



UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA



Transição de Fase Dinâmica em Modelos de Spins

Emanuel Costabile Bezerra

Manaus-AM

2012

UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Transição de Fase Dinâmica em Modelos de Spins

Emanuel Costabile Bezerra

Orientador: Prof. Dr. José Ricardo de Sousa

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Amazonas, como parte dos requisitos básicos para obtenção do grau de Mestre em Física.

Manaus-AM

2012

Bezerra, Emanuel Costabile

Transição de fase dinâmica em modelos de spins

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Amazonas, como parte dos requisitos básicos para obtenção do grau de Mestre em Física.

Aprovado em:

COMISSÃO JULGADORA

Prof. Dr. JOSÉ RICARDO DE SOUSA

Intituição: UFAM

Julgamento: aprovado

Assinatura: José Ricardo de Sousa

Prof. Dr. MIRCEA DANIEL GALICEANU

Intituição: UFAM

Julgamento: aprovado

Assinatura: Mircea Daniel Galiceanu

Prof. Dr. MARCELO LOBATO MARTINS

Intituição: UFV

Julgamento: aprovado

Assinatura: Marcelo Lobato Martins

Dedico este trabalho ao
nosso Deus e à minha
família.

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. José Ricardo de Sousa pela orientação, incentivo e confiança com que me direcionou neste trabalho.

Ao Departamento de Física da Universidade Federal do Amazonas que proporcionou a minha formação acadêmica.

Ao Prof. Denilson Borges, que me motivou nos estudos relacionados a computação (métodos computacionais).

À minha família que me incentivou a estudar, especialmente os meus pais.

Aos meus colegas que apoiaram nas horas de alegrias durante o curso, em especial Anne Beatriz, Adalberto Miranda, Carlos Velas, Celso Ricardo, Daniel Fonseca, Dilson Teixeira, Edvam Nunes, Márcio Gomes, Israel Torres, Bruce Dilcelino, Quezia Cristina Campos, Rodrigo da Lapa, Rosana dos Anjos, Madsom de Assunção e José Diego Quintiliano.

À Capes que apoiou financeiramente a realização deste trabalho.

Resumo

Neste trabalho investigaremos o diagrama de fase estático e dinâmico dos modelos de spins: Ising com campo aleatório com uma distribuição de probabilidade bimodal, Blume-Capel e Blume-Capel com campo externo oscilante, utilizando as aproximações de campo médio (MFA) e de campo efetivo (EFT). As propriedades térmicas de equilíbrio são obtidas teoricamente via o formalismo matemático da mecânica estatística de Boltzmann e Gibbs. Os estados estacionários dos modelos cinéticos são descritos pela dinâmica estocástica de Glauber. Usando MFA mostramos que as linhas de primeira ordem obtidas no equilíbrio, através da construção de Maxwell para a energia livre, e fora do equilíbrio são diferentes. A fim de analisar a estabilidade do sistema, o expoente de Lyapunov é calculado numericamente. Nesta aproximação foram encontrados valores distintos de $H_c(D_c)$ para o modelo de Ising com campo aleatório (Blume-Capel), isto é, $H_c(\text{estático})[D_c(\text{estático})] \neq H_c(\text{dinâmico})[D_c(\text{dinâmico})]$. Por outro lado, usando EFT as linhas de primeira ordem, também diferem, mas agora temos $H_c(\text{estático})[D_c(\text{estático})] = H_c(\text{dinâmico})[D_c(\text{dinâmico})]$. Comparamos nossos resultados da dinâmica com o valor de H_c obtido via simulação de Monte Carlo fora do equilíbrio e mostramos que há um acordo satisfatório do ponto de vista quantitativo. A energia do sistema representado pelo modelo Blume-Capel com campo externo oscilante não permanece fixa ao longo da evolução, oscilando para todo instante de tempo, portanto, não é possível obter as propriedades estáticas pelo formalismo da mecânica estatística do equilíbrio. Obtivemos diagramas de fase onde encontramos regiões ordenadas (ferromagnéticas), desordenadas (paramagnética) e regiões de coexistência.

Abstrat

In this paper we investigate the phase diagram of the static and dynamic models of spins, with random field Ising with a bimodal probability distribution, Blume-Capel and Blume-Capel with oscillating external field, using the mean field approximation (MFA) and the effective field (EFT). The thermal properties of balance are theoretically obtained via the mathematical formalism of statistical mechanics of Boltzmann and Gibbs. The stationary states of the kinetic models are described by the stochastic dynamics of Glauber. Using MFA show that the lines in balance first order obtained by Maxwell's construction for the free energy, and out of balance are different. To analyze the stability of sitema the Lyapunov exponent is calculated numerically. In this approach we found values distinct $H_c(D_c)$ for the Ising model with random field (Blume-Capel), ie H_c (static) [D_c (static)] $\neq H_c$ (dynamic) [D_c (dynamic)]. On the other hand, using EFT for first order lines also differ, but now we have H_c (static) [D_c (static)] = H_c (dynamic) [D_c (dynamic)]. We compared our results with the dynamic value of H_c obtained via Monte Carlo simulation out of balance and show that there is a satisfactory agreement in quantitative terms. The energy of the system represented by the Blume-Capel model with oscillating external field does not remain fixed over of evolution, swinging every second of time, so can not obtain the static properties of the formalism of equilibrium statistical mechanics. Returned diagrams phase regions where we find ordered (ferromagnetic), disordered (paramagnetic) and regions of coexistence.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Considerações gerais	1
1.2	Modelagem Magnética	4
1.2.1	Anisotropias	6
1.3	Modelos Magnéticos	9
1.3.1	Modelo de Ising	9
1.3.2	Modelo XY	11
1.3.3	Modelo de Heisenberg	12
1.4	Teoria de Landau para pontos tricríticos	12
1.5	Apresentação do trabalho	16
2	Transição de Fase dinâmica	18
2.1	Considerações gerais	18
2.2	Equação mestra	32
2.3	Dinâmica estocástica	34
2.3.1	Dinâmica de Glauber	35
2.3.2	Outras dinâmicas	38
2.4	Modelo de Ising cinético	38
2.4.1	Aproximação de campo médio	40
2.4.2	Aproximação de campo efetivo	41
2.5	Conclusões	42
3	Dinâmica e estática do modelo de Ising com campo aleatório	44
3.1	Introdução	44
3.2	Modelo de Ising estático com campo aleatório	51

3.2.1	Solução na aproximação de campo médio	51
3.2.2	Solução na aproximação de campo Efetivo	53
3.3	Modelo de Ising cinético com campo aleatório	55
3.3.1	Solução estacionária na aproximação de campo médio	57
3.3.2	Solução estacionária na aproximação de campo efetivo	58
3.4	Resultados	58
3.4.1	Magnetização média e o expoente de Lyapunov	58
3.4.2	Diagramas de fases	61
3.5	Conclusões	64
4	Dinâmica e estática do modelo de Blume-Capel	67
4.1	Introdução	67
4.2	Modelo Blume-Capel estático	68
4.2.1	Solução na aproximação de campo médio	68
4.2.2	Solução na aproximação de Campo Efetivo	69
4.3	Modelo Blume Capel Cinético	75
4.3.1	Solução na aproximação de campo médio	77
4.3.2	Solução na aproximação de campo efetivo	77
4.4	Resultados	78
4.5	Conclusões	83
5	Modelo de Blume-Capel com campo oscilante	87
5.1	Introdução	87
5.2	Dinâmica de Glauber	88
5.3	Solução na aproximação de campo médio	90
5.4	Solução na aproximação de campo efetivo	90
5.5	Resultados	91
5.6	Conclusão	102
6	Considerações Finais	104
A	Equação dinâmica para o modelo de Ising com campo oscilante	107
B	Métodos numéricos	109
B.1	Método de diferença finitas	109

B.2	Método de Runge-Kutta	110
B.3	Métodos de Previsor Corretor	112
B.4	Método de Newton-Raphson	114
C	Estabilidade local e expoente de Lyapunov	117
D	Artigos Publicados	122
	Referências Bibliográficas	133

Lista de Figuras

- 1.1 Diagrama de fase referente a um sistema antiferromagnético no espaço de parâmetro (T, H, H_s) . S_1 e S_2 representam as superfícies de primeira ordem. PTC representa o ponto tricrítico. 15
- 2.1 Diagrama de fase esquemático no plano amplitude do campo oscilatório H_0 e temperatura T para baixa frequência $\omega < \omega_c$. A linha pontilhada corresponde a transição dinâmica de primeira ordem, a contínua a transição de segunda ordem e o círculo ao ponto tricrítico. As figuras inseridas correspondem às quebras de simetria das histereses dinâmicas $m-H$ devido a transição dinâmica. 21
- 2.2 Diagrama de fase no plano $H_0 - T$ do modelo de Ising cinético obtido via simulação de Monte Carlo [54] para vários valores de frequência ω . Na curva (a) temos a simulação numa rede quadrada ($2d$) com tamanho $L = 100$ e em (b) para rede cúbica simples ($3d$) com tamanho $L = 20$. Diferentes símbolos representam diferentes frequências em (a) temos $\omega = 0.418$ (\square), $\omega = 0.208$ (\triangle), $\omega = 0.104$ (\diamond) e na curva (b) temos $\omega = 0.418$ (\diamond), $\omega = 0.202$ (\square), $\omega = 0.104$ (\circ). A localização do ponto tricrítico (TCP) é indicado nas figuras por círculos. 23
- 2.3 Comportamento da magnetização média $\langle Q \rangle$ e área da histerese $\langle A \rangle$ como função da amplitude do campo senoidal no modelo de Heisenberg anisotrópico ($\Delta = 0.1$) obtido via simulação de Monte Carlo [62]. Foram fixados $\omega = 2\pi/240$ e $\tilde{T} = 1.0$, onde para as propriedades de *bulk* (círculos) foi usado uma rede cúbica simples de tamanho $32 \times 32 \times 32$, enquanto para as propriedades do filme (triângulos) usou-se tamanho $D = 12$ (direção do eixo z). 26

2.4	Comportamento dinâmico da magnetização axial $m_z(t)$ como função do tempo para um filme fino de Heisenberg clássico com anisotropia de troca $\Delta = 0.1$ (Eq.(2.4)), obtido via simulação de Monte Carlo[62] numa rede cúbica simples de tamanho $32 \times 32 \times D(D = 12)$, na presença de uma campo oscilatório com frequência $\omega = 2\pi/240$, temperatura reduzida $\tilde{T} = \frac{k_B T}{J} = 1.0$ e várias intensidades da amplitude do campo indicadas as curvas.	27
2.5	Comportamento da magnetização dinâmico média $\langle Q \rangle$ como função da temperatura reduzida $T^* = k_B T/J$ do modelo de Heisenberg clássico anisotrópico $\Delta = 0.1$ (Eq.(2.4)), no filme fino de espessura $D = 12(L = 32)$ calculado através de simulação de Monte Carlo [64]. Um campo pulsado na forma quadrática ($\pm H_0$) foi usado com amplitude $H_0 = 0.3$ com as dinâmicas de Glauber (círculos sólidos) e Metrópolis (círculos abertos).	29
2.6	Variação temporal da magnetização $M(\omega t)$ para o modelo de Ising cinético usando aproximação de campo médio [49], fixando $\omega = 1.0$, $H_0/zJ = 0.5$ e $k_B T/zJ = 0.8$ na fase $P(a)$, $\omega = 1.0$, $H_0/zJ = 0.25$ e $k_B T/zJ = 0.25$ na fase $F(b)$ e $\omega = 1.0$, $H_0/zJ = 0.70$ e $k_B T/zJ = 0.05$ na fase mista $F + P(c)$.	30
2.7	Diagrama de fase no plano $T - h$ ($T \equiv k_B T/zJ$ e $h = H_0/zJ$) para $\omega = 2\pi$ do modelo de Ising cinético obtido via aproximação de campo médio [49]. As fases ferromagnética, paramagnética e mista são denotadas no diagrama por F , P e $F + P$, respectivamente. O círculo cheio representa o ponto tricrítico. A curva inserida representa o comportamento da magnetização na fase F como função da temperatura.	31
2.8	Diagrama esquematizado da evolução temporal da distribuição de probabilidade das transições entre os estados σ e σ' .	33
3.1	Diagrama de fase no plano $T - H$ do RFIM, obtido por Aharony [76] usando aproximação de campo médio. O c representa o número de coordenação.	45
3.2	Evolução temporal da magnetização do RFIM numa rede cúbica simples obtida via MFA, para a temperatura reduzida $k_B T/J = 3, 0$ e campo aleatório externo reduzido $H/J = 0, 5$.	59

3.3	A dependência térmica da magnetização média (a linha sólida grossa) e dos expoentes de Lyapunov λ_F e λ_P (a linha sólida fina) para o RFIM na aproximação de campo médio e numa rede cúbica simples. λ_F está associado à fase ferromagnética e λ_P à fase paramagnética. T_t e T_c são as temperaturas de transição de fase de primeira e segunda ordem, respectivamente. (a) A transição de fase de segunda ordem para $h = 2.5$ ocorre em $T_t = 4.44$. (b) A transição de fase de primeira ordem para $h = 3.5$ ocorre em $T_c = 1.87$	60
3.4	Comportamento da magnetização estacionária M como função do campo aleatório reduzido e o expoente de Lyapunov λ para o RFIM obtido via MFA [113] numa rede cúbica simples ($z=6$), para as temperaturas reduzidas: (a) $k_B T/J = 5.0$ e (b) $k_B T/J = 2.0$	62
3.5	Diagrama de fase no plano $T - H$ para o RFIM na aproximação de campo médio numa rede cúbica simples. As linhas tracejadas, pontilhadas e sólidas correspondem a linhas de transição de primeira ordem fora do equilíbrio, primeira ordem no equilíbrio e segunda ordem, respectivamente. O ponto preto denota o ponto tricrítico (PTC).	63
3.6	Comportamento da magnetização M como função do campo aleatório reduzido e o expoente de Lyapunov λ para o RFIM obtido via EFT [112] numa rede cúbica simples ($z=6$) para as temperaturas reduzidas (a) $K_B T/J = 4.0$ e (b) $K_B T/J = 1.2$. com aproximação de campo efetivo	64
3.7	Diagrama de fase no plano $T - H$ para o RFIM numa rede cúbica simples ($z=6$) obtido via a teoria de campo efetivo (EFT) [112]. As linhas tracejadas, pontilhadas e sólidas correspondem a linhas de transição de primeira ordem fora do equilíbrio, de primeira ordem no equilíbrio e de segunda ordem, respectivamente. O ponto preto denota o ponto tricrítico.	65
4.1	Diagrama de fase no plano T-D do modelo Blume-Capel com spin $S=1$ numa rede quadrada ($z=4$) obtida via aproximação de campo médio (MFA)(a) e teoria de campo efetivo (EFT)(b). As linhas contínuas e tracejadas correspondem as transições de segunda e primeira ordem, respectivamente. O ponto em negrito indica o ponto tricrítico (PTC).	74

4.2	Diagrama de fase no plano T-D do modelo Blume-Capel com spin S=1 numa rede cúbica simples ($z = 6$) obtida via MFA (a) e EFT (b). As linhas contínuas e tracejadas correspondem as transições de segunda e primeira ordem, respectivamente. O ponto em negrito indica o ponto tricrítico (PTC).	75
4.3	Comportamento da magnetização média M e do expoente de Lyapunov λ para o modelo Blume-Capel cinético numa rede cúbica simples ($z = 6$) como função da anisotropia reduzida para as temperaturas reduzidas (a) $k_B T/J = 2.2$ e (b) $k_B T/J = 1.2$, obtido via aproximação de campo médio.	80
4.4	Diagrama de fase no plano $T - D$ para o modelo Blume-Capel na aproximação de campo médio numa rede cúbica simples ($z=6$). As linhas tracejadas, pontilhadas e sólidas correspondem a linhas de transição de primeira ordem fora do equilíbrio, primeira no equilíbrio e segunda ordem, respectivamente. O ponto preto é o ponto tricrítico (PTC).	80
4.5	Diagrama de fase no plano $T - D$ para o modelo Blume-Capel na aproximação de campo médio numa rede quadrada ($z=4$). As linhas tracejadas, pontilhadas e sólidas correspondem a linhas de transição de primeira ordem fora do equilíbrio, primeira ordem no equilíbrio e segunda ordem, respectivamente. O ponto preto é o ponto tricrítico (PTC).	81
4.6	Comportamento da magnetização média M e o expoente de Lyapunov λ como função da anisotropia reduzida para o modelo Blume-Capel cinético obtido via aproximação campo efetivo numa rede cúbica simples ($z=6$), para as temperaturas reduzidas (a) $k_B T/J = 2.0$ e (b) $k_B T/J = 1.2$.	82
4.7	Diagrama de fase no plano $T - D$ para o modelo Blume-Capel cinético na aproximação de campo efetivo numa rede cúbica simples ($z=6$). As linhas tracejadas, pontilhadas e sólidas correspondem às linhas de transição de primeira fora do equilíbrio, primeira no equilíbrio e segunda ordem, respectivamente. O ponto preto é o ponto tricrítico (PTC).	82
4.8	Diagrama de fases no plano $T - D$ para o modelo Blume-Capel cinético na aproximação de campo efetivo numa rede quadrada ($z=4$). As linhas tracejadas, pontilhadas e sólidas correspondem a linhas de transição de primeira ordem fora do equilíbrio, primeira ordem no equilíbrio e segunda ordem, respectivamente. O ponto preto é o ponto tricrítico (PTC).	84

- 5.1 Evolução temporal da magnetização (m) do modelo Blume-Capel cinético na presença de um campo oscilante obtido na aproximação de campo médio (MFA)[136] . Fixando $\tau = 1$, $\omega = 2\pi$, $T \equiv (\beta J)^{-1}$, $h \equiv H_0/J$ e $d = D/J$ numa rede quadrada ($z = 4$): (a) fase paramagnética (**P**), $d = 0.25$, $h = 0.5$ e $T = 0.7$; (b) fase ferromagnética (**F**), $d = 0.25$, $h = 0.2$ e $T = 0.5$; (c) região de coexistência (**P+F**), $d = 0.25$, $h = 0.75$ e $T = 0.1$; 93
- 5.2 A dependência térmica da magnetização média (a linha sólida cheia) e dos expoentes de Lyapunov λ_s e λ_a (a linha sólida fina) para do modelo Blume-Capel cinético na presença de um campo oscilante obtido via MFA [136]. O índice s indica a solução simétrica, que corresponde a fase **P** e o índice a indica a solução anti-simétrica, que corresponde a fase **F** . T_t e T_c são as temperaturas de transição de fase de primeira e segunda ordem, respectivamente. (a) A transição de fase de primeira ordem para $h = 0.775$ e $d = 0.25$ ocorre em $T_t = 0.125$. (b) As duas sucessivas transições de fases, região de coexistência **F+P**, uma de primeira ordem e a outra de segunda ordem para $h = 0.715$ e $d = 0.25$ ocorrem em $T_t = 0.09$ e $T_c = 0.27$, respectivamente. (c) A transição de fase de segunda ordem para $h = 0.715$ e $d = 0.25$ ocorre em $T = 0.27$.(d) A transição de fase de segunda ordem para $h = 0.45$ e $d = 0.25$ ocorre em $T = 0.48$ 94
- 5.3 Diagramas de fases no plano $T - H_0$ do modelo Blume-Capel de spin-1 cinético com campo oscilante usando aproximação de campo médio (MFA)[136]. Regiões paramagnéticas **P**, ferromagnéticas **F**, e coexistência de regiões **F+P** são encontradas. As linhas tracejadas e sólida representam transições de fases de primeira e segunda ordem, respectivamente. Os círculos pretos correspondem os pontos tricríticos. (a) $d = -0.2$, (b) $d = 0.3$, (c) $d = 0.525$, (d) $d = 0.6$ e (e) $d = 1.0$ 97
- 5.4 Evolução temporal da magnetização (m) do modelo Blume-Capel cinético na presença de um campo oscilante obtido na aproximação de campo efetivo (EFT). 98

- 5.5 A magnetização média e o expoente de Lyapunov dependentes da temperatura reduzida para o modelo Blume-Capel cinético com campo externo oscilante na aproximação de campo efetivo (EFT) numa rede quadrada ($z=4$) para $d = 1.5$ e $h = 0.1$. A linha cheia e fina correspondem a magnetização média e o expoente de Lyapunov, respectivamente. (a) condição inicial na evolução temporal $m(0) = 0$ (b) $m(0) = 1$ 100
- 5.6 Diagramas de fases do modelo Blume-Capel cinético com campo oscilante no plano $T - H_0$, obtido via aproximação de campo efetivo (EFT). A região paramagnética **P**, ferromagnética **F**, e coexistência de regiões **F+P** são encontradas. As linhas tracejadas e sólidas representam transições de fase de primeira e segunda ordem, respectivamente. (a) $d = -0.2$, (b) $d = 0.7$, (c) $d = 1.5$ e (d) $d = 1.8$ 101
- B.1 A dependência térmica da magnetização média M (linha sólida grossa) e do expoente de Lyapunov λ (linha sólida fina) para o modelo de Blume-Capel com campo oscilante na aproximação de campo médio para $d = 0.25$, $h = 0.4$ e usando os métodos MDF (linha sólida preta) e MRK04 (linha sólida vermelha). O índice s indica a solução simétrica e o n indica a anti simétrica. A magnetização média decresce continuamente com o aumento da temperatura reduzida e, em $T_c \simeq 0.496$, sofre uma transição de fase. . . 113
- B.2 A dependência térmica da magnetização média M (linha sólida grossa) e do expoente de Lyapunov λ (linha sólida fina) para o modelo de Blume-Capel com campo oscilante na aproximação de campo médio para $d = 0.25$, $h = 0.4$ e usando o método MAM. O índice s indica a solução simétrica e o n indica a anti simétrica. A magnetização média decresce continuamente com o aumento da temperatura reduzida e, em $T_c = 0.4950$, sofre uma transição de fase de primeira ordem. 114
- B.3 Newton-Raphson em ação. Começando com x_0 , as sucessivas iterações se aproximam do zero da função. A posição de x_4 e do zero real da função são indistinguíveis nesta escala 116

C.1 A dependência térmica da magnetização média (a linha sólida grossa) e dos expoentes de Lyapunov λ_s e λ_a (a linha sólida fina) para $d = 0.25$ e $h = 0.715$, o índice s indica a solução simétrica que corresponde a fase **P** e o índice a indica a solução anti-simétrica que corresponde a fase **F**. T_t e T_c são as temperaturas de transição de fase de primeira ordem e segunda ordem, respectivamente. Devido a condição inicial $m(0) = 0$ o sistema apresenta duas sucessivas transições de fases, uma de primeira ordem e a outra de segunda ordem que ocorrem em $T_t = 0.09$ e $T_c = 0.27$, respectivamente. . 120

Capítulo 1

Introdução

1.1 Considerações gerais

Desde o início do século XX que pesquisadores têm-se dedicado a entender as propriedades magnéticas em diversos compostos, onde modelos são propostos a fim de modelar estas propriedades. O estado de equilíbrio de um sistema é caracterizado por uma constância no decorrer do tempo em suas propriedades macroscópicas. As propriedades termodinâmicas de equilíbrio são obtidas teoricamente via o formalismo matemático da mecânica estatística de Boltzmann e Gibbs. Este formalismo matemático está bem estabelecido na literatura. Por outro lado, uma teoria (mecânica estatística) microscópica para estudar as grandezas termodinâmicas fora do equilíbrio não se encontra bem solidificada, mas alguns aspectos gerais são descritos com base em aproximações do sistema real (complexo).

A natureza é bastante complexa quanto a medida exata de uma certa grandeza de um determinado sistema. O que conseguimos obter como resposta quando tentamos aferir uma grandeza, nada mais é que o comportamento médio de tal grandeza ao longo do tempo, uma média temporal. No laboratório, ao tentarmos medir a temperatura de um sistema, por exemplo, coloca-se um termômetro em contato com o sistema e espera-se o tempo evoluir, até que a temperatura não varie mais. Então, o termômetro apresenta uma medida estacionária desta grandeza.

A mecânica estatística de equilíbrio é uma ferramenta matemática que auxilia na descrição macroscópica de sistemas físicos da natureza nos seus diversos estados da matéria. Do ponto de vista teórico, a dinâmica dos spins estuda a evolução temporal da magne-

tização e mostra que o sistema evolui para uma magnetização que não varia mais com o tempo, a solução estacionária. Uma questão que se indaga sobre esta situação é se ela seria a solução do sistema em equilíbrio termodinâmico? Tentando responder essa questão, abordaremos um assunto muito interessante que é a dinâmica de spins. O estudo de sistemas no equilíbrio termodinâmico é bastante explorado ao longo da história, o equilíbrio que é bem definido na mecânica estatística do equilíbrio, está relacionado ao estado de mínimo de energia interna e na máxima entropia [1, 2, 3, 4], que equivale ao mínimo global da energia livre.

Para estudar a dinâmica de qualquer sistema físico seguimos basicamente cinco passos: No caso específico de um sistema de spins, o primeiro passo é definir como são as interações entre os constituintes microscópicos do sistema, o Hamiltoniano de spins. O segundo passo é descrever a dinâmica do sistema, dada as interações e escrever as equações de movimento. O terceiro passo é escolher uma representação termodinâmica, descrever quais os parâmetros macroscópicos que serão fixos (Ex.: entropia, energia interna, temperatura, etc.). O quarto passo é o processo de integração numérica, integrando as equações diferenciais e obtendo as soluções. O último passo é calcular as grandezas termodinâmicas, como se trata de um sistema dinâmico, onde as grandezas evoluem com o tempo, precisa-se calcular, por exemplo, uma grandeza que é o valor médio dos momentos de dipolos orientados em uma dada direção. Com isso, obtem-se o comportamento da magnetização média em função da temperatura. Seguindo esses passos podemos descrever os estados estacionários de um sistema dinâmico. O que realmente esse procedimento descreve é o que a termodinâmica faz, com uma única diferença, a limitação computacional, uma vez que a termodinâmica “resolve” um sistema com 10^{24} partículas. Teoricamente, nem mesmo com os melhores recursos computacionais, não conseguimos uma solução exata, e mesmo que o fizessem caso o fizessem o tempo computacional seria inviável (da ordem da idade do universo) para a maioria dos modelos de spins (Hamiltonianos).

O estudo da dinâmica de spins pode ser dividido em dinâmica molecular e dinâmica estocástica. No caso da dinâmica molecular, dadas as interações entre os spins, as equações de movimento aparecem naturalmente, e o tratamento dos constituintes podem ser quântico (equação de Heisenberg) ou clássico (2^a lei de Newton para a rotação). Na dinâmica estocástica, pressupõe-se que os spins se movimentam regidos por uma equação dinâmica probabilística, uma equação mestra que depende de uma taxa de transição

(probabilidade por unidade de tempo com que os spins se movimentam). Existem várias dinâmicas estocásticas (dinâmica de Glauber, Metrópolis, etc.), que diferem entre si é a escolha das taxas de transições. Nesta dissertação, abordaremos através da dinâmica estocástica de Glauber sistemas que consistem de variáveis de spin Ising, que interagem ferromagneticamente com seus vizinhos mais próximos. Nosso objetivo básico é comparar os estados estacionários desses sistemas com os estados de equilíbrio termodinâmico.

Devido às interações dos constituintes microscópicos (efeito cooperativo) e aos tipos de elementos químicos arranjados numa estrutura cristalina, os materiais magnéticos apresentam diversos tipos de ordenamentos (ferromagnéticos, antiferromagnéticos, vidro de spins, etc). No caso particular dos compostos ferromagnéticos, quando aumentamos a temperatura, a magnetização (ordenamento médio dos momentos magnéticos) decresce e vai a zero ao atingir a temperatura crítica T_c (temperatura de Curie). Dizemos, então, que o sistema sofreu uma transição de fase, onde para $T < T_c$ e $T > T_c$ temos uma ordem ferromagnética e um estado desordenado (paramagnético), respectivamente. Numa linguagem mais moderna, ao atingir $T = T_c$ temos uma quebra espontânea de simetria, na qual na região desordenada ($T > T_c$), o sistema é invariante por rotação arbitrária no espaço e por conseguinte tem uma simetria maior do que na região ordenada ($T < T_c$), que tem os momentos magnéticos apontados em média numa direção (eixo de fácil magnetização). Um problema básico na teoria de transições de fases contínuas em sistemas puros, que são caracterizadas por divergências de várias quantidades físicas (ex.: calor específico, susceptibilidade), para as quais detalhes microscópicos do sistema são irrelevantes, é o conceito de universalidade dos expoentes críticos [5].

Por outro lado, numa transição de fase de primeira ordem, que é muito comum na natureza, o comprimento de correlação ξ é finito na temperatura de transição ¹, onde a descontinuidade do parâmetro de ordem (magnetização para o caso de um ferromagneto) e ou presença de calor latente são observados. Sendo o comprimento de correlação finito próximo da região da transição de fase, a idéia de universalidade não é obedecida. Uma pequena aleatoriedade pode influenciar significamente a transição de fase do sistema, mudando, por exemplo, a transição de fase de primeira ordem por uma de segunda ordem, surgindo, assim, um conjunto de pontos multicríticos nos diagramas de fases [6]. Um

¹Numa transição de fase contínua (segunda ordem), o valor de T_c corresponde a temperatura crítica, mas no caso de primeira ordem, que não apresenta comportamento universal, referimos apenas a temperatura de transição de fase.

exemplo simples é a presença de campos aleatórios atuando em cada spin localizados numa rede cristalina livre de defeito. Esse sistema pode ser descrito por um modelo de Ising, o conhecido modelo de Ising com campo aleatório (RFIM *random field Ising model*). O RFIM foi introduzido por Imry [7], e suas propriedades na transição de fase de equilíbrio têm sido bastante exploradas por diversas técnicas. Aspectos gerais associados ao RFIM são a noção da dimensionalidade crítica inferior (d_l), pontos multicríticos, influência do tipo de distribuição de probabilidade dos campos aleatórios, etc. A única e bem estabelecida questão é a existência de uma transição de fase para $d \geq 3$ ($d_l = 2$), enquanto as outras questões continuam sem respostas conclusivas.

1.2 Modelagem Magnética

Para explicar o magnetismo do ponto de vista microscópico, Heisenberg [8] propôs que o alinhamento dos spins decorria de seus vizinhos mais próximos. A interação eletrostática entre elétrons das camadas externas de íons adjacentes, tratada quanticamente via teoria de perturbação, produz uma separação dos níveis de energia eletrônicos, que pode ser entendida como a quantidade de energia necessária para trocar os elétrons do átomo em estados diferentes. Por exemplo, para um sistema de dois elétrons [9], o princípio de exclusão de Pauli exige que as auto-funções dos dois elétrons (férmions) sejam anti-simétricas, e usando teoria de perturbação degenerada obtem-se as auto-energias dadas por

$$E_{\pm} = E_o \pm J_{12} \quad (1.1)$$

com

$$J_{12} = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \phi_1^*(\mathbf{r}_1) \phi_2^*(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \phi_1(\mathbf{r}_1) \phi_2(\mathbf{r}_2), \quad (1.2)$$

onde E_o é a auto-energia na ausência da perturbação coulombiana, $\phi_i(\mathbf{r}_i)$ é a autofunção da partícula $i = 1, 2$ para um estado l não perturbado. A energia de troca (exchange) $J_{12} = E_{\uparrow\downarrow}(S = 0) - E_{\uparrow\uparrow}(S = 1)$ (sendo que $E_{\uparrow\uparrow}(S = 1)$ e $E_{\uparrow\downarrow}(S = 0)$ são as auto-energias dos estados tripleto e singleto, respectivamente) foi proposta independentemente por Frenkel [10] e Dorfman [11]. Quando $J_{12} > 0$, o estado de menor energia é o tripleto, portanto, prevalece a orientação dos spins paralelos (estado ferromagnético) e se $J_{12} < 0$, o estado de menor energia é o singleto, prevalecendo a orientação dos spins antiparalelos (estado antiferromagnético). A energia de troca J_{12} decresce rapidamente com a distância entre

os íons (decaimento exponencial), em contraste com a interação coulombiana que decresce mais lentamente ($\Delta E_c \approx 1/r$). A razão é que J_{12} , dado pela Eq.(1.2), contém o produto de funções de onda de elétrons ligados em diferentes núcleos, portanto, J_{12} dependerá do envolvimento (*overlap*) das funções de onda, e este *overlap* decresce, exponencialmente, com a distância r . Desta maneira, a interação de troca corresponde a uma interação de curto-alcance, diferindo da interação dipolar cuja natureza é de longo alcance ($\approx 1/r^3$).

Usando as relações dos operadores de spin \vec{S}^2 , onde $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$ (com $S = 0, 1$), e com base nas auto-funções correspondentes as auto-energias dadas pela Eq.(1.1), Heisenberg [8] e Dirac [12] usaram o seguinte Hamiltoniano efetivo de spins:

$$\mathcal{H}_{12} = E_0 - \frac{J_{12}}{2} \left(1 + 4\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \right), \quad (1.3)$$

pois, de fato temos que $\mathcal{H}_{12}|\phi_{\pm}\rangle = E_{\pm}|\phi_{\pm}\rangle$, sendo $|\phi_{+}\rangle$ e $|\phi_{-}\rangle$ os auto-estados associados aos estados singleto e tripleto, respectivamente. Generalizando para uma rede cristalina de N spins localizados, o Hamiltoniano efetivo entre spin-spin predominante (*exchange*) é descrito por

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (1.4)$$

onde $\sum_{\langle i,j \rangle}$ representa o somatório sobre todos os pares de spins i e j com interação J_{ij} de troca entre primeiros, segundos, etc ... vizinhos e $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ indica o operador de spin no sítio i . A Eq.(1.4) é conhecida na literatura como modelo de Dirac-Heisenberg, sendo que para $J_{ij} > 0$ e $J_{ij} < 0$ esse Hamiltoniano é denominado de Heisenberg ferromagnético e Heisenberg antiferromagnético, respectivamente.

Os materiais magnéticos isolantes encontrados na natureza são, com raras exceções, antiferromagnéticos [13]. O estado fundamental do Hamiltoniano de Heisenberg ferromagnético corresponde a todos os spins alinhados paralelamente. Por outro lado, o estado fundamental deste mesmo Hamiltoniano quântico antiferromagnético não corresponde a todos os spins orientados antiparalelamente (estado Néel), pois este não é auto-estado do Hamiltoniano. Existe uma infinidade de estados de spin total nulo ($S^z = 0$), que devem ser combinados para formar o estado fundamental do sistema antiferromagnético no modelo de Heisenberg [14]. A dificuldade em estabelecer um estado fundamental é o maior problema teórico que surge no estudo do antiferromagnetismo do modelo de Heisenberg.

A interação de troca (*exchange*) se caracteriza pelo fato de ser independente da orientação dos spins, ou seja, o Hamiltoniano de Heisenberg, Eq.(1.4), apresenta simetria de

rotação dos spins. Esta transformação implica que o Hamiltoniano de Heisenberg deve conter apenas pares de operadores S_i^μ , com $\mu = x, y$ e z , onde a forma aproximada dada pela Eq.(1.4) representa o Hamiltoniano bilinear [15]. Vários outros termos de interações (com origem na interação coulombiana) podem ser deduzidas via teoria de perturbação de ordem superior, como, por exemplo, o termo biquadrático dado pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_{BQ} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \left(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \right)^2, \quad (1.5)$$

ou interação entre quatro spins

$$\mathcal{H}_4 = - \sum_{\langle i,j,l,k \rangle} J_{ij} \left(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \right) \left(\vec{S}_l \cdot \vec{S}_k \right), \quad (1.6)$$

etc.

O tipo de estrutura cristalmagnética é determinada pela natureza e magnitude das interações entre os momentos magnéticos dos íons que formam o cristal. A interação de troca, de origem eletrostática, mais o princípio de exclusão de Pauli são responsáveis pelo ordenamento magnético na matéria. Sendo de natureza isotrópica, a interação de troca não é capaz de definir alguma orientação dos momentos magnéticos com respeito aos eixos cristalográficos, mas ela produz um ordenamento mútuo dos spins em vários sítios da rede. O fato de a distribuição de spins ordenados ser sempre orientada numa dada direção (eixo de fácil magnetização), definida com respeito ao eixo cristalino, exige que algum outro tipo de interação torne o Hamiltoniano de Heisenberg anisotrópico. Fisicamente, as interações magnéticas (dipolar, quadrupolar, etc) são responsáveis pela existência da anisotropia magnetocristalina, que se manifesta com a dependência da energia do cristal nas orientações dos momentos magnéticos dos íons com relação ao eixo cristalino.

1.2.1 Anisotropias

Podemos dizer que num cristal existem campos magnéticos efetivos internos que tendem a orientar os momentos magnéticos em uma dada direção privilegiada. Este campo pode alterar algumas vezes as orientações mútuas dos momentos magnéticos dos átomos, desta forma distorcendo a estrutura magnetocristalina. Um primeiro tipo de anisotropia adicional à Eq.(1.4) é a interação dipolar, que é representada pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_{dipolar} = -4\mu_B^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \left\{ \frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - 3 \left(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{S}_i \right) \left(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{S}_j \right)}{r_{ij}^3} \right\}, \quad (1.7)$$

onde $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$ é o vetor posição que separa os íons i e j , $r_{ij} = |\vec{r}_{ij}|$ e μ_B é o magneton de Bohr. Note que o somatório acima é feito sobre todos os pares i e j de spins sobre a rede cristalina, e representa uma interação de longo alcance. Devido a simetria rotacional do Hamiltoniano de Heisenberg, Eq.(1.4), ficou provado que numa rede bidimensional as interações (*exchange*) bilineares entre primeiros vizinhos não são capazes de ordenar os momentos magnéticos em temperatura finita, ou seja, a magnetização espontânea é nula [16]. A presença da interação de longo alcance, tipo dipolar variando com a distância $1/r_{ij}^3$, no Hamiltoniano de Heisenberg, Eq.(1.4), pode induzir ordenamento magnético em $T > 0$ numa rede em 2d [17].

O magnetismo dos elementos de transição do grupo do ferro é sempre associado ao momento magnético dos spins. Isto ocorre porque nos cristais, formados por estes elementos, o campo cristalino geralmente remove a degenerescência orbital do estado eletrônico responsável pelo magnetismo. Como o valor esperado do momento orbital de um estado não degenerado é zero, verifica-se o que se convencionou chamar *quenching* do momento orbital, isto é, numa primeira aproximação a susceptibilidade estática não recebe contribuição do momento orbital. Esta contribuição apenas aparece se levarmos em conta a interação spin-órbita, que é descrita pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_{LS} = - \sum_i \xi_i \left(\vec{L}_i \cdot \vec{S}_i \right)^2, \quad (1.8)$$

sendo que

$$\xi_i = \frac{1}{2m^2 r_i} \frac{dV}{dr_i}, \quad (1.9)$$

com $V(r_i)$ é a energia potencial elétrica (núcleo-elétron), \vec{L}_i e \vec{S}_i são os operadores de momento angular orbital e de spin, respectivamente no sítio i . Usando-se a teoria de perturbação de 2ª ordem para a energia spin-órbita, a Eq.(1.8), pode ser reescrita na forma

$$\mathcal{H}_{LS} = - \sum_{i,\alpha,\beta} \Lambda_i^{\alpha\beta} S_i^\alpha S_i^\beta, \quad (1.10)$$

sendo

$$\Lambda_i^{\alpha\beta} = -2\xi_i^2 \sum_l \frac{\langle p | L_i^\alpha | l \rangle \langle l | L_i^\beta | p \rangle}{E_0^p - E_0^l}, \quad (1.11)$$

o tensor de anisotropia spin-órbita, $\xi^2 = \langle \xi^2(\vec{r}_i) \rangle$ e E_0^n é a auto-energia do Hamiltoniano não perturbado. O Hamiltoniano usado habitualmente para descrever anisotropia ortorrômbicas leva em conta apenas os termos diagonais, assim sendo, a Eq.(1.10) ficará

reduzido a seguinte forma:

$$\mathcal{H}_0 = -D_z \sum_i (S_i^z)^2 + E \sum_i [(S_i^x)^2 - (S_i^y)^2], \quad (1.12)$$

onde para $E = 0$ reduz-se ao caso da anisotropia uniaxial. Observe que o Hamiltoniano dado pela Eq.(1.12) representa a interação do sítio i com ele mesmo (auto-interação), que é uma interação denominada de anisotropia de íon-único. A Eq.(1.12) só é relevante para sistemas com spin $S > 1/2$, pois no caso particular de spin $S = 1/2$ temos $(S_i^\nu)^2 = 1/4$ ($\hbar \equiv 1$) para qualquer componente $\nu = x, y, z$ e, conseqüentemente, este Hamiltoniano se reduz a uma constante não sendo relevante nos cálculos das propriedades magnéticas.

A interação spin-órbita também pode induzir anisotropia no *exchange*. Segundo van Vleck [18], a anisotropia uniaxial deste tipo tem origem no acoplamento dos momentos orbitais dos átomos adjacentes, que depende não só da orientação relativa dos dois momentos, como também da orientação destes com relação ao eixo que une os dois átomos. Em termos dos spins, esse acoplamento pode ser simulado por uma interação dipolar, cujo coeficiente é inteiramente disposto do coeficiente da interação magnética real dada pela Eq.(1.4). Neste caso, a perturbação é dada por $W_{ij} = \xi(\vec{r}_i)\vec{L}_i\Delta\vec{S}_j + \lambda\vec{L}_i\cdot\vec{S}_j$, então o Hamiltoniano efetivo será escrito por

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\alpha,\beta} J_{ij}^{\alpha\beta} S_i^\alpha S_j^\beta, \quad (1.13)$$

onde $J_{ij}^{\alpha\beta}$ é a interação entre os sítios i e j associados as direções α e β dos spins. O Hamiltoniano generalizado dado pela Eq.(1.13) contém a parte simétrica $J_{ij}(\alpha = \beta) = J_{ji}^\alpha$ e anti-simétrica com $\alpha \neq \beta$ e $J_{ij}^{\alpha\beta} \neq J_{ji}^{\alpha\beta}$. O termo anti-simétrico surge em redes com baixa simetria [19], sendo responsável em alguns compostos antiferromagnéticos pela existência de um pequeno valor de magnetização (pequeno ferromagnetismo), que é conhecido na literatura como a interação Dzyaloshinski- Moriya (DM)[20]. Dependendo dos valores das interações $J_{ij}^{\alpha\beta}$ que aparecem no Hamiltoniano dado pela Eq.(1.13), podemos ter três modelos de spins: Ising, XY e Heisenberg isotrópico.

1.3 Modelos Magnéticos

1.3.1 Modelo de Ising

O modelo de Ising [21] e suas generalizações têm sido aplicado, além da descrição de sistemas magnéticos, com algum sucesso a sistemas biológicos [22, 23, 24, 25], como por exemplo, hemoglobina, enzimas alostéricas e DNA. O que existe em comum nestes sistemas (magnéticos e biológicos) é o fenômeno de cooperatividade entre os constituintes microscópicos, dando origem a ordem local (curto-alcance) e global (longo-alcance). Este fenômeno cooperativo deve-se exclusivamente às interações microscópicas dos constituintes (spins, moléculas, etc.). Devido a sua simplicidade matemática, o modelo de Ising tem sido aplicado numa variedade de sistemas: tráfego, amassamento, economia, propagação de doenças, etc. Em particular, devido a universalidade dos resultados os cálculos efetuados preliminarmente em sistemas magnéticos têm dado os alicerces para estudar sistemas complexos diversos.

