$

3 - Se $A = E \neq P$

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 & \sigma_1 & \sigma_1 \\ \sigma_2 & \sigma_2 & -\sigma_2 \\ \sigma_3 & \sigma_3 & \sigma_3 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \sigma_1 & \sigma_1 & \sigma_1 \\ \sigma_2 & -\sigma_2 & -\sigma_2 \\ \sigma_3 & \sigma_3 & \sigma_3 \end{pmatrix}.$$

O spin do ponto de E que difere de P será invertido com probabilidade dada por

$$min\{\frac{D(P)}{D(A)}, 1\}. \tag{8.9}$$

4 - Se $A \neq E = P$

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 & \sigma_1 & \sigma_1 \\ \sigma_2 & -\sigma_2 & -\sigma_2 \\ \sigma_3 & \sigma_3 & \sigma_3 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \sigma_1 & \sigma_1 & \sigma_1 \\ \sigma_2 & \sigma_2 & -\sigma_2 \\ \sigma_3 & \sigma_3 & \sigma_3 \end{pmatrix}.$$

O spin do ponto de E que difere de A será invertido com pribabilidade

$$min\{\frac{D(A)}{D(P)}, 1\}. \tag{8.10}$$

5 - Se $A \neq E \neq P$ com $A \neq P$

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 & \sigma_1 & \sigma_1 \\ \sigma_2 & -\sigma_2 & -\sigma_2 \\ \sigma_3 & \sigma_3 & -\sigma_3 \\ \sigma_4 & \sigma_4 & \sigma_4 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \sigma_1 & \sigma_1 & \sigma_1 \\ \sigma_2 & \sigma_2 & -\sigma_2 \\ \sigma_3 & -\sigma_3 & -\sigma_3 \\ \sigma_4 & \sigma_4 & \sigma_4 \end{pmatrix}.$$

Os spins dos pontos de E que diferem de A e de P serão invertidos com probabilidade 1.

A taxa de transição entre os estados é encontrada usando-se a expressão (8.2), que depende somente dos elementos $T(\sigma, \sigma')$, que por sua vez já foram obtidos acima. Uma última observação a respeito do algoritmo é o fato de usarmos condições de contorno periódicas.

Construído o algoritmo, o próximo passo é realizar as medidas das grandezas físicas relevantes do sistema. Entretanto, temos ainda um problema a resolver relacionado com a realizaçãodestas medidas. Tradicionalmente, a medida da magnetização do sistema para uma cadeia de tamanho L é dada por

$$M_N = < |m| > , \tag{8.11}$$

onde

$$m = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\sigma_i\,, \tag{8.12}$$

é a magnetização da cadeia em um passo de Monte Carlo, e está relacionada com a média do operador σ^z. Toma-se o módulo na eq. (8.11) devido ao tamanho obrigatoriamente finito da cadeia de spins. O tamanho finito é o responsável pela degenerescência da magnetização em $\pm m$. Porém, no nosso caso não é permitida tal operação pois por exemplo, na fase paramagnética a magnetização deve oscilar com o tempo na mesma frequência do campo externo, porém retardada, sobre um valor médio que é próximo de zero para tamanhos de redes grandes. Então, se tomarmos o módulo da magnetização em cada passo de Monte Carlo, estaremos superestimando a magnetização M_N. Este mesmo argumento é válido em se tratanto da susceptibilidade χ_N do sistema, pois, a partir de sua definição,

$$\chi_N = N(< m^2 > - < |m|^2 >)\,, \tag{8.13}$$

é óbvio notar também sua dependência do módulo de m. Entretanto, existe uma quantidade conhecida como cumulante reduzido de quarta-ordem, ou cumulante de Binder [67], que não depende do módulo de m, mas tão somente da magnetização em cada passo de Monte Carlo elevada à segunda e quarta potências, como podemos ver através de sua definição:

$$U_N = 1 - \frac{< m^4 >}{3 < m^2 >^2}\,. \tag{8.14}$$

Mas existe uma outra característica desta grandeza, bastante especial, que a difere das duas anteriores. Independentemente do tamanho da rede usada, seu valor, no ponto crítico, é sempre o mesmo para aquela condição de contorno pré-definida [68].

