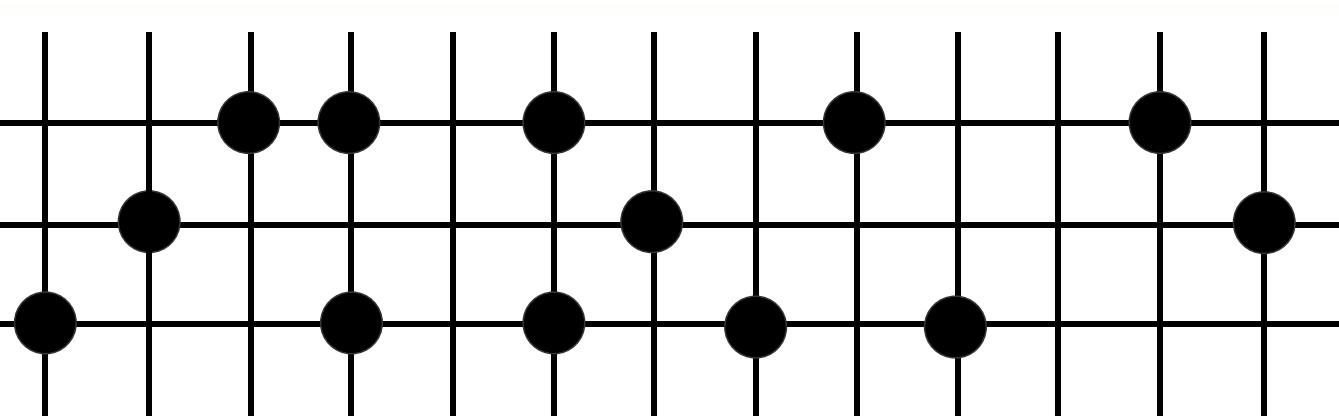


Laboratório de Teoria da Matéria Condensada

SCHMIDT, M., ZIMMER, F. M., MAZIERO, J.



TEORIA DE CAMPO MÉDIO COM CLUSTERS CORRELACIONADOS APLICADA A SISTEMAS CLÁSSICOS

INTRODUÇÃO

Na natureza, uma transição de fase é uma mudança em determinadas grandezas físicas de um sistema. Encontramos exemplos interessantes desse fenômeno nos ferromagnetos, uma classe de materiais que apresentam magnetização espontânea abaixo de uma temperatura crítica (T_c). A modelagem de sistemas compostos por partículas que apresentam momentos magnéticos intrínsecos (spins) tem contribuído para a compreensão dos resultados obtidos experimentalmente com materiais magnéticos. A Teoria de Campo Médio com Clusters Correlacionados (TCMCC), recentemente publicada por Daisuke Yamamoto, considera a matéria dividida em aglomerados (clusters) correlacionados entre si e tem fornecido bons resultados para diferentes estruturas e dimensões no modelo de Ising (MI) para sistemas clássicos de spins.

OBJETIVO

Neste trabalho analisamos em detalhes a TCMCC, compreendendo quais são os fatores responsáveis pelos bons resultados obtidos com tal teoria quando comparada às suas predecessoras. Para isso, aplicamos a TCMCC a modelos clássicos de spins, reproduzindo os resultados de Yamamoto e estudando a forma com que o método trata o comportamento da matéria.

METODOLOGIA

Após o estudo da TCMCC foram reproduzidos os resultados publicados por Yamamoto, através do desenvolvimento de programas computacionais na linguagem Fortran 90, visando o comportamento da magnetização em função da temperatura em 4 geometrias de rede diferentes. Também foram observadas as grandezas susceptibilidade magnética, energia interna e calor específico para a rede quadrada.