O modelo de Ising foi proposto por Wilhelm Lenz como tema de tese de doutorado, onde o objetivo era descrever a curva da magnetização espontânea em função da temperatura para os compostos ferromagnéticos. Vale ressaltar que este modelo foi proposto antes da formulação geral do magnetismo por Heisenberg. Experimentalmente é observado que abaixo de uma temperatura crítica (T_c), chamada de temperatura de Curie, o sistema está ordenado com uma magnetização não nula, e acima de T_c não existe ordenamento magnético. Dizemos que em $T = T_c$ temos uma transição de fase contínua (segunda ordem). A primeira teoria fenomenológica para descrever as propriedades magnéticas dos compostos ferromagnéticos foi apresentado no século passado por Weiss [26], em 1905, conhecida na literatura como teoria do campo molecular (ou médio). Apesar desta teoria fenomenológica descrever qualitativamente as propriedades destes materiais, ela falha no que se refere a uma comparação quantitativa. Uma falha crucial nesta teoria foi em assumir as interações entre os constituintes como sendo de origem dipolar. Se esta fosse a interação predominante, não poderíamos aceitar os altos valores para $T_c \simeq 10^3 K$. Vejamos o argumento apresentado na época (após mecânica quântica) para tal rejeição: se assumirmos como sendo $\Delta E \simeq \frac{\mu_B^2}{a^3}$ (μ_B é o magneton de Bohr e $a \simeq 1 \text{ \AA}$ a distância média entre os momentos magnéticos) a energia de interação, de origem dipolar, podemos estimar a temperatura crítica T_c comparando a energia térmica (desordem) com ΔE , isto

é, $\Delta E \simeq k_B T_c$, desta forma, usando as constantes (μ_B, k_B, a) , mostra-se que $T_c \simeq 10^{-1}K$ bem inferior ao valor experimental $T_c = 10^3K$. Desta maneira podemos concluir que a origem do ordenamento magnético não é dipolar. A fim de entender fisicamente o alto valor de T_c , assumindo que $\Delta E \simeq \frac{e^2}{a}$ é de origem elétrica, podemos mostrar que $T_c = 10^3K$. Por outro lado, como uma energia de origem elétrica pode dar uma orientação espacial aos spins (momentos magnéticos)? A resposta foi apresentada por Heisenberg [8] com o advento da mecânica quântica.

Introduzindo a interação spin-órbita no sistema, podemos adicionar um termo de spins na Eq.(1.4), de modo que para certos materiais a componente axial (z) $S_i^z S_j^z$ é predominante em relação a parte plana (xy) $S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y$ e, portanto, podemos aproximar a Eq.(1.13) pela expressão

$$\mathcal{H}_I = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij}^z S_i^z S_j^z, \quad (1.14)$$

que é conhecido como modelo de Ising. Ele representa a interpretação microscópica para sistemas magnéticos, que como o F_eCl_2 , apresenta forte anisotropia uniaxial.

O modelo de Ising, Eq.(1.14), tem solução exata numa cadeia unidimensional, mas na ausência de campo externo não apresenta ordenamento magnético (longo-alcance). Este resultado frustrante, $m(T, 0) = 0$, que tanto desapontou Ising na época, fez com que ele abandonasse a carreira científica e se dedicasse ao ensino de física numa escola secundária nos Estados Unidos. Ising também especulou erroneamente que este modelo, quando generalizado em duas dimensões, não deveria apresentar ordem de longo-alcance em temperatura finita. De certa forma esse foi o maior desapontamento de Ising: não poder explicar o ferromagnetismo. Foi exatamente a falha do modelo de Ising que motivou Heisenberg, em 1928, a desenvolver a teoria microscópica do magnetismo. Peierls [27], em 1936, apresentou um argumento fenomenológico mostrando que $T_c \neq 0$ numa rede quadrada, rejeitando assim as especulações de Ising. O primeiro resultado quantitativo exato no modelo de Ising na rede quadrada foi apresentado por Kramer e Wannier [28], em 1941, onde a temperatura crítica T_c foi obtida através de relações de dualidade (método Grafos). Porém, foi somente em 1944, que Onsager [29] apresentou a comunidade científica uma expressão exata para a energia livre na ausência de campo externo do modelo de Ising na rede quadrada e, conseqüentemente, a divergência logarítmica do calor específico em torno de $T \simeq T_c$, evidenciando assim pela primeira vez na literatura uma transição de fase de forma exata em modelos de spins. Um fato interessante na época, em que

o modelo de Ising na rede quadrada foi apresentada por Onsager, foi que a expressão exata da magnetização $m(T, 0) = \{1 - \sinh^{-4}(2K)\}^{1/8}$ ($K \equiv \beta J$) só foi deduzida anos após por Yang [30], em 1952. Após estes resultados demasiadamente complexos matematicamente, que envolviam uma álgebra de sistemas combinatórios para obtenção da função de partição, diversos outros autores têm apresentado a solução deste modelo de maneira mais “simples”. O trabalho de McCoy e Wei [31] é uma excelente revisão desse assunto. O modelo de Ising $2d$ na presença de campo externo não apresenta solução exata até a presente data.

1.3.2 Modelo XY

O modelo corresponde ao caso em que $J_{ij}^{xy} \gg J_{ij}^z$, aproxima o Hamiltoniano dado pela Eq.(1.13) por um modelo (XY ou planar) com interações apenas entre as componentes dos spins x e y , ou seja:

$$\mathcal{H}_{XY} = - \sum_{\langle ij \rangle} (J_{ij}^x S_i^x S_j^x + J_{ij}^y S_i^y S_j^y), \quad (1.15)$$

O modelo XY ou planar foi introduzido na literatura por Matsubara e Matsuda [32] e tem solução exata em uma dimensão [33]. Em duas dimensões este modelo não apresenta ordem magnética (magnetização espontânea) em temperatura não nula. Kosterlitz e Thouless [34] propuseram um tipo diferente de transição de fase, onde foi definido uma ordem de longo alcance topológica, caracterizada por uma súbita mudança na resposta do sistema a perturbações externas. Definiram uma temperatura de transição T_{KT} , na qual para $T > T_{KT}$ a função de correlação spin-spin decai exponencialmente com a distância entre os pares, enquanto que para $T < T_{KT}$ a função de correlação tem um decaimento segundo uma lei de potência. Acredita-se que esta transição de fase seja causada por um mecanismo de desligamento de pares de vórtice-antivórtice. Um vórtice (anti-vórtice) é uma excitação topológica na qual os spins em um caminho fechado ao redor do centro da excitação giram por 2π (-2π) no mesmo sentido. Experimentalmente tem sido usado o modelo XY 3d para descrever as propriedades magnéticas dos compostos $CoBr_2$ e $CoCl_2$ [35] bem como para explicar as configurações de vórtices na fase superfluido no filme (monocamada) de 4He [36].

1.3.3 Modelo de Heisenberg

Neste caso, os três termos de exchange J_{ij}^α ($\alpha = x, y, z$) são da mesma ordem. O Hamiltoniano anisotrópico Eq.(1.13) reduz-se ao modelo de Heisenberg isotrópico descrito pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j. \quad (1.16)$$

O estado fundamental ($T = 0$) e algumas excitações elementares do Hamiltoniano Eq.(1.16) numa rede unidimensional com spin $S = 1/2$ foi resolvido exatamente por Bethe [37] e Hulthen [38]. A generalização para incluir anisotropia do tipo: $J_{ij}^x = J_{ij}^y = \eta J$ e $J_{ij}^z = J$ foi feita anos mais tarde por Walker [39]. Outro resultado exato para o modelo de Heisenberg numa rede d -dimensional ($d = 1, 2$) é o teorema de Mermin e Wagner [16], que afirma que este sistema não apresenta ordem de longo-alcance a $T > 0$ no limite isotrópico. O estudo do modelo de Heisenberg antiferromagnético de spin $1/2$ tem sido motivado sobretudo por causa da possível conexão com os compostos supercondutores de altas temperaturas formadas por planos de CuO_2 [40, 41] como, por exemplo, os compostos $YBa_3Cu_3O_{7-x}$ e $La_{2-x}Ba_xCuO_4$. Eles são compostos fortemente anisotrópicos, havendo um forte acoplamento entre os íons de cobre pertencentes ao plano de CuO_2 e um fraco acoplamento entre os planos. Em baixas temperaturas, as flutuações quânticas antiferromagnéticas são relevantes comparadas com as térmicas.

1.4 Teoria de Landau para pontos tricríticos

A teoria de Landau para as transições de fases contínuas, proposta em 1937, está fundamentada na introdução do conceito de parâmetro de ordem e no estabelecimento de uma expansão da energia livre em termos dos invariantes dessa grandeza [5]. A energia livre é uma função analítica nas proximidades da criticalidade.

O parâmetro de ordem associado a um determinado sistema pode ser definido de diferentes maneiras. O parâmetro de ordem pode ser um escalar, um vetor e um tensor. Os dois últimos tipos para sistemas mais complexos. Em geral, o parâmetro de ordem é nulo na fase mais simétrica (desordenada ou que ocorre em altas temperaturas) e diferente de zero na fase menos simétrica (ou ordenada).

Um sistema com n variáveis termodinâmicas independentes é caracterizado por $n + 1$ campos $\{H_0, H_1, \dots, H_n\}$, sendo um deles função dos demais. Por exemplo, temperatura

(T), pressão (P), potencial químico (μ), campo magnético (\vec{H}) e elétrico (\vec{E}) são denominados genericamente de campos. O campo dependente, para o qual usaremos o símbolo $\Phi(H_1, H_2, \dots, H_n)$, será chamado de potencial termodinâmico (ou energia livre). As grandezas canonicamente conjugadas são denominadas de densidades $\{\rho_i\}$ e podem ser obtidas por simples derivadas

$$\rho = - \left(\frac{\partial \Phi}{\partial H_i} \right)_{\{H_j\}} \quad i \neq j \quad (1.17)$$

É sempre possível escolher o potencial termodinâmico $\Phi(H_1, H_2, \dots, H_n)$ como uma função côncava dos campos, implicando na estabilidade termodinâmica do sistema.

Quando duas fases de um sistema representados por I e II estão em equilíbrio, cada campo deve ter o mesmo valor em ambas as fases, isto é, $H_i^I = H_i^{II}$ ($i = 0, 1, \dots, n$). Se pensarmos no espaço dos n campos independentes, esta condição de equilíbrio definirá uma hipersuperfície de dimensão $n + 1$ neste espaço. Desde que pelo menos uma das densidades seja uma função descontínua dos campos nesta hipersuperfície, então teremos uma superfície de coexistência ou de transição de primeira ordem. Caso contrário teremos uma superfície crítica, onde as diferenças de densidade entre duas fases tendem a zero continuamente. No diagrama de fases podem existir pontos nos quais várias fases coexistem, e são denominados de pontos multicríticos. De acordo com as regras de Gibbs e Zernike, a observação de tais pontos numa mistura de substâncias pura é possível apenas acima de um certo número de componentes. Um ponto bicrítico (duas fases críticas em coexistência ou duas linhas críticas que se interceptam), só pode ser observado numa mistura com pelo menos 4 componentes. Um ponto tetracrítico (quatro fases ordinárias que se tornam idênticas), só pode ser observado numa mistura de no mínimo cinco componentes, etc. Seguindo a notação de Gibbs, uma fase ordinária é representada pela letra A ; uma fase crítica (duas fases ordinárias que se tornam idênticas), pela letra B ; uma fase tricrítica, em que três fases ordinárias se tornam idênticas, pela letra C , e assim por diante. Um estado composto por duas fases ordinárias em coexistência é representado por A^2 , o ponto triplo por A^3 , um ponto crítico terminal por AB , um ponto bicrítico por B^2 , etc. Em geral, um ponto multicrítico é representado por $A^{m_1} B^{m_2} C^{m_3} D^{m_4} \dots$. De acordo com as regras de Gibbs, o número mínimo de componentes necessário para observar este ponto multicrítico é $c = m_1 + 3m_2 + 5m_3 + 7m_4 + \dots - 2$.

Nesta dissertação, nos deteremos ao estudo de pontos tricríticos, que correspondem a pontos onde três fases se tornam idênticas ou três linhas críticas que se interceptam. Na

Figura 1.1, mostramos esquematicamente o diagrama de fase tridimensional no espaço dos parâmetros (T, H, H_s) , referente a um sistema antiferromagnético, onde H_s representa o campo conjugado com o parâmetro de ordem m_s do sistema. A linha pontilhada representa, no plano (T, H) , a linha de transição de primeira ordem (coexistência das fases **AF** e **P**). A linha contínua representa a transição de fase de segunda ordem. Se considerarmos H_s podemos obter duas superfícies S_1 e S_2 de transições de fases de acordo com $H_s < 0$ e $H_s > 0$, respectivamente. O ponto $(T_t, H_t, 0)$ foi denominado de ponto tricrítico por Griffiths, que corresponde a interseção de três linhas críticas.

Ao redor do ponto tricrítico $t \equiv \frac{(T-T_t)}{T_t} \ll 1$ e $H = H_t$, as grandezas termodinâmicas apresentam comportamentos em leis de potências com expoentes críticos diferentes dos relacionados ao longo da linha crítica. Por exemplo, na aproximação de campo médio $\beta = 1/2$ na linha crítica e $\beta_t = 1/4$ ao redor do PTC. Seja m_s o parâmetro de ordem que ao redor de PTC vai a zero na forma $m \simeq (-t)^{\beta_t}$. Portanto, Landau supôs que a energia livre $g(T, m)$ apresenta uma expansão analítica em série de potência. No caso de um magneto uniaxial simples, onde o parâmetro de ordem m é um escalar, a expansão para a energia livre é expressa por

$$g(T, m) = a_0 + \frac{a_2}{2}m^2 + \frac{a_4}{4}m^4 + \frac{a_6}{6}m^6 \quad (1.18)$$

onde a_0, a_2, a_4 e a_6 são parâmetros variáveis. Minimizando-se a Eq(1.18) obtemos

$$\begin{cases} \frac{\partial g}{\partial m} = a_2m + a_4m^3 + a_6m^5 = 0 & (a) \\ \frac{\partial^2 g}{\partial m^2} = a_2 + 3a_4m^2 + 5a_6m^4 > 0 & (b) \end{cases} \quad (1.19)$$

Da Eq.(1.19 a) encontramos cinco raízes, que são $m = 0$, $m = \pm m_1$ e $m = \pm m_2$. Sendo m_1 e m_2 dadas por

$$m_1^2 = \frac{1}{2a_6} \left[-a_4 + \sqrt{a_4^2 - 4a_2a_6} \right], \quad (1.20)$$

$$m_2^2 = \frac{1}{2a_6} \left[-a_4 - \sqrt{a_4^2 - 4a_2a_6} \right] \quad (1.21)$$

Substituindo as raízes na segunda derivada da energia Eq(1.19b) encontramos

$$\begin{cases} m = 0 \rightarrow \frac{\partial^2 g}{\partial m^2} = a_2 & (a) \\ m = \pm m_{1,2} \rightarrow \frac{\partial^2 g}{\partial m^2} = \pm 2\sqrt{a_4^2 - 4a_2a_6} m_{1,2}^2 & (b) \end{cases} \quad (1.22)$$

Se $a_2 < 0$, temos da Eq(1.22a) que $m = 0$ será um ponto de máximo, pois $(\frac{\partial^2 g}{\partial m^2}) < 0$. Portanto, das Eqs.(1.20) e (1.21) temos que $m = m_2$ será complexo e apenas o ponto

$m = m_1$ corresponderá aos pontos de mínimos. No caso em que $a_2 > 0$, $a_4 > 0$, das Eqs.(1.20) e(1.21) temos que $m_{1,2}$ são complexas e apenas $m = 0$ será mínimo. Dizemos então que o eixo positivo $a_4 > 0$ é uma linha crítica (transição de segunda ordem). No caso $a_4 < 0$, as três soluções ($m = 0, m = \pm m_1$) serão pontos de mínimos, e portanto, devem ter a mesma energia livre, ou seja, $g(T, 0) = g(T, \pm m_1)$. Desta maneira, obtemos a seguinte expressão (construção de Maxwell)

$$\frac{a_2}{2} + \frac{a_4}{4}m_1^2 + \frac{a_6}{6}m_1^4 = 0 \quad (1.23)$$

Substituindo a solução m_1 nesta expressão obtem-se que o valor de a_4 é dada por

$$a_4 = \left(\frac{3a_2}{a_6} \right)^{1/4} \quad (1.24)$$

sendo $a_2 = \alpha \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right)$. Da Eq(1.24) temos que na transição de 1ª ordem o expoente $\beta_t = 1/4$, que difere na transição de segunda ordem $\beta = 1/2$.

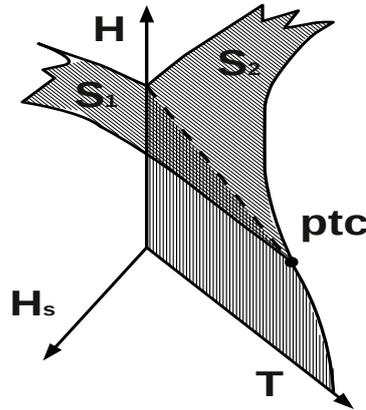


Figura 1.1: Diagrama de fase referente a um sistema antiferromagnético no espaço de parâmetro (T, H, H_s) . S_1 e S_2 representam as superfícies de primeira ordem. PTC representa o ponto tricrítico.

Portanto, podemos concluir que o conjunto de pontos críticos que geram a linha de transição de segunda ordem são dados pelas seguintes condições: $a_2 = 0$, $a_4 > 0$ e $a_6 > 0$. O ponto que separa na linha de transição de fases as regiões de primeira e de segunda ordem é denominado de ponto tricrítico (PTC). As condições para determinação deste ponto são dadas pelas seguintes relações: $a_2 = 0$, $a_4 = 0$ e $a_6 > 0$. É interessante observar que para $a_2 < 0$ e $a_4 < 0$ não existe transição de fase.

1.5 Apresentação do trabalho

Recentemente, existe uma variedade de trabalhos que estudam, teoricamente, a dinâmica de spins em modelos magnéticos usando a mecânica estatística estocástica. Neste caso obtêm-se as grandezas termodinâmicas, por exemplo, a magnetização para os ferromagnetos como função da temperatura. Inicialmente, calcula-se a evolução temporal da magnetização através da solução de uma equação diferencial e tomando a média temporal obtém-se $M(T)$. De uma maneira geral, neste formalismo fora do equilíbrio o que estamos calculando são as grandezas no seu estado estacionário. No caso da mecânica estatística de equilíbrio (Boltzmann-Gibbs), as grandezas macroscópicas são obtidas pela minimização da energia livre. Estes dois formalismos da mecânica estatística (equilíbrio e fora do equilíbrio) nos motivaram a questionar se para um dado modelo de spin, a solução estacionária corresponde ao estado de equilíbrio? Neste trabalho estudaremos três modelos de spins usando a mecânica estatística fora do equilíbrio, onde a dinâmica estocástica de Glauber será usada como ponto de partida para obter a evolução temporal das variáveis macroscópicas.

No capítulo 2, uma revisão sobre transição de fase dinâmica é apresentada, onde diversos resultados teóricos e experimentais são discutidos. Em particular, mostramos o estado da arte em que se encontram os estudos teóricos nos modelos de spins. Encontraremos a equação mestra que rege a variação temporal da distribuição de probabilidade, para o modelo de Ising de spin-1/2 a fim de descrever a evolução temporal das médias estatística (dependente do tempo), onde a dinâmica de Glauber será discutida. Outros tipos de dinâmicas serão brevemente comentados. A fim de discutir a transição de fase dinâmica, aplicaremos a dinâmica de Glauber para estudar o modelo de Ising de spin-1/2 na presença de um campo magnético oscilante. Examinaremos os resultados via aproximação de campo médio e campo efetivo (técnica do operador diferencial), onde comparamos os respectivos diagramas de fases.

No capítulo 3, o modelo de Ising cinético com campo aleatório (o chamado RFIM-*random field Ising model*) será estudado através da dinâmica de Glauber e a técnica do operador diferencial. O objetivo será investigar se a solução estacionária corresponde ao estado de equilíbrio, obtido através da minimização da energia livre. Discutiremos, preliminarmente, os resultados do diagrama de fase (distribuição de probabilidade bimodal para o campo aleatório) na aproximação de campo médio. Nossa principal (original)

contribuição corresponde a solução de campo efetivo, recentemente publicada na *Physical Review E* **85**, 011121 (2012). Mostramos que as linhas de primeira ordem no diagrama de fase no plano T-H diferem quando usamos a dinâmica e o equilíbrio (construção de Maxwell).

No capítulo 4, o modelo de Blume e Capel, com spin-1, cinético será investigado através das aproximações de campo médio (MFA-*mean field approximation*) e campo efetivo (*effective-field theory*-EFT). O diagrama de fase no plano $T - D$ (D é o parâmetro de anisotropia de íon único) será obtido para os limites estático e dinâmico (solução estacionária). Temos proposto um funcional para a energia livre, no caso EFT, pela primeira vez na literatura a fim de obter a linha de primeira ordem na região de baixas temperaturas. Comparamos os diagramas de fases, no plano T-D, dinâmico e de equilíbrio e verificamos que as linhas de primeira ordem são diferentes. Quando usamos MFA observamos que as linhas de primeira ordem terminam em pontos diferentes no limite $T = 0$, enquanto que introduzindo correlações (EFT) os pontos coincidem. Os resultados de MFA foram recentemente aceitos para publicação no *European Journal of Physical B* (2012).

No capítulo 5, o modelo de Blume-Capel de spin-1 cinético será estudado via EFT, onde a transição de fase dinâmica será investigado. Dependendo dos valores do parâmetro de anisotropia verificamos três tipos de diagramas de fases no plano T-H. Finalmente, no capítulo 6 apresentaremos nossas conclusões.

Capítulo 2

Transição de Fase dinâmica

2.1 Considerações gerais

Os aspectos gerais das propriedades macroscópicas no equilíbrio em sistemas interagentes são bem estudados teoricamente usando como ponto de partida os princípios da mecânica estatística de equilíbrio. Por outro lado, as propriedades fora do equilíbrio termodinâmico não são bem estabelecidos teoricamente e experimentalmente [42]. Do ponto de vista experimental (teórico), a termodinâmica (mecânica estatística) de equilíbrio trata basicamente de processos reversíveis ou processos infinitesimais quase estáticos, enquanto a termodinâmica (mecânica estatística) fora do equilíbrio está envolvida com processos finitos e irreversíveis. O interesse reside no estado de sistemas abertos e acoplados a fontes externas, as quais lhes subministram matéria e energia, manifestando-se nas variações temporais e espaciais das grandezas termodinâmicas estudadas.

A termodinâmica é uma ciência experimental que foi inicialmente formulada através de leis de caráter geral, que descreveriam as propriedades térmicas da matéria, o jogo entre calor e trabalho mecânico. Porém, hoje em dia, a termodinâmica evoluiu até se transformar-se numa ciência muito mais geral, descrevendo, por exemplo, a evolução da vida na biosfera. A mecânica estatística (teoria) surgiu no final do século XIX, sobretudo por Maxwell e Boltzmann, com o objetivo de entender os fenômenos termodinâmicos, onde idéias gerais da teoria de probabilidade (que descreve sistemas constituídos por um número grande de partículas) e os princípios das leis da mecânica (clássica ou quântica) foram usadas como alicerces. A mecânica estatística não se apresenta como uma teoria que possa ser considerada inabalada, uma vez que alguns aspectos pontuais ainda neces-

sitam de uma formulação. De fato, a correta introdução da irreversibilidade na teoria, como se reproduz a tendência para o equilíbrio, qual a definição estatística apropriada de entropia, etc, e são objetos de intensa e, aparentemente, interminável controvérsia. No equilíbrio termodinâmico, a mecânica estatística é uma teoria razoavelmente bem consolidada, porém o mesmo não podemos dizer da tentativa da formulação de uma teoria fora do equilíbrio. O propósito desta teoria fora do equilíbrio é determinar a evolução temporal dos observáveis macroscópicos $\langle A \rangle(t)$, usando as leis da dinâmicas que governam o movimento das partículas constituintes. Este tratamento direto de usar as leis da mecânica¹ na descrição das propriedades macroscópicas tem uma forte limitação, que é a solução de um número muito grande ($N \simeq 10^{24}$, número de Avogrado) de equações diferenciais acopladas, o que restringe seu estudo a pequeno sistema ($N \lesssim 10^6$) com a dinâmica molecular.

Por outro lado, na tentativa de descrever as propriedades gerais da matéria fora do equilíbrio, uma nova teoria (mecânica estatística) deve ser formulada. Nesta dissertação restringiremos nossos estudos, do ponto de vista teórico, a modelos de spins localizados (simetria discreta, tipo modelo de Ising), onde as propriedades fora do equilíbrio serão tratadas via mecânica estatística estocástica [43]. Existem diversos sistemas na natureza (química, biologia, sociologia, física, etc), onde essas propriedades macroscópicas são funções do tempo, e que tem como característica comum a aleatoriedade dos seus constituintes microscópicos. Embora estas propriedades pareçam evoluir ao acaso é importante saber que há uma certa convergência em seus valores médios.

Considere, por exemplo, um composto ferromagneto na presença de um campo oscilante do tipo $H(t) = H_0 \sin(\omega t)$, onde H_0 é a “intensidade” do campo magnético (amplitude) e ω a frequência. As propriedades termodinâmicas do sistema, como a magnetização, também serão oscilantes. Após algum período de tempo transiente, uma área não nula no ciclo, definida por $A(T, H_0, \omega) \equiv \oint m(t) dH$ (Histerese), é dinâmica na sua origem e desaparece no limite quase estático. Sistemas magnéticos puros, sem qualquer defeito aleatório ou anisotropias para modificar os seus domínios magnéticos, podem relaxar propriamente no limite quase-estático e seguir o campo em fase devido a flutuações térmicas em qualquer temperatura. Portanto, não ocorre curva de histerese (i.e, $A = 0$) em magnetos puro no limite quase-estático [44, 45]. Um importante aspecto da curva de histerese $m - H$, neste

¹Clássica - 2ª lei de Newton ou quântica-equação de Heisenberg.

exemplo da dinâmica do ferromagneto puro, é que ela é assimétrica quando estamos em baixa temperatura. A existência de um parâmetro de ordem dinâmico $Q(T, H)$ definido por

$$Q(T, H) = \frac{\omega}{2\pi} \oint m(t) dt, \quad (2.1)$$

é útil para estudar a transição de fase dinâmica $T_c(H_0, \omega)$, que apresenta a mesma classe de universalidade do limite estático ($\omega = 0$). A razão da assimetria na curva da histerese é o fato do sistema não ter tempo para relaxar, até mesmo o sinal do campo externo.

A contribuição para o campo coersivo (onde se anula a magnetização) e a área na curva da histerese têm sido investigadas em filmes finos ferromagnéticos [46], e algumas informações indiretas na contribuição dinâmica da área A foram apresentadas. Jiang e colaboradores [47] estudaram a dependência da histerese com a frequência em filmes de *Co* depositado em superfície de *Cu*(001). Este filme tem forte anisotropia uniaxial e é apropriadamente a ser descrito por um modelo de Ising. A variação observada da área da histerese tem a forma

$$A = A_0 + H_0^\alpha \omega^\beta g\left(\frac{\omega}{H_0^\delta}\right), \quad (2.2)$$

onde os expoentes da relação de escala α , β e δ assumem valores não inteiros, indicando singularidade na lei de potência, A_0 é a área para frequência nula e $g(x)$ uma função não monótona, tal que $g(x) \rightarrow 0$ quando $x \rightarrow 0$ ou ∞ . Tem sido observado, contrários aos expoentes críticos no estudo de transição de fase de equilíbrio, que estes expoentes de escala dependem fortemente da natureza do processo da dinâmica envolvido em diferentes materiais e também dos intervalos (amplitudes, frequência, etc), de modo que eles variam drasticamente não apresentando nenhuma universalidade. Por exemplo, Jiang e colaboradores [47] encontraram $\alpha \simeq 0.67 \simeq \beta$ para filmes de *Co* em superfície de *Cu*(100), e $\alpha \simeq 0.6$ e $\beta \simeq 0.3$ para filmes de *Fe* em superfície de *Au*(001). Suen e Erskine [48] obtiveram valores menores $\alpha \simeq 0.3$ e $\beta \simeq 0.06$ (comportamento quase logaritmo $\sim \alpha = 0$) para filmes de *Fe* na superfície *W*(100).

A relação de escala dada pela Eq.(2.2) tem se mostrado, do ponto de vista teórico, consistente com cálculos de campo médio [49, 50] e Monte Carlo [51, 52] que usam como protótipo o modelo de Ising cinético. Quando um campo magnético dependente do tempo, na forma senoidal, é aplicado no modelo de Ising, o sistema não pode responder instantaneamente a esta perturbação. A solução de campo médio [49] é exata (dimensão infinita) e pode ser usada para dar algumas características gerais da transição de fase dinâmica

analiticamente. O diagrama de fases no plano $T - H_0$, onde a curva $T_c(H_0)$ delimita a fase ferromagnética da fase desordenada paramagnética para $T < T_c$ e $T > T_c$, respectivamente, foi obtida [49]. Na região de baixa amplitude do campo temos uma transição contínua, enquanto no regime de altos valores de H_0 o sistema experimenta uma transição de fase (dinâmica) de primeira ordem, que é caracterizada por apresentar uma descontinuidade no parâmetro de ordem dinâmico $Q(T)$ quando $T = T_c(H_0)$. Desta maneira, o diagrama de fases apresenta um ponto tricrítico dinâmico que separa a linha crítica da linha de primeira ordem. Berkolaiko e Grinfelf[53] mostraram se um cálculo de campo médio cinético encontra ou não um ponto tricrítico, atualmente dependente do nível de aproximação usada no tratamento da dinâmica deste modelo. A equação de campo médio de Suzuki-Kubo leva a um ponto tricrítico, enquanto a correspondente forma derivada da expansão da energia livre de Landau em ordem Φ^4 não encontra [50].

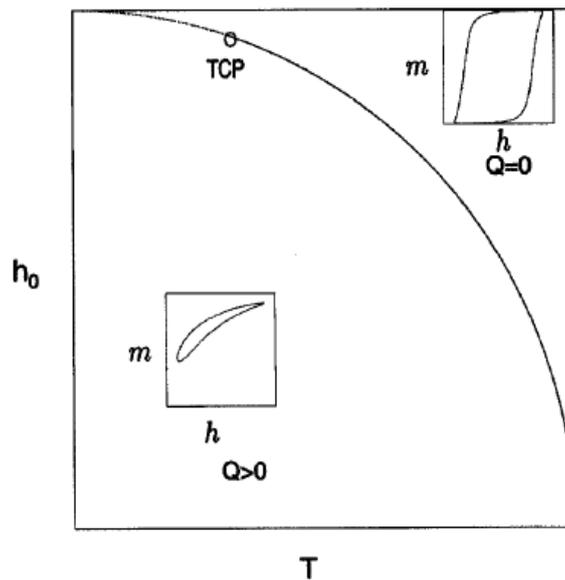


Figura 2.1: Diagrama de fase esquemático no plano amplitude do campo oscilatório H_0 e temperatura T para baixa frequência $\omega < \omega_c$. A linha pontilhada corresponde a transição dinâmica de primeira ordem, a contínua a transição de segunda ordem e o círculo ao ponto tricrítico. As figuras inseridas correspondem às quebras de simetria das histereses dinâmicas $m - H$ devido a transição dinâmica.

Enquanto um campo magnético estático aplicado no modelo de Ising ferromagnético destrói a transição de fase, um campo oscilatório ² induz uma transição de fase dinâmica

²Vale a pena mencionar, que mesmo o sistema ferromagnético submetido a um campo magnético

na qual a temperatura de transição decresce com o aumento da amplitude do campo H_0 . Os cálculos de campo médio têm mostrado a presença de um ponto tricrítico no diagrama de fase. Considerando as flutuações térmicas, que são desprezadas na aproximação de campo médio, a simulação de Monte Carlo é usada para obter o verdadeiro diagrama de fase dinâmico do modelo de Ising. Na Figura 2.1 temos o diagrama de fase no plano $H_0 - T$, de forma esquemática, obtida por Tomé e Oliveira [49] usando aproximação de campo médio.

Na aproximação de campo médio, a transição dinâmica pode existir até mesmo no limite estático ($\omega \rightarrow 0$). A razão é que para amplitude de campo menor do que o campo coercivo $H_c(T < T_c)$, a resposta da magnetização varia periodicamente mas assimetricamente até mesmo no limite $\omega \rightarrow 0$. A linha $H_0(T)$ no plano $H_0 - T$ para $\omega = 0$ corresponde a dependência da temperatura do campo estático coercivo $H_c(T)$. No limite estático ($\omega = 0$), da teoria de Landau temos que na região crítica ($T \approx T_c$), a magnetização apresenta um comportamento em lei potência do tipo $m_0 \approx (T_c - T)^{1/2}$, onde m_0 é a magnetização espontânea. Nesta teoria de campo médio, a energia livre é dada por

$$g(m_0) \approx a(T)m_0^2 + b(T)m_0^4 + \dots, \quad (2.3)$$

onde $a(T) \simeq a_0(T_c - T)$ e $b(T) \approx b_0$. Sendo $T \approx T_c$, então podemos considerar apenas o primeiro termo da expansão de Landau, Eq.(2.3), e usando o comportamento assintótico para a magnetização m_0 encontramos $g(m_0) \approx (T_c - T)^2$. O campo coercivo H_0 pode ser estimado do balanço energético de $m_0 H_c$ com a barreira de energia, isto é, $m_0 H_c \approx g(m_0) \simeq (T_c - T)^2$, ou $H_c \approx (T_c - T)^{3/2}$. A transição de fase dinâmica [54] converge para o comportamento estático: $H_0 \approx (T_c - T)^{3/2} \simeq H_c$. Em 1990, Lo e Pelcovits [55] foram os primeiros a estudar o modelo de Ising cinético usando simulação de Monte Carlo. Detectaram a transição dinâmica, mas não obtiveram precisão para o diagrama de fase no plano $H_0 - T$. Anos depois, Acharyya e Chakrabarti [54] analisaram este modelo dinâmico e concluíram que o verdadeiro diagrama de fase é qualitativamente equivalente aos resultados de campo médio, ou seja, temos a existência de um ponto tricrítico, conforme mostrado na Figura 2.2, tanto para rede $2d$ como $3d$.

Acharyya [56] testou a existência do ponto tricrítico estudando a distribuição de probabilidade do parâmetro de ordem dinâmico $P(Q)$ e, analisando o cumulante de Binder senoidal ($H = H_0 \sin(\omega t)$), a resposta da magnetização não será necessariamente do tipo senoidal, será oscilatória com mesma frequência ω do campo aplicado.

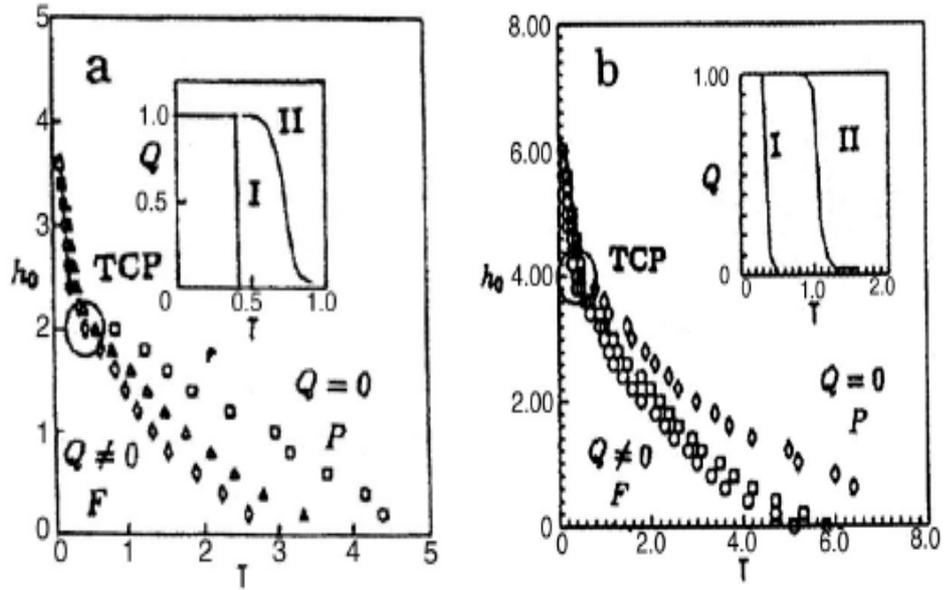


Figura 2.2: Diagrama de fase no plano $H_0 - T$ do modelo de Ising cinético obtido via simulação de Monte Carlo [54] para vários valores de frequência ω . Na curva (a) temos a simulação numa rede quadrada ($2d$) com tamanho $L = 100$ e em (b) para rede cúbica simples ($3d$) com tamanho $L = 20$. Diferentes símbolos representam diferentes frequências em (a) temos $\omega = 0.418$ (\square), $\omega = 0.208$ (\triangle), $\omega = 0.104$ (\diamond) e na curva (b) temos $\omega = 0.418$ (\diamond), $\omega = 0.202$ (\square), $\omega = 0.104$ (\circ). A localização do ponto tricrítico (TCP) é indicado nas figuras por círculos.

$U_L = 1 - \frac{\langle Q^4 \rangle}{3\langle Q^2 \rangle}$, localizou com mais precisão a temperatura de transição de fase dinâmica.

Uma análise de escala de tamanho finito da simulação de Monte Carlo no modelo de Ising cinético numa rede quadrada sugere que a transição de fase dinâmica é da mesma classe de universalidade do modelo de Ising no equilíbrio [57]. Os resultados de simulação dependem fortemente do tamanho do sistema L , e Korniss, Rikvold e Novotny [58] mostraram que não existe ponto tricrítico no limite $L \rightarrow \infty$ no modelo de Ising cinético³. Este resultado da universalidade foi confirmado através de um estudo do modelo de Ginzburg-

³A transição de fase dinâmica pode ser compreendida intuitivamente através da competição entre duas escalas de tempo: o período de oscilação do campo aplicado $2\pi/\omega$ e o tempo de resposta da magnetização τ . Quando o campo oscila em suficientemente baixas frequências ($2\pi/\omega$ grande), a magnetização essencialmente segue o comportamento do campo, oscilando entre seus dois estados com a mesma frequência ω , mostrando que a amplitude da força externa é suficientemente forte. Para altas frequências ($2\pi/\omega$ pequeno), o sistema não é capaz de relaxar depressa até mesmo para seguir a fase do campo externo e ocupa, após uma quebra de simetria, um ou outro de seus estados estáveis de campo zero, estando assim em um estado ordenado dinâmico ($Q \neq 0$).

Landau [59]. Em altas frequências uma transição de fase dinâmica é observada em que o período da magnetização média Q passa de um estado desordenado dinamicamente com $Q = 0$ para um estado ordenado dinamicamente com $Q \neq 0$ para $T < T_c$.

O modelo de Ising cinético tem provado ser um bom modelo para descrever os ferromagnetos uniaxiais nos quais o processo de inversão da magnetização é feita através de nucleação e paredes de domínios. Entretanto, ele não pode descrever os processos de relaxação magnética tal como as rotações dos spins coerentes. A fim de descrever corretamente o processo de relaxação dos filmes ferromagnéticos, um modelo de spin com grau de liberdade contínuo, o modelo de Heisenberg clássico, tem se mostrado adequado porque os spins podem rotacionar através de todas as orientações possíveis. O estudo da transição de fase do modelo de Heisenberg é mais complicado do que o correspondente modelo de Ising. Com apenas interações isotrópicas entre os primeiros vizinhos no filme de Heisenberg, a ordem ferromagnética é encontrada apenas em $T = 0$ na ausência ou não do campo externo [60]. A inclusão de uma anisotropia uniaxial no Hamiltoniano de Heisenberg pode modificar significativamente as propriedades magnéticas do sistema. Uma anisotropia uniaxial favorece o alinhamento dos spins ao longo do eixo de fácil magnetização, convencionalmente denotado pelo eixo z, onde para grandes valores desta anisotropia um comportamento crítico é do tipo Ising.

A fim de descrever a dinâmica do modelo de Heisenberg no filme fino, uma anisotropia é introduzida resultando no seguinte Hamiltoniano efetivo:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} [(1 - \Delta)(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z] - H(t) \sum_i S_i^z, \quad (2.4)$$

onde $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ é um vetor unitário no sítio i de uma rede cristalina, $\langle i, j \rangle$ denota a soma sobre os primeiros vizinhos, $H(t) = H_0 \sin(\omega t)$ é o campo oscilatório aplicado na direção do eixo z e $J > 0$ é a interação de troca ferromagnética. Seguindo Binder e Landau [61], $\Delta \in [0, 1]$ determina a intensidade da anisotropia de *exchange* presente apenas nas componentes x e y dos spins. No limite isotrópico, $\Delta = 0$, o modelo reduz-se ao familiar modelo de Heisenberg clássico do magnetismo, enquanto em $\Delta = 1$ temos o limite do modelo de Ising.

Considerando uma rede cúbica simples de tamanho $L \times L \times D$ em unidades do espaçamento da rede, onde aplica-se condição periódica apenas nas direções x e y. Para uma pequena anisotropia, a considerar $\Delta = 0.1$, o sistema está intermediário entre os

comportamentos dos modelos de Ising ($\Delta = 1$) e Heisenberg isotrópico ($\Delta = 0$). Usando a simulação de Monte Carlo com $L = 32$ e $D = 12$, a transição de fase dinâmica foi investigada [62]. Na ausência de campo magnético, aplicando, também, a condição periódica ao longo do eixo z (tamanho D) (propriedades de *bulk*) uma transição de fase contínua ocorre em $\tilde{T}_c \equiv \frac{k_B T_c}{J} = 1.53$, enquanto para o filme de largura $D = 12$ temos $\tilde{T}_c = 1.51$. Quando aplicamos um campo magnético oscilatório, Eq.(2.4), a magnetização do filme é dependente do tempo. A resposta dinâmica do filme é caracterizada por uma média do período ($2\pi/\omega$) da magnetização, $Q(T, H_0, \omega)$, e a área da histerese definida por

$$A = - \oint m_z(t) dH, \quad (2.5)$$

onde $m_z(t) = \frac{1}{D} \sum_{n=1}^D \left(\frac{1}{L^2} \sum_{i \in n} S_i^z(t) \right)$. Na simulação foi fixada a frequência $\omega = 2\pi/240$ e $\tilde{T} = \frac{k_B T}{J} = 1 < \tilde{T}_c = 1.53$.