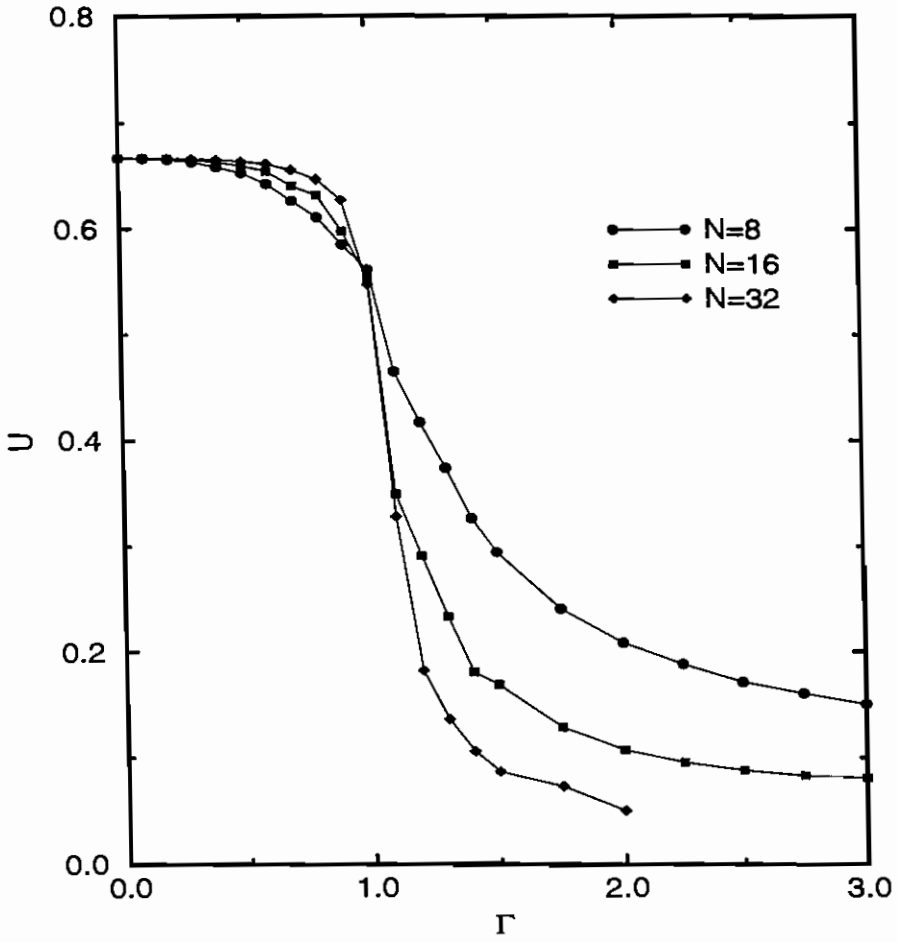

Figura 8.1: Cumulante reduzido de quarta ordem U em função de Γ para $h_0 = 0.0$, $w = \frac{2\pi}{1000}$ e três tamanhos diferentes de rede.

