

O MÉTODO DE MONTE CARLO APLICADO AO MODELO DE ISING SUPERANTIFERROMAGNÉTICO NA PRESENÇA DE CAMPO EXTERNO

INTRODUÇÃO

O modelo de Ising (MI) é um dos mais simples modelos a apresentar propriedades críticas. Devido a sua simplicidade o MI é utilizado em diversas áreas, como no estudo de sistemas biológicos, econofísica e mecânica estatística. O MI tem solução exata para redes unidimensionais (1D) e bidimensionais (2D). No entanto, muitos casos especiais do modelo de Ising ainda não possuem solução exata conhecida. Dentre estes, o MI anisotrópico na presença de um campo externo é um dos mais interessantes, tendo gerado alguns resultados contraditórios.

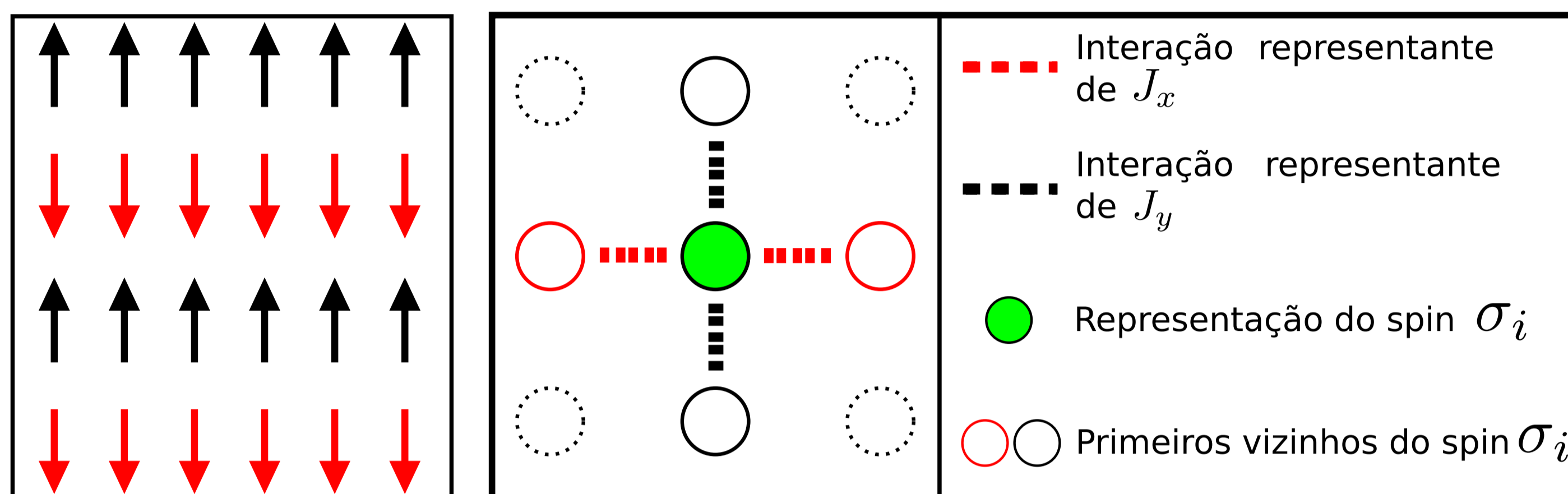


Figura 1: Representação da rede SAF anisotrópica.

OBJETIVO

O objetivo deste trabalho é estudar o MI anisotrópico considerando a presença de um campo externo longitudinal. Obteremos diagramas de fase com a utilização do método de Monte Carlo para diferentes valores das interações de troca (J_x e J_y) e para diferentes valores do campo externo. Determinaremos a temperatura crítica (ou temperatura de Néel T_N) utilizando o cumulante de quarta ordem de Binder.

METODOLOGIA

Realizaremos as simulações através do algoritmo de Metropolis, um dos mais utilizados métodos de Monte Carlo. A prescrição de Metropolis é representada no fluxograma da figura 2.