Na figura 2.3 mostramos os resultados da simulação [62] para os valores médios do parâmetro de ordem (magnetização) $\langle Q \rangle$ e a área da histerese $\langle A \rangle$ como uma função da amplitude do campo H_0 ($J \equiv 1$), onde foram fixados $\omega = 2\pi/240$ e $\tilde{T} = 1.0$. Foram comparados os resultados para um sistema *bulk* com o campo oscilatório, e condições periódicas nas três direções de uma rede cúbica simples de tamanho $32 \times 32 \times 32$, com aqueles do modelo dada pelo Hamiltoniano Eq.(2.4) com anisotropia $\Delta = 0.1$. Os comportamentos qualitativos para $\langle Q \rangle$ e $\langle A \rangle$ como função de H_0 mostrados na Figura 2.3 são os mesmos para o sistema *bulk* ou na forma de filme de tamanho $D = 12$.

Para pequenos valores do campo H_0 , $\langle Q \rangle$ é uma constante e $\langle A \rangle = 0$ indicando um sistema ordenado ferromagneticamente. O campo magnético é muito pequeno para produzir alguma reorientação significativa dos spins, e a magnetização é essencialmente independente do tempo. Como consequência da definição 2.5 temos $\langle A \rangle = 0$ e a magnetização média não nula. Quando H_0 cresce moderadamente, a energia Zeeman associada ao campo oscilatório domina a competição com as interações (J) entre os spins. O alinhamento dos spins tendem a seguir o comportamento oscilatório do campo e induz um comportamento oscilatório (não necessariamente senoidal) para a magnetização (filme e *bulk*) com uma frequência consistente com a do campo aplicado. Desta maneira, a magnetização média começa a decrescer monotonicamente, enquanto $\langle A \rangle$ cresce, com o aumento de H_0 . Para altos valores de H_0 , a oscilação do campo domina a competição e $\langle Q \rangle = 0$ como um resultado da variação simétrica da dependência temporal da magnetização. A transição de

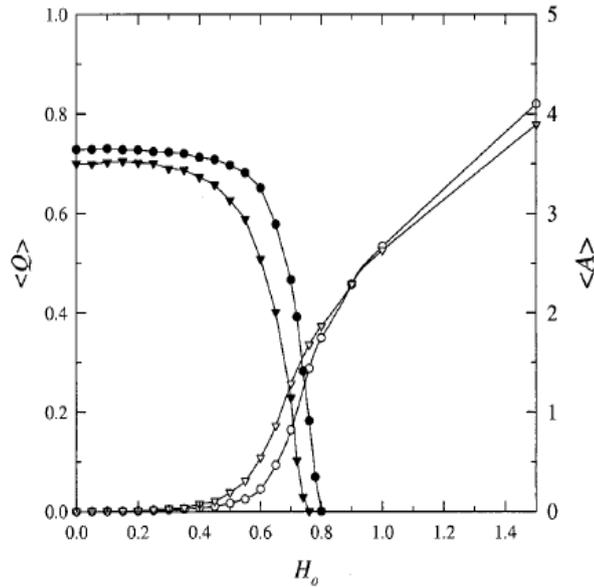


Figura 2.3: Comportamento da magnetização média $\langle Q \rangle$ e área da histerese $\langle A \rangle$ como função da amplitude do campo senoidal no modelo de Heisenberg anisotrópico ($\Delta = 0.1$) obtido via simulação de Monte Carlo [62]. Foram fixados $\omega = 2\pi/240$ e $\tilde{T} = 1.0$, onde para as propriedades de *bulk* (círculos) foi usado uma rede cúbica simples de tamanho $32 \times 32 \times 32$, enquanto para as propriedades do filme (triângulos) usou-se tamanho $D = 12$ (direção do eixo z).

fase dinâmica é caracterizada com o parâmetro de ordem $\langle Q \rangle$ nulo, quando é atingido um campo crítico H_{0c} . Os resultados da simulação indicam que para o filme temos $H_{0c} = 0.76$ e no *bulk* $H_{0c} = 0.80$. Para valores de $H_0 > H_{0c}$, existe um comportamento crescente da área média da curva de histerese, que tem forma de lei de potência $\langle A \rangle \approx H_{0c}^\alpha$, onde $\alpha = 0.73$ no caso do filme e $\alpha = 0.75$ no caso do sistema *bulk*.

Uma melhor maneira de estudar a transição de fase dinâmica, observada na Figura 2.3, é analisar a dependência temporal da magnetização $m_z(t)$. A Figura 2.4 mostra $m_z(t)$ do filme de Heisenberg anisotrópico (Eq.(2.4) com $\Delta = 0.1$) na presença de um campo oscilatório numa temperatura (reduzida) $\tilde{T} = 1.0$, frequência $\omega = 2\pi/240$ com amplitudes de campo $H_0 = 0.3, 0.7, 1.0, 2.0$ e 3.0 . A Figura 2.4 mostra que a memória do estado inicial na simulação é curta, estabelecendo rapidamente seu estado após alguns ciclos de oscilação. O caso particular de $H_0 = 0.3$ e $\tilde{T} = 1.0$ corresponde a uma estado ordenado (ferromagnético) dinamicamente com $\langle Q \rangle \neq 0$. A Figura 2.4 mostra que após um transiente inicial $m_z(t)$ tem uma oscilação com a mesma frequência do campo aplicado,

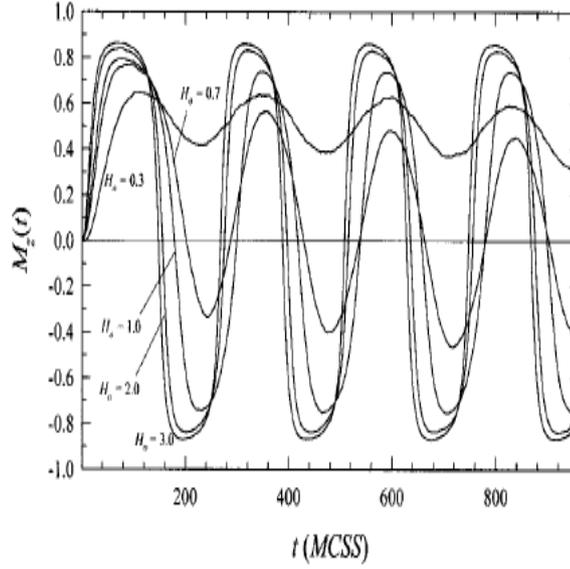


Figura 2.4: Comportamento dinâmico da magnetização axial $m_z(t)$ como função do tempo para um filme fino de Heisenberg clássico com anisotropia de troca $\Delta = 0.1$ (Eq.(2.4)), obtido via simulação de Monte Carlo[62] numa rede cúbica simples de tamanho $32 \times 32 \times D$ ($D = 12$), na presença de uma campo oscilatório com frequência $\omega = 2\pi/240$, temperatura reduzida $\tilde{T} = \frac{k_B T}{J} = 1.0$ e várias intensidades da amplitude do campo indicadas as curvas.

mas atrasado do campo por aproximadamente $\pi/2$ (defasagem de fase da oscilação da magnetização). Com o aumento de H_0 , por exemplo, o valor $H_0 = 0.7$, a magnetização oscila, ainda suavemente, e ocorre notadamente uma redução do valor médio $\langle Q \rangle$, até anulando-se para $H_0 > H_{0c} = 0.76$.

Na simulação de Monte Carlo o algoritmo incorpora uma dinâmica estocástica que descreve a regra de transição do sistema de um estado para outro. Existem diversos tipos de dinâmica estocástica que podem envolver transições de uma única ou de muitas partículas, ou ainda podem ser locais ou não locais em característica. No caso do Monte Carlo de equilíbrio um número razoável de dinâmicas pode levar à mesma distribuição de Boltzmann dos estados. A condição de ergodicidade e balanço detalhado são suficientes para garantir que a distribuição de equilíbrio dos estados, gerado pelo algoritmo, é a correta distribuição de Boltzmann [63]. Por outro lado, no caso de simulação de Monte Carlo fora do equilíbrio existe uma certa limitação na escolha da dinâmica estocástica. As condições de ergodicidade e balanço detalhado não dizem nem aproximadamente a

forma como o sistema vai para o equilíbrio (estado estacionário) e diferentes escolhas para a dinâmica estocástica darão lugar a diferentes resultados. Então, a dinâmica deve ser escolhida guiada pela física fundamental em lugar da simples eficiência computacional. Para algoritmos de *cluster* a relação entre processos de Monte Carlo e processos dinâmicos realistas não é clara. Em alguns casos, quando simulamos sistemas reais (estudo da dinâmica molecular) é possível usar os resultados para estimar a forma correta para a dinâmica estocástica. Porém, em outros casos a forma detalhada não é a priori clara e propriedades macroscópicas devem ser usadas para se fazer alguma inferência sobre a forma desta dinâmica estocástica. Isto mostra que é importante como ponto de partida da mecânica estatística fora do equilíbrio caracterizar bem o tipo de dinâmica usada.

Usando um campo oscilatório $H(t)$, na Eq.(2.4), na forma de um pulso quadrado⁴ Jang e colaboradores [64], através de simulação de Monte Carlo fora do equilíbrio, fixando $\Delta = 0.1$ e $H_0 = 0.3$, calcularam o valor médio da magnetização $\langle Q \rangle$ como uma função da temperatura reduzida $T^*(\equiv \tilde{T})$ aplicando as dinâmicas de Glauber e Metrópolis. A Figura 2.5 mostra uma considerável mudança no parâmetro de ordem dinâmico para as dinâmicas de Glauber e Metrópolis quando a temperatura é aumentada. Na região de baixas temperaturas ($T^* < T_c^*(H_0)$) temos um estado ordenado dinamicamente com $\langle Q \rangle \neq 0$, enquanto em altas temperaturas ($T^* > T_c^*(H_0)$) um estado desordenado dinamicamente com $\langle Q \rangle = 0$ é observado. Os resultados para as duas dinâmicas são os mesmos em baixas temperaturas ($T^* < 0.7$) e altas temperaturas ($T^* > T_c^* = 1.0$). Na região intermediária ($0.7 < T^* < 1.0$), a forma de $\langle Q \rangle$ como função de T^* para os dois tipos de dinâmica é diferente. A transição de fase dinâmica para o algoritmo de Metrópolis parece ser contínua com decréscimo do parâmetro de ordem quando a temperatura crítica T_c é atingida. Note as fortes flutuações térmicas observadas através das barras de erros na curva em círculos abertos na Figura 2.5, quando $\langle Q \rangle$ está próximo da região crítica. No caso da dinâmica de Glauber temos menores flutuações para $\langle Q \rangle$ com o aumento de T^* na fase ordenada, mas segue um grande decréscimo em $\langle Q \rangle$ quando atingimos em $T^* = 0.88$. Por outro

⁴Um pulso quadrado para o campo magnético $H(t)$ tem a seguinte forma

$$H(t) = \begin{cases} -H_0, & 2(k-1)\pi < \omega t \leq (2k-1)\pi \\ H_0, & (2k-1)\pi < \omega t \leq 2k\pi, \end{cases}$$

onde $k(= 1, 2, 3, \dots)$ é um número inteiro representando o número de períodos do campo externo oscilatório pulsado.

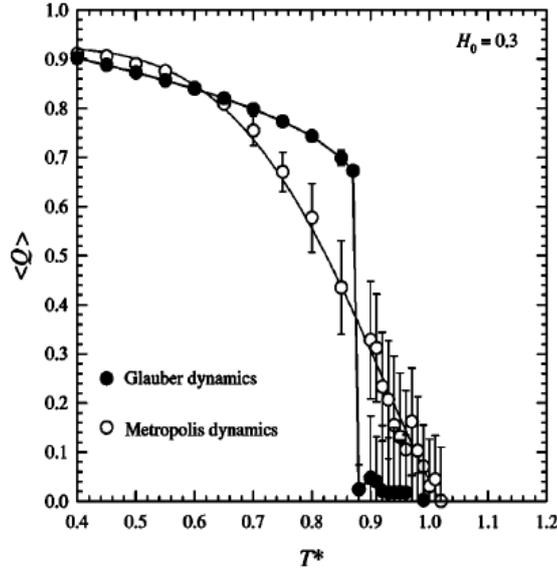


Figura 2.5: Comportamento da magnetização dinâmica média $\langle Q \rangle$ como função da temperatura reduzida $T^* = k_B T/J$ do modelo de Heisenberg clássico anisotrópico $\Delta = 0.1$ (Eq.(2.4)), no filme fino de espessura $D = 12$ ($L = 32$) calculado através de simulação de Monte Carlo [64]. Um campo pulsado na forma quadrática ($\pm H_0$) foi usado com amplitude $H_0 = 0.3$ com as dinâmicas de Glauber (círculos sólidos) e Metrópolis (círculos abertos).

lado, mesmo existindo esta diferença no comportamento de $\langle Q \rangle$ usando esses dois tipos de dinâmica, as localizações de T_c não são muito diferentes. Portanto, um estudo mais aprimorado é necessário para mostrar que o diagrama de fase no plano $T - H_0$ é o mesmo usando-se a dinâmica de Glauber ou de Metrópolis, sendo que no último apenas transições de fase contínuas devem ser observadas.

A existência ou não do ponto tricrítico no diagrama de fases do modelo de Ising cinético não tem ainda uma resposta conclusiva. Voltando para nossa análise dos resultados de campo médio [49], esquematizado na Figura 2.1 para baixas frequências e investigado por Tomé e Oliveira [49], foi observado que para altas frequências e baixas temperaturas existe um intervalo de valores do campo H_0 ($\equiv h/zJ$, z é o número de coordenação) no qual as fases paramagnética (P) e ferromagnética (F) coexistem (fase mista $P+F$). A fase mista $P+F$ é separada das fases F e P por linhas de primeira ordem, e ela existe para $\omega \geq 0.60$. Estas fases (P , F e $P+F$) são obtidas analisando o comportamento da magnetização como função do tempo, fixados os valores de T , H_0 e ω . No caso do estado desordenado (P),

qualquer condição inicial para a magnetização $m(0)$ sempre evolui (oscilatório) para um estado estacionário no qual o valor médio da magnetização calculado no período ($2\pi/\omega$) é nulo. No entanto, para o estado ordenado (F) temos uma evolução do sistema para um valor médio $\langle Q \rangle \neq 0$ (duas soluções antisimétricas). Por outro lado, a fase mista ($P + F$) evolui para dois estados estacionários que são dependente da condição inicial: se $m(0) = 0$ o sistema oscila em torno do valor $m = 0$, correspondendo, assim, a solução P , se $m(0) \neq 0$ temos o caso em que o sistema oscila em torno de um valor $m \neq 0$, correspondendo a solução F .

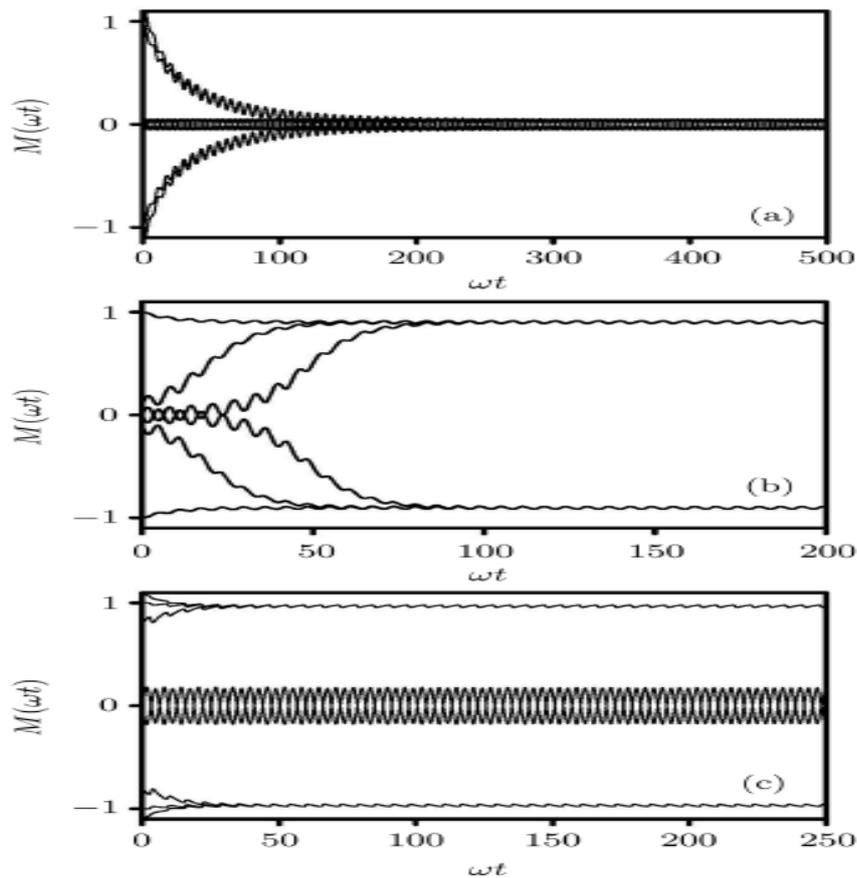


Figura 2.6: Variação temporal da magnetização $M(\omega t)$ para o modelo de Ising cinético usando aproximação de campo médio [49], fixando $\omega = 1.0$, $H_0/zJ = 0.5$ e $k_B T/zJ = 0.8$ na fase P (a), $\omega = 1.0$, $H_0/zJ = 0.25$ e $k_B T/zJ = 0.25$ na fase F (b) e $\omega = 1.0$, $H_0/zJ = 0.70$ e $k_B T/zJ = 0.05$ na fase mista $F + P$ (c).

Mais adiante iremos detalhar o cálculo de campo médio, por enquanto discutiremos apenas os resultados. Na figura 2.6 apresentamos o comportamento da magnetização $m(t)$ como função do tempo, fixando a frequência $\omega = 1.0 (> 0.6)$ e para vários valores

de H_0 e T , investigando cada uma das soluções estacionárias: P (curva a), F (curva b) e $P + F$ (curva c). A presença desta fase mista não é observada através de simulação de Monte Carlo. Podemos atribuir este possível resultado espúrio ao fato da aproximação de campo médio desprezar todos os tipos de correlações no sistema (‘interação de longo-alcance’). Neste nível de aproximação, no regime de baixas frequências $\omega < \omega_c = 0.60$, o tempo de relaxação τ (“flip do spin”) é menor do que o período de oscilação do campo ($2\pi/\omega$) e o sistema relaxa rapidamente ao estado estacionário, que independe da condição inicial. Portanto, esta fase mista ($P + F$) não existe. Porém, quando estamos no regime de altas frequências ($\omega \geq \omega_c$), $\tau > 2\pi/\omega$, fazendo com que o sistema relaxe lentamente ao estado estacionário, que poderá depender da condição inicial (fixados valores de T e H_0). De fato cada sítio da rede interage com todos os outros sítios (interação de longo-alcance), tornando o processo de relaxamento ainda mais lento, surgindo, assim, um possível estado misto $P + F$. Analizando vários outros valores de pares (H_0, T) podemos obter um diagrama de fases. Fixando uma frequência $\omega = 2\pi(> \omega_c)$, na Figura 2.7 apresentamos o diagrama de fases no plano $T - h$.

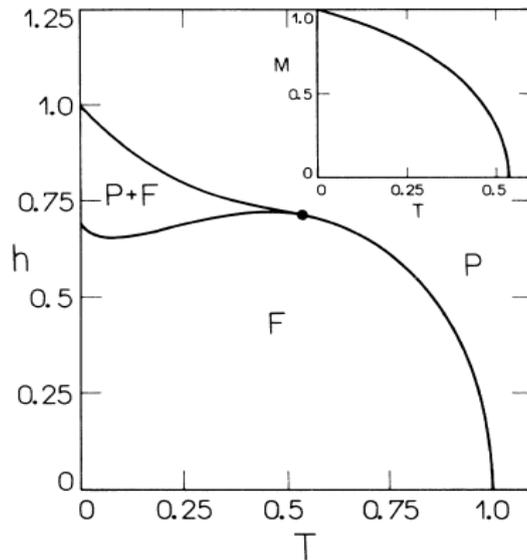


Figura 2.7: Diagrama de fase no plano $T - h$ ($T \equiv k_B T/zJ$ e $h = H_0/zJ$) para $\omega = 2\pi$ do modelo de Ising cinético obtido via aproximação de campo médio [49]. As fases ferromagnética, paramagnética e mista são denotadas no diagrama por F , P e $F + P$, respectivamente. O círculo cheio representa o ponto tricrítico. A curva inserida representa o comportamento da magnetização na fase F como função da temperatura.

Para investigar a veracidade da existência da fase mista no diagrama de fases do modelo de Ising cinético, efeitos de correlações devem ser introduzidos na aproximação. No nível superior a aproximação de campo médio, Shi e colaboradores [65] desenvolveram a técnica do operador diferencial na aproximação de campo efetivo [66], aplicada inicialmente para descrever modelos de spins no equilíbrio, e concluíram que não existe a fase $F + P$ e nem um ponto tricrítico no diagrama de fases. Recentemente, Deviren e colaboradores [67] mostraram que a análise do trabalho da Ref.[65] está incompleta, uma vez que o comportamento da magnetização $m(t)$ em função do tempo não foi apresentada. Deste novo estudo, os autores [67] concluíram que a fase mista $F + P$ persiste para qualquer valor de frequência ω . Apesar de ter sido levado parcialmente em consideração correlações entre spins, a fase mista $F + P$ continua existindo e agora para todo valor de ω , o que entra em contradição com nossas especulações acerca de existência desta fase quando foi usado a aproximação de campo médio.

Recentemente, Deviren e Albayrak [68] estudaram o modelo de Ising cinético usando relações de recorrência numa rede de Bethe [69]. Nesta nova aproximação, as correlações são tratadas mais elaboradamente, e os resultados encontrados para as propriedades de equilíbrio são melhores do que os de campo efetivo [66]. Destes novos estudos, os autores [68] mostraram que a fase mista não existe, mas persiste ainda um ponto tricrítico no diagrama de fase para $\omega > \omega_c$, e que para baixas frequências $\omega < \omega_c$ temos apenas uma linha de primeira ordem delimitando as fases P e F .

2.2 Equação mestra

A fim de encontrar a dependência temporal dos observáveis físicos do ponto de vista da mecânica estatística, precisamos escrever uma equação (mestra), para a evolução temporal dos processos estocásticos markovianos⁵. Seja $P(\sigma, t)$ a probabilidade de encontrar um sistema no estado microscópico σ , num determinado instante t . De forma intuitiva, podemos escrever

$$\frac{d}{dt}P(\sigma, t) = \Delta P_{dentro} - \Delta P_{fora}, \quad (2.6)$$

⁵Uma sequência de eventos aleatórios $\{y_i(t_i)$, onde $y_i(t_i)$ é um dado evento no instante t_i $i = 1, 2, \dots$, com $t_1 < t_2 < \dots$ é denominado de markoviano quando a probabilidade de ocorrência de um determinado elemento da sequência não depende da história anterior do sistema. Há ausência de memória.

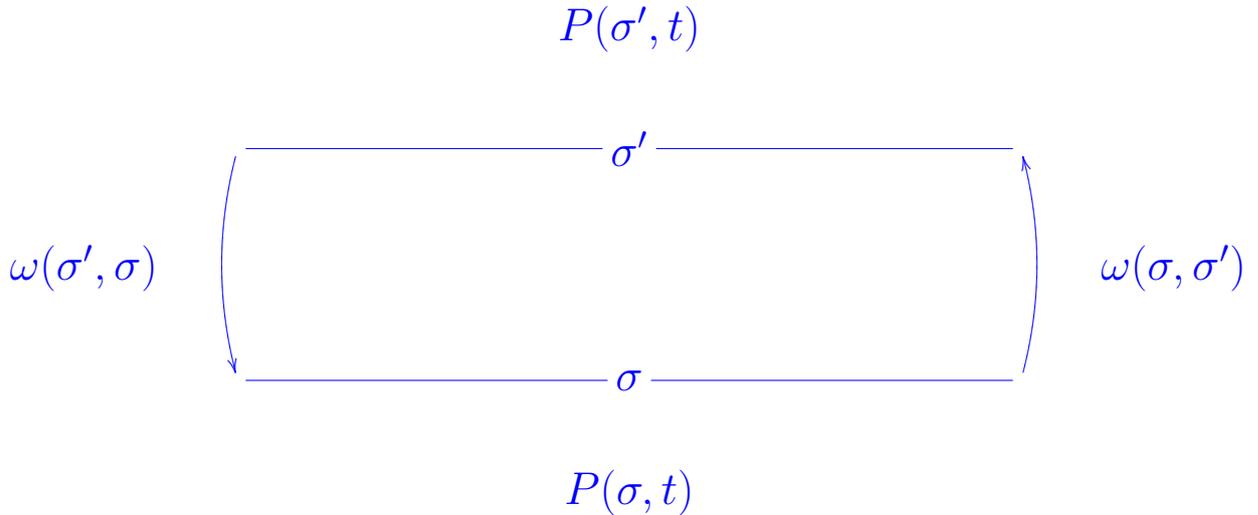


Figura 2.8: Diagrama esquematizado da evolução temporal da distribuição de probabilidade das transições entre os estados σ e σ' .

onde a taxa de variação da probabilidade “para dentro” do estado σ é dada por

$$\Delta P_{dentro} = \sum_{\{\sigma'\}} P(\sigma', t) \omega(\sigma', \sigma) \quad (2.7)$$

com $\omega(\sigma', \sigma)$ interpretada como a probabilidade, por unidade de tempo, de que o sistema mude do estado σ' para o estado σ . Da mesma maneira, a taxa de variação de probabilidade “para fora” do estado σ é escrita como

$$\Delta P_{fora} = P(\sigma, t) \sum_{\{\sigma'\}} \omega(\sigma, \sigma'), \quad (2.8)$$

onde $\omega(\sigma, \sigma')$ é a taxa de transição do estado σ para σ' . Veja o diagrama esquematizado na Figura 2.8 que mostra a idéia de forma mais clara.

Portanto, substituindo as Eqs.(2.7) e (2.8) na equação mestra, Eq.(2.6), ficaremos com

$$\frac{dP(\sigma, t)}{dt} = \sum_{\{\sigma'\}} [P(\sigma', t) \omega(\sigma', \sigma) - P(\sigma, t) \omega(\sigma, \sigma')]. \quad (2.9)$$

Como já mencionamos anteriormente, toda a dificuldade reside na obtenção da taxa de transição $\omega(\sigma, \sigma')$ ou $(\omega(\sigma', \sigma))$. Em problemas de interesse físico devemos calcular essas probabilidades de transição a partir de primeiros princípios (o que se torna, em geral, praticamente impossível!) ou adotar formas plausíveis, consistentes com os aspectos físicos subjacentes.

Nos estados estacionários, a probabilidade $P(\sigma, t)$ não deve ser uma função explícita do tempo, ou seja,

$$\frac{dP(\sigma, t)}{dt} = 0 \quad (2.10)$$

que pode corresponder a situação de equilíbrio. Observando a Eq.(2.9), uma condição suficiente para o equilíbrio é dada pelo princípio do balanço detalhado, ou seja,

$$P(\sigma', t)\omega(\sigma', \sigma) = P(\sigma, t)\omega(\sigma, \sigma'), \quad (2.11)$$

para quaisquer estados σ' e σ . Essa equação de balanço detalhado, como o próprio nome indica, tem um significado intuitivo muito claro: na situação estacionária, devemos ter o mesmo número de transições de σ para σ' ou na direção contrária, de σ' para σ . Uma das estratégias mais frequentes nessa área consiste em escolher as taxas $\omega(\sigma, \sigma')$ a fim de satisfazer a equação do balanço detalhado no equilíbrio, ou seja, tal que

$$P(\sigma', t \rightarrow \infty)\omega(\sigma', \sigma) = P(\sigma, t \rightarrow \infty)\omega(\sigma, \sigma'). \quad (2.12)$$

2.3 Dinâmica estocástica

O modelo de Ising com dois estados será estudado aqui como um protótipo para a descrição da dinâmica (discreta) dos spins e, conseqüentemente, obter as grandezas médias como função do tempo. Uma configuração microscópica de todos os N sítios de uma rede é representado por $\sigma \equiv (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$ ($\sigma_i = \pm 1$) cujos spins interagem segundo o Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad (2.13)$$

onde $\langle i, j \rangle$ denota a soma sobre os primeiros vizinhos, J é a interação de troca ($J > 0$ e $J < 0$ corresponde ao ferromagnetismo e ao antiferromagnetismo, respectivamente) e a variável discreta de spins σ_i no sítio i pode assumir valores $+1$ (spin para cima) e -1 (spin para baixo).

Ao modelo de Ising é acoplado um reservatório térmico a temperatura T , de tal maneira que no equilíbrio, o sistema é descrito pela distribuição de probabilidade de Boltzmann-Gibbs associada ao estado σ dada por

$$P(\sigma) \equiv \frac{e^{-\beta\mathcal{H}(\sigma)}}{Z}, \quad (2.14)$$

onde $\beta = 1/k_B T$, k_B é a constante de Boltzmann e $Z = \sum_{\sigma} e^{-\beta \mathcal{H}(\sigma)}$ é a função de partição do sistema.

Observe que o Hamiltoniano Eq.(2.13) não carrega intrinsecamente nenhuma informação temporal, de maneira que o modelo de Ising é estático por natureza. Esse resultado não deve surpreender já que os spins da rede estão em equilíbrio com um reservatório térmico a temperatura T . Para descrever a evolução temporal para as variáveis de spin do modelo de Ising (magnetização, funções de correlações, etc), devemos primeiro encontrar a taxa de transição $\omega(\sigma, \sigma')$ a fim de resolver a equação diferencial dada pela Eq.(2.9) e obter $P(\sigma, t)$. Consequentemente, podemos calcular a média temporal $\langle A \rangle = \sum_{\sigma} A_{\sigma} P(\sigma, t)$ de qualquer observável nas variáveis Ising.

2.3.1 Dinâmica de Glauber

Há certos processos markovianos que podem evoluir com uma mínima mudança em seu estado. Como exemplo, consideremos um caso em que o sistema esteja inicialmente no estado $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_N)$ e vá para o novo estado $\sigma' = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma'_i, \dots, \sigma_N)$, onde apenas um sítio da rede foi invertido. Com objetivo de compreender a evolução temporal do modelo de Ising, Glauber [70] em 1960 propôs uma forma para a taxa de transição $\omega(\sigma, \sigma')$. Em particular, no caso em que a variável estocástica $\sigma_i = \pm 1$, a mudança no valor desta variável é probabilística e se deve tanto à influência do banho térmico, com o qual o sistema está em contato, quanto as interações entre os primeiros vizinhos do sítio i -ésimo. Assim sendo, a configuração inicial σ sob ação da taxa de inversão $\omega(\sigma, \sigma')$ resulta em outra configuração $\sigma' \equiv \sigma^i = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, -\sigma_i, \dots, \sigma_N)$, de maneira que apenas um único sítio é atualizado de cada vez.

Esta condição não é ainda suficiente para o modelo de Glauber descrever variáveis estocásticas de Ising, porque ele deve satisfazer no equilíbrio a condição do balanço detalhado dada pela Eq.(2.12), ou seja,

$$\frac{\omega_i(\sigma)}{\omega_i(\sigma^i)} = \frac{P(\sigma^i)}{P(\sigma)}. \quad (2.15)$$

Usando-se a distribuição de Boltzmann-Gibbs Eq.(2.14), ficamos com a seguinte condição para a taxa de transição

$$\frac{\omega_i(\sigma)}{\omega_i(\sigma^i)} = \frac{e^{-\beta \mathcal{H}(\sigma^i)}}{e^{-\beta \mathcal{H}(\sigma)}}. \quad (2.16)$$

Usando o Hamiltoniano de Ising Eq.(2.13) na relação Eq.(2.15), ficamos⁶

$$\frac{\omega_i(\sigma)}{\omega_i(\sigma^i)} = \frac{e^{-\beta J \sigma_i \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{i+\vec{\delta}}} (1 - \sigma_i \tanh(K \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{i+\vec{\delta}}))}{e^{\beta J \sigma_i \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{i+\vec{\delta}}} (1 + \sigma_i \tanh(K \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{i+\vec{\delta}}))} \quad (2.17)$$

onde $K = \beta J$ e $\sum_{\vec{\delta}} \sigma_{i+\vec{\delta}}$ é a soma sobre as variáveis estocásticas associadas aos primeiros vizinhos. Não há unicidade na forma de $\omega_i(\sigma)$, existindo diferentes exemplos que satisfazem o balanço detalhado [71], Eq.(2.15). Uma destas propostas é a de Glauber [70] definida por

$$\omega_i(\sigma) = \frac{1}{2\tau} \left\{ 1 - \sigma_i \tanh(K \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{i+\vec{\delta}}) \right\}, \quad (2.18)$$

onde τ é o tempo de transição entre os estados. Este tempo τ foi estimado como sendo da ordem de $10^{-11}s$ em estudos experimentais de relaxação dielétrica no composto $NaNO_2$ ao qual o modelo de Glauber foi ajustado [72].

A dinâmica de Glauber, expressa pela taxa de transição definida pela Eq.(2.18), apresenta uma simetria: ela não se modifica se houver uma inversão de sinal de todos os spins da rede, ou seja, $\omega_i(\sigma) = \omega_i(-\sigma)$. Isso significa que o modelo possui simetria de inversão. Essa característica do modelo de Glauber é de grande importância, pois modelos com a mesma simetria apresentam o mesmo comportamento nas proximidades da temperatura crítica desde que ambos estejam definidos na mesma dimensão.

Com a inclusão de um campo magnético (H) no Hamiltoniano de Ising, Eq.(2.13), Glauber, então, propôs a seguinte taxa de transição:

$$\omega_i(\sigma) = \frac{1}{2\tau} \left\{ 1 - \sigma_i \tanh(K \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{i+\vec{\delta}} + \beta H) \right\}. \quad (2.19)$$

Utilizando a notação σ e σ^i , podemos reescrever a equação mestra Eq.(2.9) na forma

$$\frac{dP(\sigma, t)}{dt} = \sum_i^N \{ P(\sigma^i, t) \omega_i(\sigma^i) - P(\sigma, t) \omega_i(\sigma) \}. \quad (2.20)$$

⁶ Sendo $\sigma_i = \pm 1$, vale a seguinte identidade $e^{\pm \lambda \sigma_i} = \cosh(\lambda) \pm \sigma_i \sinh(\lambda)$, então a Eq.(2.16) é facilmente demonstrada, ou seja,

$$\frac{e^{-\lambda \sigma_i}}{e^{\lambda \sigma_i}} = \frac{\cosh(\lambda) - \sigma_i \sinh(\lambda)}{\cosh(\lambda) + \sigma_i \sinh(\lambda)} = \frac{1 - \sigma_i \tanh(\lambda)}{1 + \sigma_i \tanh(\lambda)}$$

Conhecendo a evolução temporal da probabilidade, podemos escrever a evolução temporal da média de uma variável $A(\sigma)$ definida como

$$\langle A(\sigma) \rangle = \sum_{\sigma} A(\sigma) P(\sigma, t). \quad (2.21)$$

Derivando encontramos

$$\frac{d\langle A(\sigma) \rangle}{dt} = \sum_{\sigma} \left\{ \frac{dA}{dt} P(\sigma, t) + A(\sigma) \frac{d}{dt} P(\sigma, t) \right\}, \quad (2.22)$$

sendo $\frac{dA}{dt} = 0$ e usando a relação Eq.(2.20) obtemos

$$\frac{d\langle A(\sigma) \rangle}{dt} = \sum_i \sum_{\sigma} \{ A(\sigma) \omega_i(\sigma^i) P(\sigma^i, t) - A(\sigma) \omega_i(\sigma) P(\sigma, t) \}, \quad (2.23)$$

Resolvendo cada termo do segundo membro da Eq.(2.23) temos ⁷

$$\sum_{\sigma} A(\sigma) \omega_i(\sigma^i) P(\sigma, t) = \sum_{\sigma} A(\sigma^i) \omega_i(\sigma) P(\sigma, t) = \langle A(\sigma^i) \omega_i(\sigma) \rangle \quad (2.24)$$

e

$$\sum_{\sigma} A(\sigma) \omega_i(\sigma) P(\sigma, t) = \langle A(\sigma) \omega_i(\sigma) \rangle. \quad (2.25)$$

Substituindo Eq.(2.24) e Eq.(2.25) em Eq.(2.23) obtemos

$$\frac{d\langle A(\sigma) \rangle}{dt} = \sum_i^N \langle [A(\sigma^i) - A(\sigma)] \omega_i(\sigma) \rangle. \quad (2.26)$$

A Eq.(2.26) será fundamental para encontrar a evolução temporal das médias $\langle \sigma_i \rangle$ e $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$. No primeiro caso temos que $A(\sigma) = \sigma_i$ e $A(\sigma^i) = -\sigma_i = -A(\sigma)$, desta maneira mostramos

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_i \rangle = -2 \langle \sigma_i \omega_i(\sigma) \rangle. \quad (2.27)$$

No caso da função de correlação $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$ temos que $A(\sigma) = \sigma_i \sigma_j$ e $A(\sigma^i) = -\sigma_i \sigma_j$, então

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle = -2 \langle \sigma_i \sigma_j [\omega_i(\sigma) - \omega_j(\sigma)] \rangle. \quad (2.28)$$

⁷Sejam duas funções de variáveis estocástica de Ising $g(\sigma)$ e $f(\sigma^i)$, então temos:

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma} f(\sigma^i) g(\sigma) &= \sum_{\sigma} f(\sigma_1, \sigma_2, \dots, -\sigma_i, \dots, \sigma_N) g(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_N) \\ &= \sum_{\sigma'} f(\sigma'_1, \sigma'_2, \dots, \sigma'_i, \dots, \sigma'_N) g(\sigma'_1, \sigma'_2, \dots, -\sigma'_i, \dots, \sigma'_N) \\ &= \sum_{\sigma} f(\sigma) g(\sigma^i) \end{aligned}$$

2.3.2 Outras dinâmicas

Outras tipos de dinâmicas diferentes da proposta por Glauber, Eq.(2.18), podem ser formuladas obedecendo o balanço detalhado Eq.(2.17). Kawasaki [73] estabeleceu uma taxa de transição apenas entre apenas spins vizinhos de sinais opostos de forma a conservar a magnetização total. Essa taxa de transição é dada por

$$\omega_{ij}(\sigma_i, \sigma_j) = \frac{1}{2\tau} \left(\frac{1 - \sigma_i \sigma_j}{2} \right) \left[1 - \tanh\beta(\sigma_i E_i^{(j)} + \sigma_j E_j^{(i)}) \right], \quad (2.29)$$

onde $E_i^{(j)}$ refere-se as interações de σ_i no Hamiltoniano de Ising excluída a interação de σ_i com σ_j . Uma formulação mais elaborada para taxa de transição foi proposta por Kadanoff e Swift [74] que considera a dinâmica de mais graus de liberdade, introduzindo uma variável de quantidade de movimento. Tudo isto que atesta as potencialidades deste tipo de formulação estocástica. Todas estas dinâmicas têm em comum o fato delas serem reversíveis no estado estacionário e invariantes por inversão de spins.

2.4 Modelo de Ising cinético

A fim de analisar a transição de fase dinâmica, usando como ponto de partida o modelo de Ising e a dinâmica de Glauber, consideramos o modelo de Ising na presença de um campo oscilatório (senoidal) definido pelo seguinte Hamiltoniano (modelo de Ising cinético).

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - H(t) \sum_i \sigma_i, \quad (2.30)$$

onde $H(t) = H_0 \sin(\omega t)$, H_0 é a amplitude do campo e ω a frequência de oscilação.

Se o sistema estiver em contato com um reservatório térmico a temperatura T , as variáveis de spins σ podem ser consideradas funções estocásticas do tempo. Considerando que o sistema evolui de acordo com a dinâmica estocástica de Glauber numa taxa de $1/\tau$ transições por unidade de tempo. A probabilidade $P(\sigma, t)$ de encontrar o sistema em um estado $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$, em um determinado tempo t é dada pela seguinte equação mestra Eq.(2.9), ou seja,

$$\frac{dP(\sigma, t)}{dt} = \sum_{\sigma'} [P(\sigma', t)\omega(\sigma', \sigma) - P(\sigma, t)\omega(\sigma, \sigma')] \quad (2.31)$$

onde $\omega(\sigma', \sigma)$ é a probabilidade, por unidade de tempo, do estado $\sigma' = (\sigma'_1, \sigma'_2, \dots, \sigma'_N)$ mudar para o estado $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$. A expressão explícita para a probabilidade de

transição $\omega(\sigma', \sigma)$ é obtida a fim de satisfazer a equação do balanço detalhado, válida para tempos suficientemente grandes. Desta maneira, a proposta de Glauber para a taxa de transição pode ainda ser expressa por

$$\omega(\sigma, \sigma') = \frac{1}{\tau} \frac{\exp[-\beta\Delta\mathcal{H}(\sigma, \sigma')]}{\sum_{\sigma'} \exp[-\beta\Delta\mathcal{H}(\sigma, \sigma')]} \quad (2.32)$$

onde $\beta = 1/k_B T$, k_B é constante de Boltzmann, $\sum_{\sigma'}$ é a soma sobre os dois valores possíveis da variável de spin $\sigma_i = \pm 1$, τ o tempo de transição entre os estados e $\Delta\mathcal{H}(\sigma, \sigma')$ dá a mudança na energia do sistema quando os spins σ_i evoluem. Considerando-se a interação de um único spin central com seus vizinhos, essa expressão pode ser encontrada manipulando-se a Eq.(2.30), ou seja,

$$\Delta\mathcal{H}(\sigma, \sigma') = -J(\sigma'_i - \sigma_i) \sum_{\delta}^z \sigma_{i+\delta} + H_i(\sigma'_i - \sigma_i), \quad (2.33)$$

onde z é o número de coordenação e δ é o vetor vizinhos mais próximos. Substituindo os valores possíveis σ_i na probabilidade de transição, obtém-se

$$\begin{cases} \omega(-1, +1) = \omega(+1, +1) = \frac{1}{\tau} \frac{1}{1+e^{-2\beta a}} \\ \omega(-1, -1) = \omega(+1, -1) = \frac{1}{\tau} \frac{e^{-2\beta a}}{1+e^{-2\beta a}} \end{cases} \quad (2.34)$$

onde $a = J \sum_{\delta}^z \sigma_{i+\delta} + H$. Observando-se a Eq.(2.34), conclui-se que $\omega(\sigma_i, \sigma'_i)$ não depende dos valores σ_i , podendo ser reescrita como $\omega(\sigma_i, \sigma'_i) = \omega(\sigma'_i)$.

Desde que a soma das probabilidades seja normalizada e igual a um, e da média estatística para uma variável de spin σ_k , veja o apêndice A, obtém-se

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_k \rangle (t) = \sum_{\{\sigma_k\}} \sigma_k \frac{d}{dt} P(\sigma, t) = -\frac{1}{\tau} \langle \sigma_k \rangle + \left\langle \frac{1}{\tau} \tanh \left(K \sum_{\delta}^z \sigma_{i+\delta} + \beta H \right) \right\rangle \quad (2.35)$$

Podemos ainda reescrever esta equação como

$$\tau \frac{d}{dt} m(t) = -m(t) + \left\langle \tanh \left(K \sum_{\delta}^z \sigma_{i+\delta} + \beta H \right) \right\rangle \quad (2.36)$$

onde $m(t) = \langle \sigma_k \rangle (t)$. Esta expressão, Eq.(2.36), descreve a evolução temporal do parâmetro de ordem dinâmico para o sistema ferromagnético, ela é exata, no entanto de difícil manipulação, devido a inclusão de funções de correlações. Uma alternativa de se contornar essa dificuldade é o uso de métodos aproximativos.