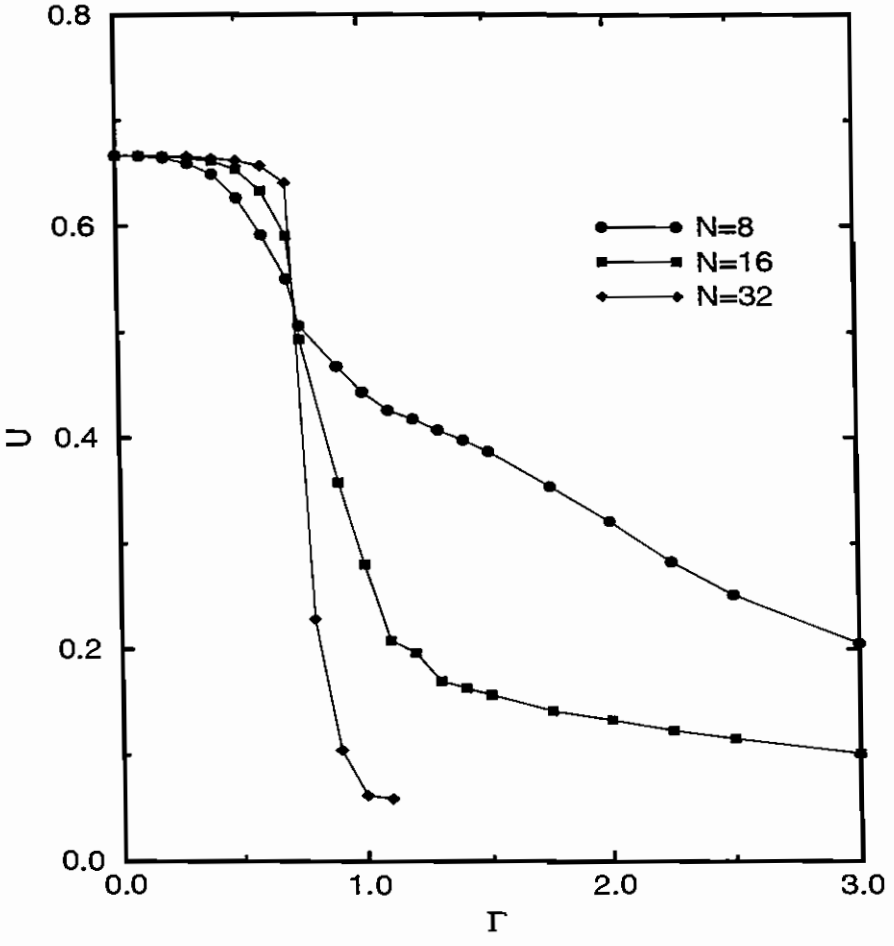

Figura 8.2: Cumulante reduzido de quarta ordem U em função de Γ para $h_0 = 0.5$, $w = \frac{2\pi}{1000}$ e três tamanhos diferentes de rede.

Portanto, varrendo-se uma região de valores do campo transverso, mantendo-se fixo o valor da amplitude e da frequência do campo oscilante para diferentes tamanhos de rede, podemos determinar o valor crítico de Γ como sendo aquele onde os vários cumulantes de Binder (um para cada tamanho de rede) tornam-se iguais. A análise das figuras 8.1 e 8.2 confirma o que acabamos de expor. Na figura 8.1, onde o campo oscilante está ausente pois $h_0 = 0$, o ponto onde os cumulantes tornan-se iguais ($\Gamma_c = 1$) é justamente o valor crítico obtido em cálculos exatos [59]. Nestas figuras usamos três tamanhos de redes distintos, $N = 8$,16 e 32, com 10^6 passos de Monte Carlo para determinar os valores médios da magnetização.

Esta forma de obtenção dos valores críticos dos campos permite, então, construir o diagrama de fases dinâmico do modelo. De fato, na figura 8.3 mostramos tal diagrama para um valor fixo da frequência do campo longitudinal. Como podemos notar, ele é qualitativamente semelhante àquele encontrado no capítulo anterior. Então os resultados que encontramos por ambos os métodos mostram a existência de uma linha de transição contínua separando as fases ferromagnética e paramagnética.

