

Universidade Federal de Santa Maria  
Centro de Ciências Naturais e Exatas  
Departamento de Física  
Laboratório de Teoria da Matéria Condensada

# MÉTODO DE MONTE CARLO APLICADO AO MODELO DE BLUME-CAPEL NA PRESENÇA DE UM CAMPO ANISOTRÓPICO

Diego Luan Ferreira da Silva

12 de Setembro de 2014

# Sumário

## 1 OBJETIVOS

## 2 MOTIVAÇÕES

## 3 METODOLOGIA

Método de Monte Carlo

Modelo de Blume-Capel

Vizinhos de um spin em uma rede quadrada

Algoritmo de Metropolis

## 4 RESULTADOS

Energia interna

Magnetização

Calor específico

Diagrama de Fases

## 5 CONCLUSÃO

# Objetivo

- Apresentar resultados para alguns observáveis do modelo de Blume-Capel(BC) na rede quadrada com interações ferromagnéticas;
- Verificar como um sistema ferromagnético se comporta na presença de um campo anisotrópico(D);
- Então, obter um diagrama de fases do campo D pela temperatura(T).

# Motivações

- Aprender mais sobre o método de Monte Carlo, verificando suas vantagens e desvantagens;
- Estudar diferentes modelos que são utilizados para descrever sistemas magnéticos.

# Metodologia

- Utilizamos o método de Monte Carlo(MC), que é uma ferramenta muito eficaz para obter o comportamento dos sistemas magnéticos. Utilizamos então o algoritmo de Metropolis para obter os dados do comportamento dos observáveis do sistema.

# Modelo de Blume-Capel

- O modelo de Blume-Capel permite que os spins da rede possam assumir 3 possíveis estados energéticos em um sistema magnético, como representado na figura 1.

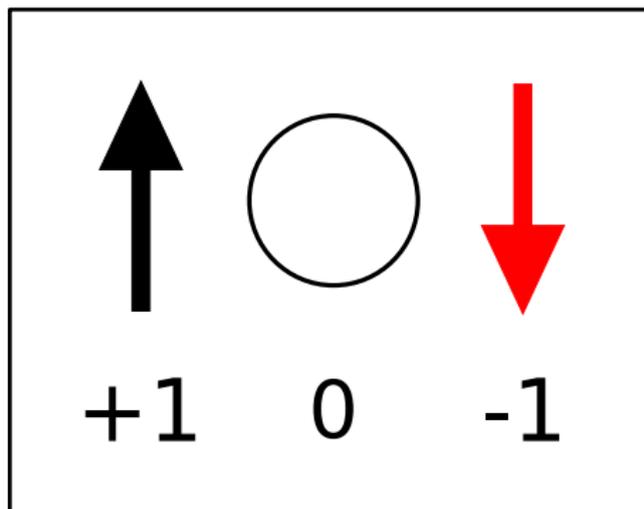


Figura 1

- O operador Hamiltoniano que descreve o BC é:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i,j}^N \sigma_i \sigma_j - D \sum_i^N \sigma_i^2 \quad (1)$$

Onde,

- $J$  é a interação de troca;
- $\sigma_i$  é o spin que está sendo avaliado;
- $\sigma_j$  são os primeiros vizinhos;
- $D$  é o campo anisotrópico.

- Para conseguirmos simular um sistema ferromagnético, temos que utilizar uma interação de troca maior que zero;
- Na figura 2 temos uma representação de primeiros vizinhos.

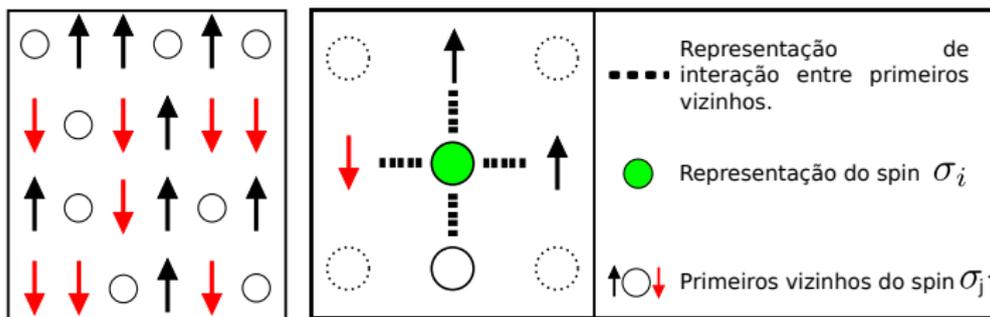


Figura 2

- Para conseguirmos simular um sistema ferromagnético, temos que utilizar uma interação de troca maior que zero;
- Na figura 2 temos uma representação de primeiros vizinhos.