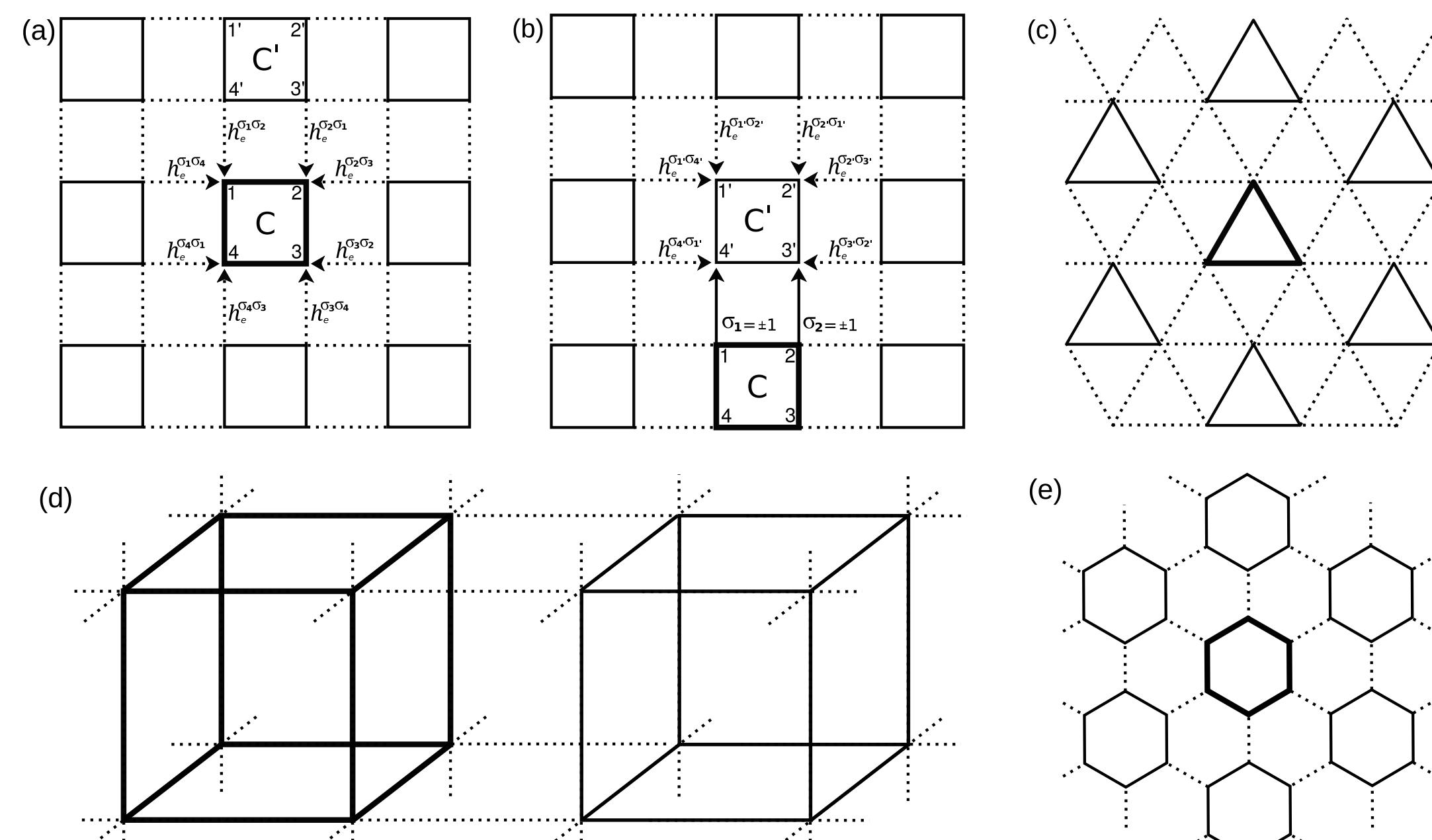


Figura 1 - Diferentes estruturas de rede para as quais foi aplicada a TCMCC: a) rede dividida em clusters quadrados explicitando os campos efetivos sobre o cluster central C'; b) rede quadrada explicitando os campos efetivos sobre o cluster C'; c) rede triangular; d) rede cúbica; e) rede hexagonal.

O Hamiltoniano do modelo de Ising na TCMCC, para o cluster C é

$$H_C = -J \sum_{\langle ij \rangle \in C} \sigma_i \sigma_j - \sum_{i \in C} h_e^{\sigma_i} \sigma_i.$$