2.4.1 Aproximação de campo médio

Na aproximação de campo médio [49], aproxima-se a média de $\tanh(K \sum_{\delta}^z \sigma_{i+\delta} \pm \beta H)$ por $\tanh(Kzm(t) \pm \beta H)$, desprezando-se assim todas as correlações dos spins. Desta maneira, da Eq.(2.36), obtemos uma equação auto-consistente para o parâmetro de ordem dinâmico escrita como

$$\Omega \frac{dm}{d\xi} = -m + \tanh \left[\frac{1}{T} (m + h \sin(\xi)) \right], \quad (2.37)$$

onde $\xi = \omega t$, T , h e Ω são parâmetros definidos por $T = (\beta Jz)^{-1}$, $h = H/Jz$ e $\Omega = \omega\tau$.

Resolvendo esta equação, Eq.(2.37), numericamente (pelo método de diferença finitas ou método de Runge Kutta de quarta ordem, veja apêndice B), obtemos a evolução temporal para $m(t)$. Os pontos de transições de fase dinâmica, são encontrados pela investigação do comportamento da magnetização média em função da temperatura reduzida T , do campo magnético externo reduzido h e Ω . A estabilidade da solução será analisada através do cálculo do expoente de Lyapunov (veja Apêndice C). O expoente de Lyapunov funciona como um indicador da transição de fase dinâmica que está associado com a simetria das soluções da equação de movimento. As soluções desta equação, Eq.(2.37), são funções periódicas, elas podem satisfazer ou não a propriedade $m(\xi + \pi) = -m(\xi)$. A solução que satisfaz esta propriedade é chamada simétrica e a que não satisfaz anti-simétrica. Denotamos por λ_s e λ_a os expoentes de Lyapunov associados as soluções simétricas e anti-simétricas, respectivamente. Se λ_s e λ_a crescem para zero continuamente a temperatura reduzida tende para a temperatura da transição de fase, a temperatura onde $\lambda_s = \lambda_a = 0$ é a temperatura da transição de fase de segunda ordem T_c . Por outro lado, se um deles (λ_a ou λ_s) crescer para zero descontinuamente e outro crescer para zero continuamente à medida que a temperatura reduzida se aproxima da temperatura de transição de fase, a temperatura em que a descontinuidade ocorrer primeiro para um dos λ e outro $\lambda = 0$, é a temperatura de transição de fase de primeira ordem T_c^* . Como mencionado anteriormente, Tânia Tomé e Mário de Oliveira [49] encontraram diagramas de fase dinâmica para $\Omega/2\pi = 0.1$ e $\Omega/2\pi = 1$, que apresentam características semelhantes. O sistema apresenta as regiões ferromagnética F , paramagnética P e a região de coexistência entre essas fases $P + F$ e o ponto tricrítico, veja a Figura 2.7. A baixa temperatura reduzida, o sistema apresenta a região mista que faz fronteiras com a região ferromagnética e paramagnética. Para grandes valores de T , existem apenas as regiões F

e P . O ponto tricrítico, onde as duas linhas de fronteira mesclam, existe para todo valor de Ω .

2.4.2 Aproximação de campo efetivo

Na aproximação de campo efetivo, efeitos de correlações são levados em consideração, possibilitando análises mais precisas. Num nível superior a aproximação de campo médio, Shi e colaboradores [65] desenvolveram a técnica do operador diferencial na aproximação de campo efetivo, aplicada inicialmente para descrever modelos de spins no equilíbrio. Para solucionar esse problema, Eq.(2.36), usaremos uma técnica desenvolvida há quarenta anos atrás por Honmura e Kaneyoshi [66], que tem sido muito aplicada em modelos estatísticos no regime estático denominado de técnica do operador diferencial. A idéia é simples e tem como ponto de partida o uso da seguinte identidade

$$\exp(\alpha D_x) f(x) = f(x + \alpha), \quad (2.38)$$

onde $D_x = \frac{\partial}{\partial x}$ é o operador diferencial em relação a variável x e $f(x)$ uma função analítica. Seja a função $F(x) = \tanh(x + \beta H)$, usando a identidade da técnica do operador diferencial, mostra-se

$$e^{\alpha D_x} F(x)|_{x=0} = \tanh(\alpha + \beta H) \quad (2.39)$$

onde podemos assumir que $\alpha = K \sum_{\delta} \sigma_{i+\delta}$. Com este resultado, a Eq(2.36) poderá ser reescrita na forma

$$\tau \frac{d}{dt} m(t) = -m(t) + \prod_{\delta}^z \langle e^{K D_x \sigma_{i+\delta}} \rangle F(x)|_{x=0}. \quad (2.40)$$

Utilizando a identidade da cinemática dos spins (Van der Waerdan) $e^{\lambda \sigma_{i+\delta}} = \cosh(\lambda) + \sigma_{i+\delta} \sinh(\lambda)$ ($\sigma_i \pm 1$), a Eq.(2.40) ficará escrita na forma

$$\tau \frac{d}{dt} m(t) = -m(t) + \prod_{\delta}^z \langle (\cosh(K D_x) + \sigma_{i+\delta} \sinh(K D_x)) \rangle F(x)|_{x=0} \quad (2.41)$$

Esta expressão, Eq.(2.41), é exata, e de difícil manipulação matemática, pois envolve funções de correlação que não conhecemos a priori. Para contornar este obstáculo aplica-se a aproximação de Zernike, isto é, $\langle \sigma_i \sigma_j \dots \sigma_l \rangle \simeq \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \dots \langle \sigma_l \rangle$ ($i \neq j \neq \dots \neq l$), de modo que a expressão para a evolução temporal da magnetização ficará escrita na seguinte forma aproximada (EFT - *effective field theory*)

$$\tau \frac{d}{dt} m(t) = -m(t) + [\cosh(K D_x) + m \sinh(K D_x)]^z F(x)|_{x=0} \quad (2.42)$$

onde $m = \langle \sigma_{i+\delta} \rangle$ e z é o número de coordenação. Vale a pena mencionar, que nesta aproximação de campo efetivo, os resultados quantitativos são superiores aos obtidos por MFA, uma vez que as auto-correlações (i.e., $\langle \sigma_i^2 \rangle = 1$) foram tratadas de forma exata quando usamos a identidade de spin de Van Der Waerden, já o campo médio trata esta auto-correlação de forma aproximada (i.e., $\langle \sigma_i^2 \rangle \approx m^2$), que é refletida na troca da média da tangente hiperbólica pela tangente hiperbólica da média.

Para uma rede cúbica simples ($z = 6$), expandindo a Eq.(2.42) e fazendo algumas manipulações algébricas, usando a propriedade da Eq.(2.39), obtemos

$$\Omega \frac{dm(t)}{d\xi} = -m(t) + A_1(T, h)m + A_3(T, h)m^3 + A_5(T, h)m^5 \quad (2.43)$$

onde $\xi = \omega t$, $T = (\beta J)^{-1}$, $h = H_0/J$, $\Omega = \omega \tau$, $F(x) = \tanh(x + h \sin \xi)$ e $A_p(T, h) = \frac{6!}{p!(6-p)!} \cosh^{6-p}(KD_x) \sinh^p(KD_x) F(x)|_{x=0}$ funções que podem ser facilmente calculadas empregando a relação $\exp(\alpha D_x)g(x) = g(x + \alpha)$.

Expandindo a Eq.(2.37) numa série de potências da magnetização m , obtemos uma expressão semelhante ao resultado da Eq.(2.43), sendo que agora temos uma série infinita na MFA. O procedimento numérico para resolver a Eq.(2.43) é semelhante ao usado para resolver a equação diferencial de campo médio Eq.(2.37). Por meio onde através do cálculo do expoente de Lyapunov podemos estudar a transição de fase dinâmica no plano $T - H_0$. Os resultados são semelhantes aos obtidos usando-se MFA, por isto omitimos apresentar estes resultados.

Todas as ferramentas matemática e numérica usadas no modelo de Ising cinético, isto é, método de Runge-Kutta, cálculo do expoente de Lyapunov, MFA, e EFT, serão também usadas para estudar a dinâmica de três modelos nos próximos capítulos.

2.5 Conclusões

Estudamos a transição de fase dinâmica do modelo de Ising de spin-1/2 na presença de um campo oscilante, onde usamos a dinâmica de Glauber para descrever a evolução temporal da magnetização. O expoente de Lyapunov foi numericamente obtido a fim de analisar a estabilidade do sistema. Uma expressão exata foi derivada na forma de equação diferencial para a magnetização, onde funções de correlações acopladas estão presentes. Desejando obter a evolução temporal para $m(t)$ desacoplamos estas funções de correlações através de duas aproximações: no caso da aproximação de campo médio (MFA) todas as

correlações foram desacopladas, inclusive as auto-correlações (i.e., $\langle \sigma_i^2 \rangle \approx m^2$), enquanto na teoria de campo efetivo (EFT) as auto-correlações são tratadas exatamente através do uso da identidade de spin de Van der Waerden, mas as correlações entre diferentes spins foram também desacopladas $\langle \sigma_i \sigma_j \dots \sigma_l \rangle \approx \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \dots \langle \sigma_l \rangle$ ($i \neq j \neq \dots \neq l$). Dependendo dos valores da temperatura e da amplitude do campo magnético, dada a condição inicial, o sistema pode evoluir para o valor médio da magnetização nulo (estado paramagnético), valor diferente de zero (estado ferromagnético) ou para um estado misto $P + F$ que é caracterizado pela coexistência dos dois estados. Este estado misto aparece por causa da aproximação usada, pois, recentemente, Devirem e Albayrak [68] utilizaram a aproximação de Bethe-Peierls e mostraram que apenas os estados F e P estão presentes, inexistindo assim esta fase mista. Um tratamento mais elaborado pode ser usado na técnica do operador diferencial para desacoplar as funções de correlações, levando em consideração algumas flutuações.

Capítulo 3

Dinâmica e estática do modelo de Ising com campo aleatório

3.1 Introdução

O interesse por modelos cinéticos tem sido bastante intenso na física estatística e física da matéria condensada. Isso porque a maioria dos fenômenos físicos na natureza apresentam comportamentos fora do equilíbrio. Neste Capítulo, estudaremos a transição de fase e o comportamento do parâmetro de ordem (dinâmico e estático) de um sistema ferromagnético representado pelo modelo de Ising com campo aleatório. Usaremos uma distribuição de probabilidade bimodal para o campo aleatório e o comportamento do sistema será descrito pela dinâmica de Glauber

O modelo de Ising com campo aleatório (RFIM) tem sido bastante estudado nos últimos 30 anos. Entretanto, uma série de resultados teóricos e numéricos não foram esclarecidos até o momento. Entre estes estão a existência ou não de um ponto tricrítico no diagrama de fases, a influência da distribuição de probabilidade no comportamento da transição de fase, etc. O modelo representa um sistema ferromagnético com N spins. Seus estados microscópicos do sistema serão representados por $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$, sendo σ_i uma variável de spin no sítio i , que pode assumir valores ± 1 . O modelo corresponde ao termo de Ising com um campo externo aplicado em cada sítio, que é descrito pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - \sum_i H_i \sigma_i \quad (3.1)$$

onde $J > 0$ é a constante de troca ferromagnética, $\langle i, j \rangle$ denota interação entre pri-

meiros vizinhos e H_i é um campo aleatório cujos valores em diferentes sítios são descorrelacionados e são escolhidos de acordo com uma distribuição $P(H_i)$, simétrica em torno de $H_i = 0$ e tal que $\langle H_i \rangle_c = 0$. Aqui $\langle \dots \rangle_c$ representa a média configuracional sobre a desordem. No estudo deste modelo ao longo do tempo, foram empregados vários tipos de distribuição de probabilidade (Por exemplo: gaussiana, bimodal, etc.)

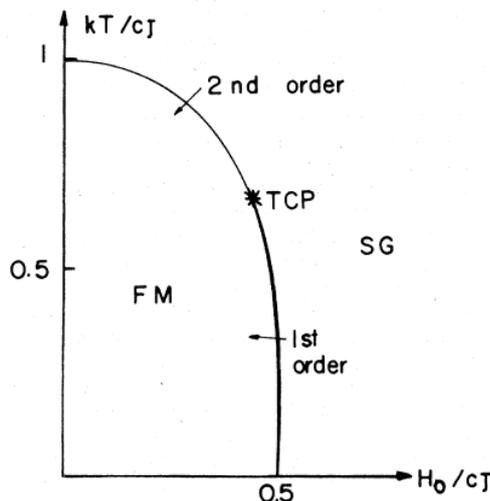


Figura 3.1: Diagrama de fase no plano $T - H$ do RFIM, obtido por Aharony [76] usando aproximação de campo médio. O c representa o número de coordenação.

O RFIM foi inicialmente introduzido na literatura por Imry e Ma [75]. Desde então as propriedades da transição de fase de equilíbrio foram estudadas usando diferentes métodos [76]-[93], mas a transição de fase dinâmica, ou de não equilíbrio, deste modelo não foi muito explorada. O efeito do campo aleatório induz frustração no sistema, pois existe competição entre as interações de troca que tendem a alinhar os spins ferromagneticamente, e os campos aleatórios, que tendem a direcionar os spins na mesma direção do campo local, caso efeito na realidade é introduzir desordem no sistema.

Do ponto de vista teórico, e a nível de campo médio, é bem conhecido que diferentes distribuições de probabilidades para os campos aleatórios produzem distintos diagramas de fases. Usando uma distribuição bimodal, que corresponde a soma de suas funções deltas de Dirac (mesmos pesos $1/2$) localizadas em campos simétricos ($\pm H$), o diagrama de fase no plano $T - H$ exibe transições de segunda ordem, na região de baixos valores de campo ($H < H_t$, H_t é o valor do campo no ponto tricrítico -PTC), e de primeira ordem na região de altos valores de campo ($H > H_t$). Separando estas duas linhas de transições de fases existe um PTC [76] (ver Figura 3.1). Quando usamos uma distribuição

gaussiana, centrada em $H = 0$, apenas transições contínuas são obtidas no diagrama de fase [77]. Tem-se argumentado que quando uma distribuição simétrica analítica para os campos apresenta um mínimo em campo nulo, espera-se um PTC.

No caso do RFIM com interação de curto-alcance, a existência do PTC não está ainda completamente elucidada. Originalmente, o primeiro estudo de expansão em séries de altas temperaturas [78] que tratou o RFIM numa rede cúbica simples, com distribuição gaussiana, encontrou a existência de uma transição de fase de primeira ordem na região de baixas temperaturas. Outro estudo de expansão em séries [79] indicou transição de fase contínua na região de baixos valores do campo. Portanto, numa especulação usando expansão em série espera-se um PTC no diagrama de fase, mas a limitação do método limita-se apenas a estudar a transição de fase nas regiões de altas e baixas temperaturas. Estudos mais elaborados de expansão em séries [80] têm indicado a existência de PTC para cada tipo de distribuição de probabilidade dos campos. As coordenadas do PTCs encontradas foram: $(\frac{H_t}{zJ} \equiv h_t = 0.28 \pm 0.01, \frac{k_B T_t}{zJ} \equiv \tau_t = 0.49 \pm 0.03)$ para a bimodal e $(\sigma_t = 0.36 \pm 0.01, \tau_t = 0.36 \pm 0.04)$ para a distribuição gaussiana de largura σ numa rede cúbica simples ($z=6$). Na aproximação de campo médio [76], o PTC existe apenas com o uso da distribuição bimodal, que é localizado no diagrama de fase em $(h_t = \frac{2}{3} \tanh^{-1}(\frac{1}{\sqrt{3}}) \simeq 0.439, \tau_t = \frac{2}{3})$. Simulação Monte Carlo numa rede cúbica simples [81], usando distribuição gaussiana, não levou a uma conclusão definida a respeito da natureza da transição de fase do RFIM. Porém, algumas realizações de aleatoriedade dos campos, através do histograma da magnetização, geraram as vezes dois picos caracterizando uma transição de fase contínua, enquanto outros valores geraram três picos, implicando uma transição de primeira ordem. Em $T = 0$, Middleton e Fisher [82] usando distribuição similar sugeriram uma transição de primeira ordem com pequeno expoente crítico $\beta = 0.017(5)$. Fytas e colaboradores [83], usando o esquema entrópico de Wang-Landau e Lee no RFIM com distribuição bimodal, numa rede cúbica simples. Fixando $\frac{H}{J} = 2.0$ e $\frac{H}{J} = 2.25$, eles aplicaram o método da barreira de energia de Lee-Kosterlitz e concluíram que seus resultados indicam uma transição de fase contínua. Numa análise mais detalhada da simulação, Hernández e colaboradores [84] encontraram um *crossover* entre transições de primeira e segunda ordem em temperatura e campo finitos para a distribuição, indicando, assim, a existência de um PTC.

Fishman e Aharony [85] mostraram que o modelo de Ising antiferromagnético com

interação de troca aleatória e na presença de um campo uniforme H é equivalente ao RFIM com o valor do campo aleatório linearmente proporcional a magnetização induzida. Outro resultado também interessante, encontrado por Galam [86], via campo médio (MFA), foi que o modelo de Ising antiferromagnético, em um campo uniforme com diluição por sítio ou ligação na interação de troca, tem o mesmo comportamento multicrítico do RFIM com distribuição bimodal. Galam e Aharony[94], numa série de investigações, apresentaram uma análise detalhada, via MFA e grupo de renormalização (GR), de um sistema constituído de spins clássicos com n -componentes (escolheram $n = 3$), numa rede d -dimensional, de um ferromagneto uniaxialmente anisotropia na presença de um campo aleatório com distribuição simétrica bimodal sem e com um campo magnético uniforme. A anisotropia uniaxial e os campos foram escolhidas ao longo do eixo de fácil magnetização, onde a interação de troca tem a forma $J^{(2)} = aJ$ com $J^{(1)} = J^{(3)} = J$ e o parâmetro de anisotropia $a \in [0, 1]$. Dependendo do valor da anisotropia, uma variedade de fases (longitudinal, transversal e paramagnética), pontos multicríticos (bicrítico, crítico terminal, tricrítico) e interseções destes pontos estão presentes no diagrama de fases. Baseado nesta investigação preliminar, Galam [95] propôs um modelo (campo aleatório diluído) a fim de reproduzir alguns dos diagramas de fases experimentais dos compostos magnéticos $X(CN)_xY_{1-x}$ ($X = k, Na, Rb$, metal alcalino e $Y = Br, Cl, I$, halogênio esférico). A transição ferroelástica do cristal puro XCN desaparece para um certo valor crítico de concentração x_c e seu valor numérico depende dos elementos X e Y usados. O modelo teórico usado foi o RFIM com diluição e uma distribuição de probabilidade trimodal do campo aleatório ¹. Usando MFA, Galam conseguiu prever transições de primeira e segunda ordem com a interferência do PTC com respeito a concentração. Os campos aleatórios foram necessários por que existiu evidência experimental de que abaixo de x_c a orientação do cristal desaparece, e estes campos foram usados para fixar esta orientação. O valor da concentração (p) da distribuição trimodal bem como a concentração crítica x_c foram expressos em termos de quantidades microscópicas.

Recentemente, a distribuição bimodal assimétrica para os campos aleatórios tem sido

¹No estudo da transição de fase do RFIM diversos tipos de distribuição de probabilidades têm sido usadas. Uma generalização consiste na distribuição trimodal dada por

$$P(H_i) = p[\delta(H_i - H) + \delta(H_i + H)] + q\delta(H_i),$$

onde $p + q = 1$.

estudada em detalhe [96]. Ela possui a forma

$$P(H_i) = p\delta(H_i - H) + (1 - p)\delta(H_i + H) \quad (3.2)$$

onde p é a fração de sítios na rede que tem um campo magnético H , enquanto o resto dos sítios da rede tem um campo $-H$. A distribuição bimodal simétrica usual corresponde ao caso particular $p = 1/2$, que na aproximação de campo médio apresenta um PTC no diagrama de fases.

No caso assimétrico, $p \neq 1/2$, Hadjiagapiou [96] mostrou que para pequenos e grandes valores de p , $p < p_{1c}$ e $p > p_{2c}$ (onde $p_{1c} = \frac{13-\sqrt{13}}{26}$ e $p_{2c} = \frac{13+\sqrt{13}}{26}$), respectivamente, apenas transições de fases contínuas são observadas. Em contraste, para $p_{1c} \leq p \leq p_{2c}$ existe um PTC e, conseqüentemente, transições de primeira e segunda ordem. Comportamento reentrante também foi observado para certos valores de p e H , bem como um perfil de magnetização complexa com respeito ao campo aleatório H . A distribuição trimodal do campo aleatório também foi investigado por Hadjiagapiou [97], e uma outra generalização é usar a distribuição bimodal assimétrica com campos diferentes, ou seja,

$$P(H_i) = p\delta(H_i - H) + (1 - q)\delta(H_i + \lambda H), \quad (3.3)$$

onde $\lambda \in [0, 1]$ é o razão entre os dois campos nas direções opostas. No caso $\lambda < 0$ os dois campos estarão atuando na mesma direção e não haverá competição, conseqüentemente, não ocorrerá transição de fase uma vez que teremos um ferromagneto na presença de um campo magnético [98].

Outra escolha para a distribuição de probabilidade dos campos aleatórios é a dupla gaussiana [99], dada por

$$P(H_i) = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \left\{ \exp \left[-\frac{(H_i - H)^2}{2\sigma^2} \right] + \exp \left[-\frac{(H_i + H)^2}{2\sigma^2} \right] \right\}, \quad (3.4)$$

onde no limite $\sigma \rightarrow 0$, a Eq.(3.4) reduz-se a distribuição bimodal simétrica. O diagrama de fases no plano $T - H$ apresenta diversos pontos multicríticos dependendo do valor das larguras σ das gaussianas .

Por outro lado, outro aspecto intrigante no estudo do RFIM está relacionado com a dimensionalidade crítica inferior d_l . Acima dela ($d > d_l$) o modelo apresenta ordem de longo-alcance em baixas temperaturas ($T < T_c(H)$). Um argumento heurístico introduzido por Imry e Ma [75], sugere que $d_l = 2$. Para campos aleatórios suficientemente fortes (i. e., $|H_i| \gg J$), o spin em cada sítio apontará na direção do campo neste sítio, de modo

que não será possível nenhum alinhamento ferromagnético em qualquer dimensão d . Entretanto, para os campos aleatórios pequenos (i. e., $|H_i| \ll J$), espera-se a ocorrência de uma fase ordenada de baixa temperatura acima da dimensão crítica $d_l = 2$. O argumento usado por Imry e Ma foi o seguinte: Considere um domínio de spins de tamanho L tal que a magnetização (spins para baixo) é oposta àquela da amostra (spins para cima), na presença de campos pequenos e em $T = 0$. O custo de energia na troca da parede de domínio é proporcional a área da parede, isto é, $\Delta E \sim JL^{d-1}$, enquanto que o ganho na energia do campo para que os spins vençam as tendências dos campos e apontem na direção oposta é resultante das flutuações estatísticas, sendo proporcional a raiz quadrada do número total de sítios no domínio, isto é, $\Delta E_H \sim H(L^d)^{1/2}$. A troca de energia total é então

$$\Delta E_T \sim JL^{d-1} - HL^{d/2}. \quad (3.5)$$

Para $d > 2$, $\Delta E_T > 0$ para L grande, e o estado fundamental ferromagnético é estável, impedindo a formação de grandes domínios. Quando $d < 2$, ΔE_H domina e o estado fundamental ferromagnético é instável, permitindo que o sistema se divida em domínios, de tal modo que ordens de longo alcance sejam destruídas. Desta forma, especulou-se que $d_l = 2$. Note, entretanto, que este argumento não se aplica para $d = 2$.

No caso da dimensionalidade crítica superior d_c , teremos a mesma classe de universalidade do campo médio se $d \geq d_c$. Cálculos perturbativos [100] encontram $d_c = 6$ para o RFIM, de modo que numa expansão em $\epsilon = 6 - d$ sugere que os expoentes críticos do problema de campo aleatório em d -dimensões são idênticas àquelas do sistema puro em $d - 2$ dimensões. Sendo a dimensionalidade crítica inferior do modelo de Ising puro $d_l = 1$, então a dimensão crítica do RFIM seria $d_l = 3$, caso a expansão valha até ai. Existem, entretanto, cálculos fenomenológicos rigorosos [101] que demonstram a ocorrência de transição de fase em $d = 3$. Por outro lado, Frontera e Vives [102] mostraram que o RFIM em duas dimensões com distribuição de probabilidade gaussiana para os campos aleatórios exibe ordem em $T = 0$. Recentemente, o RFIM em duas dimensões tem sido estudado por diversas técnicas e os autores encontraram a existência de uma transição de fase para as redes honeycomb ($z=3$) e quadrada ($z=4$).

Borges e Silva [87] estudaram o RFIM usando EFT e mostraram que não existe PTC no diagrama de fase deste modelo na redes $2d$ ($z = 3, 4$). Mielnicki [103] estudou o RFIM numa rede quadrada, com distribuição de probabilidade gaussiana, e mostrou que

o sistema apresenta PTC e comportamento reentrante. Albuquerque e colaboradores [88] estudaram o RFIM numa rede honeycomb usando EFT no aglomerado com $N=3$ spins e mostraram que não existe PTC e que a temperatura crítica $T_c(H)$ decresce monotonamente com o aumento da intensidade do campo (variância da distribuição), apresentando um comportamento reentrante ao redor do campo $\frac{H_c}{J} = 1.0$. Usando uma aproximação mais elaborada, Yuksel e colaboradores [103] verificaram a existência de PTC e comportamento reentrante no RFIM na rede honeycomb. Este resultado controverso da existência ou não de PTC no RFIM em redes $2d$ é um problema em aberto que deve ser elucidado por outras metodologias.

A formulação atual do modelo baseado em campos locais atuando nos sítios da rede com intensidades aleatórias descritas por uma distribuição de probabilidade, foi introduzido pela primeira vez por Larkin [104] para supercondutores e depois generalizado por Imry e Ma [75] para sistemas magnéticos. Protótipos de realizações experimentais do RFIM são compostos antiferromagnéticos diluídos, tais como, $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$ [105, 106], $\text{Rb}_2\text{Co}_x\text{Mg}_{1-x}\text{F}_4$ [107], $\text{Co}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$ [108] e $\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$ [109], na presença de um campo magnético uniforme. Em particular, o composto de $\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$ apresenta um comportamento tipo vidro de spin para baixas concentrações $x < 0.55$ e é considerado um RFIM no regime de altas concentrações magnéticas. No regime RFIM este composto apresenta um comportamento curioso: apresenta uma transição de primeira ordem que se transforma em uma transição contínua quando mudamos a intensidade do campo [110]. Porém, a comparação entre resultados teóricos e experimentais têm sido inconclusiva por causa da dificuldade de equilibrar o sistema experimental, por isto a motivação de estudar este modelo fora do equilíbrio.

O estudo de modelos fora do equilíbrio, como o caso do Hamiltoniano (RFIM) (3.1) revela muitos fenômenos interessantes, com uma rica variedade de transições de fases e fenômenos críticos. O conhecido resultado discutido [42] revela que o comportamento crítico não é universal, mas geralmente depende aparentemente dos detalhes irrelevantes na dinâmica, semelhante a difusão de impurezas, isto é, as propriedades da distribuição das variáveis aleatórias e a taxa de transição escolhida. Desta maneira, modelos fora do equilíbrio podem ser relevantes na descrição teórica dos materiais magnéticos.

Anos atrás Paula e Figueiredo [113] estudaram o RFIM fora do equilíbrio, onde para descrever teoricamente as propriedades fora do equilíbrio utilizaram a dinâmica de Glauber.

Aplicando a aproximação de campo médio, o diagrama de fase no plano $T - H$ foi obtido e comparado com a solução de campo médio [76]. Eles mostraram que a linha de primeira ordem, obtida usando a dinâmica (solução estacionária) e o equilíbrio são diferentes. No estado fundamental ($T = 0$) foram encontrados $\frac{H_c}{J} = 6.0$ e $\frac{H_c}{J} = 3.0$ usando a dinâmica e a estática, respectivamente. Existe alguma controvérsia com relação a transição de fase em baixas temperaturas, mas simulação de Monte Carlo recente [111] numa rede cúbica simples de tamanho $L = 60$, sugeriu a ocorrência de uma transição de primeira ordem, com um ponto tricrítico no diagrama de fase. Em $T = 0$ obteve-se o valor $\frac{H_c}{J} \simeq 4.0$. Estes diferentes valores de H_c em comparação aos resultados de Monte Carlo podem ser atribuídos a aproximação de campo médio. Levando em consideração correlações, Costabile e de Sousa [112] desenvolveram a técnica do operador diferencial na aproximação de campo efetivo (EFT) e mostraram que as linhas de primeira ordem diferem usando a dinâmica (Glauber) e estática, e que ambas terminam em $T = 0$ no ponto $\frac{H_c}{J} = 4.0$. Na próxima seção desenvolveremos os cálculos da MFA e EFT no modelo de RFIM dinâmico.

3.2 Modelo de Ising estático com campo aleatório

3.2.1 Solução na aproximação de campo médio

Uma forma “elegante” de solucionar o modelo na aproximação de campo médio, é fornecida pelo princípio variacional baseado na desigualdade de Peierls-Bogoliubov que se apóia em argumentos de convexidade. Para qualquer sistema clássico ou quântico, podemos escrever a seguinte desigualdade:

$$G(\mathcal{H}) \leq G_0(\mathcal{H}_0) + \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle \quad (3.6)$$

onde $G(\mathcal{H})$ e $G_0(\mathcal{H}_0)$ são energias livres associadas a dois sistemas definidos pelos Hamiltonianos \mathcal{H} e \mathcal{H}_0 , respectivamente. A média térmica deve ser tomada em relação a uma distribuição canônica associada ao Hamiltoniano \mathcal{H}_0 . Neste caso, devido o modelo apresentar uma aleatoriedade no campo, tem-se que a desigualdade de Peierls-Bogoliubov é escrita como $G(\mathcal{H}) \leq \langle G_0(\mathcal{H}_0) \rangle_c + \langle \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle \rangle_c$. Escolhemos um Hamiltoniano de tentativa não-interagente na forma

$$\mathcal{H}_0 = -\eta \sum_{i=1}^N \sigma_i + \sum_{i=1}^N \sigma_i H_i \quad (3.7)$$

onde η é um parâmetro variacional a determinar.

A função de partição e a energia livre para o hamiltoniano \mathcal{H}_0 , respectivamente, são dados por

$$Z_0 = \text{tr} e^{-\beta \mathcal{H}_0} = \prod_{i=1}^N 2 \cosh [\beta(\eta + H_i)] \quad (3.8)$$

e

$$G(\mathcal{H}_0) = -\frac{1}{\beta} \ln(Z_0) = -\frac{1}{\beta} \sum_{i=1}^N \ln [2 \cosh [\beta(\eta + H_i)]] . \quad (3.9)$$

Usando a definição de média configuracional e o fato que as variáveis aleatórias são independentes entre si, encontramos

$$\langle G(\mathcal{H}_0) \rangle_c = -\frac{N}{2\beta} \{ \ln [2 \cosh [\beta(\eta + H)]] + \ln [2 \cosh [\beta(\eta - H)]] \} . \quad (3.10)$$

O segundo termo da desigualdade, a média da diferença de energia, é dado por

$$\langle \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle \rangle_c = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \langle \langle \sigma_i \sigma_j \rangle \rangle_c + \eta \sum_i \langle \langle \sigma_i \rangle \rangle_c \quad (3.11)$$

Na teoria de campo médio, consideramos que $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle \simeq \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle$ e $\langle \sigma_i^2 \rangle \simeq \langle \sigma_i \rangle^2$. Portanto, temos que

$$\langle \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle \rangle_c = -J \frac{zm^2 N}{2} + \eta Nm \quad (3.12)$$

onde $m \equiv \langle \langle \sigma_i \rangle \rangle_c$. De posse desses resultados, a energia livre do sistema pode ser escrita como

$$G(\mathcal{H}) = -\frac{N}{2\beta} \{ \ln [2 \cosh [\beta(\eta + H)]] + \ln [2 \cosh [\beta(\eta - H)]] \} - \frac{JNzm^2}{2} + \eta m N \quad (3.13)$$

No mínimo de energia, isto é, $\frac{\partial G}{\partial m} = 0$ e $\frac{\partial G}{\partial \eta} = 0$, obtemos, respectivamente,

$$\eta = Jzm \quad (3.14)$$

e

$$m = \frac{1}{2} \left\{ \tanh \left[\frac{1}{T} (zm + h) \right] + \tanh \left[\frac{1}{T} (zm - h) \right] \right\} . \quad (3.15)$$

onde $T^{-1} = \beta J$ e $h = H/J$. Esta Eq.(3.15) representa o parâmetro de ordem, a magnetização, para o sistema ferromagnético. A energia livre por partícula pode ser reescrita na forma

$$G(m, T)/J = -\frac{T}{2} \left\{ \ln \left[2 \cosh \left[\frac{1}{T} (zm + h) \right] \right] + \ln \left[2 \cosh \left[\frac{1}{T} (zm - h) \right] \right] \right\} + \frac{zm^2}{2} . \quad (3.16)$$

Resolvendo numericamente as Eqs.(3.15) e (3.16) pelo método de Newton-Raphson, encontra-se o diagrama de fase do sistema no equilíbrio termodinâmico, que é garantido pela construção de Maxwell, igualando-se as energias livres nas fases desordenada \mathbf{P} ($m = 0$) e ordenada \mathbf{F} ($m \neq 0$) (ver Figura 3.5).

3.2.2 Solução na aproximação de campo Efetivo

Nesta seção vamos considerar o modelo de Ising com campo aleatório, representado pelo Hamiltoniano (3.1) sujeito a distribuição bimodal dada por

$$\mathcal{P}(H_i) = \frac{1}{2}\delta(H_i - H) + \frac{1}{2}\delta(H_i + H) \quad (3.17)$$

onde H é a magnetude do campo aleatório.

O ponto de partida para o desenvolvimento da teoria de campo efetivo, consiste no uso da seguinte identidade:

$$\langle O\{N\} \rangle = \left\langle \frac{Tr_{\{N\}} O(\{N\}) e^{-\beta \mathcal{H}_N}}{Tr_{\{N\}} e^{-\beta \mathcal{H}_N}} \right\rangle \quad (3.18)$$

onde $Tr_{\{N\}}$ corresponde ao traço parcial realizado numa base composta de N spins (aglomerado), que é descrito pelo Hamiltoniano \mathcal{H}_N neste aglomerado finito e $O\{N\}$ é um observável contendo variáveis de spin deste aglomerado.

Para um aglomerado com um spin central σ_i , o Hamiltoniano Eq.(3.1) pode ser escrito da seguinte forma

$$\mathcal{H}_i = -J\sigma_i \sum_{\delta}^z \sigma_{i+\delta} - \sigma_i H_i \quad (3.19)$$

onde z é o número de coordenação. O valor médio da variável de spin σ_i é

$$m_i = \left\langle \frac{\sum_{\sigma_i} \sigma_i e^{\beta H_i}}{\sum_{\sigma_i} e^{\beta H_i}} \right\rangle = \left\langle \tanh \left[\beta \left(J \sum_{\delta}^z \sigma_{i+\delta} + H_i \right) \right] \right\rangle. \quad (3.20)$$

onde $m_i = \langle \sigma_i \rangle$. O modelo é caracterizado por ter um campo aleatório com uma distribuição de probabilidade bimodal. Considera-se que o parâmetro de ordem deste sistema ferromagnético, a magnetização, seja uma média configuracional do valor esperado da variável de spin m_i . A média configuracional em um sítio k é definido por

$$\langle \langle \sigma_k \rangle \rangle_c = \int_{-\infty}^{\infty} \langle \sigma_k \rangle \mathcal{P}(H_k) dH_k. \quad (3.21)$$

Usando a distribuição de probabilidade bimodal para o campo H_i , Eq.(3.17), e a média da variável de spin em um sítio i , Eq.(3.20). Tomando a média configuracional para m_i ,

obtemos

$$m = \left\langle \frac{1}{2} \{ \tanh [\beta (a + H)] + \tanh [\beta (a - H)] \} \right\rangle \quad (3.22)$$

onde $m = \langle \langle \sigma_i \rangle \rangle_c$ e $a = J \sum_{\delta}^z \sigma_{i+\delta}$. A Eq.(3.22) representa o parâmetro de ordem para o sistema ferromagnético. No lado direito desta expressão temos uma média estatística das variáveis de spins vizinhas da variável de spin central presentes no argumento das funções hiperbólicas. Esta expressão é exata, no entanto de difícil manipulação, devido a inclusão de funções de correlações não conhecidas. Uma alternativa a essa dificuldade são os métodos aproximados.

A aproximação de campo efetivo é a segunda alternativa utilizada visando superar a dificuldade imposta pelas funções de correlações, na solução da Eq.(3.11), possibilitando análises mais precisas.

Usaremos a técnica do operador diferencial desenvolvida há quarenta anos atrás por Honmura e Kaneyoshi [66], que tem sido muito aplicada em modelos estatísticos no regime estático. A idéia é simples e tem como ponto de partida o uso da seguinte identidade:

$$\exp(\alpha D_x) f(x) = f(x + \alpha), \quad (3.23)$$

onde $D_x = \frac{\partial}{\partial x}$ é o operador diferencial em relação a variável x e $f(x)$ uma função analítica. Seja a função $F(x) = \frac{1}{2} [\tanh(x + \beta H) + \tanh(x - \beta H)]$ e usando a identidade dada pela Eq(3.23) mostramos

$$e^{\alpha D_x} F(x)|_{x=0} = \frac{1}{2} [\tanh(\alpha + \beta H) + \tanh(\alpha - \beta H)] \quad (3.24)$$

onde $\alpha = K \sum_{\delta} \sigma_{i+\delta}$. Com este resultado, a Eq(3.22) poderá ser reescrita na forma

$$m = \left\langle e^{K \sum_{\delta} \sigma_{i+\delta} D_x} F(x)|_{x=0} \right\rangle = \prod_{\delta}^z \langle e^{\lambda \sigma_{i+\delta}} \rangle F(x)|_{x=0}, \quad (3.25)$$

onde $\lambda = K D_x$. Utilizando a identidade da cinemática dos spins-1/2 (Van de Waerdan), i. e., $e^{\lambda \sigma_{i+\delta}} = \cosh(\lambda) + \sigma_{i+\delta} \sinh(\lambda)$, obtemos a expressão para a magnetização,

$$m = \prod_{\delta}^z \langle (\cosh(\lambda) + \sigma_{i+\delta} \sinh(\lambda)) \rangle F(x)|_{x=0} \quad (3.26)$$

Esta expressão, Eq.(3.26), é exata, mas de difícil manipulação matemática, pois envolve no lado direito funções de correlações que não conhecemos. Para contornar este obstáculo aplica-se a aproximação de Zernike, isto é, $\langle \sigma_i \sigma_j \dots \sigma_l \rangle \simeq \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \dots \langle \sigma_l \rangle (i \neq j \neq$

... $\neq l$), de modo que a magnetização ficará aproximada na teoria de campo efetivo (EFT) por

$$m = [\cosh(\lambda) + m \sinh(\lambda)]^z F(x)|_{x=0} \quad (3.27)$$

onde $m = \langle \sigma_{i+\delta} \rangle_c$. Consequentemente, a equação para a magnetização via teoria de campo efetivo é obtida. Para uma rede cúbica simples ($z = 6$), expandindo Eq.(3.27) e fazendo algumas manipulações algébricas encontramos a equação de estado

$$m = A_1(T, h)m + A_3(T, h)m^3 + A_5(T, h)m^5 \quad (3.28)$$

sendo $A_p(T, h) = \frac{6!}{p!(6-p)!} \cosh^{6-p}(KD_x) \sinh^p(KD_x) F(x)|_{x=0}$ funções que podem ser facilmente calculadas empregando a relação $\exp(\alpha D_x)g(x) = g(x + \alpha)$.

Na teoria de campo efetivo, ainda não se tem uma definição para obter a expressão para energia livre. Essa seria a razão de não termos uma análise mais interessante no estudos dos modelos de spins. Nesta dissertação, usaremos um funcional para a energia livre $\Psi(m)$, de tal forma que no mínimo de energia $\frac{d\Psi}{dm} = 0$, seja obtida a equação de estado para o sistema ferromagnético. Portanto, com o auxílio de Eq.(3.28) obtem-se o funcional para a energia livre, após integração [87]

$$\Psi(m, T, h) = \lambda_1(T, h) + \lambda_2(T, h) \left[(A_1 - 1) \frac{m^2}{2} + A_3 \frac{m^4}{4} + A_5 \frac{m^6}{6} \right] \quad (3.29)$$

onde $\lambda_{1,2}(T, h)$ são funções arbitrárias irrelevantes na análise da transição de fase.

A fim de encontrar o diagrama de fases no plano $T - H$, em especial a linha de primeira ordem (descontinuidade na magnetização), usaremos a Eq.(3.29) para a construção de Maxwell.

3.3 Modelo de Ising cinético com campo aleatório

As discussões das seções anteriores sempre se referiram a situações de equilíbrio macroscópico, descritas pelo formalismo do ensemble de Boltzmann-Gibbs. Nesta seção vamos retomar o problema, considerando a evolução temporal do sistema fora do equilíbrio. As generalizações do modelo de Ising, a princípio, não tem nenhuma dinâmica, pois os spins são escalares que não se sujeitam as regras quânticas de comutação. Conhecendo a natureza estocástica desses sistemas, é interessante escrever de saída uma equação mestra, justificada em termos probabilísticos, para a evolução temporal da probabilidade de

encontrar o sistema num determinado estado microscópico num dado instante de tempo t . No caso em que a evolução temporal não depende de toda a história anterior do sistema, processos markovianos, a equação mestra admite uma forma mais simples, que depende das probabilidades de transições entre estados microscópicos sucessivos, porém difíceis de serem obtidas. No entanto, pode-se construir uma equação mestra postulando formas plausíveis para as probabilidades de transição, garantindo que o sistema transite para o estado de equilíbrio no decorrer do tempo.