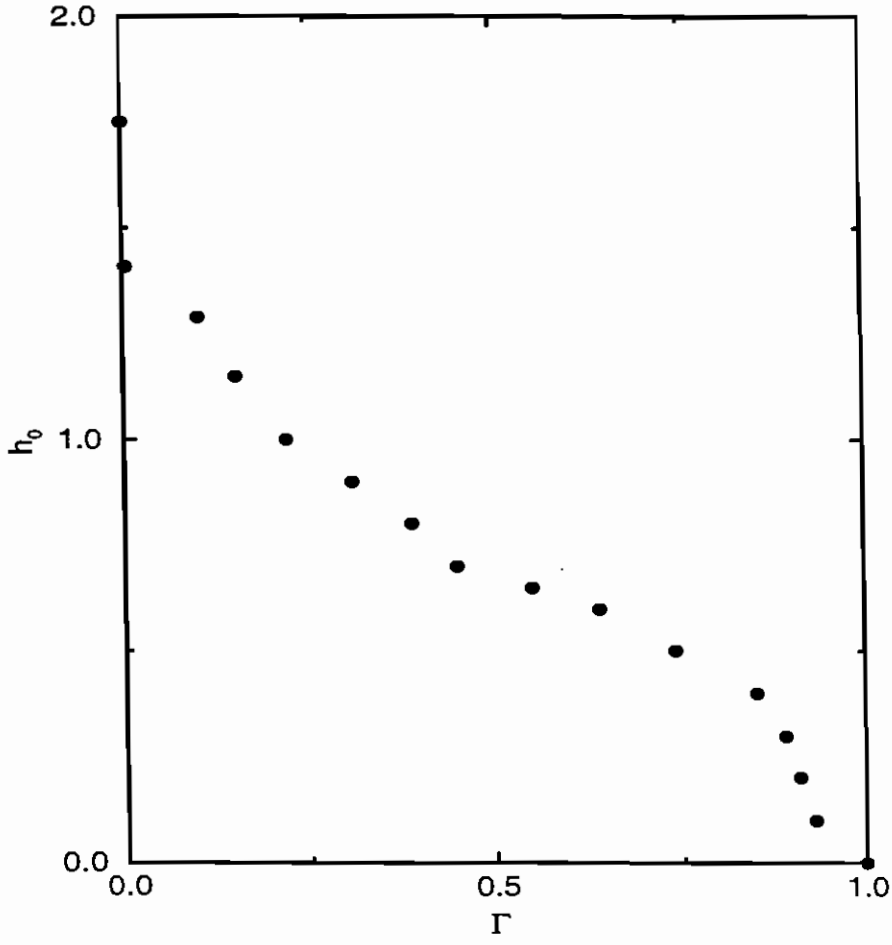

Figura 8.3: Diagrama de fases dinâmico no plano h_0 x Γ, para $w = \frac{2\pi}{1000}$.

CAPÍTULO 9

Conclusões

Neste trabalho estudamos o comportamento dinâmico de dois modelos de spins representativos dos casos clássico e quântico. Assim, na primeira parte do estudo dedicamos nossos esforços à tentativa de melhor compreender a resposta de um sistema de spins de Ising em contato com um reservatório térmico na presença de campos magnéticos estáticos e dependentes do tempo. O formalismo da equação mestra juntamente com a prescrição dada pela dinâmica de Glauber, dentro da aproximação de pares, foram usadas a fim de obter um conjunto de equações diferenciais para as magnetizações e funções de correlação relavantes do modelo que leva em conta interações anisotrópicas entre spins primeiros vizinhos.

O primeiro e mais simples dos casos estudados é aquele em que o campo magnético externo está ausente. Neste caso mostramos, através do diagrama de fases obtido no plano temperatura versus parâmetro de competição, que quando mudamos o acoplamento

intersubrede é possível passar continuamente de uma fase ferromagnética para uma fase paramagnética e desta para uma fase antiferromagnética. Neste sentido, nosso diagrama de fases é semelhante àquele obtido para um sistema ferrmagnético auto-organizado onde um fluxo externo de energia é aplicado ao sistema. Em nosso caso a mudança do acoplamento intersubrede pode ser realizada pela aplicação de uma força externa sobre o modelo de Ising compressível.

Quando o modelo leva em conta um campo magnético estático, ele naturalmente descreve um modelo metamagnético de camadas ferromagnéticas que interagem antiferromagneticamente. Neste caso os resultados mostram que, ao contrário do previsto pela teoria de campo médio, existe uma clara evidência para a presença única e exclusiva do ponto tricrítico. A ausência dos pontos crítico e bicrítico finais em nosso diagrama de fases no plano campo magnético versus temperatura está de acordo com recentes simulações de Monte Carlo realizadas em modelos metamagnéticos equivalentes aos estudados aqui. Além disso, essas simulações mostram, assim como os nossos resultados, que o ponto tricrítico move-se para o ponto de temperatura nula à medida que aumenta os valores da razão entre os acoplamentos antiferromagnético e ferromagnético.

Entretanto, quando o campo magnético aplicado ao sistema exibe uma dependência temporal, o diagrama de fases dinâmico que determinamos é estruturalmente semelhante àquele obtido via aproximação de campo médio para o modelo de Ising cinético ferromagnético. Também verificamos, nesta situação, que os sistemas metamagnéticos podem apresentar diferentes comportamentos dinâmicos de acordo com os valores usados para o parâmetro de competição e para a frequência do campo externo. Além disso mostramos que,

dentro da aproximação de pares, existe a possibilidade do modelo de Ising unidimensional submetido a um campo magnético oscilante sofrer uma transição de fases entre as fases paramagnética e ferromagnética a temperatura zero. Porém, como vimos na introdução, a aproximação de pares dinâmica pode levar a resultados errados em modelos de não-equilíbrio unidimensionais. Portanto, seria interessante realizar simulações de Monte Carlo neste modelo a fim de confirmar ou não os resultados obtidos.

Na segunda parte deste trabalho consideramos o modelo de Ising em um campo transverso na presença de um campo magnético longitudinal dependente do tempo para tentar compreender o comportamento dinâmico de sistemas quânticos de spins. Tanto através de simulações de Monte Carlo quanto análise de campo médio, encontramos um diagrama de fases dinâmico, a temperatura zero, que mostra uma transição contínua entre as fases ferromagnética e paramagnética, à medida que aumentamos a amplitude do campo magnético oscilante para um valor fixo do campo transverso.