Onde os campos efetivos são dados por

$$h_e^{\sigma_i} = J m^{\sigma_i}.$$

A magnetização da rede é dada por

$$m = \text{Tr}(\sigma_i e^{-\beta H_C}) / \text{Tr}(e^{-\beta H_C}).$$

Os campos provenientes dos clusters vizinhos são obtidos auto-consistentemente. Estes campos são utilizados no cálculo do Hamiltoniano do cluster principal. Por exemplo, para a rede quadrada, é necessário resolver os campos efetivos $h_e^{\sigma_i} = J m^{\sigma_i}$, onde

$$m^{\sigma_i} = \begin{cases} m^{++} & (\sigma_i = +1, \sigma_i = +1) \\ m^{+-} & (\sigma_i = +1, \sigma_i = -1) \\ m^{-+} & (\sigma_i = -1, \sigma_i = +1) \\ m^{--} & (\sigma_i = -1, \sigma_i = -1) \end{cases}$$

Foram realizadas simulações, através do método de Monte Carlo (MMC), visando traçar comparativos entre estes resultados e os obtidos com a TCMCC. Nesta linha de trabalho também foi realizado um estudo da Teoria de Campo Médio (TCM) e das soluções exatas do modelo de Ising.

RESULTADOS

Os resultados publicados por Yamamoto da magnetização (m) em função da temperatura (T) foram reproduzidos para as redes quadrada, hexagonal, triangular e cúbica que são apresentados a seguir. Para a rede quadrada também são apresentados os resultados da simulação de Monte Carlo, da TCM e o exato para a geometria bidimensional.

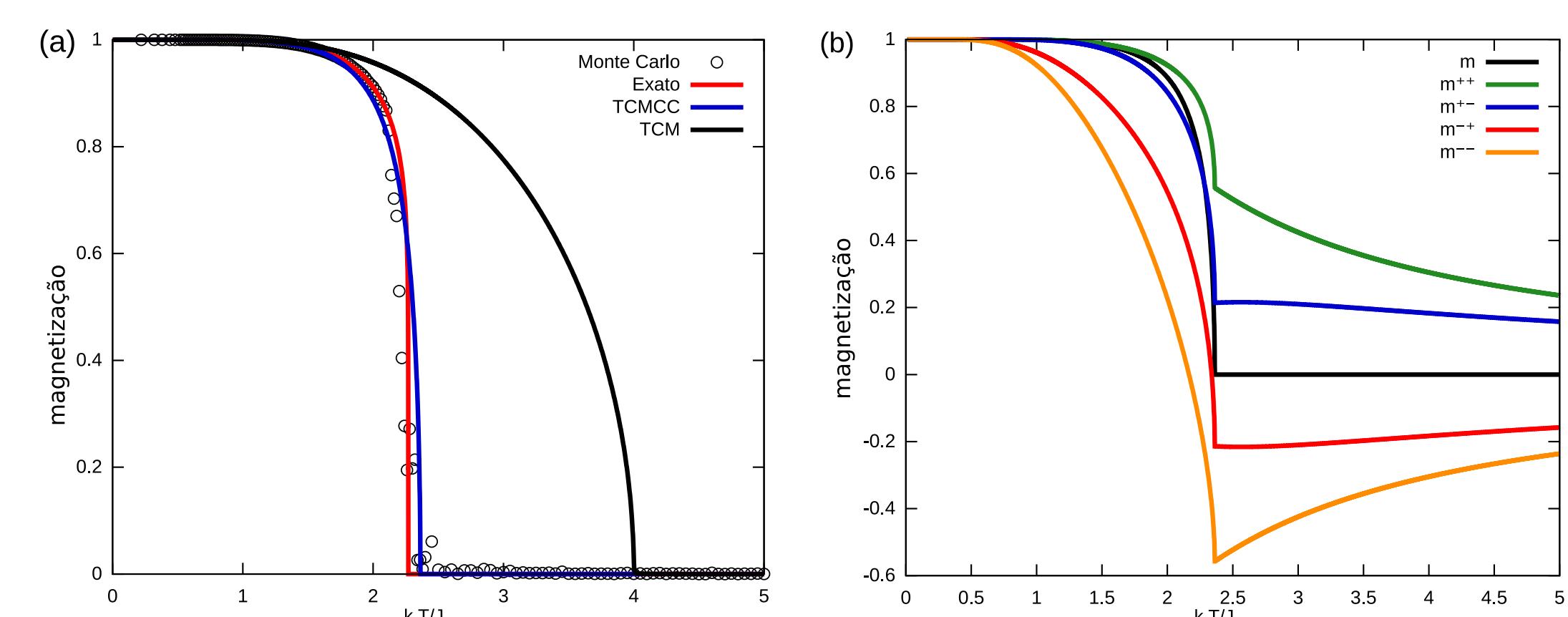


Figura 2 - Magnetização em função da temperatura para rede quadrada: a) A T_c na TCM depende diretamente de z . A solução exata para esta rede apresenta $T_c=2.269$. A simulação de Monte Carlo demonstra um comportamento semelhante à da solução exata. A TCMCC apresenta a transição de fase na $T_c=2.362$; b) Os 4 campos médios (m^{++} , m^{+-} , m^{-+} e m^{--}) resolvidos auto-consistentemente e a magnetização (m).