Neste dissertação, considera-se que o sistema evolui de acordo com a dinâmica estocástica de Glauber numa taxa de $1/\tau$ transições por unidade de tempo. Seja $P(\sigma, t)$ a probabilidade de o sistema estar em um estado microscópico σ , em um determinado tempo t . Se o sistema está em contato com um reservatório de calor a uma temperatura absoluta, a dependência temporal da função probabilidade que descreve a interação entre os spins e o banho térmico é governada pela seguinte equação mestra,

$$\frac{dP(\sigma, t)}{dt} = \sum_{\sigma'} [P(\sigma', t)\omega(\sigma', \sigma) - P(\sigma, t)\omega(\sigma, \sigma')] \quad (3.30)$$

onde $\omega(\sigma', \sigma)$ é a probabilidade de transição, por unidade de tempo, do estado $\sigma' = (\sigma'_1, \sigma'_2, \dots, \sigma'_N)$ mudar para o estado $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$. A expressão explícita para a probabilidade de transição $\omega(\sigma', \sigma)$ é obtida afim de satisfazer a equação do balanço detalhado, válida para tempos suficientemente grandes. Desta maneira, Glauber propôs

$$\omega(\sigma, \sigma') = \frac{1}{\tau} \frac{\exp[-\beta\Delta\mathcal{H}(\sigma, \sigma')]}{\sum_{\sigma'} \exp[-\beta\Delta\mathcal{H}(\sigma, \sigma')]} \quad (3.31)$$

onde $\beta = 1/k_B T$, k_B é constante de Boltzmann, $\sum_{\sigma'}$ é a soma sobre os dois valores possíveis da variável de spin $\sigma_i = \pm 1$ e $\Delta\mathcal{H}(\sigma, \sigma')$ dá a mudança na energia do sistema quando os spins σ_i evoluem, o qual pode ser encontrado manipulando-se a Eq.(3.1),

$$\Delta\mathcal{H}(\sigma, \sigma') = -J(\sigma'_i - \sigma_i) \sum_{\delta}^z \sigma_{i+\delta} + H_i(\sigma'_i - \sigma_i), \quad (3.32)$$

onde z é o numero de coordenação. Substituindo os valores possíveis σ_i na probabilidade de transição, obtem-se

$$\begin{cases} \omega(-1, +1) = \omega(+1, +1) = \frac{1}{\tau} \frac{1}{1+e^{-2\beta a}} \\ \omega(-1, -1) = \omega(+1, -1) = \frac{1}{\tau} \frac{e^{-2\beta a}}{1+e^{-2\beta a}} \end{cases} \quad (3.33)$$

onde $a = J \sum_{\delta}^z \sigma_{i+\delta} + H_i$. Observando-se a Eq.(3.33), conclui-se que $\omega(\sigma_i, \sigma'_i)$ não depende dos valores σ_i , podendo ser reescrita como $\omega(\sigma_i, \sigma'_i) = \omega(\sigma'_i)$ e a equação mestra se torna

$$\frac{dP(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N, t)}{dt} = \sum_{\sigma'} [P(\sigma'_1, \sigma'_2, \dots, \sigma'_N, t)\omega(\sigma_i) - P(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N, t)\omega(\sigma'_i)] \quad (3.34)$$

Desde que a soma das probabilidades seja normalizada e igual a um, e da média estatística para uma variável de spin σ_k , obtem-se

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_k \rangle (t) = \sum_{\{\sigma_k\}} \sigma_k \frac{d}{dt} P(\sigma, t) = -\frac{1}{\tau} \langle \sigma_k \rangle + \frac{1}{\tau} \langle \tanh(\beta a) \rangle \quad (3.35)$$

O modelo trabalhado apresenta uma campo aleatório com uma distribuição bimodal, Eq.(3.17). Portanto, torna-se necessário fazer uma média configuracional do campo aleatório. Tomando a média da Eq.(3.35) temos,

$$\frac{d}{dt} m(t) = -\frac{1}{\tau} m(t) + \frac{1}{\tau} \langle \langle \tanh(\beta a) \rangle \rangle_c \quad (3.36)$$

onde $m(t) = \langle \langle \sigma_k \rangle \rangle_c$. Usando Eq.(3.21) podemos reescrever o segundo termo da Eq(3.36) como

$$\tau \frac{d}{dt} m(t) = -m(t) + \left\langle \frac{1}{2} \{ \tanh[\beta(a+H)] + \tanh[\beta(a-H)] \} \right\rangle \quad (3.37)$$

Esta expressão, Eq.(3.37), descreve a evolução temporal do parâmetro de ordem dinâmico para o sistema ferromagnético. Ela é exata, no entanto de difícil manipulação, devido a inclusão de funções de correlações. Uma alternativa de se desviar dessa dificuldade são o métodos aproximados.

3.3.1 Solução estacionária na aproximação de campo médio

Na aproximação de campo médio, aproxima-se a média de $\tanh(K \sum_{\delta}^z \sigma_{i+\delta} \pm \beta H)$ como a média de $\tanh(Kzm(t) \pm \beta H)$, esta aproximação despreza todas as correlações dos spins. Assim, a Eq.(3.37) se torna uma equação auto-consistente para o parâmetro de ordem dinâmico que pode ser reecrita como,

$$\tau \frac{dm(t)}{dt} = -m(t) + \frac{1}{2} \left\{ \tanh \left[\frac{1}{T} (mz + h) \right] + \tanh \left[\frac{1}{T} (mz - h) \right] \right\}, \quad (3.38)$$

onde $T = (\beta J)^{-1}$ e $h = H/J$.

3.3.2 Solução estacionária na aproximação de campo efetivo

Nesta seção, o tratamento é o mesmo utilizado na seção (3.2.2). Repare que o segundo termo de Eq(3.37) é o mesmo na Eq(3.27). Portanto, usando-se a Eq.(3.37) tem-se que,

$$\tau \frac{dm(t)}{dt} = -m(t) + [\cosh(\lambda) + m \sinh(\lambda)]^z F(x)|_{x=0} \quad (3.39)$$

Para uma rede cúbica simples ($z = 6$), expandindo Eq.(3.39) e fazendo algumas manipulações temos

$$\tau \frac{dm(t)}{dt} = -m(t) + A_1(T, h)m + A_3(T, h)m^3 + A_5(T, h)m^5 \quad (3.40)$$

onde $T = (\beta J)^{-1}$, $h = H/J$ e $A_p(T, h) = \frac{6!}{p!(6-p)!} \cosh^{6-p}(KD_x) \sinh^p(KD_x) F(x)|_{x=0}$ funções que podem ser facilmente calculadas empregando a relação $\exp(\alpha D_x)g(x) = g(x + \alpha)$. Fixando $\tau = 1$, as soluções e uma discussão desta equação será apresentados na seção (3.4.2).

3.4 Resultados

3.4.1 Magnetização média e o expoente de Lyapunov

A expressão para a equação exata, Eq.(3.37), que descreve a evolução temporal do RFIM na aproximação de campo médio é dada por Eq.(3.38). A solução numérica desta equação para uma rede cúbica simples ($z=6$), em um conjunto de parâmetros (por exemplo, temperatura e campo aleatório externo) depende da condição inicial $m(0)$, e com o passar do tempo evolui para uma magnetização estacionária M , conforme ilustrado na Figura (3.2). Essa magnetização estacionária é definida como

$$M = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \left\{ \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} m(t) dt \right\}. \quad (3.41)$$

O comportamento de M em função da temperatura reduzida para vários valores de h são obtidos através do método numérico de diferença finita (ver apêndice A).

A Figura 3.3 mostra o comportamento da magnetização média para RFIM na aproximação de Campo médio em uma rede cúbica simples. Nesta figura, a linha mais cheia corresponde à M e a mais fina ao expoente de Lyapunov λ , que será calculado mais adiante. A Figura 3.3(a), representa a magnetização média dependente da temperatura

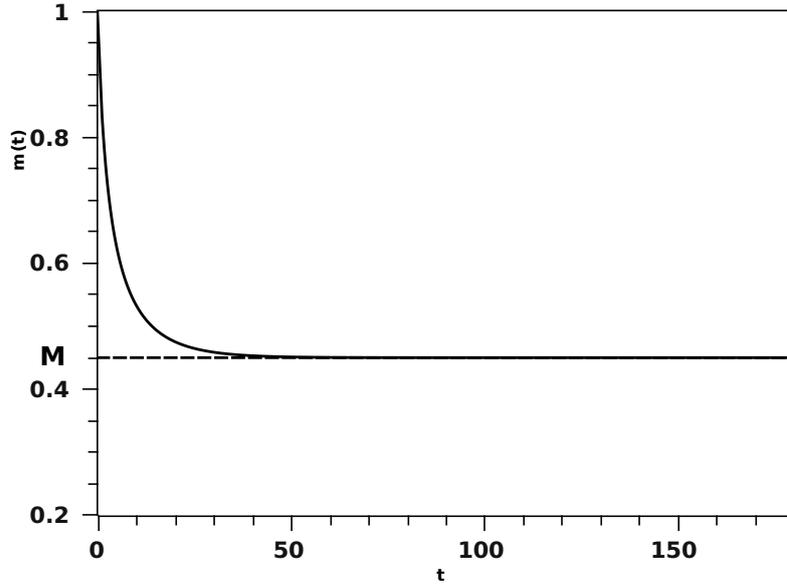


Figura 3.2: Evolução temporal da magnetização do RFIM numa rede cúbica simples obtida via MFA, para a temperatura reduzida $k_B T/J = 3,0$ e campo aleatório externo reduzido $H/J = 0,5$.

reduzida para $h = 3.5$. Neste caso M decresce para zero continuamente com o aumento da temperatura reduzida, e o sistema exibe uma transição de fase de segunda ordem em $T_c = 4.44$. A Figura 3.3(b) representa a magnetização média dependente da temperatura reduzida para $h = 2.5$. Neste caso, M decresce para zero descontinuamente com o aumento da temperatura. Assim uma transição de fase de primeira ordem ocorre em $T_t = 1.87$.

Uma outra grandeza importante em nosso estudo é o expoente de Lyapunov λ . Com o cálculo desse expoente é possível controlar e verificar as estabilidades das soluções. Se escrevermos a Eq.(3.37) como

$$\tau \frac{dm}{dt} = F(m, t). \quad (3.42)$$

Portanto, o expoente de Lyapunov λ é dado por

$$\tau \lambda = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \left\{ \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} \frac{\partial F}{\partial m} dt \right\} \quad (3.43)$$

e a solução será estável se $\lambda < 0$.

O expoente de Lyapunov funciona como um indicador da transição de fase. Ele é de grande importância na busca pelos pontos de transição de fases dinâmica, sendo possível construir o diagrama de fases dinâmico para o modelo. O comportamento do expoente de

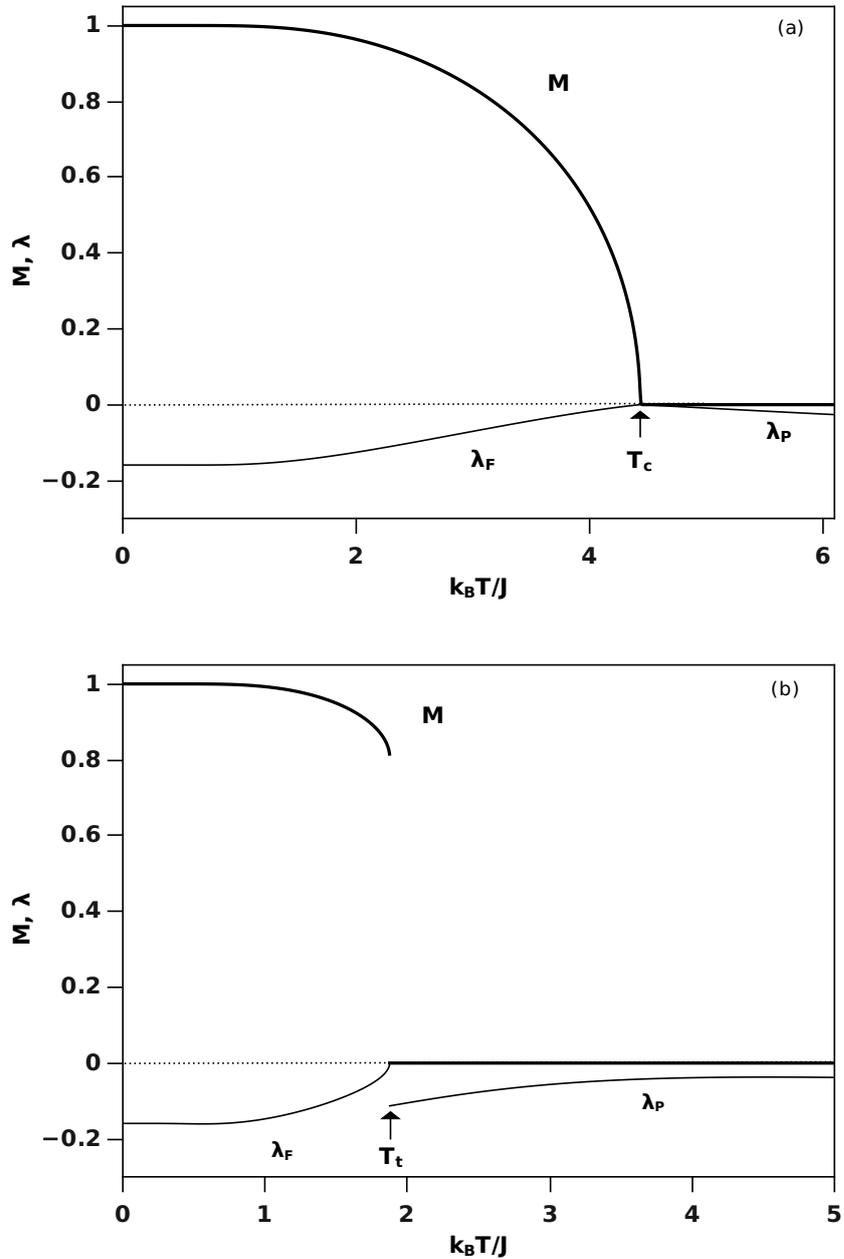


Figura 3.3: A dependência térmica da magnetização média (a linha sólida grossa) e dos expoentes de Lyapunov λ_F e λ_P (a linha sólida fina) para o RFIM na aproximação de campo médio e numa rede cúbica simples. λ_F está associado à fase ferromagnética e λ_P à fase paramagnética. T_t e T_c são as temperaturas de transição de fase de primeira e segunda ordem, respectivamente. (a) A transição de fase de segunda ordem para $h = 2.5$ ocorre em $T_t = 4.44$. (b) A transição de fase de primeira ordem para $h = 3.5$ ocorre em $T_c = 1.87$.

Lyapunov em função da temperatura reduzida para o RFIM na aproximação de campo médio (MFA) numa rede cúbica simples é mostrado nas Figuras 3.3(a)-(b), que são representadas por linhas finas. λ_F e λ_P são expoentes de Lyapunov associados as fases ferromagnética e paramagnética, respectivamente. Se λ_F e λ_P crescem para zero continuamente, a temperatura reduzida se aproxima da temperatura da transição de fase, a temperatura onde $\lambda_F = \lambda_P = 0$ é a temperatura da transição de fase de segunda ordem T_c . Por exemplo, na Figura 3.3(a) a temperatura de transição de segunda ordem ocorre quando $\lambda_F = \lambda_P = 0$, em $T_c = 4.44$, que é marcada por uma seta cheia. Por outro lado, se um λ crescer para zero continuamente e outro λ crescer para zero descontinuamente, a medida que a temperatura reduzida se aproxima da temperatura de transição de fase, a temperatura em que a descontinuidade ocorrer primeiro para um dos λ e outro $\lambda = 0$, é a temperatura de transição de fase de primeira ordem T_t . Por exemplo, na Figura 3.3(b) a descontinuidade ocorre para λ_P , a temperatura onde ocorre a descontinuidade é $T_t = 1.87$.

3.4.2 Diagramas de fases

Nesta dissertação, existe uma preocupação com os aspectos dinâmicos do RFIM, haja visto que a modelagem de sistemas dinâmicos ainda é um dos grandes desafios da comunidade científica. No entanto, os aspectos estáticos do modelo são bastante investigados na mecânica estatística do equilíbrio e são de grande importância na busca por um melhor entendimento de tais sistemas. Uma outra preocupação no desenvolvimento deste trabalho, é obter soluções para o modelo usando dois tipos de aproximações bastante conhecidas (MFA e EFT). Para uma melhor compreensão, organizamos os resultados em seções. Em cada seção abordou-se uma aproximação, e se descreveu o comportamento estático e dinâmico do parâmetro de ordem do modelo. Resolvendo a Eq.(3.38) numericamente com método de diferenças finitas, para uma rede cúbica simples $z = 6$, com $\tau = 1$, obtêm-se os comportamentos das magnetizações estacionárias M e os expoentes de Lyapunov λ em função da intensidade do campo aleatório para dois valores de temperatura reduzida, mostrado na Figura (3.4). Na curva (a), onde $k_B T/J = 5.0$, o parâmetro de ordem dinâmico apresenta uma descontinuidade com o aumento do campo aleatório, onde o sistema muda da fase ferromagnética para a fase paramagnética, enquanto na curva (b), em que $k_B T/J = 2.0$, o parâmetro de ordem tem um comportamento contínuo durante a transição de fase.

Com o auxílio do expoente de Lyapunov calcula-se o conjunto dos pontos da transição de fase dinâmica, pois em sistemas dinâmicos não é possível conhecer a energia livre do sistema. Assim é possível construir o diagrama de fase dinâmico para o modelo. Na Figura 3.5 é mostrado o diagrama de fase no plano $T - H$ do RFIM na aproximação de campo médio [113]. Ele compara o comportamento da solução de equilíbrio do sistema termodinâmico com a solução estacionária do sistema dinâmico descrito pela dinâmica de Glauber. Nos dois casos, têm-se uma linha de transição que separa uma fase ordenada (ferromagnética) de uma fase desordenada (paramagnética), que são de primeira e segunda ordens, delimitadas por um ponto tricrítico. A diferença entre as linhas de equilíbrio e estacionárias ocorrem na região de baixas temperaturas. No estado fundamental ($T=0$), o valor do campo aleatório reduzido no sistema em equilíbrio é $H_c/J = 3.0$, enquanto que no sistema dinâmico o valor é $H_c/J = 6.0$, gerando um certo conflito sobre o conceito de estados estacionários. Por outro lado, na linha crítica na região de baixos valores do campo H , as duas soluções (equilíbrio e estacionária) coincidem. Estes valores diferentes para H_c no estado fundamental podem ser atribuídos a aproximação (MFA) que despreza todos os tipos de correlações.

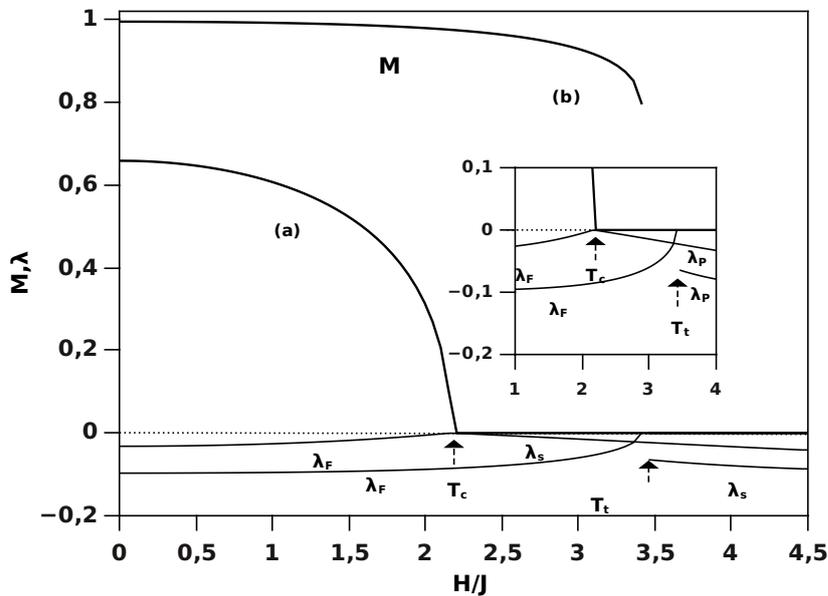


Figura 3.4: Comportamento da magnetização estacionária M como função do campo aleatório reduzido e o expoente de Lyapunov λ para o RFIM obtido via MFA [113] numa rede cúbica simples ($z=6$), para as temperaturas reduzidas: (a) $k_B T/J = 5.0$ e (b) $k_B T/J = 2.0$.

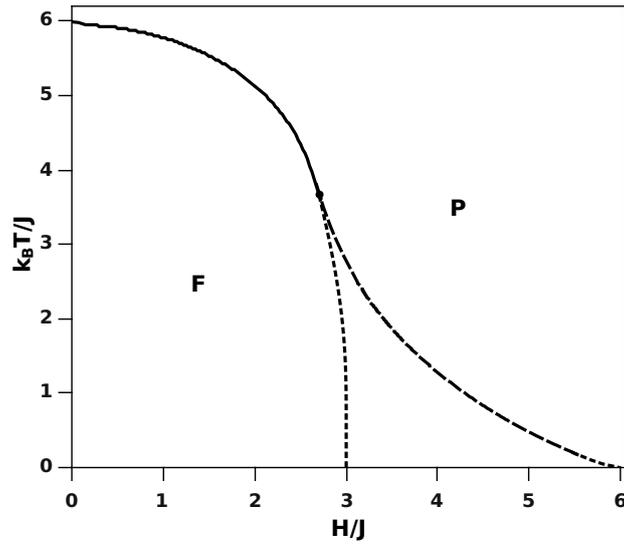


Figura 3.5: Diagrama de fase no plano $T - H$ para o RFIM na aproximação de campo médio numa rede cúbica simples. As linhas tracejadas, pontilhadas e sólidas correspondem a linhas de transição de primeira ordem fora do equilíbrio, primeira ordem no equilíbrio e segunda ordem, respectivamente. O ponto preto denota o ponto tricrítico (**PTC**).

Procedendo de forma parecida a da seção anterior resolvemos a Eq.(3.40) numericamente com o método de diferenças finitas numa rede cúbica simples ($z = 6$) e com $\tau = 1$. Obtivemos os comportamentos da magnetização estacionária M e do expoente de Lyapunov λ em função da intensidade do campo aleatório para dois valores de temperatura reduzida, mostrado na Figura (3.6). Na curva (a), onde $k_B T/J = 4.0$, o parâmetro de ordem tem um comportamento contínuo durante a transição de fase. Já na curva (b), em que $k_B T/J = 1, 2$, o parâmetro de ordem dinâmico apresenta uma descontinuidade com o aumento do campo aleatório, onde o sistema muda da fase ferromagnética para a fase paramagnética. Com o auxílio do expoente de Lyapunov calcula-se o conjunto dos pontos da transição de fase dinâmica, pois em sistemas dinâmicos não é possível conhecer a energia livre do sistema. Desta maneira é possível construir o diagrama de fase dinâmico para o modelo. Na Figura 3.7 é mostrado o diagrama de fases no plano $T - H$ do RFIM numa rede cúbica simples ($z=6$) obtido na aproximação de campo efetivo. Comparamos o comportamento dos estados de equilíbrio do sistema termodinâmico com os estados estacionários do sistema dinâmico proposto por Glauber. Nos dois casos, têm-se uma linha de transição que separa uma fase ordenada (ferromagnética) de uma fase desordenada (paramagnética), as linhas de transições são de primeira e segunda ordem, delimitadas por

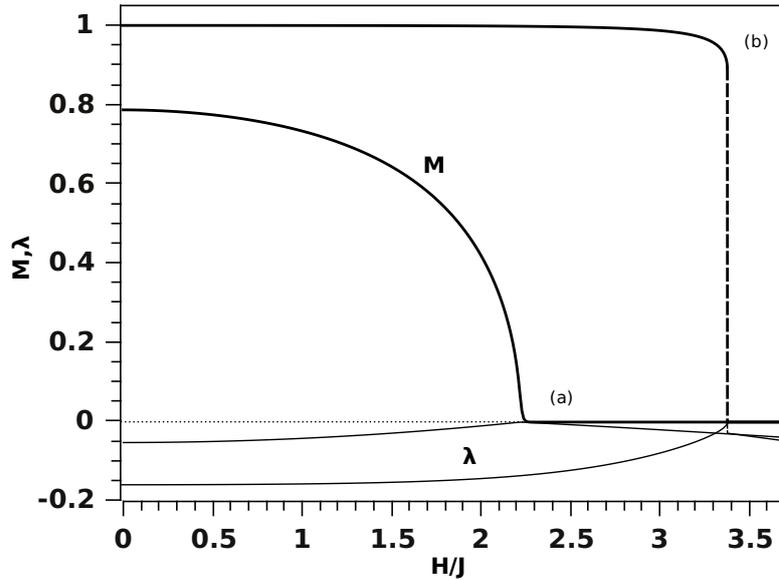


Figura 3.6: Comportamento da magnetização M como função do campo aleatório reduzido e o expoente de Lyapunov λ para o RFIM obtido via EFT [112] numa rede cúbica simples ($z=6$) para as temperaturas reduzidas (a) $K_B T/J = 4.0$ e (b) $K_B T/J = 1.2$. com aproximação de campo efetivo

um ponto tricrítico. A diferença entre os estados de equilíbrio e estacionários acontecem a baixa temperatura, terminado com o aumento da temperatura em um ponto tricrítico (PTC). No estado fundamental ($T=0$), diferentemente do encontrado na MFA, os valores de campo aleatório reduzido são iguais, tanto para o sistema em equilíbrio quanto para o sistema dinâmico, cujo valor é $H/J = 4.0$.

3.5 Conclusões

Desde que foi introduzido na literatura o RFIM por Imry e Ma [75] as suas propriedades de equilíbrio foram bastante discutidas, usando-se uma variedade de métodos. No caso particular de uma rede cúbica simples ($z=6$) e campo com distribuição bimodal, o diagrama de fases no plano $T - H$ apresenta linhas de primeira e de segunda ordem, com um ponto tricrítico (PTC) interceptando estas duas linhas. Em baixas temperaturas temos uma linha de primeira ordem terminando em $t = 0$ no ponto $H = H_c$. Simulações de Monte Carlo no equilíbrio [83] encontraram, através de uma análise de tamanho finito, o valor $\frac{H_c}{J} = 2.219 \pm 0.065$, enquanto simulações fora do equilíbrio [101] não obtiveram uma

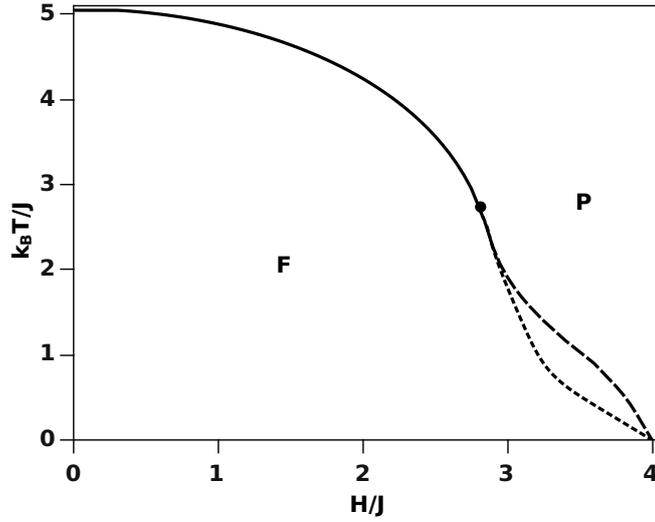


Figura 3.7: Diagrama de fase no plano $T - H$ para o RFIM numa rede cúbica simples ($z=6$) obtido via a teoria de campo efetivo (EFT) [112]. As linhas tracejadas, pontilhadas e sólidas correspondem a linhas de transição de primeira ordem fora do equilíbrio, de primeira ordem no equilíbrio e de segunda ordem, respectivamente. O ponto preto denota o ponto tricrítico.

boa precisão no valor de H_c , mas uma estimativa $\frac{H_c}{J} = 4.0$ com uma grande barra de erro. Os resultados de campo médio (MFA) [103] têm encontrado linhas de primeira ordem diferentes, que em $T = 0$ possuem $\frac{H_c}{J}(\text{equilíbrio}) = 3.0$ e $\frac{H_c}{J}(\text{dinâmico}) = 6.0$, diferindo bastante dos respectivos valores da simulação de Monte Carlo. Efeitos de correlações, desprezadas quando tratadas usando MFA, podem ser relevantes no cálculo do valor de $H_c(\text{estado fundamental})$, e fazer diferir os resultados. A priori, os valores de H_c obtidos no equilíbrio e fora do equilíbrio na simulação são diferentes, mas qualitativamente subestimados em comparação aos valores da MFA. Levando em consideração alguns efeitos de correlações, desenvolvemos a técnica do operador diferencial. Nela as funções de correlações entre diferentes sítios foram tratadas numa aproximação (Zernike) na qual elas são igualadas aos produtos das médias de cada spin localizados nos seus respectivos sítios. Nesta nova metodologia, as auto-correlações ($\langle \sigma_i^{2n} \rangle = 1$) foram tratadas exatamente, ao contrário da aproximação MFA ($\langle \sigma_i^{2n} \rangle \simeq \langle \sigma_i \rangle^{2n}$). Nesta metodologia de campo efetivo (EFT) [112] obtivemos, em $T = 0$, usando a dinâmica de Glauber, o valor $\frac{H_c}{J} = 4.0$ que está de acordo com o valor encontrado recentemente por Monte Carlo [83]. No caso estático obtivemos o mesmo valor do dinâmico, que de certa maneira difere do resultado

encontrado através de simulação de Monte Carlo no equilíbrio.

Capítulo 4

Dinâmica e estática do modelo de Blume-Capel

A natureza apresenta um grande número de fenômenos dinâmicos que ainda não foram modelados, por isso daremos continuidade ao estudo de um sistema fora do equilíbrio. Consideraremos inicialmente a caracterização do sistema no equilíbrio e a compararemos com a solução estacionária. Neste Capítulo, investigaremos o comportamento do modelo Blume-Capel cinético de spin-1 na ausência de campo externo, estudando o comportamento do parâmetro de ordem (dinâmico e estático) e da transição de fase de um sistema ferromagnético. No caso do modelo cinético, o comportamento do sistema será descrito pela dinâmica de Glauber. onde usaremos a aproximação de campo médio e campo efetivo.

4.1 Introdução

O modelo de Blume-Capel é uma generalização do modelo de Ising para sistemas de spin-1. Ele foi proposto originalmente, e de forma independente, por Blume [114] e Capel [115] para estudar transições de fases magnéticas de primeira ordem. O modelo consiste de variáveis de spins assumindo os valores discretos $S_i = 0, \pm 1$, que interagem com primeiros vizinhos pelo acoplamento ferromagnético $J > 0$, de origem eletrostática. Em cada sítio i está presente uma anisotropia (interação de campo cristalino) de íon único (D), cuja origem microscópica é a interação spin-órbita. O modelo é descrito pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + D \sum_i S_i^2 \quad (4.1)$$

Este modelo não apresenta solução exata, no entanto, várias são os métodos alternativos que revelam informações sobre este modelo, tais como, aproximação de campo médio [114]-[115], aproximação de campo efetivo [116], grupo de renormalização [117], simulações de Monte Carlo [118], matriz de transferência [119], expansões em séries [120], entre outros.

Uma versão estendida deste Hamiltoniano, denominada modelo de Blume-Emery-Griffiths [121], contém um termo adicional biquadrático do tipo $-K \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^2 S_j^2$. Originalmente o modelo teve como motivação explicar algumas propriedades termodinâmicas bem como a transição de fase que ocorre na mistura ${}^3He-{}^4He$, na qual o estado $s = 0$ representa um átomo de 3He , e os estados com $s = \pm 1$ representam os átomos de 4He . Uma transição superfluido corresponde a uma quebra de simetria entre os estados $S = \pm 1$. O diagrama de fases, apresenta uma linha de transição que separa uma fase ordenada (ferromagnética) de uma fase desordenada (paramagnética), em um ponto a linha de transição de fase muda de ordem. A transição de fase de primeira ordem se encontra com a transição de fase de segunda ordem em um ponto chamado tricrítico.

4.2 Modelo Blume-Capel estático

4.2.1 Solução na aproximação de campo médio

Usando o mesmo princípio utilizado no capítulo anterior, a desigualdade de Peierls-Bogoliubov, Eq(3.6), escolhemos um Hamiltoniano tentativa não-interagente do tipo

$$\mathcal{H}_0 = \eta \sum_{i=1}^N S_i + D \sum_{i=1}^N S_i^2, \quad (4.2)$$

onde η é um parâmetro variacional determinado analisando-se o mínimo de energia. A função de partição e a energia livre para o Hamiltoniano \mathcal{H}_0 , Eq.(4.2), são respectivamente,

$$Z_0 = \text{tr} e^{-\beta \mathcal{H}_0} = [1 + 2e^{-\beta D} \cosh(\beta \eta)]^N \quad (4.3)$$

e

$$G(\mathcal{H}_0) = -\frac{1}{\beta} \ln(Z_0) = -\frac{N}{\beta} \ln [1 + 2e^{-\beta D} \cosh(\beta \eta)]. \quad (4.4)$$

O segundo termo da desigualdade, a média da diferença de energia é dada por

$$\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \langle S_i S_j \rangle + \eta \sum_i \langle S_i \rangle \quad (4.5)$$

Na teoria de campo médio, considera-se que $\langle S_i S_j \rangle \simeq \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle$ e $\langle S_i^2 \rangle \simeq \langle S_i \rangle^2$, portanto, temos

$$\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle = -\frac{JNzm^2}{2} + \eta mN, \quad (4.6)$$

onde $m = \langle S_i \rangle$. Com esses resultados, Eq.(4.4) e Eq.(4.6), o funcional da energia livre será dado por

$$G(\mathcal{H}) = -\frac{N}{\beta} \ln \left[\frac{e^{\beta D}}{2} + \cosh(\eta\beta) \right] - \frac{JNzm^2}{2} + \eta mN. \quad (4.7)$$

No mínimo de energia $\left\{ \frac{\partial G}{\partial m} = 0 \text{ e } \frac{\partial G}{\partial \eta} = 0 \right\}$, obtemos respectivamente,

$$\eta = Jzm \quad (4.8)$$

e

$$m = \frac{\sinh\left(\frac{zm}{T}\right)}{\frac{e^{\frac{d}{T}}}{2} + \cosh\left(\frac{zm}{T}\right)}. \quad (4.9)$$

onde $T = (\beta J)^{-1}$, $d = D/J$.

A energia livre por spin é dada por

$$g(m) = \frac{G(m, T)}{NJ} = -T \ln \left[\frac{e^{\frac{d}{T}}}{2} + \cosh\left(\frac{zm}{T}\right) \right] + \frac{zm^2}{2}. \quad (4.10)$$

O estado de equilíbrio termodinâmico está relacionado a um mínimo de energia. Através de uma construção de Maxwell é possível garantir a estabilidade das soluções e o equilíbrio entre as duas fases. Usando as equações Eq.(4.9) e Eq.(4.10) obtem-se pelo método numérico de Newton Raphson, para diversos valores da anisotropia d , o ponto de transição de fase, que no caso contínuo terá $m = 0$ em $T = T_c$, e no caso da transição de primeira ordem terá $m \neq 0$, onde o valor de m corresponde ao valor da descontinuidade do parâmetro de ordem em $T = T_c^*$.

4.2.2 Solução na aproximação de Campo Efetivo

Na tentativa de levar em consideração efeitos de correlação numa aproximação superior a de campo médio, onde todas as correlações foram desprezadas, anos atrás Siqueira e Fittipaldi [116] aplicaram a técnica do operador diferencial ao modelo Blume-Capel de spin-1. Porém eles não obtiveram a linha de primeira ordem no diagrama de fase, apenas a linha de segunda ordem e o ponto tricrítico foram calculados. Desenvolveremos a seguir este formalismo, no qual um funcional para energia livre será proposto a fim de investigar a

linha de primeira ordem. Vale a pena mencionar, que uma primeira tentativa de descrever a linha de primeira ordem neste modelo usando a técnica do operador diferencial foi feita por Kaneyoshi e Fittipaldi [122]. Porém, os resultados apresentados não estão corretos uma vez que a linha obtida corresponde a solução de instabilidade do sistema.

O ponto de partida para o desenvolvimento da teoria de campo efetivo, consiste no uso da seguinte identidade [122]

$$\langle O(\{N\}) \rangle = \left\langle \frac{\text{Tr}_{\{N\}} O(\{N\}) e^{-\beta \mathcal{H}_N}}{\text{Tr}_{\{N\}} e^{-\beta \mathcal{H}_N}} \right\rangle, \quad (4.11)$$

onde $\text{Tr}_{\{N\}} \{ \dots \}$ corresponde ao traço parcial feito numa base composta de N spins, descrito pelo Hamiltoniano \mathcal{H}_N para um aglomerado finito de N spins e $O\{N\}$ é um observável contendo variáveis de spin deste aglomerado. Consideremos o caso mais simples de aglomerado com $N=1$ spin, desta maneira o Hamiltoniano será dado por

$$\mathcal{H}_1 = -JS_1 \sum_{\vec{\delta}} S_{\vec{\delta}} + DS_1^2, \quad (4.12)$$

onde $\vec{\delta}$ corresponde o vetor primeiro vizinho.

No caso do spin $S = 1$, os observáveis possíveis são $O = S_1$ e $O = S_1^2$, uma vez que devido a relação de cinemática de spin ¹ todas as outras ordens dos momentos S_i^n recaem nestes dois observáveis ($S_1^3 = S_1, S_1^4 = S_1^2, S_1^5 = S_1, \dots$).

Substituindo a Eq.(4.12) na Eq.(4.11) obtemos a magnetização $m = \langle S_1 \rangle$ que é dada por

$$m = \langle S_1 \rangle = \left\langle \frac{2\sinh(K \sum_{\vec{\delta}} S_{i+\vec{\delta}})}{e^{\beta D} + 2\cosh(K \sum_{\vec{\delta}} S_{i+\vec{\delta}})} \right\rangle, \quad (4.13)$$

onde $K = \beta J$. Definindo uma função $f(x) = \frac{2\sinh(x)}{e^{\beta D} + 2\cosh(x)}$, mostramos a seguinte identidade

$$e^{K \sum_{\vec{\delta}} S_{i+\vec{\delta}} D_x} f(x)|_{x=0} = \frac{2\sinh(K \sum_{\vec{\delta}} S_{i+\vec{\delta}})}{e^{\beta D} + 2\cosh(K \sum_{\vec{\delta}} S_{i+\vec{\delta}})} \quad (4.14)$$

Usando a relação Eq.(4.14), podemos reescrever a Eq.(4.13) na forma

$$m = \left\langle e^{K \sum_{\vec{\delta}} S_{i+\vec{\delta}} D_x} \right\rangle f(x)|_{x=0} \quad (4.15)$$

¹ $\prod_{r=-S}^S (r - S_i) = 0$, para $S = 1/2$ temos $(S_i)^2 = 1/4$, $S = 1$ temos $(S_i)^3 = S_i$ e assim sucessivamente.

ou na forma expandida

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}}^z e^{KD_x S_{i+\vec{\delta}}} \right\rangle f(x)|_{x=0}. \quad (4.16)$$

Por se tratar de um sistema de spin-1, podemos expandir a exponencial $e^{\lambda S_{i+\delta}^z}$ até a segunda ordem, ou seja, $e^{\lambda S_{i+\delta}^z} = A + BS_{i+\delta}^z + C(S_{i+\delta}^z)^2$, onde a exponencial é

$$e^{\lambda S_{i+\delta}^z} = \begin{pmatrix} e^\lambda & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\lambda} \end{pmatrix} \quad (4.17)$$

Da igualdade Eq(4.17), encontramos que os valores das constantes são, $A = 1$, $B = \sinh(\lambda)$ e $C = \cosh(\lambda) - 1$. Portanto, podemos reescrever Eq(4.16) como

$$m = \prod_{\vec{\delta}}^z \langle A + BS_{i+\delta}^z + C(S_{i+\delta}^z)^2 \rangle f(x)|_{x=0} \quad (4.18)$$

Esta Equação é exata e de difícil manipulação matemática, pois envolve no lado direito funções de correlações que não conhecemos. Desta maneira aplicando a aproximação de Zernike, isto é, $\langle S_i S_j \dots S_l \rangle \simeq \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle \dots \langle S_l \rangle (i \neq j \neq \dots \neq l)$, que corresponde a desprezar as flutuações do sistema, tratando exatamente apenas as auto-correlações, a Eq(4.18) ficará escrita na forma aproximada

$$m = (1 + \sinh(KD_x)m + (\cosh(KD_x) - 1)q)^z f(x)|_{x=0} \quad (4.19)$$

onde $q = \langle (S_{i+\delta}^z)^2 \rangle$.

De forma análoga obtemos $q = \langle (S_i)^2 \rangle$ dado por

$$q = (1 + \sinh(KD_x)m + (\cosh(KD_x) - 1)q)^z g(x)|_{x=0} \quad (4.20)$$

sendo $g(x) = \frac{2\cosh(x)}{e^{\beta D} + 2\cosh(x)}$.

As Eqs(4.19) e (4.20) são válidas para qualquer rede cristalina. A solução destas equações (pelo métodos numéricos) levam a análise de transições de fase de primeira e segunda ordem, que são caracterizados pelo comportamento contínuo e descontínuo, respectivamente do parâmetro de ordem (m). Porém, o comportamento descontínuo na magnetização não é encontrado apenas resolvendo simultaneamente estas equações, uma vez que na transição de primeira ordem observamos instabilidades que são removidas apenas com conhecimento da energia livre. Com a construção de Maxwell a descontinuidade é finalmente encontrada.

Antes de desenvolver o formalismo para uma rede específica com número de coordenação z fixo, alertamos para algumas propriedades relevantes. Sendo $f(x)$ uma função ímpar, então qualquer operador par $\hat{O}_{par}(D_x)$ aplicado nesta função no limite $x = 0$ será nulo, ou seja, $\hat{O}_{par}(D_x)f(x)|_{x=0} = 0$. Isto corresponde a ter na expansão da Eq(4.19) termos ímpares da magnetização m , mas fisicamente é esperado que a troca de m por $-m$ mantenha invariante esta equação de estado. Por outro lado, no caso da função $g(x)$ sendo par temos $\hat{O}_{impar}(D_x)g(x)|_{x=0} = 0$, assim sendo, na expansão da Eq.(4.20) teremos apenas potências pares na magnetização, deixando também esta equação de estado invariante pela inversão de spin.

A fim de ilustrar o formalismo vamos desenvolver as Eqs(4.19) e (4.20) para uma rede quadrada ($z = 4$), resultando então nas seguintes equações de estado:

$$m = A_1(q)m + A_3(q)m^3 \equiv \Lambda_1(m, q) \quad (4.21)$$

$$q = B_0(q) + B_2(q)m^2 + B_4(q)m^4 \equiv \Lambda_2(m, q), \quad (4.22)$$

sendo

$$A_1(q) = 4[1 + (\cosh(KD_x) - 1)q]^3 \sinh(KD_x)f(x)|_{x=0} \quad (4.23a)$$

$$A_3(q) = 4[1 + (\cosh(KD_x) - 1)q] \sinh^3(KD_x)f(x)|_{x=0} \quad (4.23b)$$

$$B_0(q) = [1 + (\cosh(KD_x) - 1)q]^4 g(x)|_{x=0} \quad (4.23c)$$

$$B_2(q) = 6[1 + (\cosh(KD_x) - 1)q]^2 \sinh^2(KD_x)g(x)|_{x=0} \quad (4.23d)$$

$$B_4(q) = \sinh^4(KD_x)g(x)|_{x=0}, \quad (4.23e)$$

onde os coeficientes acima são obtidos usando a identidade $e^{\lambda D_x} f(x) = f(x + \lambda)$. Para T e D fixos, resolvendo simultaneamente as Eqs.(4.21) e (4.22) encontramos os valores da magnetização m e o momento quadrupolar q .