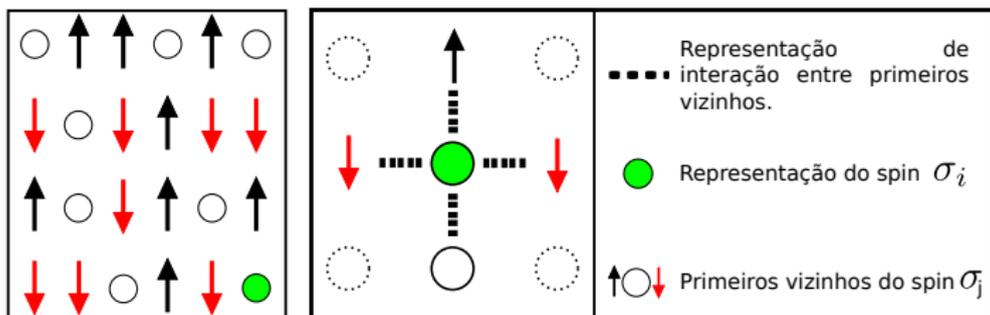


Figura 2

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j - D \sum_i \sigma_i^2 \quad (2)$$

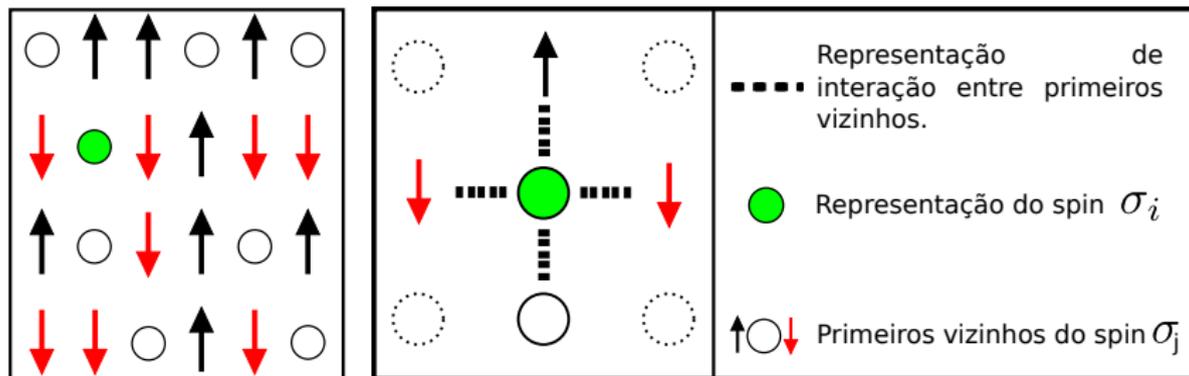


Figura 2

- Com o auxílio do Fortran 90, conseguimos escrever um programa para simular três tamanhos de redes quadradas, 32x32, 64x64 e 128x128 spins.
- O algoritmo de Metropolis esta representado pelo fluxograma na figura 3.