Para finalizar, gostaríamos de sugerir alguns trabalhos para para futuras investigações, relacionados com os resultados obtidos aqui, e que podem levar a uma compreensão mais clara dos processos dinâmicos. Em primeiro lugar, seria interessante realizar simulações de Monte Carlo no modelo para metamagetos sob a influência de um campo magnético estático, a fim de levantar o mais precisamente possível as linhas de transição contínua e descontínua entre as fases antiferromagnética e paramagnética. Feito isto, pode-se tentar determinar o expoente crítico dinâmico z, sobre a linha de transição de segunda ordem e nas proximidades do ponto tricrítico para vários valores da razão entre os acoplamentos antiferromagnético e ferromagnético. Simulações de Monte Carlo também seriam

interessantes no modelo de Ising unidimensional na presença de um campo magnético que varia periodicamante no tempo. Os resultados advindos por este método podem confirmar ou não, a transição de fases prevista pela aproximação de pares.

Outro modelo passível de estudos, via aproximação de pares e simulações de Monte Carlo, é o sistema de Ising anisotrópico estudado aqui e em contato com dois reservatórios térmicos, o que poderia simular diferentes dinâmicas. Neste caso, seria interessante saber se o diagrama de fases para metamagnetos apresentaria ou não o fenômeno da auto-organização e se a aplicação de um campo magnético oscilante neste modelo preservaria ou destruiria a auto-organização em sistemas ferromagnéticos.

Finalmente, se poderia tentar obter o expoente crítico dinâmico z para o modelo de Ising em campo transverso utilizando o formalismo de Monte Carlo proposto por *de Oliveira* para obter as propriedades do estado fundamental de sistemas quânticos de spin. Este modelo é propício ao cálculo deste expoente pois seu ponto crítico é conhecido exatamente.

APÊNDICE

Expressão para o expoente de Lyapunov

Considere a equação de evolução

$$\Omega \frac{d}{d\xi} m = -m + F(m, \xi) \equiv G(m)\,,$$

na forma discretizada

$$\Omega(\frac{m_{l+1} - m_l}{\Delta\xi}) = G(m_l)\,,$$

que pode ser entendida como um mapeamento

$$m_{l+1} = m_l + \frac{\Delta\xi}{\Omega} G(m_l) \equiv \mathcal{F}(m_l)\,.$$

Para tempos longos, isto é, no regime estacionário, a magnetização m_l se torna periódica, de período L, ou seja $m_{L+l} = m_l$. Podemos então reescrever o mapemamento acima como um mapeamento L-dimensional

$$(m_1, m_2, ..., m_L) \rightarrow (m'_1, m'_2, ..., m'_L)\,,$$

onde $m'_l \equiv m_{L+l}$, é dado por

$$m'_1 = \mathcal{F}(m_L)\,,$$

$$m'_2 = \mathcal{F}(m_1)\,,$$

$$\vdots$$

$$m'_{L-1} = \mathcal{F}(m_{L-2}),$$

$$m'_L = \mathcal{F}(m_{L-1}).$$

Seja $m_l^\star$, $l = 1, 2, ..., L$, a solução estacionária. Linearizando as equações acima em torno dessa solução obtemos

$$\Phi'_l = \sum_{l'=1}^{L} A_{l,l'} \Phi_l,$$

onde $\Phi_l = m_l - m_l^\star$ é o desvio da solução estacionária e

$$A_{l+1,l} = \left.\frac{\partial \mathcal{F}(m_l)}{\partial m_l}\right|_{m_l = m_l^\star} \equiv \mathcal{F}'(m_l^\star),$$

com $A_{L+1,L} \equiv A_{1,L}$. Os outros elementos são nulos. Os autovalores Λ da matriz A são dados por

$$\Lambda^L = \prod_{l=1}^{L} \mathcal{F}'(m_l^\star).$$

O expoente de Lyapunov λ_d é o logaritmo do maior autovalor em módulo e é dado por

$$\lambda_d = \frac{1}{L} \sum_{l=1}^{L} ln \mathcal{F}'(m_l^\star).$$

Logo

$$\lambda_d = \frac{1}{L} \sum_{l=1}^{L} ln \left[1 + \frac{\Delta\xi}{\Omega} G'(m_l^\star) \right],$$