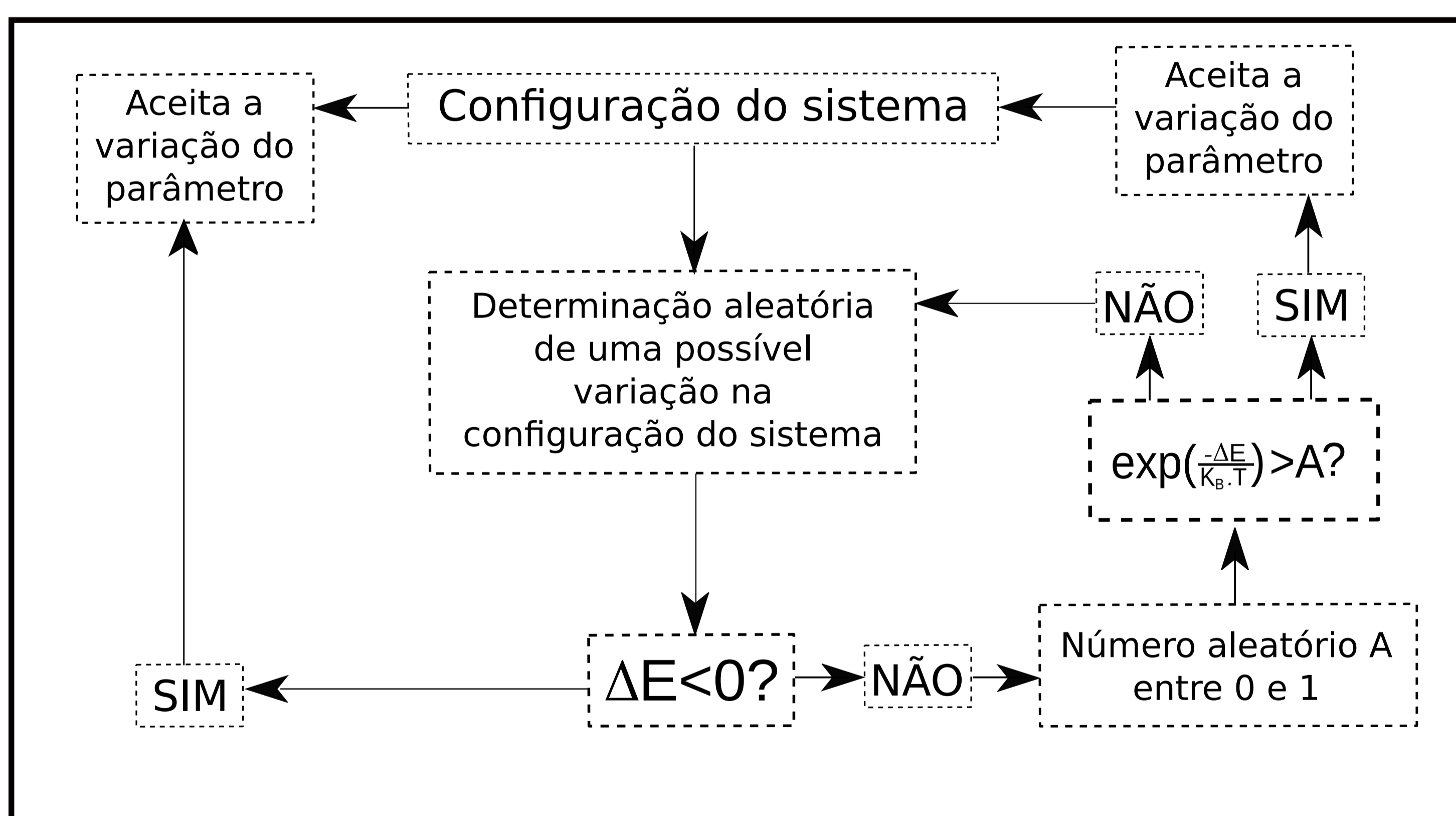


Figura 2 - Fluxograma do algoritmo de Metropolis (método de Monte Carlo).

O MI anisotrópico na presença de campo externo é descrito pelo hamiltoniano abaixo:

$$H = -J_x \sum_{i, \vec{\delta}_x} \sigma_i \sigma_{i+\vec{\delta}_x} + J_y \sum_{i, \vec{\delta}_y} \sigma_i \sigma_{i+\vec{\delta}_y} - h \sum_i \sigma_i$$

Onde J_x (J_y) são as interações de troca nas direções x (y), respectivamente, σ_i representa os spins de Ising que podem assumir valores de ± 1 e h representa o campo externo.