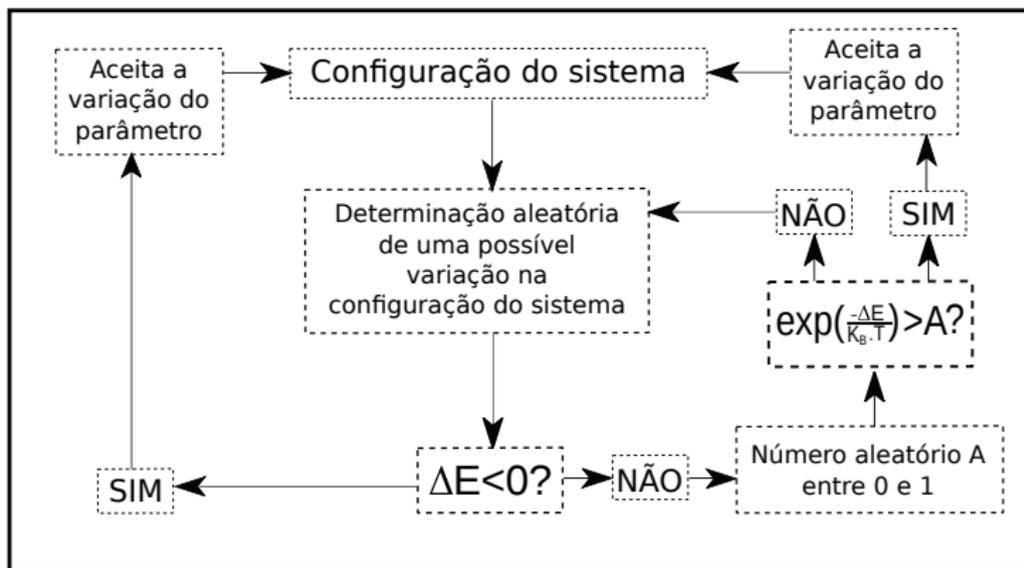


Figura 3

# Equações Utilizadas

- Para calcular os observáveis(energia interna e magnetização), utilizamos:

$$\langle O \rangle = \sum_{i=1}^n \frac{O_i e^{-\beta H_i}}{Z} \quad (3)$$

Sendo  $\beta$  definido por:

$$\beta = \frac{1}{k_b T}$$

Sendo Z denominado a função de partição, sendo assim definida pela equação (4).

$$Z = \sum_{i=1}^n e^{-\beta H_i} \quad (4)$$

- Para obter a susceptibilidade magnética, utilizamos:

$$\chi = \beta[\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2] \quad (5)$$

- Para obter o calor específico do sistema, utilizamos:

$$C_v = \beta^2[\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2] \quad (6)$$

- Utilizamos o cumulante de quarta ordem de Binder para determinar o ponto onde ocorre a  $T_c$  do nosso sistema magnético para cada valor do campo  $D$ .
- Na figura 4 temos uma representação de simulações realizadas para um campo  $D=0$ .

$$U = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3 \langle M^2 \rangle^2} \quad (7)$$