Recentemente, Viana e de Sousa [123] propuseram um funcional para a energia livre, a fim de estudar a transição de fase quântica no modelo de Heisenberg de spin-1/2 com interação entre primeiros (J_1) e segundos (J_2) vizinhos (o chamado modelo $J_1 - J_2$). A equação de estado foi integrada, uma vez que ela é obtida através da minimização deste funcional, obtendo assim o funcional da energia livre. Vários outros trabalhos [124] têm aplicado com sucesso esta metodologia para descrever a transição de fase de primeira ordem. Nesta metodologia apenas uma equação de estado está normalmente envolvida, entretanto, no caso do modelo Blume-Capel, temos duas equações de estados,

Eqs.(4.21) e (4.22). Nosso objetivo é encontrar um funcional para a energia livre, tipo expansão de Landau, em função do parâmetro de ordem do sistema. Para o modelo de Blume-Capel ferromagnético, o parâmetro de ordem é a magnetização m , assim sendo, podemos encontrar um funcional para a energia livre como uma expansão apenas da magnetização. Notemos que as Eqs.(4.21) e (4.22) estão acopladas, para isto vamos admitir, por hipótese (“aproximação”), que a equação de estado para o momento de quadrupolo é uma constante e apenas integraremos a Eq.(4.21), obtendo, finalmente, a seguinte expressão para o funcional da energia livre:

$$\Psi(m) = \lambda_1(T, D) + \lambda_2(T, D) \left[(A_1 - 1) \frac{m^2}{2} + A_3 \frac{m^4}{4} \right] \quad (4.24)$$

onde $\lambda_{1,2}(T, D)$ são funções arbitrárias irrelevantes na transição de fase. Note que a minimização do funcional $\delta\Psi = 0$ fornece a equação de estado Eq.(4.21). Outra observação importante do funcional $\Psi(m)$ é que numa transição de primeira ordem, a expansão de Landau deve conter termos até ordem m^6 a fim de obter o ponto tricrítico. Sendo os coeficientes $A_{1,2}$ funções do momento de quadrupolo, e que este é função da magnetização, então expandindo autoconsistentemente verificamos que a expansão Eq.(4.24) representa uma série infinita de termos envolvendo potências pares da magnetização, estando assim de acordo com a expansão da teoria de Landau para descrever o ponto tricrítico.

Para obtermos a linha de estabilidade usamos a construção de Maxwell que consiste na igualdade entre as energias livres nas fases ordenadas ($m \neq 0$) e desordenada ($m = 0$). Portanto, usando a Eq.(4.24) obtemos

$$[A_1(q) - 1] \frac{m^2}{2} + A_3(q) \frac{m^4}{4} = 0. \quad (4.25)$$

Fixando um valor do parâmetro D e resolvendo simultaneamente as Eqs.(4.21), (4.22) e (4.25) encontramos os valores de T_c , m e q . Para o caso $m = 0$ temos uma transição contínua e para $m \neq 0$ uma transição de primeira ordem, associada a descontinuidade do parâmetro de ordem em $T = T_c(D)$.

Para fazermos uma comparação entre os formalismos de campo efetivo (EFT) e campo médio (MFA), na Figura 4.1 apresentamos o diagrama de fase no plano T-D na rede quadrada ($z=4$). A medida que a anisotropia D cresce, o estado $S_i = 0$ fica cada vez mais populado, diminuindo, assim, o valor da energia térmica ($\sim k_B T_c$) na qual a ordem ferromagnética é destruída. Ou seja, a medida que D cresce temos um decréscimo gradual na temperatura de transição de fase $T_c(D)$. Para baixos valores do parâmetro D ($< D_t$,

onde D_t é o valor da anisotropia no ponto tricrítico-PTC), o sistema sofre uma transição de fase contínua, enquanto que para altos valores de $D_t < D < D_c$ o sistema experimenta uma transição de primeira ordem que é caracterizada por uma descontinuidade da magnetização (primeira derivada do potencial) em $T = T_c^*$ (D_c é o valor do parâmetro de anisotropia em $T = 0$ no qual ocorre a transição de fase. Uma análise do estado fundamental mostra que $D_c = \frac{zJ}{2}$ e, portanto, no caso particular de uma rede quadrada ($z=4$) temos $D_c = 2J$). A linha crítica e o valor de PTC, foram obtidos preliminarmente por Siqueira e Fittipaldi [116]. Neste trabalho apresentamos, pela primeira, vez a linha de primeira ordem usando a técnica do operador diferencial via EFT.

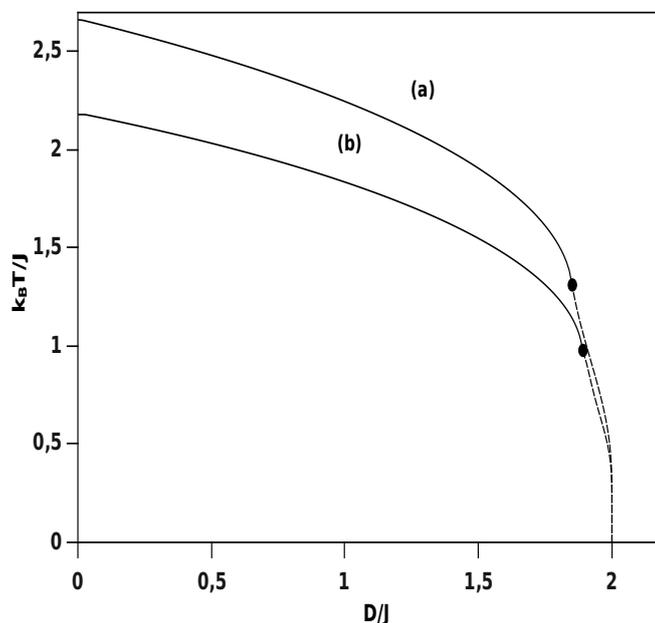


Figura 4.1: Diagrama de fase no plano T-D do modelo Blume-Capel com spin $S=1$ numa rede quadrada ($z=4$) obtida via aproximação de campo médio (MFA)(a) e teoria de campo efetivo (EFT)(b). As linhas contínuas e tracejadas correspondem as transições de segunda e primeira ordem, respectivamente. O ponto em negrito indica o ponto tricrítico (PTC).

Facilmente o formalismo EFT pode ser generalizado para outros tipos de redes cristalinas, aqui rerepresentado pelo valor do número de coordenação z . Na Figura 4.2 temos os resultados do diagrama de fases no plano $T - D$ para uma rede cúbica simples ($z=6$), que também comparamos com a MFA. Os resultados são qualitativamente equivalentes ao da rede quadrada (Fig. 4.1), sendo que EFT não descreve corretamente o estado fundamental, obtendo erroneamente o valor $D_c = 4J$, enquanto o valor exato é $D_c = 3J$.

Certamente este resultado espúrio obtido via EFT pode ser atribuído ao “*approach*” usado na obtenção do funcional da energia livre, uma vez que usamos a hipótese de que o momento de quadrupolo q é uma constante, o que permite integrar a Eq.(4.21) sobre apenas a variável m .

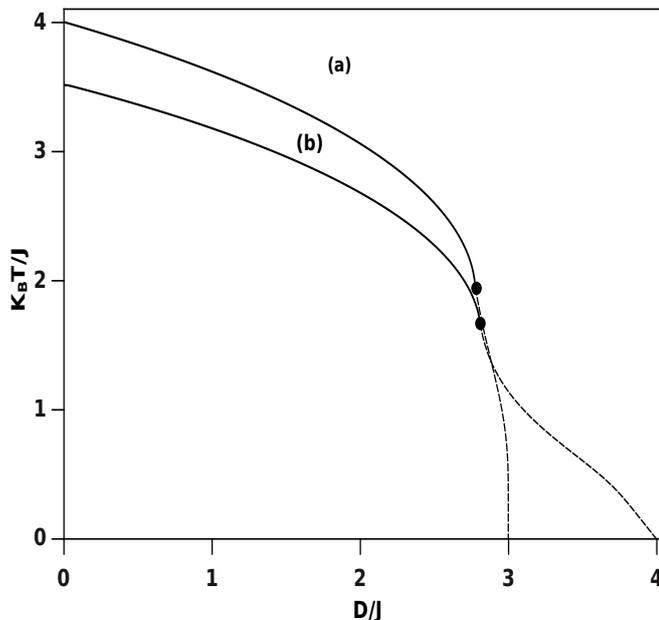


Figura 4.2: Diagrama de fase no plano T-D do modelo Blume-Capel com spin $S=1$ numa rede cúbica simples ($z = 6$) obtida via MFA (a) e EFT (b). As linhas contínuas e tracejadas correspondem as transições de segunda e primeira ordem, respectivamente. O ponto em negrito indica o ponto tricrítico (PTC).

4.3 Modelo Blume Capel Cinético

No caso do modelo cinético, considera-se que o sistema evolui de acordo com a dinâmica estocástica de Glauber numa taxa de $1/\tau$ transições por unidade de tempo. Em razão do sistema estar em contato com um reservatório de calor a uma temperatura absoluta, a dependência temporal da função probabilidade que descreve a interação entre spins e o banho térmico é governada pela seguinte equação mestra:

$$\frac{d}{dt}P(\mathbf{S}, t) = \sum_{\mathbf{S}'} [P(\mathbf{S}', t)\omega(\mathbf{S}', \mathbf{S}) - P(\mathbf{S}, t)\omega(\mathbf{S}, \mathbf{S}')] \quad (4.26)$$

onde $\omega(\mathbf{S}', \mathbf{S})$ é a probabilidade de transição, por unidade de tempo, do estado $\mathbf{S}' = (S'_1, S'_2, \dots, S'_N)$ mudar para o estado $\mathbf{S} = (S_1, S_2, \dots, S_N)$. A expressão explícita para a probabilidade de transição $\omega(\mathbf{S}', \mathbf{S})$ é obtida a fim de satisfazer a equação do balanço detalhado, válida para tempos suficientemente grandes. Desta maneira, Glauber propôs

$$\omega(\mathbf{S}, \mathbf{S}') = \frac{1}{\tau} \frac{\exp[-\beta\Delta\mathcal{H}(\mathbf{S}, \mathbf{S}')] }{\sum_{\mathbf{S}'} \exp[-\beta\Delta\mathcal{H}(\mathbf{S}, \mathbf{S}')]}, \quad (4.27)$$

onde $\beta = 1/k_B T$, k_B é a constante de Boltzmann, $\sum_{\mathbf{S}'}$ é a soma sobre os três valores possíveis da variável de spin $S_i = 0, \pm 1$ e $\Delta\mathcal{H}(\mathbf{S}, \mathbf{S}')$ é a mudança na energia do sistema quando o spins S_i muda de configuração.

Para o modelo Eq.(4.1) com um aglomerado com um spin central S_i , a mudança na energia do sistema é dada por

$$\Delta\mathcal{H}(\mathbf{S}, \mathbf{S}') = -J(S'_i - S_i) \sum_{\delta}^z S_{i+\delta} + D(S_i'^2 - S_i^2) \quad (4.28)$$

onde z é o número de coordenações. Com esta equação, substituindo-se os possíveis valores das variáveis de spins na probabilidade de transição de Glauber, obtemos

$$\omega(-1, 0) = \omega(1, 0) = \frac{1}{\tau} \frac{e^{\beta D}}{2\cosh(\beta b) + e^{\beta D}} \quad (4.29a)$$

$$\omega(1, -1) = \omega(0, -1) = \frac{1}{\tau} \frac{e^{-\beta b}}{2\cosh(\beta b) + e^{\beta D}} \quad (4.29b)$$

$$\omega(-1, 1) = \omega(0, 1) = \frac{1}{\tau} \frac{e^{\beta b}}{2\cosh(\beta b) + e^{\beta D}} \quad (4.29c)$$

onde $b = J \sum_{\delta}^z S_{i+\delta}$. Observando as probabilidades de transições possíveis, Eq.(4.29), conclui-se que $\omega(S_i, S'_i)$ não depende dos valores S_i , podendo ser reescrita como $\omega(S'_i) = \omega(S_i, S'_i)$ e a equação mestra se torna

$$\frac{d}{dt} P(\mathbf{S}, t) = \sum_{\mathbf{S}'} [P(\mathbf{S}', t)\omega(\mathbf{S}) - P(\mathbf{S}, t)\omega(\mathbf{S}')] \quad (4.30)$$

Desde que a soma das probabilidades normalizada seja um, multiplicando ambos os lados da Eq(4.30) por S_i e S_i^2 , e tomando-se a média, obtemos respectivamente,

$$\tau \frac{dm}{dt} = -m(t) + \left\langle \frac{2\sinh(\beta b)}{2\cosh(\beta b) + e^{\beta D}} \right\rangle, \quad (4.31)$$

$$\tau \frac{dq}{dt} = -q(t) + \left\langle \frac{2\cosh(\beta b)}{2\cosh(\beta b) + e^{\beta D}} \right\rangle \quad (4.32)$$

onde $m = \langle S_k \rangle (t)$ e $q = \langle (S_k)^2 \rangle (t)$.

Estas expressões que descrevem a evolução temporal do parâmetro de ordem dinâmico para um sistema de spin-1, são exatas, mas de difícil manipulação devido a inclusão de funções de correlações entre os spins, não conhecidas. Uma alternativa a essa dificuldade são o métodos aproximativos. Por isso, para a investigação desse sistema usaremos duas aproximações comuns em mecânica estatística: a aproximação de campo médio e a de campo efetivo.

4.3.1 Solução na aproximação de campo médio

A teoria de campo médio equivale a reescrever a expressão Eq.(4.31), como uma função dependente da média das variáveis de spins, ou seja,

$$\tau \frac{dm(t)}{dt} = -m(t) + \frac{\sinh(\beta J \sum_{\delta}^z \langle S_{i+\delta} \rangle)}{\cosh(\beta J \sum_{\delta}^z \langle S_{i+\delta} \rangle) + \frac{e^{\beta D}}{2}}. \quad (4.33)$$

Portanto, esta equação pode ser reescrita como,

$$\tau \frac{dm(t)}{dt} = -m(t) + \frac{\sinh(\frac{zm(t)}{T})}{\cosh(\frac{zm(t)}{T}) + \frac{e^{\frac{d}{2}}}{2}} \equiv F_1(m) \quad (4.34)$$

onde $m(t) = \langle S_{i+\delta} \rangle$, $T = (\beta J)^{-1}$ e $d = D/J$. Analogamente podemos aplicar MFA na Eq.(4.32) para a evolução temporal do momento quadrupolo, mas esta não é relevante na análise da transição de fase dinâmica.

4.3.2 Solução na aproximação de campo efetivo

Para reescrever as Eq.(4.31) e Eq.(4.32) usando a aproximação de campo efetivo, se faz exatamente como na seção (4.2.2). A ideia é usar a técnica do operador diferencial para retirar os operadores de spins dos argumentos das funções hiperbólicas, expandir a função exponencial até segunda ordem e aplicar a aproximação de Zernike nas funções de correlações. Procedendo dessa forma, as equações de movimento podem ser reescrita nas formas

$$\tau \frac{dm}{dt} = -m(t) + (1 + \sinh(KD_x)m + (\cosh(KD_x) - 1)q)^z f(x)|_{x=0} \quad (4.35)$$

e

$$\tau \frac{dq}{dt} = -q(t) + (1 + \sinh(KD_x)m + (\cosh(KD_x) - 1)q)^z g(x)|_{x=0} \quad (4.36)$$

onde $f(x) = \frac{2\sinh(x)}{e^{d/T} + 2\cosh(x)}$, $g(x) = \frac{2\cosh(x)}{e^{d/T} + 2\cosh(x)}$, $T = (\beta J)^{-1}$ e $d = D/J$. Note que agora as equações estão acopladas e devem ser resolvidas numericamente. Usaremos o método de Runge-Kutta de quarta ordem.

Desenvolvendo as Eqs.(4.35) e (4.36) para uma rede quadrada ($z = 4$) obtemos

$$\tau \frac{dm}{dt} = -m(t) + \Delta_1(m, q) \equiv W_1(m, q) \quad (4.37)$$

e

$$\tau \frac{dq}{dt} = -q(t) + \Delta_2(m, q) \equiv W_2(m, q) \quad (4.38)$$

onde as expressões para $\Delta_{1,2}(m, q)$ são definidos nas Eqs.(4.21) e (4.22). Resolvendo simultaneamente as Eqs.(4.37) e (4.38), fixados T e D, encontramos a evolução temporal para $m(t)$ e $q(t)$.

4.4 Resultados

O parâmetro de ordem dinâmico $M(T, D)$ e o momento de quadrupolo dinâmico $Q(T, D)$ correspondem, respectivamente, às médias temporais das grandezas $m(t)$ e $q(t)$, ou seja,

$$M(T, D) = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \left\{ \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} m(t) dt \right\} \quad (4.39)$$

e

$$Q(T, D) = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \left\{ \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} q(t) dt \right\}. \quad (4.40)$$

Note que os resultados das integrais acima correspondem as soluções estacionárias do sistema e que devemos usar o expoente de Lyapunov para analisar a estabilidade do sistema. Como estamos interessados em estudar a transição de fase, investigaremos o expoente de Lyapunov associado a equação diferencial Eq.(4.37), ou seja, λ_m é obtido como

$$\tau \lambda_m = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \left\{ \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} \frac{\partial W_1}{\partial m} dt \right\}. \quad (4.41)$$

A solução estável corresponde a valores negativos do expoente de Lyapunov ($\lambda_m < 0$). Na transição de segunda ordem λ_m vai a zero na temperatura crítica $T_c(D)$, enquanto na transição de primeira ordem observamos uma descontinuidade de λ_m quando atingimos a temperatura de transição $T_c^*(D)$.

Na aproximação de campo médio (MFA), o expoente de Lyapunov λ_m é obtido por

$$\tau\lambda_m = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \left\{ \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} \frac{\partial F_1}{\partial m} dt \right\}. \quad (4.42)$$

A aproximação de campo médio (MFA) é uma das aproximações que utilizaremos para analisar o modelo de Blume-Capel, e um dos primeiros recursos para reparar nossa ignorância quanto as funções de correlações entre os spins, ela despreza todas as correlações entre os spins. Resolvendo numericamente a Eq.(4.34), para uma rede cúbica simples ($z = 6$), com $\tau = 1$, obtem-se a evolução temporal da magnetização para o modelo de Blume-Capel com campo externo nulo. Os comportamentos da magnetização estacionária M e do expoente de Lyapunov λ em função da anisotropia para dois valores de temperatura reduzida são mostrados na Figura 4.3. Na curva (a), onde $k_B T/J = 2.2$, o parâmetro de ordem dinâmico apresenta um comportamento contínuo com o aumento da anisotropia e o sistema muda da fase ferromagnética para a fase paramagnética. Já na curva (b), em que $k_B T/J = 1.2$, o parâmetro de ordem tem uma descontinuidade durante a transição de fase. O expoente de Lyapunov corresponde a linha mais fina no diagrama. Além de verificar as estabilidades das soluções, ele é um parâmetro importante na construção do diagrama de fases do modelo, pois em sistemas dinâmicos não é possível conhecer a energia livre do sistema.

Na Figura 4.4 é mostrado o diagrama de fases no plano $T - D$, para o modelo Blume-Capel obtido com a aproximação de campo médio. Ele compara os estados do sistema no equilíbrio termodinâmico com os fora do equilíbrio. Nos dois casos, têm-se uma linha de transição que separa uma fase ordenada (ferromagnética) de uma fase desordenada (paramagnética). Na linha de transição a baixa temperatura a transição de fase é de primeira e em altas temperaturas é de segunda ordem, delimitadas por um ponto tricrítico PTC. A diferença entre os estados de equilíbrio e estacionários acontecem a baixa temperatura e termina próximo ao ponto tricrítico. No estado fundamental ($T=0$), o valor da anisotropia no sistema em equilíbrio é $D/J = 3$, enquanto que no sistema dinâmico o valor é $D/J = 6$. Em altas temperaturas, os estados estacionários são idênticos aos estados de equilíbrio termodinâmico. A temperatura máxima onde o sistema apresenta ordenamento magnético é $k_B T/J = 4$, o que acontece quando o sistema apresenta uma anisotropia nula.

Para uma rede quadrada ($z=4$), o diagrama de fases do modelo é qualitativamente equivalente ao caso da rede cúbica simples, Figura 4.4. A diferença entre os estados

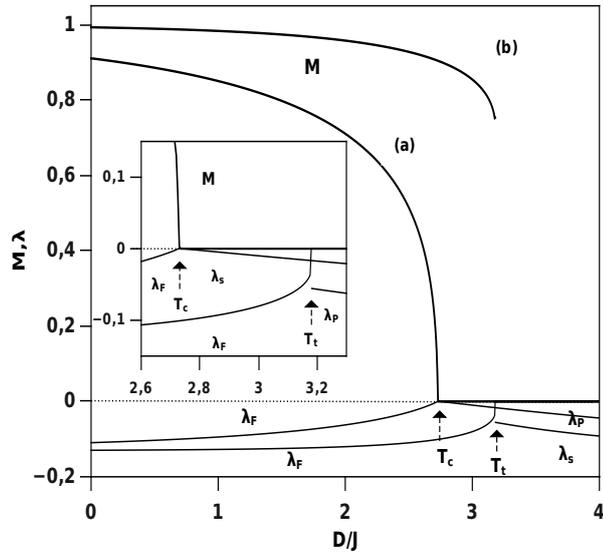


Figura 4.3: Comportamento da magnetização média M e do expoente de Lyapunov λ para o modelo Blume-Capel cinético numa rede cúbica simples ($z = 6$) como função da anisotropia reduzida para as temperaturas reduzidas (a) $k_B T/J = 2.2$ e (b) $k_B T/J = 1.2$, obtido via aproximação de campo médio.

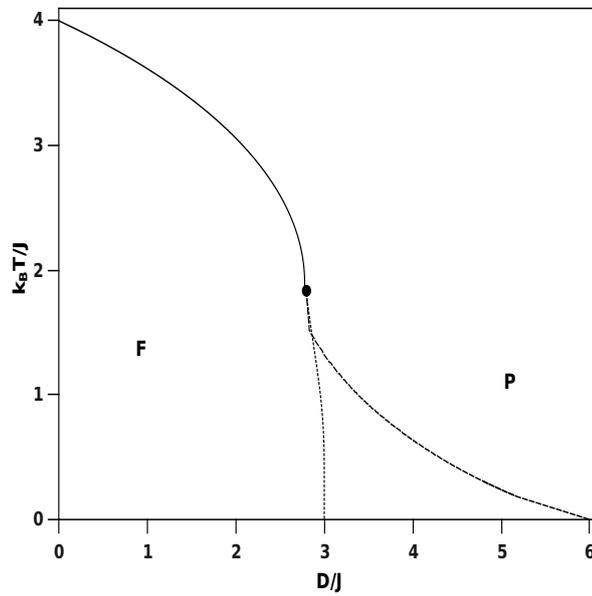


Figura 4.4: Diagrama de fase no plano $T - D$ para o modelo Blume-Capel na aproximação de campo médio numa rede cúbica simples ($z=6$). As linhas tracejadas, pontilhadas e sólidas correspondem a linhas de transição de primeira ordem fora do equilíbrio, primeira no equilíbrio e segunda ordem, respectivamente. O ponto preto é o ponto tricrítico (**PTC**).

de equilíbrio e estacionários acontecem a baixa temperatura e termina próximo ao ponto tricrítico. No estado fundamental ($T=0$), o valor crítico da anisotropia no sistema dinâmico é $D/J = 4$, enquanto que no sistema em equilíbrio o valor é $D/J = 2$. Em altas temperaturas, os estados estacionários são idênticos aos estados de equilíbrio termodinâmico. A temperatura máxima onde o sistema apresenta ordenamento magnético é $k_B T/J = 2.66$ em $D = 0$.

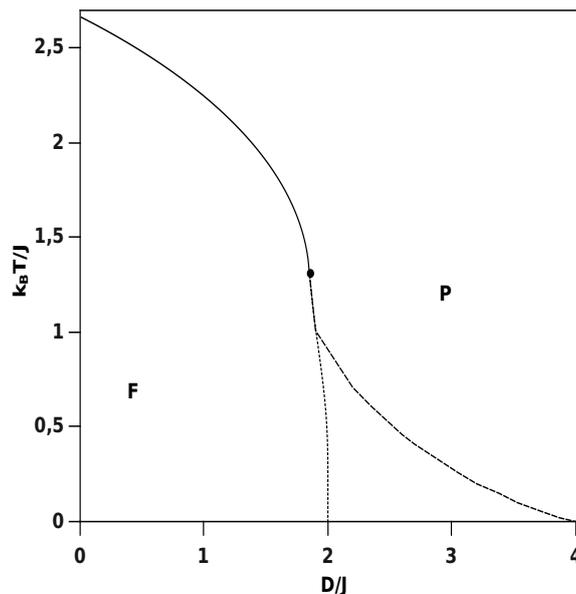


Figura 4.5: Diagrama de fase no plano $T - D$ para o modelo Blume-Capel na aproximação de campo médio numa rede quadrada ($z=4$). As linhas tracejadas, pontilhadas e sólidas correspondem a linhas de transição de primeira ordem fora do equilíbrio, primeira ordem no equilíbrio e segunda ordem, respectivamente. O ponto preto é o ponto tricrítico (**PTC**).

A aproximação de campo efetivo (EFT) é a segunda aproximação utilizada neste trabalho. Ao contrário da aproximação de campo médio, ela não despreza todas as correlações entre os spins. Resolvendo numericamente a Eq.(4.37), obtem-se a solução estacionária do modelo na aproximação de campo efetivo. Para uma rede cúbica simples ($z = 6$), fixando $\tau = 1$, o comportamento da magnetização estacionária M e do expoente de Lyapunov λ em função da anisotropia para dois valores de temperatura reduzida são mostrado na Figura 4.6. Na curva (a), onde $k_B T/J = 2.0$, o parâmetro de ordem dinâmico apresenta um comportamento contínuo com o aumento da anisotropia, e o sistema muda da fase ferromagnética para a fase paramagnética. Já na curva (b), em que $k_B T/J = 1.2$, o parâmetro de ordem tem uma descontinuidade durante a transição de fase. O expoente

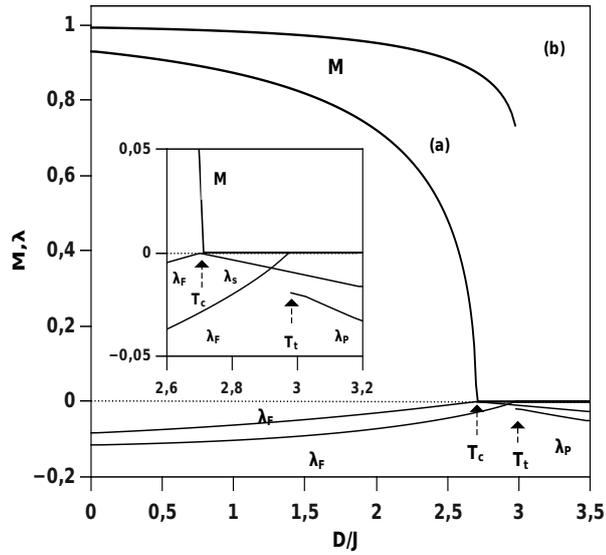


Figura 4.6: Comportamento da magnetização média M e o expoente de Lyapunov λ como função da anisotropia reduzida para o modelo Blume-Capel cinético obtido via aproximação campo efetivo numa rede cúbica simples ($z=6$), para as temperaturas reduzidas (a) $k_B T/J = 2.0$ e (b) $k_B T/J = 1.2$.

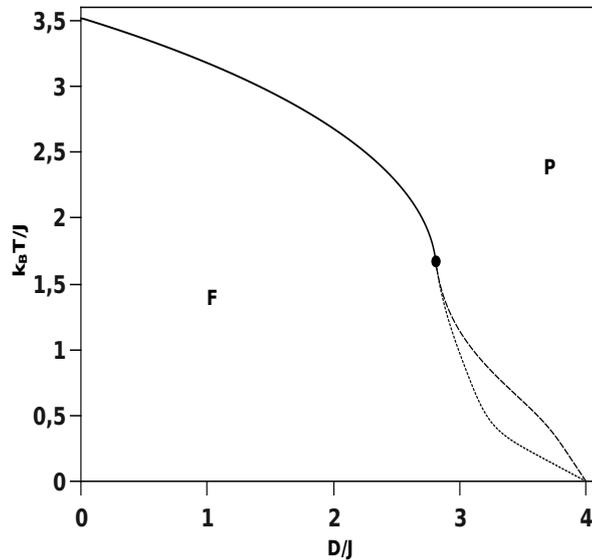


Figura 4.7: Diagrama de fase no plano $T - D$ para o modelo Blume-Capel cinético na aproximação de campo efetivo numa rede cúbica simples ($z=6$). As linhas tracejadas, pontilhadas e sólidas correspondem às linhas de transição de primeira fora do equilíbrio, primeira no equilíbrio e segunda ordem, respectivamente. O ponto preto é o ponto tricrítico (PTC).

de Lyapunov corresponde a linha mais fina no diagrama, e nos permite verificar as estabilidades das soluções, indicando o momento da transição. O expoente de Lyapunov é um parâmetro importante na construção do diagrama de fases do modelo, pois em sistemas dinâmicos não é possível conhecer a energia livre do sistema.

Na Figura 4.7 é mostrado o diagrama de fases no plano $T - D$ do modelo Blume-Capel na aproximação de campo efetivo. Comparamos os estados do sistema no equilíbrio termodinâmico com os estados estacionários da dinâmica estocástica de Glauber do modelo. Nos dois casos, têm-se uma linha de transição que separa uma fase ordenada (ferromagnética) de uma fase desordenada (paramagnética). Na linha de transição a baixa temperatura a transição de fase é de primeira ordem e em altas temperaturas de segunda ordem, delimitadas por um ponto tricrítico PTC. A diferença entre os estados de equilíbrio e estacionários acontecem a baixa temperatura. No entanto, no estado fundamental ($T=0$), os estados de equilíbrio e estacionários são os mesmos, e a anisotropia reduzida crítica é $D/J = 4$. Em altas temperaturas, os estados estacionários são idênticos aos estados de equilíbrio termodinâmico. A temperatura máxima onde o sistema apresenta ordenamento magnético é $k_B T/J = 3.5$, o que acontece quando o sistema apresenta uma anisotropia nula.

Para uma rede quadrada ($z=4$), o diagrama de fases do modelo, Figura 4.8, é qualitativamente semelhante ao resultado da rede cúbica simples ($z = 6$), a diferença é apenas quantitativa. No estado fundamental ($T = 0$), os estados de equilíbrio e estacionários são iguais em $D/J = 2$. A temperatura máxima onde o sistema apresenta ordenamento magnético é $k_B T/J = 2.66$ em $D = 0$.

4.5 Conclusões

As propriedades de equilíbrio são calculadas teoricamente usando-se a mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs. Nesse caso o equilíbrio corresponde ao mínimo da energia livre do sistema. Por outro lado, para o estudo de sistemas fora do equilíbrio não existe uma teoria completa para descrever todas as propriedades termodinâmicas, do ponto de vista teórico. Entretanto, a mecânica estatística estocástica tem como base algumas propostas usadas na mecânica estatística de equilíbrio em conjunto com o uso de definições das transições entre estados microscópicos que, na sua grande maioria, não são obtidas

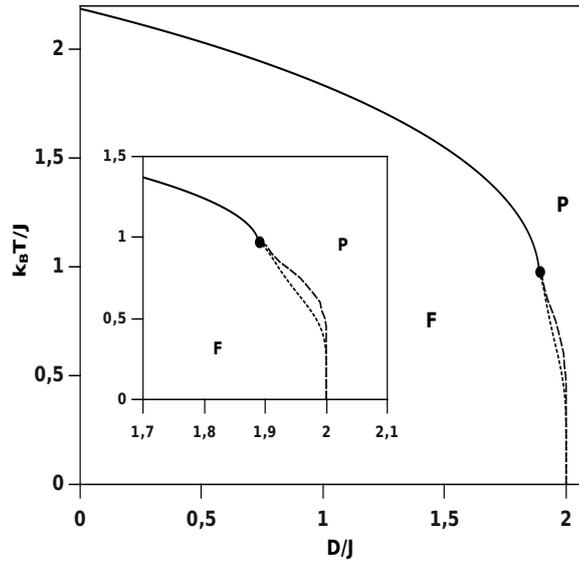


Figura 4.8: Diagrama de fases no plano $T - D$ para o modelo Blume-Capel cinético na aproximação de campo efetivo numa rede quadrada ($z=4$). As linhas tracejadas, pontilhadas e sólidas correspondem a linhas de transição de primeira ordem fora do equilíbrio, primeira ordem no equilíbrio e segunda ordem, respectivamente. O ponto preto é o ponto tricrítico (**PTC**).

dos primeiros princípios. Neste estudo fora do equilíbrio analisa-se o estado estacionário do sistema. É conjecturado que para um Hamiltoniano contendo interações entre as partículas de curto alcance, o estado final estacionário corresponde ao equilíbrio termodinâmico [125]. Não existe prova rigorosa, mas na prática é observado que sistemas não integráveis sempre relaxam para um único estado estacionário. O estado de equilíbrio não depende das condições iniciais. A situação é muito diferente para potenciais de longo alcance. Este é o caso para sistemas auto-gravitante [126] e sistemas de spins tratado a nível de campo médio [127, 128, 128, 129]. Nestes sistemas, no limite termodinâmico, o tempo de relaxação diverge e o equilíbrio termodinâmico nunca é alcançado [130], então, eles acabaram colapsados num estado estacionário caracterizado por uma quebra de simetria [127]. Ao contrário do equilíbrio termodinâmico, o estado estacionário depende explicitamente das condições iniciais. Uma importante característica de sistemas com interações de longo-alcance é que as propriedades termodinâmicas podem depender da forma do ensemble em que estas são derivadas [131]. Por exemplo, o calor específico no ensemble canônico é sempre positivo, mas pode ser negativo no ensemble microcanônico

[129, 132].

Recentemente, Pakter e Yan Levin [133] estudaram através da dinâmica molecular um modelo de Hamiltoniano que consiste de um termo correspondendo a energia cinética das partículas adicionado a um termo de spins planares que interagem com um potencial de longo alcance (tipo campo médio). Foi mostrado inicialmente que as distribuições de spin e velocidade não obedecem a distribuição de Maxwell-Boltzmann, mostrando assim ser o sistema não ergódico. Outro resultado interessante observado foi que a solução dinâmica difere na região de altas energias da solução de equilíbrio, onde uma transição de primeira ordem é verificada no comportamento da magnetização como uma função da energia.

Neste capítulo estudamos a dinâmica (Glauber) do modelo Blume-Capel de spin através das aproximações de campo médio (MFA) e de campo efetivo (EFT), que são métodos aproximados que desprezam efeitos de correlações. Desta maneira, elas são considerados aproximações nas quais todos os sítios interagem entre si e, por isto, corresponde a interação de longo-alcance. Inicialmente, propusemos um funcional para a energia livre na EFT e analisamos o diagrama de fases, no plano $T - D$, a linha de primeira ordem não discutida na literatura. No caso da rede quadrada ($z = 4$), o comportamento de $T_c(D)$ obtida via EFT é qualitativamente semelhante ao resultado da MFA, onde temos um decréscimo gradual de $T_c(D)$ com o aumento da anisotropia D até anular-se no valor $D_c = 2J$ que corresponde a solução exata do modelo no estado fundamental ($T = 0$). Para baixos valores do parâmetro $D (< D_t)$, o sistema sofre uma transição de fase contínua entre os estados ferromagnético (F) e paramagnético (P). No caso de altos valores de anisotropia ($D > D_t$), a transição de fase é de primeira ordem que é caracterizada por uma descontinuidade na magnetização. No diagrama de fase existe um ponto tricrítico (PTC) que separa as linhas de primeira e segunda ordem. Um resultado importante descrito neste capítulo foi a proposta do funcional da energia livre, que não foi ainda discutido na literatura, apenas linha de segunda ordem e PTC foram obtidos. Por outro lado, no caso da rede cúbica simples ($z = 6$) o diagrama de fases está qualitativamente correto. Porém, o ponto de vista quantitativo, a linha de primeira ordem obtida por EFT não termina em $T = 0$ (estado fundamental) no valor exato $D_c = 3J$, como encontrado via MFA. Especulamos que esta discrepância deve-se, sobretudo, a expressão da energia (funcional) livre proposta. Em particular, a hipótese de manter o momento do quadrupolo constante no instante da integração da equação de estado associada à magnetização é relevante nesta

análise. Portanto, este formalismo (EFT) não é adequado para descrever a linha de primeira ordem na rede cúbica simples e outro funcional da energia livre mais elaborado deve ser proposto para eliminar este resultado espúrio em $T = 0$. Salientamos que outras redes [honeycomb ($z=3$), $bcc(z = 8)$, $fcc(z = 12)$] foram investigadas e também não obtivemos resultados satisfatórios.

Analizando os resultados da solução estacionária (dinâmica), observamos que a linha crítica coincide com a solução de equilíbrio (minimização da energia livre) usando MFA e EFT. Por outro lado, no caso da linha de primeira ordem, os resultados (dinâmica e equilíbrio) são distintos. De fato na aproximação de campo médio (MFA), em $T = 0$, o valor de D_c (equilíbrio) $\neq D_c$ (dinâmico). Usando-se a teoria de campo efetivo (EFT), tanto para rede cúbica simples ($z=6$) como para a rede quadrada ($z = 4$) temos valores iguais para D_c , isto é, D_c (equilíbrio) = D_c (dinâmico), mostrando ao levar-se em consideração os efeitos de correlação temos melhoras nos resultados em comparação com MFA. A estabilidade da solução dinâmica foi analisada através do cálculo do expoente de Lyapunov. Na transição de fase contínua temos $\lambda(T = T_c) = 0$ ($\lambda(T < T_c) < 0$) e na transição de primeira ordem observamos uma certa descontinuidade no valor de λ quando atingimos a temperatura de transição $T_c^*(D)$.

Capítulo 5

Modelo de Blume-Capel com campo oscilante

5.1 Introdução

O modelo de Ising de spin-1 com um campo cristalino ou anisotropia de íon único, que é conhecido como Blume Capel (BC), tem sido tema de muitas investigações teóricas desde a sua introdução [114, 115] há 40 anos atrás, por causa de ser fundamental no estudo de fenômenos multicríticos associado com vários sistemas físicos reais, tais como fluidos multicomponentes, ligas ternárias, sistemas magnéticos, etc. A versão de equilíbrio deste modelo e sua generalização, o modelo Blume-Emery-Griffiths (BEG) [121], tem sido extensamente estudado [117, 118, 119, 120, 121, 122] e apresenta uma variedade rica de comportamento crítico e multicrítico. Enquanto as propriedades de equilíbrio são bem conhecidas, usando uma variedade de métodos, as propriedades de não-equilíbrio consistem na introdução de um campo externo oscilatório no Hamiltoniano do modelo BC. Manzo e colaboradores [134], usando simulação de Monte Carlo (MC) dinâmico, mostraram que o decaimento do estado metaestável particular pode ocorrer diretamente ou por uma sucessão de passos separados, dependendo da disponibilidade e estabilidade relativa de um segundo estado metaestável intermediário entre o estado inicial e a fase de equilíbrio. Manzo e Oliveira [135] estudaram a metaestabilidade e nucleação deste modelo BC cinético usando MC. Keskin e colaboradores [136] estudaram este modelo usando aproximação campo médio e encontraram novas linhas de primeira ordem no diagrama de fase no plano $T - H_0$ (H_0 é a amplitude do campo oscilante), dependendo do valor da

anisotropia D . O mais interessante resultado dos seus estudos é o aparecimento de mais pontos tricríticos. Porém, a transição não pode ser verdadeiramente dinâmica uma vez que ela persiste mesmo no limite de frequência nula (estática). Esta transição no limite estático é um artefato da MFA, que negligência as flutuações térmicas não triviais. Deviren e Keskin [137] desenvolveram a teoria de campo efetivo (EFT), onde mais correlações são levadas em consideração sendo superior a MFA. Esta técnica (Operador Diferencial) foi introduzida por Honmura e Kaneyoshi [66] para estudar as propriedades de equilíbrio do modelo de Ising de spin-1/2, posteriormente foi generalizada para tratar a transição de fase dinâmica do modelo de Ising-1/2 cinético [67, 68]. Na teoria desenvolvida por Deviren e Keskin [137], o momento de quadrupolo $q = \langle S_i^2 \rangle$ foi tratado de forma aproximada (i. e., $q = \langle S_i^2 \rangle^n \simeq \langle S_i \rangle^{2n} = m^{2n}$) gerando, assim, apenas uma equação diferencial, obtida a partir da dinâmica de Glauber e técnica do operador diferencial, para a magnetização. Integrando a magnetização $m(t)$ num período, obtém-se o parâmetro de ordem dinâmico $M(T, H_0, D)$, e analisando o comportamento do expoente de Lyapunov a transição de fase dinâmica é então calculada. O diagrama de fases no plano $T - H_0$ para diversos valores do parâmetro de anisotropia D , fixando a frequência $\omega = 2\pi$, foi obtido e diversos pontos multicríticos (triplo, tricrítico, etc) têm sido encontrados diferindo dos resultados de MFA [135, 136] que apenas temos PTC. Tanto MFA como este EFT desenvolvida por Deviren e Keskin [137] apresentam a fase mista P+F no diagrama de fases, enquanto que na aproximação de Bethe [138] na rede quadrada ($z=4$) esta fase não existe. Neste capítulo iremos desenvolver uma teoria de campo efetivo, na técnica do operador diferencial, na qual geraremos duas equações diferenciais acopladas para a magnetização (m) e momento de quadrupolo (q).

5.2 Dinâmica de Glauber

O modelo de Blume-Capel cinético é descrito pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + D \sum_i S_i^2 - H \sum_i S_i, \quad (5.1)$$

onde S_i assumem valores discretos $0, \pm 1$ em cada sítio i da rede, $\langle i, j \rangle$ denota a soma entre os primeiros vizinhos, $J > 0$ é o acoplamento ferromagnético, de origem eletrostática, D é a anisotropia de íon único, de origem microscópica da interação spin-órbita e H é

uma campo magnético externo oscilante com dependência temporal, definido por

$$H(t) = H_0 \cos(\omega t) \quad (5.2)$$

onde H_0 e $\omega = 2\pi\nu$ são a amplitude e a frequência angular do campo oscilante, respectivamente. O sistema está em contato com um reservatório de calor a uma temperatura absoluta T . O sistema evolui de acordo com processo estocástico de Glauber a uma taxa de $1/\tau$ transições por unidade de tempo.