O cumulante de quarta ordem de Binder depende da magnetização de sub-redes de ordem 2 e 4. Para obter a magnetização de ordem d utilizamos as equações abaixo:

$$\langle m_s^d \rangle = \frac{\sum_{i=1}^n m_{s,i}^d e^{-\beta H_i}}{Z} \quad Z = \sum_{i=1}^n e^{-\beta H_i}$$

Após calcularmos a magnetização de sub-redes conseguimos calcular o cumulante de quarta ordem de Binder, que é definida como:

$$U_4(L) = 1 - \frac{\langle m_s^4 \rangle}{3 \langle m_s^2 \rangle^2}$$

O ponto de intersecção entre os cumulantes de redes com tamanhos diferentes permite definir a T_N :

RESULTADOS

Os resultados obtidos para esse modelo foram comparados com teorias de campo efetivo, como teoria de campo médio e a aproximação de Bethe, Peierls e Weiss. Também há resultados obtidos com teoria métodos de grupo de renormalização e utilizando a técnica do operador diferencial. Estes métodos, descritos em uma extensa bibliografia, divergem com relação a existência ou não de uma reentrância pra valores acima de h_c .

Os tamanhos das redes quadradas utilizadas para realizar as simulações foram de 10x10, 20x20 e 30x30. Para cada valor de temperatura utilizamos 10^6 passos de Monte Carlo.

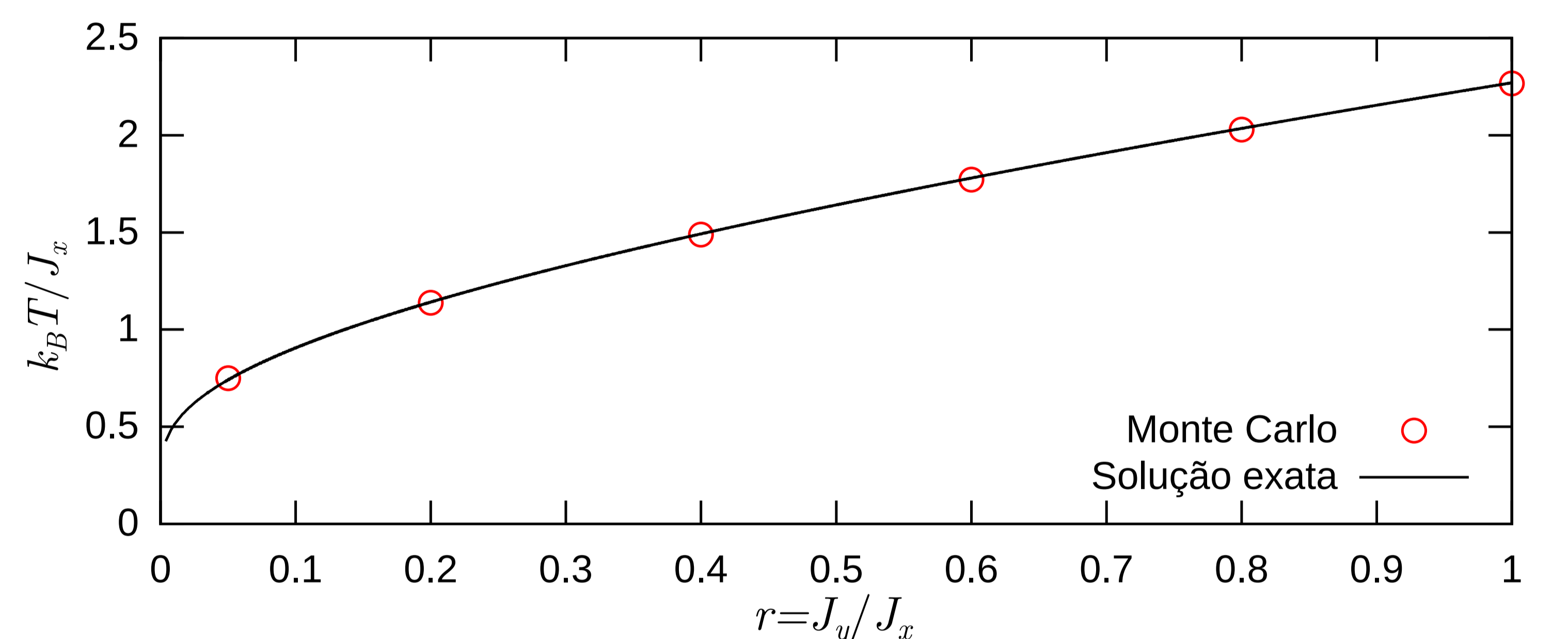


Figura 3: Representa a dependência da temperatura crítica na razão de $r = J_y/J_x$. A linha corresponde a solução exata e os pontos, aos resultados com o método de Monte Carlo.