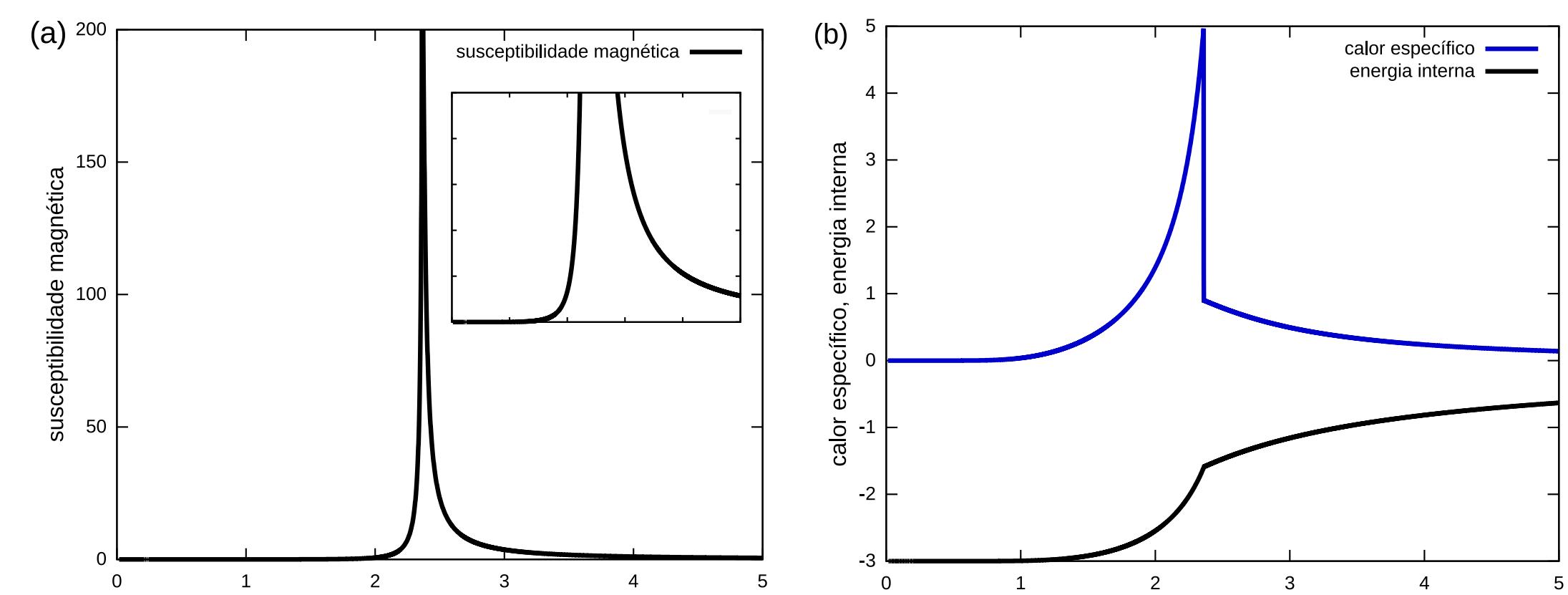


Figura 3 - Resultados da TCMCC na rede quadrada para: a) susceptibilidade magnética, com destaque no comportamento próximo à criticalidade; b) calor específico e energia interna.