Para um aglomerado com um spin central, a mudança na energia do sistema quando os spins S_i mudam é dado por

$$\Delta\mathcal{H}(\mathbf{S}, \mathbf{S}') = -(S'_i - S_i) \left(J \sum_{\delta}^z S_{i+\delta} + H \right) + D(S_i'^2 - S_i^2) \quad (5.3)$$

onde z é o número de coordenação. Com esta equação, substituindo os valores possíveis de $S_i = \pm 1, 0$ na probabilidade de transição de Glauber, Eq.(4.27), obtemos

$$\begin{aligned} \omega(-1, 0) = \omega(1, 0) &= \frac{1}{\tau} \frac{e^{\beta D}}{2\cosh(\beta c) + e^{\beta D}} \\ \omega(1, -1) = \omega(0, -1) &= \frac{1}{\tau} \frac{e^{-\beta c}}{2\cosh(\beta c) + e^{\beta D}} \\ \omega(-1, 1) = \omega(0, 1) &= \frac{1}{\tau} \frac{e^{\beta c}}{2\cosh(\beta c) + e^{\beta D}} \end{aligned} \quad (5.4)$$

onde $c = J \sum_{\delta}^z S_{i+\delta} + H$

Desde que a soma das probabilidades normalizada seja um, multiplicando ambos os lados da Eq(4.26) por S_i , S_i^2 e tomando-se a média, obtemos respectivamente,

$$\tau \frac{dm}{dt} = -m(t) + \left\langle \frac{2\sinh(\beta c)}{2\cosh(\beta c) + e^{\beta D}} \right\rangle, \quad (5.5)$$

$$\tau \frac{dq}{dt} = -q(t) + \left\langle \frac{2\cosh(\beta c)}{2\cosh(\beta c) + e^{\beta D}} \right\rangle \quad (5.6)$$

onde $m = \langle S_k \rangle (t)$ e $q = \langle (S_k)^2 \rangle (t)$. Estas expressões da evolução temporal são exatas, mas de difícil manipulação, devido as correlações entre os spins não conhecidas. Uma alternativa para contornar essa dificuldade são os métodos aproximativos. Por isso, usaremos duas aproximações comuns em mecânica estatística, aproximação de campo médio e campo efetivo na investigação desse sistema.

5.3 Solução na aproximação de campo médio

A teoria de campo médio [135, 136], equivale reescrever a expressão Eq.(5.5) aproximando as médias das funções hiperbólicas pelas médias dos seus respectivos argumentos, obtendo assim

$$\tau \frac{dm}{dt} = -m(t) + \frac{2\sinh(K \sum_{\delta}^z \langle S_{i+\delta} \rangle + \beta H)}{2\cosh(K \sum_{\delta}^z \langle S_{i+\delta} \rangle + \beta H) + e^{\beta D}}, \quad (5.7)$$

ou ainda pode ser reescrita na forma

$$\Omega \frac{dm}{d\xi} = -m(t) + \frac{2\sinh[(1/T)(mz + h\cos(\xi))]}{2\cosh[(1/T)(mz + h\cos(\xi))] + \exp(d/T)} \quad (5.8)$$

onde $\xi = \omega t$, $T = (\beta J)^{-1}$, $d = D/J$, $h = H_0/J$ e $\Omega = \omega\tau$.

5.4 Solução na aproximação de campo efetivo

Seguindo os mesmos procedimentos das obtenções das Eqs.(4.35) e (4.36), encontramos o seguinte conjunto de equações diferenciais acopladas para os parâmetros m e q , que são dadas por

$$\tau \frac{dm}{dt} = -m(t) + (1 + \sinh(KD_x)m + (\cosh(KD_x) - 1)q)^z f(x)|_{x=0} \quad (5.9)$$

e

$$\tau \frac{dq}{dt} = -q(t) + (1 + \sinh(KD_x)m + (\cosh(KD_x) - 1)q)^z g(x)|_{x=0}, \quad (5.10)$$

onde $f(x) = \frac{2\sinh(x+\beta H)}{e^{\beta D} + 2\cosh(x+\beta H)}$ e $g(x) = \frac{2\cosh(x+\beta H)}{e^{\beta D} + 2\cosh(x+\beta H)}$. Definindo $\Omega = \omega\tau$ e $\xi = \omega t$ podemos reescrever as equações diferenciais nas formas reduzidas

$$\Omega \frac{dm}{d\xi} = -m + (1 + \sinh(KD_x)m + (\cosh(KD_x) - 1)q)^z f(x)|_{x=0} \quad (5.11)$$

e

$$\Omega \frac{dq}{d\xi} = -q + (1 + \sinh(KD_x)m + (\cosh(KD_x) - 1)q)^z g(x)|_{x=0}. \quad (5.12)$$

A fim de ilustrar o formalismo e estudar a transição de fase deste modelo usando EFT vamos desenvolver as Eqs.(5.11) e (5.12) numa rede quadrada ($z=4$), resultando assim nas seguintes expressões

$$\Omega \frac{dm}{d\xi} = -m(t) + G_1(m, q) \equiv \Lambda_1(m, q) \quad (5.13)$$

e

$$\Omega \frac{dq}{d\xi} = -q(t) + G_2(m, q) \equiv \Lambda_2(m, q) \quad (5.14)$$

sendo

$$G_1(m, q) = \sum_{r=0}^4 A_r(q) m^r \quad (5.15)$$

e

$$G_2(m, q) = \sum_{r=0}^4 B_r(q) m^r, \quad (5.16)$$

onde os coeficientes A_r, B_r são obtidos analiticamente aplicando a identidade $e^{\lambda D_x} f(x) = f(x + \lambda)$, e são expressos por

$$A_r(q) = \hat{O}(D_x) f(x)|_{x=0} \quad (5.17)$$

e

$$B_r(q) = \hat{O}(D_x) g(x)|_{x=0} \quad (5.18)$$

onde o operador $\hat{O}(D_x)$ é dado por

$$\hat{O}(D_x) = \binom{4}{r} [1 + (\cosh(KD_x) - 1)q]^{4-r} \sinh^r(KD_x) \quad (5.19)$$

para T, D, H_0 e ω fixos ($\tau \equiv 1$), resolvendo numericamente o conjunto de equações diferenciais acopladas Eqs.(5.13) e (5.14), usando o método de Runge-Kutta de quarta ordem, obtemos a evolução temporal da magnetização $m(t)$ e o momento de quadrupolo $q(t)$. No limite de campo nulo ($H_0 = 0$), as funções $f(x)$ (ímpar) e $g(x)$ (par) têm uma paridade bem definida, de modo que na expansão da Eq.(5.15) teremos apenas potências ímpares, enquanto que na expansão da Eq.(5.16) teremos apenas potências pares, reduzindo os resultados discutido no capítulo 4, mas precisamente as Eqs.(4.37) e (4.38).

5.5 Resultados

Nesta seção apresentamos as soluções e os diagramas de fases do modelo Blume-Capel cinético com campo oscilante numa rede quadrada ($z = 4$), usando as aproximações de campo médio e campo efetivo. Primeiramente, vamos estudar as soluções das equações diferenciais, Eq.(5.13) e Eq.(5.14), fixados $\Omega = 2\pi$ e $\tau = 1$ para um conjunto de parâmetros $\{T, d, h\}$ e condições iniciais.

As soluções destas equações são funções periódicas de ξ , isto é, $m(\xi + 2\pi) = m(\xi)$. Além disso, elas podem ser de dois tipos de acordo se elas têm ou não têm a propriedade

$$m(\xi + \pi) = -m(\xi). \quad (5.20)$$

A solução que satisfazem Eq.(5.20) é chamada solução simétrica, que corresponde a solução paramagnética (**P**). Nesta solução, a magnetização $m(\xi)$ oscila em torno do valor zero. O segundo tipo de solução, que não satisfaz Eq.(5.20), é chamada solução anti-simétrica, que corresponde a solução ferromagnética (**F**), a magnetização oscila em torno de um valor não nulo. Além dessas soluções esse sistema apresenta uma outra solução, a coexistência da solução paramagnética com a ferromagnética (**P+F**).

Vamos primeiramente discutir os resultados de campo médio, Eq.(5.8), fixando numa rede quadrada ($z = 4$). Os resultados qualitativos são independentes do valor de z . A Figura 5.1 mostra as três diferentes soluções para o modelo que são paramagnética (**P**), a ferromagnética (**F**) e a solução mista (**P+F**) em que a solução paramagnética e ferromagnética coexistem. Na Figura 5.1 (a), apenas a solução simétrica é obtida, a magnetização oscila em torno de zero, então temos a solução paramagnética. Na figura 5.1 (b), apenas a solução anti-simétrica é encontrada, a magnetização oscila em torno de um valor não nulo, portanto, temos a solução ferromagnética. Nenhuma dessas soluções dependem das condições iniciais. Por outro lado, na Figura 5.1 (c) ambas soluções simétricas e anti-simétricas sempre existem no sistema, portanto temos a solução coexistente (**P+F**). Neste caso, as soluções dependem das condições iniciais.

Para verificar as fronteiras entre essas três diferentes regiões, iremos calcular os pontos da transição de fase dinâmica, e o conjunto de tais pontos formam os diagramas de fases do sistema. Esses pontos serão obtidos pela investigação do comportamento da magnetização média em função da temperatura reduzida e do campo magnético externo reduzido, onde será controlada a estabilidade através do cálculo do expoente de Lyapunov.

A magnetização média \mathbf{M} em um período é definida por

$$\mathbf{M} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} m(\xi) d\xi. \quad (5.21)$$

O comportamento de \mathbf{M} em função da temperatura reduzida para vários valores de h e d são obtidos através do método numérico diferença finita (ver apêndice B). No caso da MFT, o comportamento da magnetização média \mathbf{M} em função da temperatura reduzida para $d = 0.25$ e vários valores de h são plotados na Figura 5.2. Nesta Figura, a linha mais

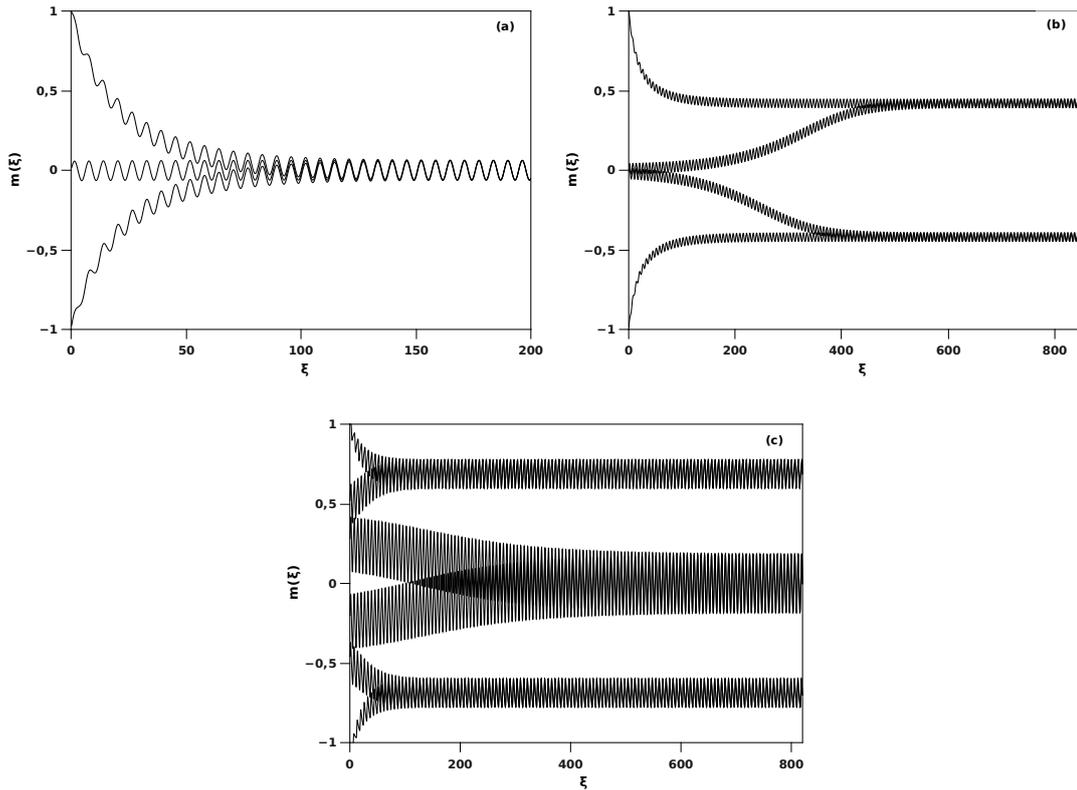


Figura 5.1: Evolução temporal da magnetização (m) do modelo Blume-Capel cinético na presença de um campo oscilante obtido na aproximação de campo médio (MFA)[136]. Fixando $\tau = 1$, $\omega = 2\pi$, $T \equiv (\beta J)^{-1}$, $h \equiv H_0/J$ e $d = D/J$ numa rede quadrada ($z = 4$): (a) fase paramagnética (\mathbf{P}), $d = 0.25$, $h = 0.5$ e $T = 0.7$; (b) fase ferromagnética (\mathbf{F}), $d = 0.25$, $h = 0.2$ e $T = 0.5$; (c) região de coexistência ($\mathbf{P}+\mathbf{F}$), $d = 0.25$, $h = 0.75$ e $T = 0.1$;

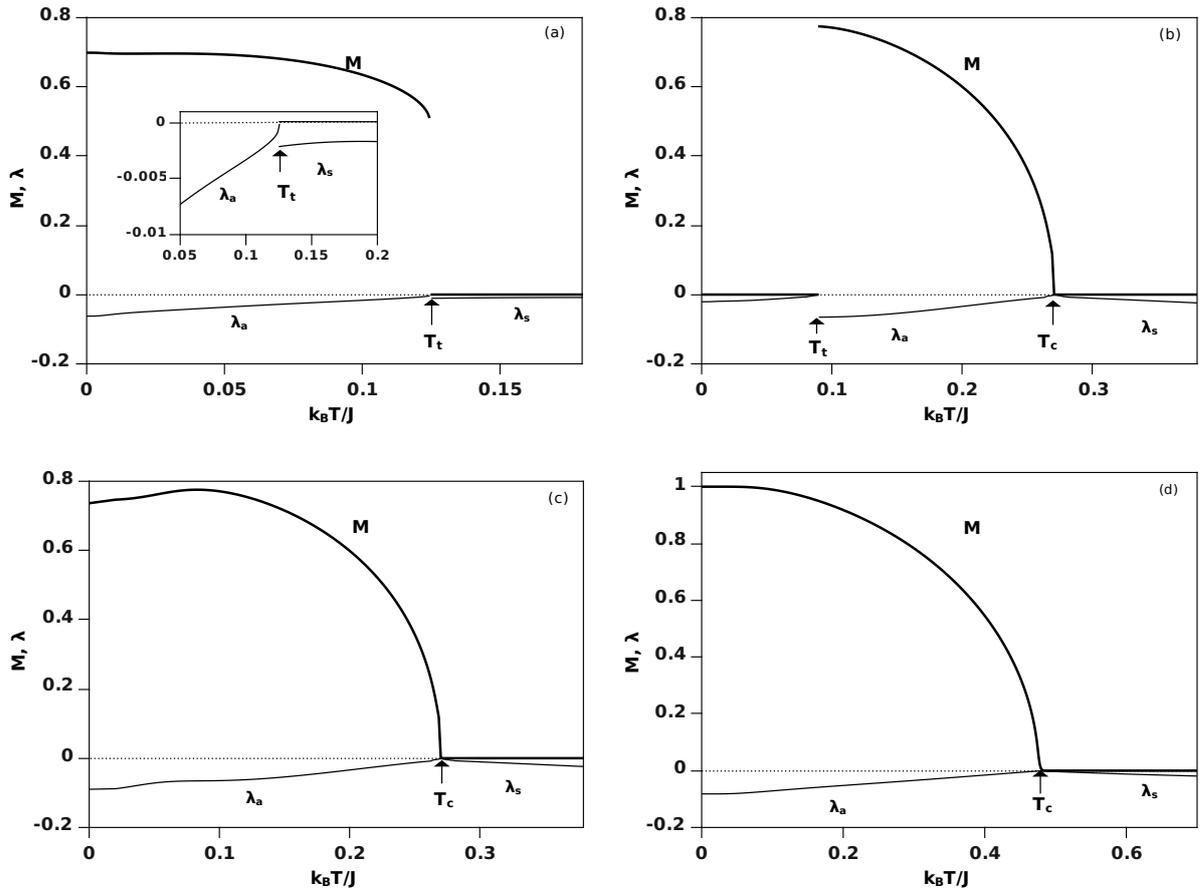


Figura 5.2: A dependência térmica da magnetização média (a linha sólida cheia) e dos expoentes de Lyapunov λ_s e λ_a (a linha sólida fina) para do modelo Blume-Capel cinético na presença de um campo oscilante obtido via MFA [136]. O índice s indica a solução simétrica, que corresponde a fase \mathbf{P} e o índice a indica a solução anti-simétrica, que corresponde a fase \mathbf{F} . T_t e T_c são as temperaturas de transição de fase de primeira e segunda ordem, respectivamente. (a) A transição de fase de primeira ordem para $h = 0.775$ e $d = 0.25$ ocorre em $T_t = 0.125$. (b) As duas sucessivas transições de fases, região de coexistência $\mathbf{F}+\mathbf{P}$, uma de primeira ordem e a outra de segunda ordem para $h = 0.715$ e $d = 0.25$ ocorrem em $T_t = 0.09$ e $T_c = 0.27$, respectivamente. (c) A transição de fase de segunda ordem para $h = 0.715$ e $d = 0.25$ ocorre em $T = 0.27$. (d) A transição de fase de segunda ordem para $h = 0.45$ e $d = 0.25$ ocorre em $T = 0.48$.

cheia corresponde o comportamento de M e a mais fina o expoente de Lyapunov λ , que foi discutido nos dois últimos capítulos anteriores. A Figura 5.2(a) representa a magnetização média dependente da temperatura reduzida fixando $h = 0.775$. Neste caso, M decresce monotonicamente para zero descontinuamente com o aumento da temperatura, assim

uma transição de fase de primeira ordem ocorre em $T_t = 0.125$ que é marcada com uma seta na Figura. As Figuras 5.2(b) e 5.2(c) ilustram a variação térmica de M para $h = 0.715$ e para duas diferentes condições iniciais. No caso da condição inicial $m = 0$ temos a Figura 5.2(b) e $m = 1$ a Figura 5.2 (c). Na Figura 5.2 (b), o sistema sofre duas sucessivas transições de fases, uma de primeira ordem, da fase paramagnética para a fase ferromagnética e outra transição de segunda ordem, da fase ferromagnética para a fase paramagnética. As temperaturas das transições de fases encontradas são $T_t = 0.09$ e $T_c = 0.27$, respectivamente. Isso significa que existe uma região coexistente $\mathbf{P}+\mathbf{F}$ no sistema para $h = 0.715$, este fato será visto mais adiante no diagrama de fase. Na Figura 5.2 (c), M decresce para zero continuamente com o aumento da temperatura reduzida, o sistema exibe uma transição de fase de segunda ordem, a temperatura da transição de fase de segunda ordem T_c é marcada com uma seta na figura, $T_c = 0.715$. Finalmente, a Figura 5.2 (d) mostra o comportamento de \mathbf{M} em função da temperatura reduzida para $h = 0.45$, o sistema apresenta apenas transição de fase de segunda ordem, da fase \mathbf{F} para a fase \mathbf{P} em $T_c = 0.48$. Esse resultado independe da condição inicial, para qualquer valor da condição, o sistema apresenta o mesmo comportamento.

Uma outra grandeza importante no nosso estudo é o expoente de Lyapunov λ , com o cálculo desse expoente é possível controlar as estabilidades das soluções. Se escrevermos as equações dinâmicas, Eq(5.13) e Eq(5.14), na forma

$$\Omega \frac{dm}{d\xi} = F(m, \xi), \quad (5.22)$$

o expoente de Lyapunov λ será então calculado por

$$\Omega \lambda = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{\partial F}{\partial m} d\xi \quad (5.23)$$

a solução será estável se $\lambda < 0$.

O expoente de Lyapunov funciona como um indicador da transição de fase, isso é de grande importância na busca dos pontos de transição de fase dinâmica, sendo possível construir os diagramas de fases dinâmico para o modelo. O comportamento do expoente de Lyapunov em função da temperatura reduzida é mostrada na figura 5.2, no qual as linhas finas correspondem aos expoentes de Lyapunov. λ_s e λ_a são os expoentes de Lyapunov associados as soluções simétricas e anti-simétricas, respectivamente. Se λ_s e λ_a crescem para zero continuamente, a temperatura reduzida aproxima da transição de fase de segunda ordem T_c . Por outro lado, se um λ crescer para zero descontinuamente e outro

λ crescer para zero continuamente a medida que a temperatura reduzida se aproxima da temperatura de transição de fase, a temperatura em que a descontinuidade ocorrer primeiro para um dos λ e outro $\lambda = 0$, é a temperatura de transição de fase de primeira ordem T_t . Por exemplo, na Figura 5.2(a) a descontinuidade ocorre para λ_s , a temperatura onde ocorre a descontinuidade é T_t , mas na Figura 5.2(b) a descontinuidade ocorre para λ_a . Além disso, pode ser visto através desta Figura 5.2, que T_t e T_c podem ser calculados através de \mathbf{M} ou λ .

Os diagramas de fases no plano $T - H_0$ do sistema foram obtidos, eles estão apresentados nas Figuras 5.3(a)- 5.3(e). Nestes diagramas de fases, as linhas sólidas e pontilhadas representam as linhas de transições de fases de segunda e primeira ordem, respectivamente. Os pontos tricríticos dinâmicos serão denotados pelos pontos pretos. Para d negativos, apenas um tipo de diagrama de fase é obtido, conforme ilustrado na Figura na 5.3(a). Para d positivos, quatros diferentes diagramas de fases são encontrados, ilustrados na Figura 5.3(b)-5.3(e). A Figura 5.3(a), representa os diagramas de fases para valor $d = -0.2$. Neste diagrama de fase, em alta temperatura reduzida T e campo externo reduzido h as soluções são paramagnéticas, em baixos valores de T e h elas são ferromagnéticas. As fronteiras entre essas regiões \mathbf{P} e \mathbf{F} é uma linha de fase de segunda ordem para altas temperatura reduzida e em baixa temperatura existe uma região de coexistência das fases \mathbf{P} e \mathbf{F} , chamada fase mista. A região de coexistente é separada das fase \mathbf{P} e \mathbf{F} por uma linha de fase de primeira ordem. O sistema exhibe apenas um ponto tricrítico dinâmico, onde as duas linhas de transição de primeira ordem se unem, sinalizando a mudança de primeira ordem para a segunda.

No caso de anisotropia positiva, quatro diferentes diagramas de fases são encontrados, dependendo dos valores de d . O primeiro diagrama de fases é representado pela Figura 5.3(b), onde $d = 0.3$, ele é similar ao da Figura 5.3(a), diferenciando apenas por apresentar uma região coexistente para valores mais baixos de T e h . A fronteira entre esta região coexistente $\mathbf{P}+\mathbf{F}$ e \mathbf{F} é uma linha de fase de primeira ordem. O segundo, representado pela Figura 5.3(c), onde $d = 0.525$, mostra que o sistema exhibe dois pontos tricríticos dinâmicos, um ocorre similarmente como nos diagramas anteriores e o outro ocorre para baixo valores de h . A linha de transição fase de segunda ordem entre as fases \mathbf{F} e \mathbf{P} não termina em $h = 0$, a linha de transição fase de primeira ordem que separa as regiões \mathbf{F} e $\mathbf{P}+\mathbf{F}$ se funde com a linha de fase de segunda ordem e um segundo ponto tricrítico

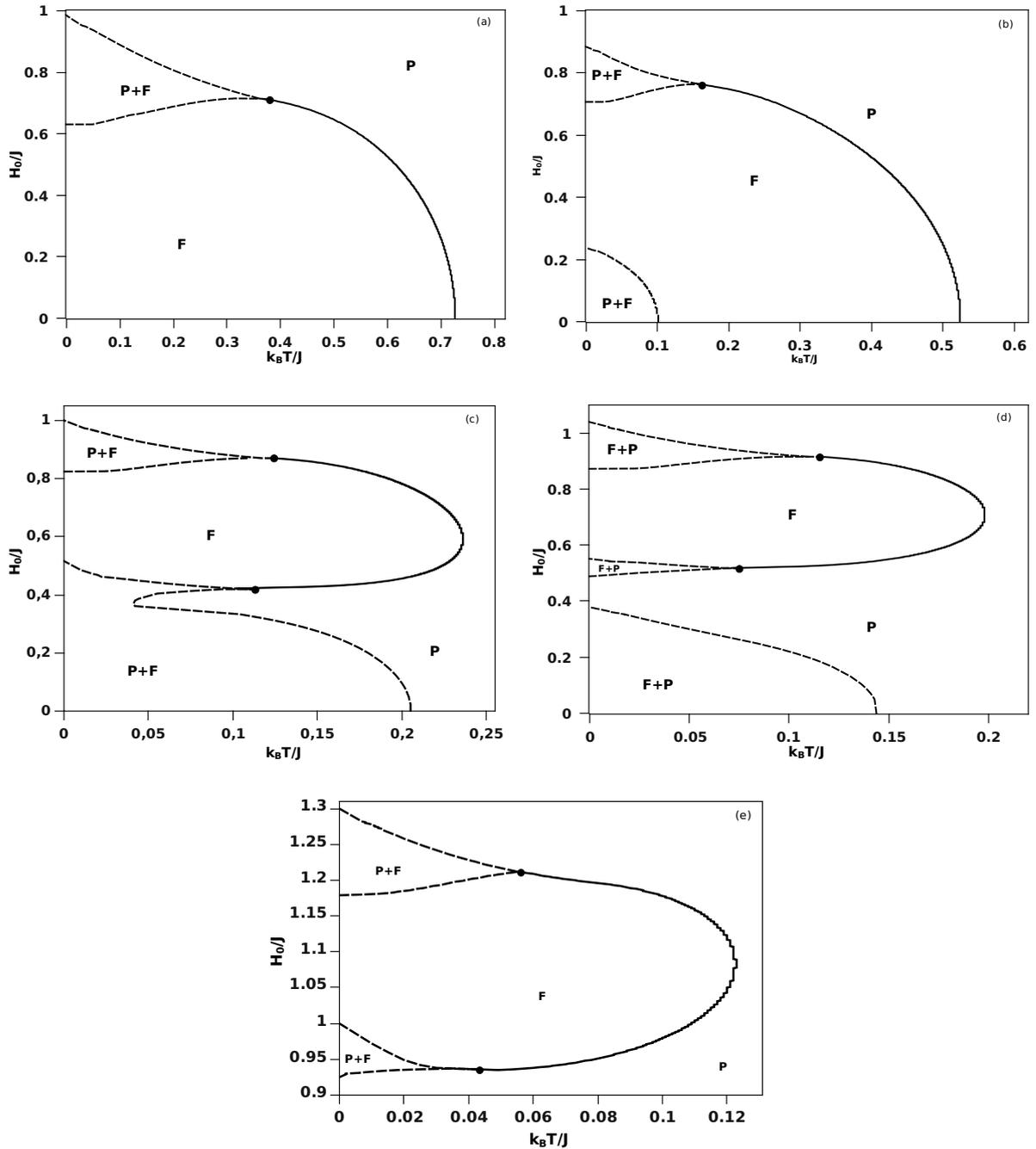
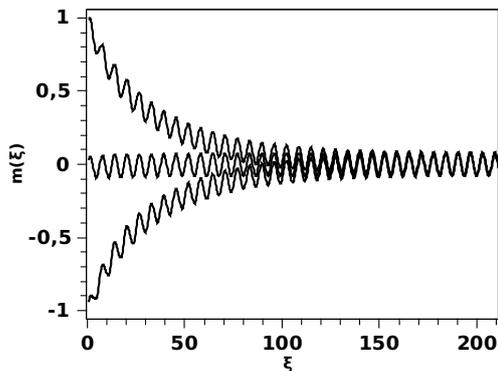
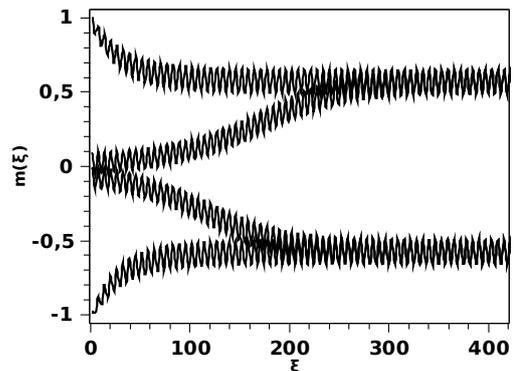


Figura 5.3: Diagramas de fases no plano $T - H_0$ do modelo Blume-Capel de spin-1 cinético com campo oscilante usando aproximação de campo médio (MFA)[136]. Regiões paramagnéticas **P**, ferromagnéticas **F**, e coexistência de regiões **F+P** são encontradas. As linhas tracejadas e sólida representam transições de fases de primeira e segunda ordem, respectivamente. Os círculos pretos correspondem os pontos tricríticos. (a) $d = -0.2$, (b) $d = 0.3$, (c) $d = 0.525$, (d) $d = 0.6$ e (e) $d = 1.0$.

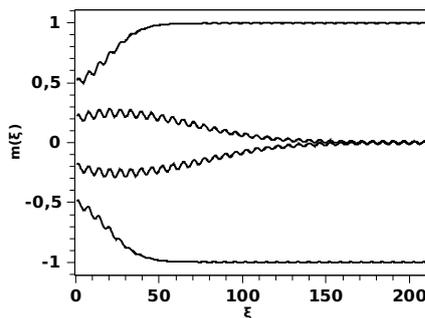
dinâmico ocorre. A linha de transição de fase de primeira ordem existe para valores baixo de campo externo reduzido h , ela separa a região coexistente da região **F**, e também da fase **P**. O terceiro diagrama de fases obtido escolhemos $d = 0.6$, conforme ilustrado na Figura 5.3(d), esse diagrama de fases é bastante complexo, ele apresenta os dois pontos tricríticos dinâmicos e a baixa temperatura reduzida apresenta um intervalo de h onde existe uma região paramagnética. O sistema apresenta três regiões coexistentes, que a baixa temperatura reduzida é adicionada entres as fases **P** e **F**. E, finalmente, o diagrama de fases para $d = 1$, Figura 5.3(e), é similar ao terceiro tipo de diagrama para d positivos, exceto que, a região coexistente para valores baixos de h e T desaparece. Toda esta discussão de MFA tem sido feita por Keskin e colaboradores [136], aqui apenas reproduzimos a fim de comparação com os nossos resultados de EFT.



(a) Exibindo a fase paramagnética (**P**), $d = 1.8$, $h = 2.9$ e $T = 1.2$.



(b) Exibindo a fase ferromagnética (**F**), $d = 1.8$, $h = 2.2$ e $T = 0.3$.



(c) Exibindo a região de coexistência (**P+F**), $d = 1.8$, $h = 0.75$ e $T = 0.3$.

Figura 5.4: Evolução temporal da magnetização (m) do modelo Blume-Capel cinético na presença de um campo oscilante obtido na aproximação de campo efetivo (EFT).

Na teoria de campo efetivo (EFT) efeitos de correlações foram levados em consi-

deração, sendo um formalismo um pouco mais aprimorado do que MFA discutido anteriormente. Escolhendo apropriadamente valores para os parâmetros reduzidos T , h e d , fixando $\omega = 2\pi$, mostramos na Figura 5.4 a evolução temporal da magnetização nas três possíveis regiões. No caso da região paramagnética (Figura 5.4 (a)) e ferromagnética (Figura 5.4 (b)), o sistema oscila ao redor de $m = 0$ e $m \neq 0$, respectivamente, caracterizando, assim, um estado desordenado ($m = 0$) e ordenado ($m \neq 0$) magneticamente. Nestes dois casos, a evolução do sistema independe da condição inicial. Por outro lado, no caso da região mista $\mathbf{F}+\mathbf{P}$ a evolução temporal fortemente depende da condição inicial. Escolhendo duas condições iniciais distintas, na Figura 5.4 (c) temos que a magnetização oscila ao redor de $m = 0$ ou $m \neq 0$, caracterizando muito bem esta região de coexistência. Do ponto de vista qualitativo, os três comportamento para a evolução temporal da magnetização são equivalentes aos obtidos via MFA, conforme ilustrado na Figura 5.1. Na EFT, o comportamento da magnetização média e o expoente de Lyapunov em função da temperatura reduzida é mostrado na Figura 5.5. Nesta figura, ilustra-se a variação térmica de \mathbf{M} para $d = 1.5$, $h = 0.1$ e duas condições iniciais diferentes. As linhas grossas e finas correspondem a magnetização média e o expoente de Lyapunov, respectivamente. A magnetização média em função da temperatura reduzida apresenta dois tipos de comportamentos, esses comportamentos dependem dos valores de d e das condições iniciais. Na Figura 5.5(a) a condição inicial usada é $\mathbf{M} = 0$, o sistema sofre duas sucessivas transições de fase. A primeira, é transição de primeira ordem, a magnetização média sofre uma descontinuidade com o aumento da temperatura reduzida, o sistema muda da fase paramagnética para a fase ferromagnética em uma temperatura de $T_t = 0.350$. A segunda, é transição de segunda ordem, a magnetização média decresce continuamente a zero com o aumento da temperatura reduzida, o sistema muda da fase ferromagnética para a fase paramagnética em $T_c = 1.550$. Isso significa que existe uma região de coexistência $\mathbf{P}+\mathbf{F}$ no sistema, esse fato pode ser visto no diagrama de fases, veja a Figura 5.6(c)-5.6(d). Este comportamento não se apresenta para baixos valores de d . Na Figura 5.5(b), a condição inicial é $\mathbf{M} = 1$, a magnetização média sofre apenas uma transição de fase, decrescendo continuamente a zero com aumento da temperatura reduzida caracterizando uma transição de fase de segunda ordem, a temperatura de transição de fase é $T_c = 1.550$ a mesma encontrada na Figura 5.5(b), esse comportamento acontece para todos os valores de d . Os diagramas de fases do sistema são apresentados nas Figu-

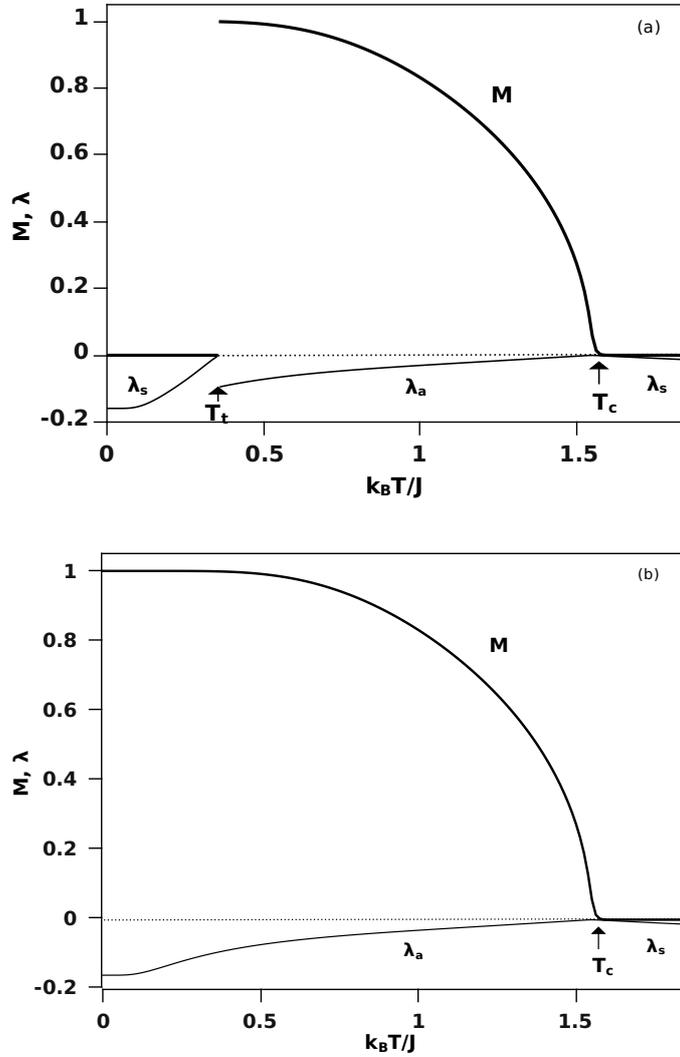


Figura 5.5: A magnetização média e o expoente de Lyapunov dependentes da temperatura reduzida para o modelo Blume-Capel cinético com campo externo oscilante na aproximação de campo efetivo (EFT) numa rede quadrada ($z=4$) para $d = 1.5$ e $h = 0.1$. A linha cheia e fina correspondem a magnetização média e o expoente de Lyapunov, respectivamente. (a) condição inicial na evolução temporal $m(0) = 0$ (b) $m(0) = 1$.

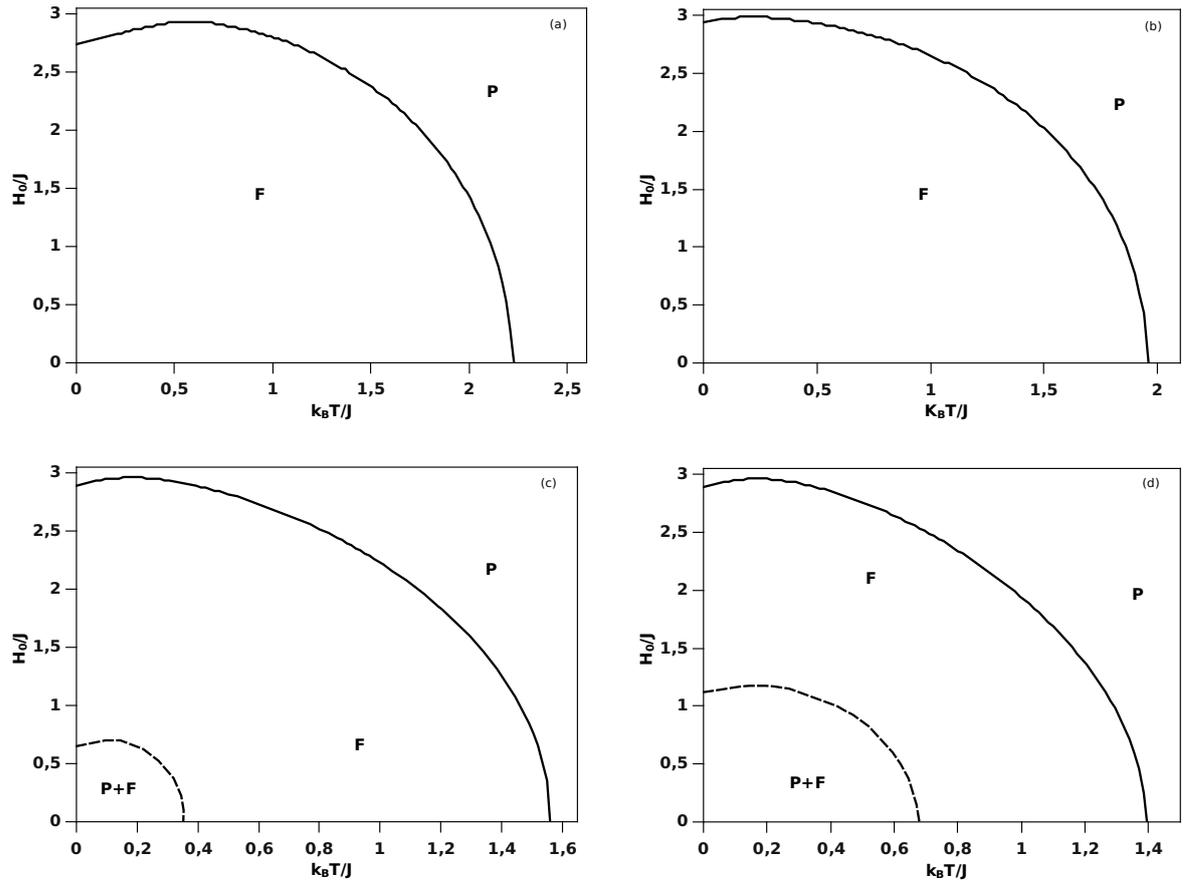


Figura 5.6: Diagramas de fases do modelo Blume-Capel cinético com campo oscilante no plano $T - H_0$, obtido via aproximação de campo efetivo (EFT). A região paramagnética **P**, ferromagnética **F**, e coexistência de regiões **F+P** são encontradas. As linhas tracejadas e sólidas representam transições de fase de primeira e segunda ordem, respectivamente. (a) $d = -0.2$, (b) $d = 0.7$, (c) $d = 1.5$ e (d) $d = 1.8$

ras 5.6(a)- 5.6(e). Nestes diagramas de fases as linhas pontilhadas e sólidas representam as linhas de transições de fases de primeira e segunda ordem, respectivamente. Apenas dois tipos de diagramas de fases foram obtidos, os que não apresentam regiões coexistentes (**F+P**) e os que apresentam. O primeiro tipo não apresenta uma região coexistente (**F+P**), tem-se uma região ordenada (**F**) que é delimitada por uma linha de transição de segunda ordem de uma região desordenada (**P**), essa região ferromagnética diminui para valores grandes de d , compare as Figuras 5.6(a) e 5.6(b). Esse tipo de diagrama de fases ocorre para $d \leq 1$. O segundo tipo de diagrama é similar ao anterior, exceto que para baixos valores de T e h existe a região (**P+F**), região que cresce com o aumento de d , até o sistema se tornar totalmente paramagnético. Esse tipo de diagrama de fases ocorre

para $d > 1$, veja as Figuras 5.6(b)-5.6(e).

5.6 Conclusão

Neste capítulo, analisamos nas aproximações de campo médio (MFA) e de campo efetivo (EFT) apenas os estados estacionários do modelo de Blume-Capel com campo externo oscilante, uma vez que não foi possível obter uma expressão para a energia livre e com isto analisar os estados do sistema no equilíbrio termodinâmico. Usamos a dinâmica estocástica de Glauber para descrever a evolução temporal das grandezas termodinâmicas, particularmente, o comportamento da magnetização dependente do tempo e o comportamento da magnetização média em função da temperatura reduzida, anisotropia reduzida e campo magnético externo reduzido. As estabilidades das soluções estacionárias foram analisadas através do cálculo do expoente de Lyapunov, que nos permite determinar os pontos e as ordens das transições de fase.

Analisando a evolução temporal da magnetização do sistema ferromagnéticos, usando os dois métodos aproximativos, observamos que o sistema apresenta regiões paramagnéticas (P), ferromagnéticas (F) e mistas (P+F). O comportamento do parâmetro de ordem dinâmico pode depender das condições iniciais do sistema. Ele pode sofrer mudança em seu estado de forma descontínua (transição de primeira ordem) ou contínua (transição de segunda ordem).