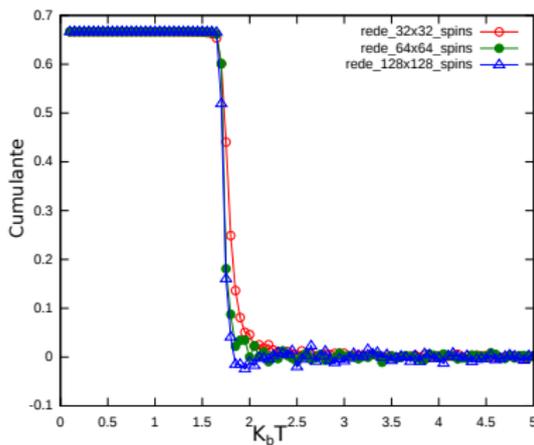


Figura 4

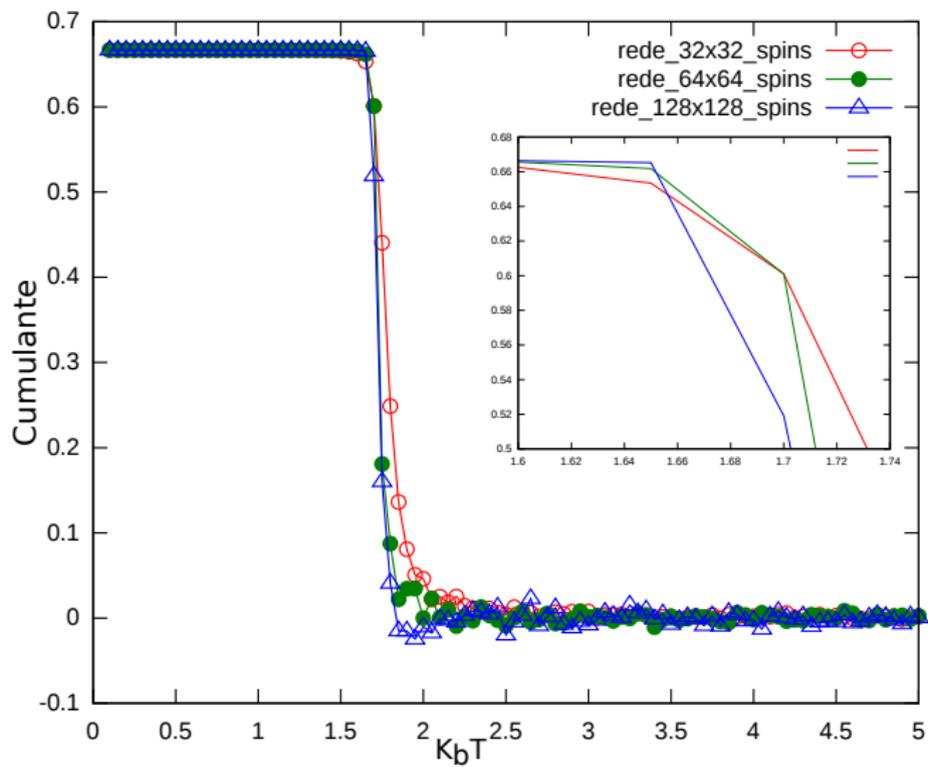


Figura 5

# Energia interna

- Podemos verificar uma mudança de comportamento na região da  $T_c (\approx 1.69)$ , que foi apresentada pelo cumulante de Binder para  $D=0$ ;

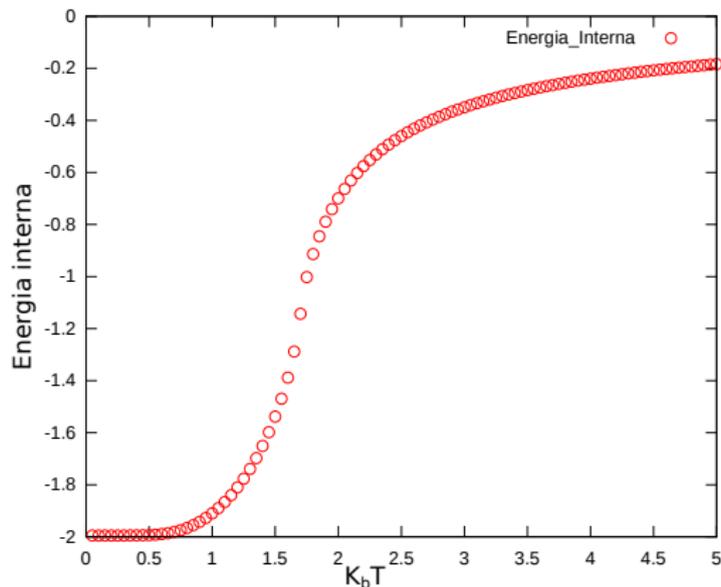


Figura 6

# Magnetização

- Na figura 7, temos o gráfico da magnetização de um sistema;

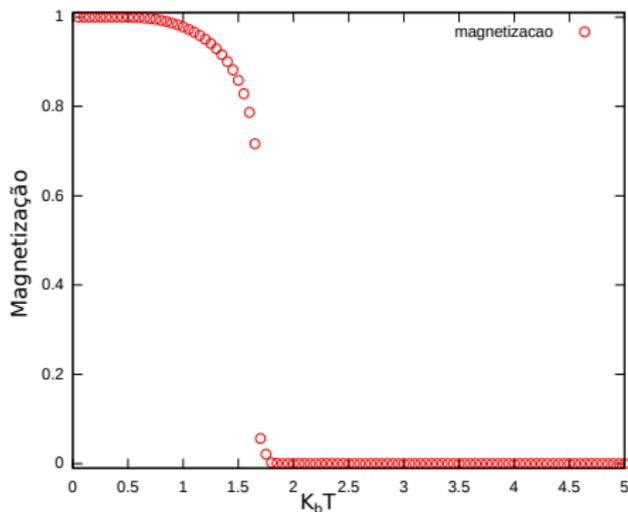


Figura 7

# Calor específico

- Na figura 8 podemos perceber uma descontinuidade do calor específico na região da  $T_c$ ;