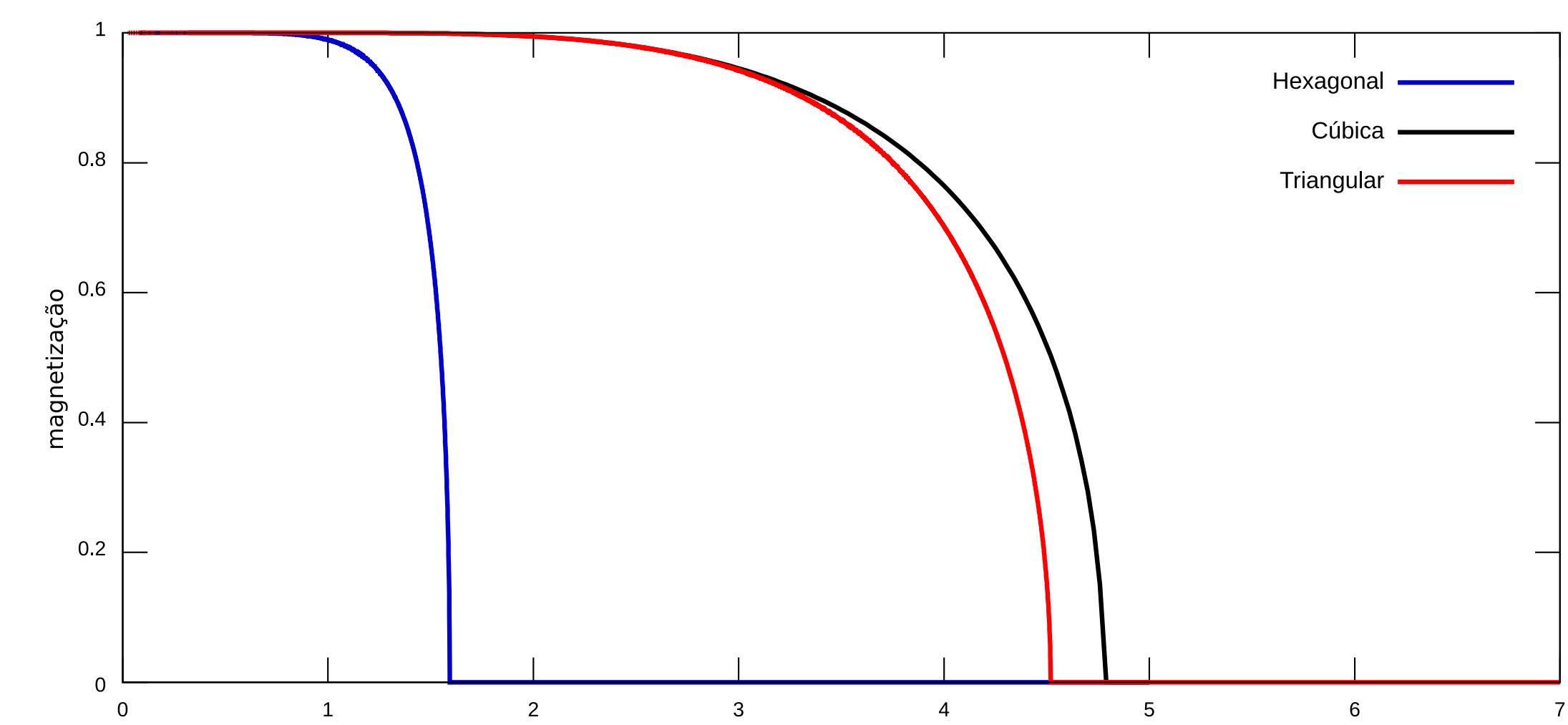


Figura 4 - Resultados da TCMCC para diferentes redes, apresentando melhorias em relação à TCM. Pela TCMCC as transições ocorrem em: hexagonal ($z=3$) - 1.593; cúbica ($z=6$) - 4.753; e triangular ($z=6$) - 4.519.

CONCLUSÕES

A TCMCC permite a obtenção de excelentes resultados para geometrias de rede em duas e três dimensões no MI, portanto, a técnica é muito eficiente no tratamento de sistemas clássicos de spins. O método também foi aplicado para uma rede unidimensional ($z=2$) no MI, não apresentando transição de fase. A independência de z é um dos fatores que qualifica a TCMCC em relação a outros métodos, como a TCM, que depende diretamente de z . A simplicidade de aplicação da técnica e o seu baixo custo computacional, levam a crer que a TCMCC trará bons resultados se aplicada a sistemas quânticos, sendo este o próximo foco deste projeto.

Kadanoff, L. P., *J. Stat. Phys.* 137 (2009) 777.

Newman, M. E. J., e Barkema, G. T., *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Oxford: Clarendon Press, 1999.

Yamamoto, D., *Phys. Rev. B* 79 (2009) 144427.