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO
2792
INSTITUTO DE FÍSICA

ou, até ordem linear em $\Delta\xi$,

$$\lambda_d = \frac{1}{L}\sum_{l=1}^{L}\frac{\Delta\xi}{\Omega}G'(m_l^*)\,.$$

Tomando o limite $\Delta\xi \to 0$, $L \to \infty$ com $\Delta\xi.L = 2\pi$ uma constante podemos mostrar que o expoente de Liapunov no contínuo, dado por

$$\lambda = \frac{\lambda_d}{\Delta\xi}, \tag{9.1}$$

pode ser escrito como

$$\Omega\lambda = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\frac{\partial G(m)}{\partial m}\bigg|_{m=m^*}d\xi\,.$$

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. R. J. Glauber, J. Math. Phys. **4**, 294 (1963).

2. N. G. van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry* (North-Holland, Amsterdam, 1981).

3. K. Kawasaki, *Phase Diagram and Critical Phenomena*, vol. 2, eds. D. C. Domb e M. S. Green (Academic, New York, 1972).

4. P. C. Hohenberg e B. I. Halperin, Rev. Mod. Phys. **49**, 435 (1977).

5. J. Kamphorst Leal da Silva, Phys. Lett. A **19**, 37 (1986).

6. A. G. Moreira, J. Kamphorst Leal da Silva, e F. C. Sá Barreto, Phys. Rev. B **48**, 289 (1993).

7. B. W. Southern e Y. Achiam, J. Phys. A: Math. Gen. **26**, 2519 (1993).

8. M. Santos e W. Figueiredo, J. Phys. A: Math. Gen. **29**, 2435 (1996).

9. M. Santos e W. Figueiredo, Phys. Lett. A **227**, 362 (1997).

10. J. M. Gonzalez-Miranda, P. L. Garrido, J. Marro, e J. L. Lebowitz, Phys. Rev. Lett. **59**, 1934 (1987).

11. K. Kikuchi, Phys. Rev **81**, 988 (1951).

12. H. Mamada e F. Takano, J. Phys. Soc. Jpn **25**, 675 (1968).

13. R. Dickman, Phys. Lett. A **122**, 463 (1987).

14. T. Tomé e M. J. de Oliveira, Phys. Rev. A **40**, 6643 (1989).

15. G. Nicolis e I. Prigogine, *Self-Organization in Nonequilibrium Systems* (Wiley, New York, 1977).

16. B. C. S. Grandi e W. Figueiredo, Phys. Rev B **50**, 12595 (1994).

17. B. C. S. Grandi e W. Figueiredo, Phys. Rev E **53**, 5484 (1996).

18. B. C. S. Grandi e W. Figueiredo, Phys. Rev E **56**, 5240 (1997).

19. B. C. S. Grandi e W. Figueiredo, Mod. Phys. Lett. B **10**, 945 (1996).

20. M. Rao, H. R. Krishnamurthy, e R. Pandit, J. Phys. Cond. Matter **1**, 9061 (1989); Phys. Rev. B **42**, 856 (1990).

21. M. Acharyya e B. K. Chakrabarti, Physica A **192**, 471 (1993).

22. W. S. Lo e R. A. Pelcovitz, Phys. Rev. A **42**, 7471 (1990).

23. S. Sengupta, Y. J. Marathe, e S. Pury, Phys. Rev. B **45**, 7828 (1990).

24. G. S. Agarwal e S. R. Shenoy, Phys. Rev. A **23** 2714 (1981); Phys. rev A **29**, 1315 (1984).

25. T. Tomé e M. J. de Oliveira, Phys. Rev. A **41**, 4251 (1990).

26. P. Jung, G. Gray e R. Ray, Phys. Rev. Lett. **65**, 1873 (1990).

27. M. Acharyya e B. K. Chakrabarti, Phys. Rev. B **52**, 6550 (1995).

28. G. Hoenicke, P. C. T. D'Ajello, e W. Figueiredo, Phys. Rev. B **53**, 9221 (1996).

29. T. D. Schultz, D. C. Mattis, e E. H. Lieb, Rev. Mod. Phys. **36**, 856 (1964).

30. M. Acharyya e B. K. Chakrabarti, e R. B. Stinchcombe, J. Phys. A **27**, 1533 (1994).

31. V. Banerjee, S. Dattagupta, e P. Sen, Phys. Rev. E **52**, 1436 (1995).

32. T. Tomé, M. J. de Oliveira, e M. A. Santos, J. Phys. A: Math. Gen. **24**, 3677 (1991).

33. W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, e W. T. Vetterling, *NUMERICAL RECIPES - The Art of Scientific Computing (FORTRAN Version)*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1989).