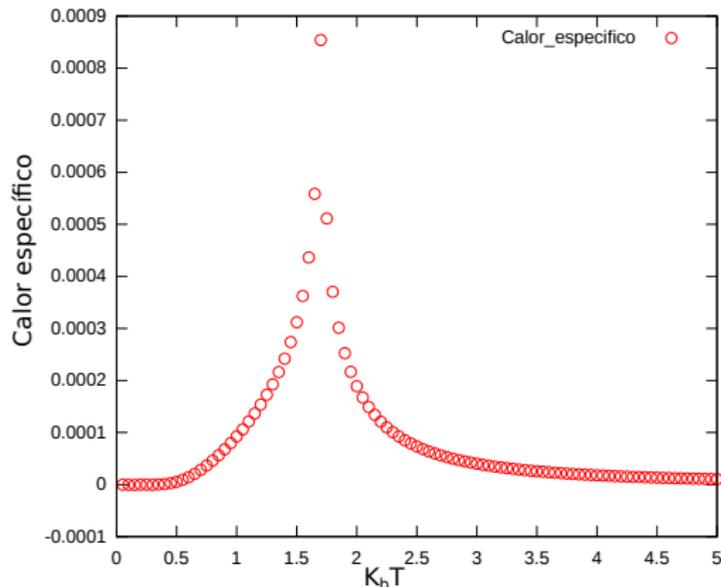


Figura 8

# Diagrama de Fases

- Na figura 9 temos um diagrama de fases, do campo anisotrópico em função da temperatura;
- Esse diagrama foi construído a partir de valores de  $T_c$  obtidos com o auxílio do cumulante de Binder.

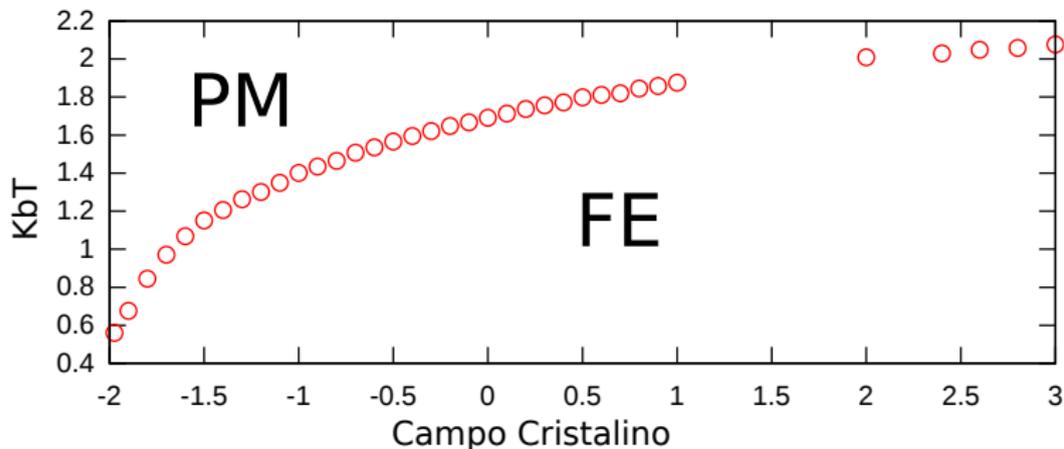


Figura 9

# Conclusão

- Com esse trabalho percebemos que o modelo de Blume-Capel apresenta um comportamento diferente quando colocamos um campo  $D$  diferente de zero atuando sobre o sistema.
- O sistema da preferência aos estados não interagentes quando  $D < 0$ .
- O sistema da preferência aos estados interagentes quando  $D > 0$ .
- Sendo assim, quanto maior for o campo  $D$ , maior será a temperatura necessária para que ocorra uma transição de fase.