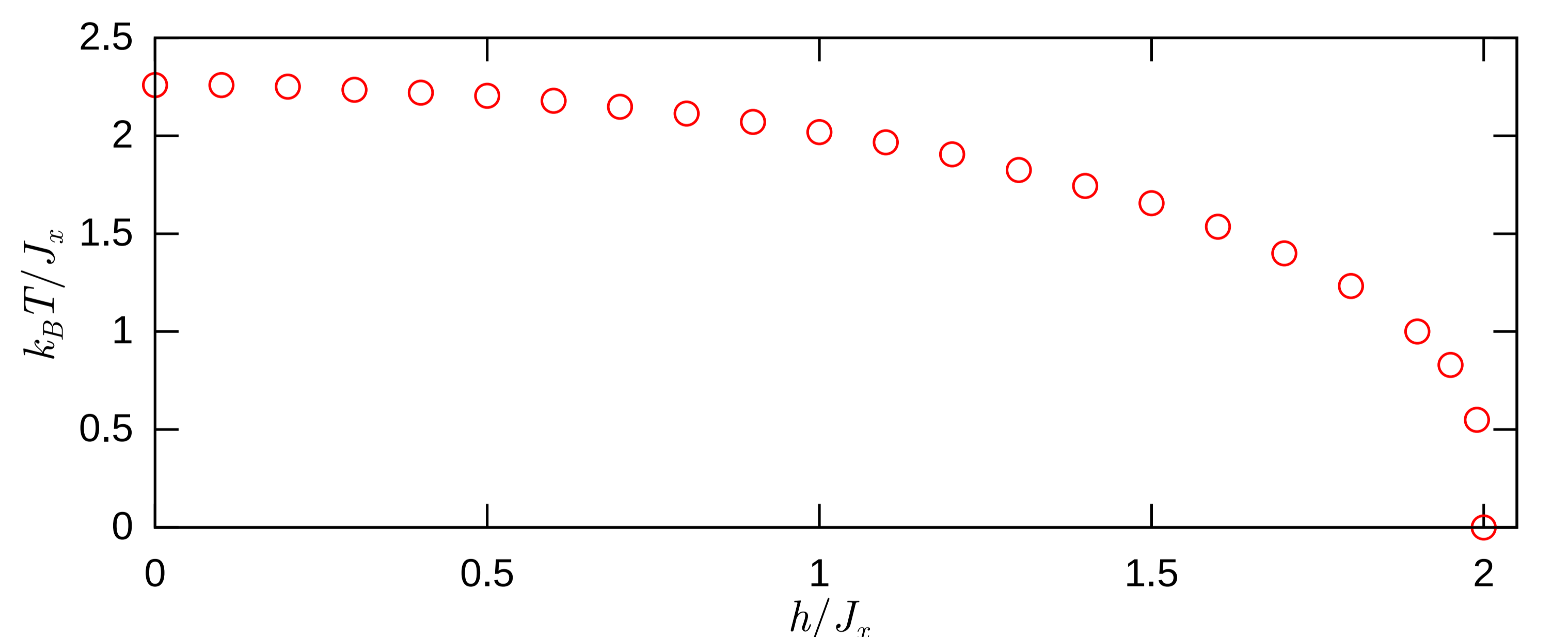


Figura 4: Diagrama de fase no plano T-h. Os pontos foram obtidos com simulações feitas com o MMC.

CONCLUSÕES

Nossos resultados indicam a inexistência de reentrância do diagrama T-h, mostrando a inexistência de transição para $h_c = 2J_x$, para $T > 0$. Estes resultados concordam com os obtidos através da teoria de campo efetivo, que utiliza a técnica do operador diferencial e apresenta boa precisão no tratamento de sistemas magnéticos.

REFERÊNCIAS

- R. J. Baxter, I. G. Enting, S. K. Tsang, J. Stat. Phys. 22 (1980) 465
M. A. Neto, R. A. dos Anjos, J. R. de Souza, Phys. Rev. B 73 (2006) 214439
J. R. Viana, M. A. Neto, J. R. de Souza. Phys. Let. A 373 (2009) 2413