34. S. R. A. Salinas, *Introdução à Física Estatística* (Edusp, São Paulo, 1997).

35. G. A. Baker e J. W. Essam, Phys. Rev. Lett. **24**, 447 (1970).

36. C. Vettier, H. L. Alberts, e D. Bloch, Phys. Rev. Lett. **31**, 1414 (1973).

37. S. S. Uda e W. Figueiredo, Phys. Lett. A **117**, 372 (1986).

38. M. Santos e W. Figueiredo, Phys. Rev. B **55**, 11353 (1997).

39. E. Strajewski e N. Giordano, Adv. Phys. **26**, 487 (1977).

40. V. A. Schmidt e S. A. Fridberg, Phys. Rev. B **1**, 2250 (1970).

41. J. M. Kincaid e E. G. D. Cohen, Phys. Rep. **22**, 57 (1975).

42. H. J. Heermann, E. B. Rasmusseen e D. P. Landau, J. Appl. Phys. **53**, 7994 (1982).

43. D. P. Landau e R. H. Swendsen, Phys. Rev. Lett. **42**, 1437 (1987).

44. H. J. Heermann e D. P. Landau, Phys. Rev. B **48**, 239 (1993).

45. W. Selke, Z. Phyz. B **101**, 145 (1996).

46. H. E. Stanley, *Introduction to Phase Transition and Critical Phenomena* (Claredon Press, Oxford, 1971).

47. A. Dutta, B. K. Chakrabarti, e R. B. Stinchcombe, J. Phys. A: Math. Gen. **29**, 5285 (1996).

48. P. Bergé, Y. Pomeau, e C. Vidal, *Order Within Chaos* (Wiley, New York, 1986); T. Tomé e M. J. de Oliveira, Phys. Rev. A **41**, 4251 (1990).

49. R. J. Elliott, P. Pfeuty e C. Wood, Phys. Rev. Lett **25**, 443 (1970).

50. M. Suzuki, Prog. Theo. Phys. **46**, 1337 (1971); **56**, 1454 (1976).

51. H. F. Trotter, Proc. Am. Math. Soc. **10**, 545 (1959).

52. J. B. Kogut, Rev. Mod. Phys. **51**, 659 (1979).

53. P. G. de Gennes, Solid State Comm. 1, 132 (1963).

54. R. B. Stinchcombe, J. Phys. C **6**, 2459 (1973).

55. B. K. Chakrabarti, Phys. Rev. B **24**, 4062 (1981).

56. W. Wu, B. Ellman, T. F. Rosenbaum, G. Aeppli, e D. H. Reich, Phys. Rev. Lett **67**, 2076 (1991).

57. W. Wu, D. Bitko, T. F. Rosenbaum, e G. Aeppli, Phys. Rev. Lett **74**, 3045 (1993).

58. D. Bitko, T. F. Rosenbaum, e G. Aeppli, Phys. Rev. Lett **77**, 940 (1996).

59. K. Chakrabarti, A. Dutta e P. Sen, *Quantum Ising Phases and Transitions in Transverse Ising models* (Lectures Notes in Physics M, Springer-Verlag, Berlim, 1996).

60. M. J. de Oliveira, Phys. Rev. B **48**, 6141 (1993).

61. M. J. de Oliveira, Int. J. Mod. Phys. B **10**, 1313 (1996).

62. R. A. Sauerwein e M. J. de Oliveira, Phys. Rev. B **49**, 5983 (1994).

63. R. A. Sauerwein e M. J. de Oliveira, Mod. Phys. Lett. B **9**, 619 (1995).

64. J. P. Neirotti e M. J. de OLiveira, Phys. Rev. B **53**, 668 (1996).

65. M. J. de Oliveira e J. R. N. Chiappin, Physica A, 238 (1997).

66. K. Binder, *The Application of the Monte Carlo Methods in Statistical Physics* (Springer-Verlag, Heidelberg, 1984).

67. K. Binder, Z. Phyz. B **43**, (1981).

68. T. W. Burkhardt e B. Derrida, Phys. Rev. B **32**, 7273 (1985)