O comportamento do sistema é fortemente influenciado pela interação de campo cristalino, resultados vistos através dos diagramas de fases. Usando MFA, para d negativos, o sistema se comporta como uma dinâmica de um sistema ferromagnético misto com spin-1/2 e spin-1 e também como a cinética do modelo de Ising-1/2 [136]. Nos diagramas de fases, em altas temperaturas o sistema apresenta regiões paramagnéticas, e em baixos valores de T regiões ferromagnéticas. A fronteira entre essas duas regiões é uma linha de transição de fase de segunda ordem para altas temperaturas, e uma região de coexistência delimita por linhas de primeira ordem em baixas temperaturas. Um ponto tricrítico separa a região de coexistência da linha de transição crítica. Para outros valores de d observamos quatro diferentes diagramas de fases foram encontrados que apresentam regiões ordenadas, desordenadas, mistas e pontos multicríticos. Com aproximação de campo efetivo, apenas dois tipos de diagramas de fases foram obtidos: os

que não apresentam regiões de coexistência, onde uma região ordenada que é delimitada por uma linha de transição de fase de segunda ordem de uma região desordenada, para $d < 1$, e os que apresentam, para baixos valores de T e h região de coexistência, que cresce com o aumento de d até o sistema se tornar totalmente paramagnético em $d = 2$. Com esta aproximação, não se observou a presença de pontos multicríticos. É evidente que a anisotropia contrária ao ordenamento magnético destrói esse ordenamento.

Capítulo 6

Considerações Finais

Neste trabalho, analisamos nas aproximações de campo médio (MFA) e de campo efetivo (EFT) os estados estacionários e de equilíbrio dos modelos de spins: modelo de Ising com campo aleatório (RFIM), de Blume-Capel (BC) sem campo externo. Para o modelo de Blume-Capel com campo externo oscilante com o tempo estudamos apenas os estados estacionários, por que não é possível analisar os estados do sistema no equilíbrio termodinâmico. Usamos a dinâmica estocástica de Glauber para descrever a evolução temporal das grandezas termodinâmicas, particularmente o comportamento da magnetização dependente do tempo e o comportamento da magnetização média em função da temperatura reduzida, anisotropia reduzida e campo magnético externo reduzido. As estabilidades das soluções estacionárias foram analisadas através do cálculo do expoente de Lyapunov, que nos permite determinar os pontos das transições de fase. Os resultados são apresentados através dos diagramas de fases, e nos casos do RFIM e do BC sem campo magnético externo foi possível fazer uma comparação dos resultados da dinâmica com a solução do equilíbrio.

Para os dois modelos que permitem a análise dos estados de equilíbrio termodinâmico, RFIM e Blume-Capel sem campo magnético externo, os diagramas de fases apresentam características qualitativas semelhantes. Mostramos que o sistema apresenta a existência de duas regiões, uma magneticamente ordenada \mathbf{F} e outra desordenada \mathbf{P} , ambas limitadas por uma linha de transições de fases que pode ser de primeira ordem e ou de segunda ordem, tendo um ponto tricrítico separando estas duas linhas. Eles mostram que para temperatura elevadas, a solução estacionária da dinâmica estocástica de Glauber são iguais à solução de equilíbrio termodinâmico. No entanto, em baixas temperaturas, essas

soluções são diferentes, sendo que usando a MFA obtém-se distintos valores em $T = 0$ para $H_c(D_c)$ no RFIM (BC), enquanto a EFT encontra mesmos valores descrevendo corretamente o estudo fundamental. No caso do modelo BC, o valor de $D_c = \frac{zJ}{2}$ é obtido de forma exata, e no caso RFIM comparamos nossa estimativa de $H_c = 4J$ como o valor encontrado recentemente usando simulação de Monte Carlo [111].

No caso do modelo de Blume-Capel com campo externo oscilante, observa-se que o comportamento do sistema é fortemente influenciado pela interação de campo cristalino (anisotropia de íon único) D . Usando MFA, para d negativos, apenas um tipo de diagrama de fases foi obtido, no qual em altas temperaturas as soluções são paramagnéticas, e em baixos valores de T elas são ferromagnéticas. A fronteira entre essas duas regiões é uma linha de transição de fase de segunda ordem para alta temperatura reduzida, e uma região coexistente para temperaturas baixas. A região coexistência é separada das fase **P** e **F** por linhas de primeira ordem, exibindo apenas um ponto tricrítico dinâmico. Por outro lado, para d positivos, quatro diagramas de fases diferentes foram encontrados. O primeiro, para $d = 0.3$, é similar ao caso de d negativos, diferenciando-se apenas por apresentar uma região de coexistência para valores muito baixos de T e h . A fronteira entre esta região coexistente e a região ferromagnética é uma linha de primeira ordem. O segundo, para $d = 0.525$, mostra que o sistema exibe dois pontos tricríticos dinâmicos. Um ocorre como nos diagramas anteriores e o outro ocorre para baixo valores de h . A linha de segunda ordem entre as fases **F** e **P** não termina em $h = 0$, enquanto a linha de fase de primeira ordem que separa as regiões **F** e **P+F** se funde com a linha de segunda ordem e um segundo ponto tricrítico dinâmico surge. A linha de primeira ordem existe para valores baixos do campo externo reduzido h . Ela separa a região de coexistência da região ferromagnética, e também da fase paramagnética. O terceiro, para $d = 0.6$, é bastante interessante. Ele apresenta os dois pontos tricríticos dinâmicos e, a baixa temperatura reduzida apresenta um intervalo de h onde existe uma região paramagnética. O sistema apresenta três regiões de coexistência adicionadas entre as fases **P** e **F** a baixa temperatura reduzida. Finalmente, o quarto para $d = 1$, é similar ao terceiro tipo de diagrama para d positivos, exceto que a região de coexistência para valores baixos de h e T desaparece.

Com EFT, apenas dois tipos de diagramas de fases foram obtidos, os que não apresentam regiões de coexistência e os que apresentam. O primeiro tipo, ocorre para $d \leq 1$.

Ele apresenta uma região ordenada que é delimitada por uma linha de transição de fase de segunda ordem de uma região desordenada. A região ferromagnética diminui com o aumento d , e conseqüentemente, a região paramagnética aumenta. O segundo tipo de diagrama de fases, ocorre para $d > 1$. Ele é similar ao anterior, exceto que para baixos valores de T e h existe uma região de coexistência, que cresce com o aumento de d , até o sistema se tornar totalmente paramagnético em $d > 2$.

Como resultados desta dissertação publicamos, preliminarmente, dois trabalhos científicos (ver apêndice D). O primeiro deles está relacionado ao capítulo 3 e o outro à análise de campo médio feita no capítulo 4. Estão em fase de preparação mais dois artigos científicos relacionados aos resultados de EFT do capítulo 4, em particular a proposta do funcional da energia livre para o modelo BC, e o outro aos resultados do capítulo 5.

Apêndice A

Equação dinâmica para o modelo de Ising com campo oscilante

A equação que descreve a evolução temporal dos processos markovianos é dada por,

$$\frac{dP(\vec{\sigma})}{dt} = \sum_{\sigma'} [P(\vec{\sigma}', t)\omega(\sigma_i) - P(\vec{\sigma}, t)\omega(\sigma'_i)]. \quad (\text{A.1})$$

Multiplicando esta equação por uma variável de spin σ_k temos,

$$\sigma_k \frac{dP(\vec{\sigma})}{dt} = \sigma_k \sum_{\sigma'} [P(\vec{\sigma}', t)\omega(\sigma_i) - P(\vec{\sigma}, t)\omega(\sigma'_i)]. \quad (\text{A.2})$$

Considerando que a média de um observável é dada por $\langle \sigma_k \rangle(t) = \sum_{\sigma} \sigma_k P(\sigma, t)$, podemos escrever que a dependência temporal de $\langle \sigma_k \rangle$ seja,

$$\frac{d\langle \sigma_k \rangle}{dt} = \langle \sum_{\sigma} \sigma_k \omega(\sigma_k) \rangle - \langle \sigma_k \rangle \sum_{\sigma'} \omega(\sigma'_k). \quad (\text{A.3})$$

Para o modelo de Ising com campo oscilante, onde as variáveis de spins podem assumir os valores ± 1 , as taxa de transições de Glauber são:

$$\begin{cases} \omega(-1, +1) = \omega(+1, +1) = \frac{1}{\tau} \frac{1}{1+e^{-2\beta a}} \\ \omega(-1, -1) = \omega(+1, -1) = \frac{1}{\tau} \frac{e^{-2\beta a}}{1+e^{-2\beta a}} \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

onde $a = J \sum_{\delta}^z \sigma_{i+\delta} + H_0 \cos(\eta t)$ e $\omega(\sigma_i, \sigma'_i)$ não depende dos valores σ_i . Substituindo os possíveis valores das variáveis de spins em Eq.(A.3) temos,

$$\frac{d\langle \sigma_k \rangle}{dt} = \langle \omega(1) - \omega(-1) \rangle - \langle \sigma_k \rangle (\omega(1) + \omega(-1)). \quad (\text{A.5})$$

Portanto, a equação para evolução temporal da magnetização é dada por

$$\frac{d\langle\sigma_k\rangle}{dt} = \left\langle \frac{1}{\tau} \tanh(\beta a) \right\rangle - \langle\sigma_k\rangle \frac{1}{\tau} \quad (\text{A.6})$$

ou

$$\tau \frac{d\langle\sigma_k\rangle}{dt} = \left\langle \tanh\left(\beta J \sum_{\delta}^z \sigma_{i+\delta} + \beta H_0 \cos(\eta t)\right) \right\rangle - \langle\sigma_k\rangle \quad (\text{A.7})$$

Apêndice B

Métodos numéricos

A importância do estudo das equações diferenciais ordinárias justifica-se pelo fato de ocorrerem com muita frequência na modelagem matemática de diferentes situações práticas, principalmente nas áreas de física, engenharia, biologia, economia, biomedicina, etc [139].

Em mecânica estatística é comum empregarmos métodos numéricos para solucionar as equações diferenciais são fundamentais, pois com frequência soluções exatas não são possíveis ou muito difícil de serem determinadas.

A seguir, apresentaremos a síntese de alguns métodos numéricos para a resolução de equações diferenciais ordinárias, consideramos que o leitor conheça sobre equação diferencial ordinária.

B.1 Método de diferença finitas

O método de diferenças finitas (MDF) se baseia na aproximação de derivadas por diferenças finitas, que obtém-se da série de Taylor.

Considerando um problema de valor inicial (PVI),

$$\begin{cases} y' &= f(x, y) \\ y(x_0) &= y_0 \end{cases}$$

O algoritmo para resolver a equação diferencial de primeira ordem para um valor inicial é

1. Declare:

- a) Função $f(x, y)$.
- b) Condição inicial: $y(x_0), y_0$
- c) Intervalo $[a, b]$, onde : $a = x_0$.
- d) Número de subintervalos N e calcule: $h = \frac{(b-a)}{N}$.

2. Para $n=0, \dots, (N-1)$, faça:

Calcule:

início

$$x_{n+1} = x_n + h$$

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$$

fim

B.2 Método de Runge-Kutta

Dentre os métodos numéricos para calcular a solução aproximada de problemas de valor inicial mais utilizados, pela sua simplicidade e precisão, estão os chamados métodos de Runge-Kutta, ou melhor, métodos de Carl David Tolmé Runge (1856-1927) e Wilhelm Kutta (1867-1944). Esses métodos apresentam precisão equivalente aos métodos de Taylor, porém, com a vantagem de evitar o cálculo de derivadas de ordem elevada que além, da complexidade analítica, exigem um significativo esforço computacional. Ao contrário disto, os métodos de Runge-Kutta são baseados na avaliação da função $f(x, y)$ em alguns pontos. Considere o problema de valor inicial:

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

Para esse problema, o método geral de Runge-Kutta é definido por:

$$y_{n+1} = y_n + h\phi_R(x_n, y_n, h)$$

onde

$$\phi_R(x_n, y_n, h) = c_1k_1 + c_2k_2 + \dots + c_Rk_R$$

$$c_1 + c_2 + \dots + c_R = 1$$

com

$$k_1 = f(x_n, y_n)$$

$$\begin{aligned}
k_2 &= f(x_n + ha_2, y_n + h(b_{21}k_1)) & a_2 &= b_{21} \\
k_3 &= f(x_n + ha_3, y_n + h(b_{31}k_1 + b_{32}k_2)) & a_3 &= b_{31} + b_{32} \\
k_4 &= f(x_n + ha_4, y_n + h(b_{41}k_1 + b_{42}k_2 + b_{43}k_3)) & a_4 &= b_{41} + b_{42} + b_{43} \\
&\vdots \\
k_R &= f(x_n + ha_R, y_n + h(b_{R1}k_1 + \dots + b_{R,R-1}k_{R-1})) & a_R &= b_{R1} + b_{R2} + \dots + b_{R,R-1}
\end{aligned}$$

Note que a aproximação y_{n+1} é calculada a partir de y_n e uma “media” de valores da função $f(x, y)$ em vários pontos. Os parâmetros c_r , a_r , b_r na definição de um método de Runge-Kutta podem ser escolhidos de modo que o método tenha a mesma ordem de um método de Taylor, o que define a ordem dos métodos de Runge-Kutta.

O algoritmo para o método de Runge-Kutta de quarta ordem (MRK04) para resolver uma equação diferencial de primeira ordem para um valor inicial é

1. Declare:

- a) Função $f(x, y)$.
- b) Condição inicial: $y(x_0), y_0$
- c) Intervalo $[a, b]$, onde : $a = x_0$.
- d) Número de subintervalos N e calcule: $h = \frac{(b-a)}{N}$.

2. Para $n=0, \dots, (N-1)$, faça:

Calcule:

início

$$x_{n+1} = x_n + h$$

$$k_1 = f(x_n, y_n)$$

$$k_2 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_1)$$

$$k_3 = f(x_n + \frac{1}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_2)$$

$$k_4 = f(x_n + h, y_n + hk_3)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

fim

B.3 Métodos de Previsor Corretor

Outros métodos para resolver equações diferenciais ordinárias são os chamados de métodos previsor corretor são baseado no teorema fundamental do cálculo, que por ser escrito por

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} y'(x)dx = y(x_{n+1}) - y(x_n)$$

Como $y' = f(x, y(x))$, temos

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x))dx \quad (\text{B.1})$$

A equação definida na equação anterior pode ser aproximada por diferentes métodos numéricos e, portanto, podemos ter diferentes métodos de resolver a equação diferencial $y' = f(x, y)$. Por exemplo, se usarmos a regra dos retângulos (isto é, a função é considerada constante no intervalo de integração), com $h = x_{n+1} - x_n$:

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x))dx = hf(x_n, y(x_n))$$

e, como a notação para aproximação de $y(x_n)$ dada por $y_n \cong y(x_n)$, segue de Eq.(B.1):

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + hf(x_n, y_n)$$

que consiste exatamente no método de Euler. Outros métodos de integração podem ser utilizados para resolver a integral contida em Eq.(B.1), por exemplo o método de trapézio, método de Simpson, método de Romberg, etc. Alguns métodos são chamados implícitos, pois têm a incógnita y_{n+1} , de forma implícita. Os métodos nos quais y_{n+1} é calculado explicitamente, são chamados métodos explícitos (método de Euler, por exemplo). No método previsor corretor, se usa um método explícito para uma aproximação de um valor inicial de y_{n+1} , chamado previsor, e depois um método corretor para corrigir a solução. Um exemplo de previsor corretor é o método de Adams-Moulton (MAM). O Adams Moulton utiliza o fato de que iterações (com algum dos outros métodos para os primeiros passos) anteriores já foram realizadas, isto é, será necessário guardar as informações dos valores pré calculados de y , com isto é construído um polinômio que aproxima a derivada da função e consegue-se extrapolar para o próximo intervalo.

O número de iterações anteriores a ser utilizadas determinará o grau do polinômio, sendo assim a ordem do método será o grau do polinômio + 1. Foi implementado um Adams-Moulton de 5ª ordem, preditor e corretor:

$$\text{Preditor : } y_{n+1} = \frac{h}{24}(55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3})$$

$$\text{Corretor} : y_{n+1} = \frac{h}{24}(9f_{n+1} - 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2})$$

Sendo que: $f_n, f_{n-1}, f_{n-2}, f_{n-3}$ são os valores da função calculadas utilizando alguma das técnicas de passo único, nos primeiros passos, e daí por diante os valores das 4 iterações anteriores são armazenadas.

Este método tem algumas vantagens em relação aos anteriores pois usando o fato que já temos alguns passos calculados, para conseguir uma precisão equivalente ao Runge-Kutta 4ª ordem precisaremos apenas calcular duas vezes a função, ao invés de 4 vezes como no Runge-Kutta.

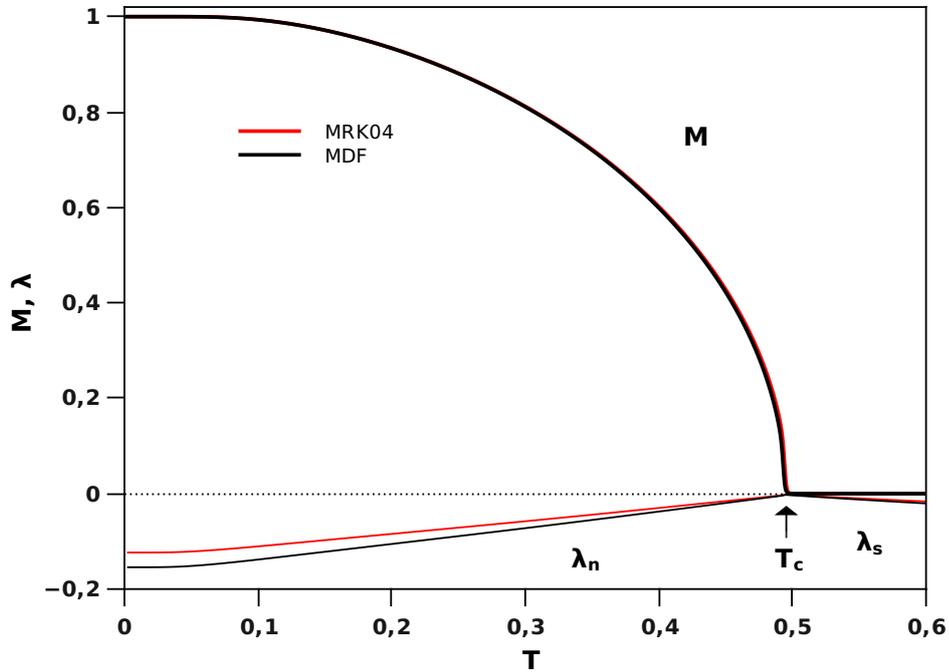


Figura B.1: A dependência térmica da magnetização média M (linha sólida grossa) e do expoente de Lyapunov λ (linha sólida fina) para o modelo de Blume-Capel com campo oscilante na aproximação de campo médio para $d = 0.25$, $h = 0.4$ e usando os métodos MDF (linha sólida preta) e MRK04 (linha sólida vermelha). O índice s indica a solução simétrica e o n indica a anti simétrica. A magnetização média decresce continuamente com o aumento da temperatura reduzida e, em $T_c \simeq 0.496$, sofre uma transição de fase.

As Figuras B.1 e B.2 mostram a magnetização média em função da temperatura reduzida para o modelo de Blume-Capel com campo oscilante Eq.(5.8) com aproximação de campo médio para $d = 0.25$, $h = 0.4$. Na Figura B.1 temos a solução para o método de diferenças finitas (linha sólida preta) e para o método de Runge Kutta de quarta ordem

(linha sólida vermelha). Na Figura B.2 temos a solução obtida pelo método previsor corretor de Adams-Moulton com integração de Romberg por M. Keskin e O. Canko [?]. Observa-se que os três métodos apresentam precisões equivalentes, acredita-se que isso se deva por tratar-se da solução de uma equação diferencial de primeira ordem, nos três casos, o sistema sofre transição de fase em $T_c \approx 0.495$. A diferença entre os métodos se apresenta quando se observa o tempo computacional, o método de Adams-Moulton é mais sofisticado que os outros métodos analisados.

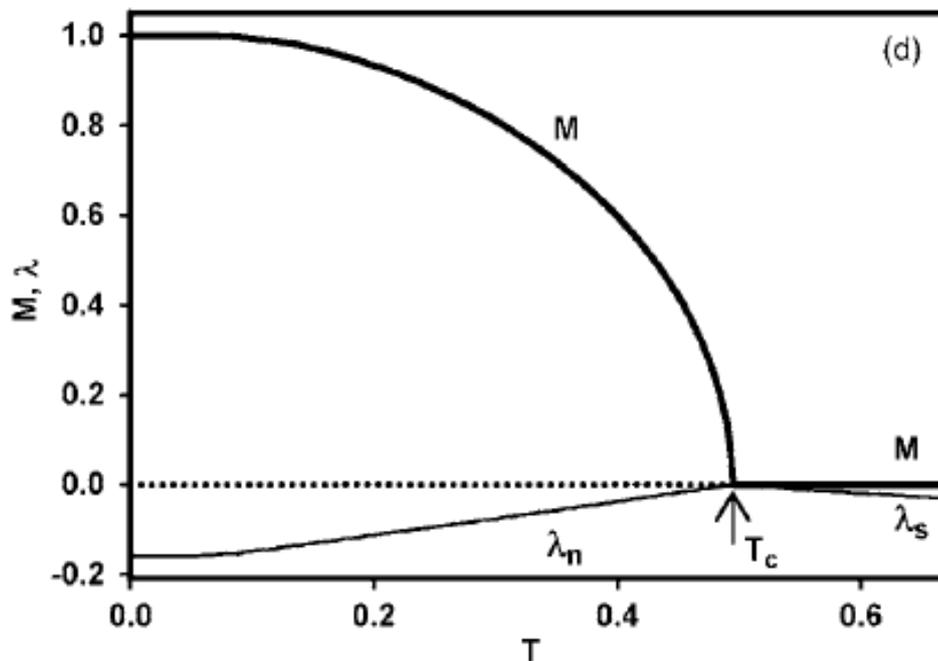


Figura B.2: A dependência térmica da magnetização média M (linha sólida grossa) e do expoente de Lyapunov λ (linha sólida fina) para o modelo de Blume-Capel com campo oscilante na aproximação de campo médio para $d = 0.25$, $h = 0.4$ e usando o método MAM. O índice s indica a solução simétrica e o n indica a anti simétrica. A magnetização média decresce continuamente com o aumento da temperatura reduzida e, em $T_c = 0.4950$, sofre uma transição de fase de primeira ordem.

B.4 Método de Newton-Raphson

Vamos aprender o método de Newton-Raphson. Ele cobre as desvantagens da bisseção, isto é, é mais rápido e encontra raízes que tocam o eixo x , mas também apresenta duas desvantagens:

- nem sempre converge
- precisa do cálculo da derivada da função, o que nem sempre é uma tarefa fácil

Para desenvolver este método [141], vamos utilizar a expansão de uma função em série de Taylor em torno do ponto x_0 . Ela é escrita como:

$$f(x) = f(x_0) + (x - x_0)f'(x_0) + \frac{(x - x_0)^2}{2!}f''(x_0) + \dots$$

Mantendo apenas os dois primeiros termos da série temos

$$f(x) \approx f(x_0) + (x - x_0)f'(x_0)$$

Esta é a equação de uma reta que passa pelo ponto $f(x_0)$ com inclinação $f'(x_0)$, isto é, ela é tangente a curva no ponto x_0 .

Supondo que a função $f(x)$ seja bem aproximada por uma reta, o ponto que essa reta cruza o eixo x , está próximo ao ponto que a função cruza o eixo x . Este ponto x para o qual a função cruza o zero será:

$$0 = f(x_0) + (x - x_0)f'(x_0)$$

$$-f(x_0) = (x - x_0)f'(x_0)$$

$$x = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$$

Esse ponto x é então usado no lugar de x_0 como um novo valor inicial melhorando assim a aproximação. Essa idéia de se usar um valor para gerar um outro melhor é chamada de iteração. A Figura B.3 ilustra a idéia do método.

Mudando ligeiramente a notação, podemos calcular o $(i + 1)$ éximo valor usando o i ésimo valor através da expressão

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

No Newton-Raphson damos um valor inicial e dependendo deste valor nem sempre o método converge, pois podemos ter o caso em que a reta tangente a função no ponto inicial não representa bem a função naquele ponto.

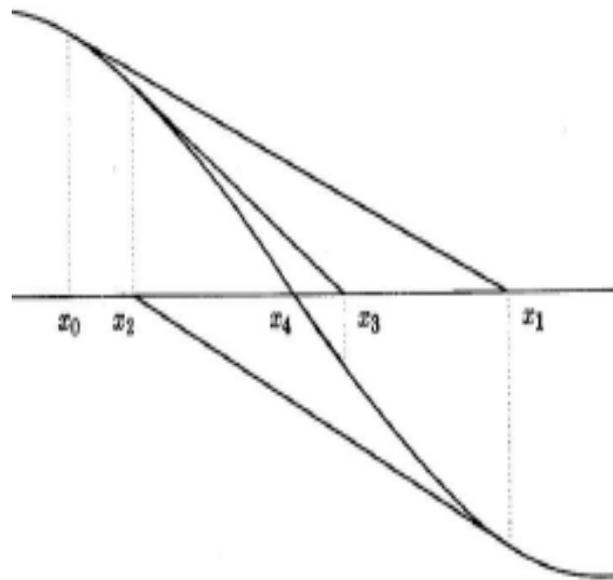


Figura B.3: Newton-Raphson em ação. Começando com x_0 , as sucessivas iterações se aproximam do zero da função. A posição de x_4 e do zero real da função são indistinguíveis nesta escala

Apêndice C

Estabilidade local e expoente de Lyapunov

Nesta apêndice, faremos uma síntese de dois conceitos básicos relacionados com a estabilidade de soluções. Considere o espaço de fase associado a uma determinada dinâmica autônoma, em cada ponto deste espaço está em correspondência com um única trajetória que é parametrizado no tempo t . Em qualquer ponto dessa curva queremos saber o que acontece se nos movemos em uma direção infinitesimalmente não tangente. Depois de um aumento de δt , a nova trajetória poderia ter ampliada ou reduzida do valor inicial, o que dá uma medida de comportamento de estabilidade local[140]. Por simplicidade considerarmos o sistema

$$\frac{d}{dt}y = f(y), \quad (\text{C.1})$$

a condição inicial $y_0 = y(t_0)$ define a curva γ_0 ou $y(t, \rho_0)$. No momento t_0 é produzido a variação δy_0 e a nova curva solução γ expressa como $y = y(t, \rho_0) + \delta y$ onde a variação δy é definida por

$$\frac{d}{dt}\delta y = \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_{\gamma_0}\delta y, \quad (\text{C.2})$$

integrando a Eq.(C.2) se obtém

$$\frac{\delta y(t)}{\delta y(t_0)} = \exp\left(\int_{t_0}^t \frac{\partial f}{\partial y} dt'\right), \quad (\text{C.3})$$

quando valores de t são próximos a t_0 a variação se aproxima para

$$\frac{\delta y(t)}{\delta y(t_0)} \equiv \exp\left(\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_{t_0}\delta t\right). \quad (\text{C.4})$$

Quando $(\frac{\partial f}{\partial y})_{t_0} > 0$, dizemos que a solução $y(t, \rho_0)$ é localmente instável em ρ_0 . Caso contrário, $(\frac{\partial f}{\partial y})_{t_0} < 0$, é localmente estável. Por tanto, para cada ponto da trajetória temos definido a estabilidade local.

Um segunda questão de interesse na teoria de sistemas dinâmicos é determinar como uma medida de quanto se separam a tempo infinito diferentes trajetórias geradas com condições iniciais muito próximas e definir um parâmetro que quantifique o movimento caótico. Como se sabe, um desses parâmetros é expoente de Lyapunov.

Os expoentes de Lyapunov são quantidades importantes no estudo de sistemas dinâmicos e amplamente utilizados no contexto de sincronização. Eles são uma medida média da divergência ou convergência exponencial de órbitas próximas, fornecendo uma medida da sensível dependência às condições iniciais. Seja a evolução temporal de um sistema dinâmico a partir de duas condições iniciais muito próximas, x_0 e $x_0 + \varepsilon_0$. Decorrido um intervalo de tempo t tem-se:

$$\varepsilon(t) \sim \varepsilon_0 e^{\lambda t} \quad (\text{C.5})$$

e o expoente de Lyapunov λ fornece a taxa média de divergência das trajetórias. Se λ for positivo, teremos uma divergência exponencial de trajetórias inicialmente próximas, um forte indicador para caos. Também podemos encontrar expoentes de Lyapunov negativos, indicando a existência de um ponto estável x_0 , ou ainda, expoentes iguais a zero, onde duas trajetórias se afastam ou se aproximam de forma mais lenta que exponencial. Finalmente, se o sistema for caracterizado por ruído aleatório, então o expoente máximo será infinito.

Considerando que a magnetização seja proporcional a exponencial do tempo, ou seja,

$$m = Ae^{\lambda t}$$

e que a taxa da magnetização em relação ao tempo pode ser definida como

$$\tau \frac{dm}{dt} = W(m).$$

Então em um intervalo de tempo temos,

$$\tau \lambda (m_2 - m_1) = W(m + \Delta m) - W(m).$$

Portanto, usando a definição da derivada de uma função de uma variável obtém-se,

$$\tau \lambda_{\Delta t} = \frac{\partial W}{\partial m},$$

onde $\lambda_{\Delta t}$ é o expoente de Lyapunov no intervalo de tempo. Tomando a média temporal do expoente de Lyapunov tem-se

$$\tau\lambda = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \left\{ \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} \frac{\partial W}{\partial m} dt \right\}.$$

Para exemplificar, aplicaremos estes conceitos em um sistema dinâmico, e então mostraremos a importância de utilizarmos estes conceitos em estudos de dinâmica estocástica.

A equação diferencial que descreve a dinâmica estocástica de Glauber para o modelo de Blume Capel com um campo externo oscilante ($H_0 \cos(\omega t)$) como aproximação de campo médio é dada por

$$\Omega \frac{dm}{d\xi} = -m(t) + \frac{\sinh [(1/T)(mz + h \cos(\xi))]}{\cosh [(1/T)(mz + h \cos(\xi))] + 0.5 \exp(\frac{d}{T})} \quad (\text{C.6})$$

onde $\xi = \vartheta t$, $T = (\beta J)^{-1}$, $d = D/J$, $h = H_0/J$ e $\Omega = \vartheta \tau$. Fixando $z = 4$ e $\Omega = 2\pi$. As soluções desta equação Eq(C.6) para um conjunto de parâmetros $\{T, d, h\}$ e condições iniciais são funções periódicas de ξ , isto é, $m(\xi + 2\pi) = m(\xi)$. Além disso, elas podem ser de dois tipos de acordo se elas têm ou não têm as propriedades

$$m(\xi + \pi) = -m(\xi). \quad (\text{C.7})$$

A solução que satisfaz Eq.(C.7) é chamada solução simétrica, que corresponde a solução paramagnética (**P**). nesta solução, a magnetização $m(\xi)$ oscila em torno do valor zero. O segundo tipo de solução, que não satisfaz Eq.(C.7), é chamada solução anti-simétrica, que corresponde a solução ferromagnética (**F**), a magnetização oscila em torno de um valor não nulo. Além dessas soluções esse sistema apresenta uma outra solução, a coexistência da solução paramagnética com a ferromagnética (**P+F**). Esses fatos são visto explicitamente com a solução numérica das equações dinâmicas Eq(C.6). Para verificar as fronteiras entre essas diferentes regiões, deve-se calcular os pontos da transição de fase dinâmica, o conjunto de pontos que formam os diagramas de fases do sistema. Esses pontos serão obtidos pela investigação do comportamento da magnetização média em função da temperatura reduzida e do campo magnético externo reduzido. A magnetização média **M** em um período é definida como

$$\mathbf{M} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} m(\xi) d\xi. \quad (\text{C.8})$$

O comportamento de **M** em função da temperatura reduzida para vários valores de h e d são obtidos através de métodos numéricos. Esta investigação será controlada e verificada

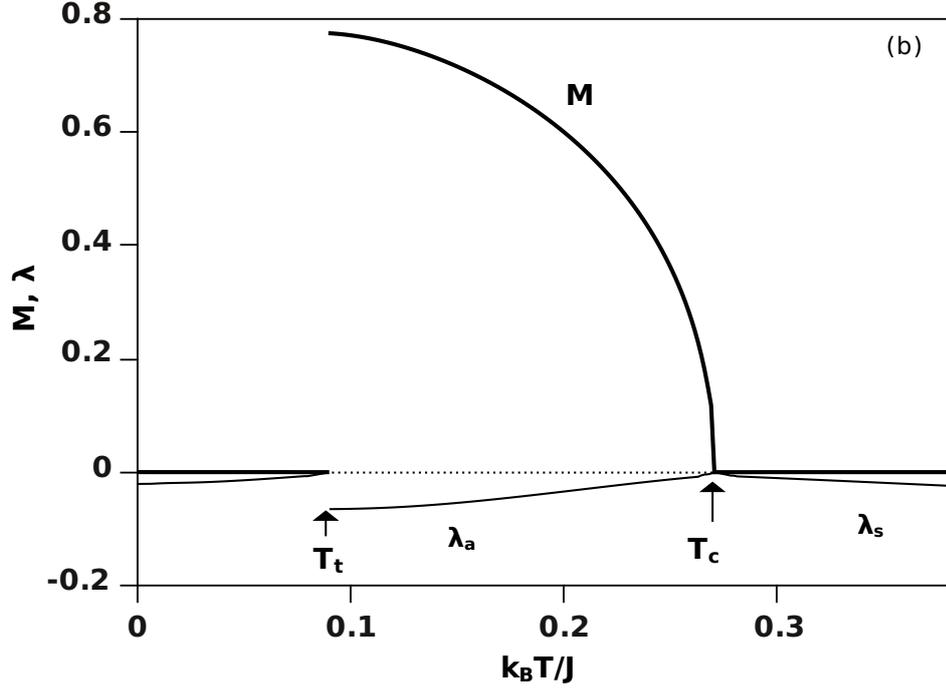


Figura C.1: A dependência térmica da magnetização média (a linha sólida grossa) e dos expoentes de Lyapunov λ_s e λ_a (a linha sólida fina) para $d = 0.25$ e $h = 0.715$, o índice s indica a solução simétrica que corresponde a fase **P** e o índice a indica a solução anti-simétrica que corresponde a fase **F**. T_t e T_c são as temperaturas de transição de fase de primeira ordem e segunda ordem, respectivamente. Devido a condição inicial $m(0) = 0$ o sistema apresenta duas sucessivas transições de fases, uma de primeira ordem e a outra de segunda ordem que ocorrem em $T_t = 0.09$ e $T_c = 0.27$, respectivamente.

pelo cálculo do expoente de Lyapunov λ , com o cálculo desse expoente é possível controlar e verificar as investigações, ele verifica as estabilidades das soluções. Se escrevermos as equações dinâmicas Eq(C.8) na forma,

$$\Omega \frac{dm}{d\xi} = F(m, \xi), \quad (\text{C.9})$$

o expoente de Lyapunov λ é dado por

$$\Omega \lambda = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{\partial F}{\partial m} d\xi, \quad (\text{C.10})$$

a solução será estável se $\lambda < 0$. O expoente de lyapunov funciona como um indicador da transição de fase, isso é de grande importância na busca dos pontos de transição de fase dinâmica. O comportamento da magnetização média e do expoente de Lyapunov em

função da temperatura reduzida é mostrada na figura C.1, no qual as linhas sólidas grossas e finas correspondem a magnetização média e ao expoentes de Lyapunov, respectivamente. λ_s e λ_a são os expoentes de Lyapunov associados as soluções simétricas e anti-simétricas, respectivamente. Se λ_s e λ_a crescem para zero continuamente a temperatura reduzida aproxima para a temperatura da transição de fase, a temperatura onde $\lambda_s = \lambda_a = 0$ é a temperatura da transição de fase de segunda ordem T_c . Por outro lado, se um λ crescer para zero descontinuamente e outro λ crescer para zero continuamente a medida que a temperatura reduzida se aproxima da temperatura de transição de fase, a temperatura em que a descontinuidade ocorrer primeiro para um dos λ e outro $\lambda = 0$, é a temperatura de transição de fase de primeira ordem T_t . Por exemplo, na Figura C.1, onde foi usado a condição inicial $m(0) = 0$, o sistema apresenta duas sucessivas transições de fases dinâmicas, uma de primeira ordem (descontinuidade) e a outra de segunda ordem. Na primeira, a descontinuidade ocorre para λ_s , a temperatura onde ocorre a descontinuidade é $T_t = 0.09$, mas o sistema pode apresentar descontinuidade para λ_a . A segunda transição ocorre quando λ_s e λ_a crescem para zero continuamente onde a temperatura reduzida se aproxima para a temperatura da transição de fase ($\lambda_s = \lambda_a = 0$), a temperatura reduzida onde ocorre da transição de fase contínua é $T_c = 0.27$. É importante notar que o expoente de Lyapunov sempre é negativo, com exceção quando ocorrem as transições de fases dinâmicas, sendo assim, garantida as estabilidades das soluções.

Apêndice D

Artigos Publicados

PHYSICAL REVIEW E **85**, 011121 (2012)

Phase transitions in a three-dimensional kinetic spin-1/2 Ising model with random field: Effective-field-theory study

Emanuel Costabile¹ and J. Ricardo de Sousa^{1,2}

¹*Departamento de Física, Universidade Federal do Amazonas, 3000, Japiim, 69077-000, Manaus-AM, Brazil*

²*National Institute of Science and Technology for Complex Systems, Universidade Federal do Amazonas, 3000, Japiim, 69077-000, Manaus-AM, Brazil*

(Received 5 August 2011; revised manuscript received 18 November 2011; published 13 January 2012)

The dynamical phase transitions of the kinetic Ising model in the presence of a random magnetic field with a bimodal probability distribution is studied by using effective-field theory (EFT) with correlations. We have used a Glauber-type stochastic dynamic to describe the time evolution of the system, where the system strongly depends on the $H \equiv \sqrt{\langle H^2 \rangle}$, root mean square deviation of the magnetic field. The EFT dynamic equation is given for the simple cubic lattice ($z = 6$), and the dynamic order parameter is calculated. The system presents ferromagnetic and paramagnetic states for low and high temperatures, respectively. Our results predict first-order transitions at low temperatures and large disorder strengths, which corresponds to the existence of a nonequilibrium tricritical point (TCP) in a phase diagram in the $T - H$ plane. We compare the results with the equilibrium phase diagram, where only the first-order line is different. Our qualitative results are compatible with recent Monte Carlo simulations.

DOI: [10.1103/PhysRevE.85.011121](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.85.011121)

PACS number(s): 02.50.Ng, 75.10.Nr

I. INTRODUCTION

A basic problem in the theory of continuous phase transition in pure systems, which is characterized by a divergence of various physical quantities (e.g., susceptibility, specific heat, correlation length) in such a way that some microscopic details of the system become irrelevant, is the concept of universality classes for the critical exponents [1]. On the other hand, in a first-order phase transition that is very common in nature, the correlation length remains finite and a universal behavior is not expected, where a discontinuity in the order parameter and/or the presence of latent heat are observed. A small amount of quenched randomness can influence significantly the phase transition replacing a first-order phase transition by a second-order one, so that tricritical points (TCP's) and critical end points (CEP's) are suppressed [2]. An example is the presence of random magnetic fields acting on each spin in a lattice otherwise free of defects, in particular described by the Ising model, which is now transformed into the random field Ising model (RFIM). Associated with this model are the notions of lower critical dimension (d_l), tricritical points, higher-order critical points, and random field probability distribution function. The only well-established conclusion is the existence of a phase transition for dimension $d \geq 3$ ($d_l = 2$), while many other issues are still unanswered; among them is the order of the phase transition, the existence of TCP's, and the dependence of these on the form of the random field probability distribution.

The RFIM was introduced by Imry and Ma [3], where the equilibrium phase transitions properties have been studied in detail by using different approaches [4–15] and the equilibrium phase diagrams presented, but the nonequilibrium or dynamic phase transition (DPT) of the model has not been as thoroughly explored. The RFIM, studied for more than 30 years now, is among the simplest statistical mechanical models with quenched disorder, but it is still not well understood. It is presumed to describe equilibrium phase transitions in physical systems such as fluids adsorbed in porous media and diluted

antiferromagnets. However, comparisons between theoretical predictions and experiments have been inconclusive because of the difficulty of equilibrating the experimental systems [16].

A standard experimental realization of the RFIM is the diluted Ising antiferromagnet in the presence of a uniform field [17]. In particular, the Ising antiferromagnet compound $\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$ behaves like a spin glass phase for $x < 0.55$, and is considered a typical RFIM for higher magnetic concentration. In the RFIM regime this compound presents a very curious behavior: one finds a first-order transition turning into a continuous one due to a change in the random fields [18].

From the theoretical point of view, and at the mean-field level, it is well known that different probability distributions for the random fields produced distinct phase diagrams: using a bimodal distribution, it exhibits a continuous phase transition at high temperature ending up at a TCP, followed by a first-order phase transition at low temperature [4], while for Gaussian probability distribution only a continuous ferromagnetic-paramagnetic boundary was observed [5]. It has been argued that whenever an analytic symmetric distribution for the fields presents a minimum at zero field, one should expect a TCP. In the case of short-range interaction models, the presence of a TCP represents a point that has not been fully elucidated. Originally, the first study of the high-temperature series expansion (HTSE) [6] which treated the three-dimensional RFIM with a Gaussian distribution found the existence of a fluctuation-driven first-order phase transition at sufficiently strong disorder. Another study of HTSE [7] indicated continuous transitions for both Gaussian and bimodal distributions, at least for weak disorder. Recent Monte Carlo simulations [15] for the energy and the magnetization distributions suggest for the RFIM with a bimodal probability distribution, a first-order transition. Moreover, phase transition properties of RFIM with symmetric double [19] and triple [20] Gaussian distributions have also recently been studied by means of a replica method, and a rich variety of phase diagrams have been presented.

In two dimensions, an infinitesimal amount of field randomness destroys any first-order transition. For the three-dimensional RFIM, it is known that there is an ordered phase for sufficiently low temperature and weak randomness. The standard picture [21–23] is that the phase transition is continuous and that it is controlled by a zero-temperature fixed point with three scaling exponents. There have also been suggestions that the transition is of first order [24,25], and in fact, it is difficult to determine whether the magnetization vanishes continuously or discontinuously because the value of the magnetic exponent β/ν is very small.

The equilibrium aspects of cooperative physical systems are now rather well known within the framework of equilibrium statistical physics [16]. On the other hand, the nonequilibrium properties of the systems are not yet well known, either theoretically or experimentally, due to the complexity. Some interesting problems in nonequilibrium systems are the nonequilibrium or the DPT in which the mechanism behind it has not yet been explored rigorously and the basic phenomenology is still undeveloped. In particular, the kinetic Ising models on the lattice are very often used to describe the time evolution and the corresponding steady states of a great variety of interacting particle systems, such as, for example, catalysis, contact process, domain growth, phase separation, and transport phenomena. Aside from a few approximate analytical methods used to investigate these systems, computational methods have been the main tool to study nonequilibrium steady states.

At the Hamiltonian system level, it is conjectured that for particles interacting through short-range potentials, the final stationary state reached by a system corresponds to the thermodynamic equilibrium [26]. Although no rigorous proof exists, in practice it is found that nonintegrable systems always relax to a unique stationary state. The equilibrium state does not depend on the initial conditions. The situation is very different for systems in which particles interact through long-range potentials. This is the case for self-gravitating systems [27] and spin systems treated at the mean-field level [28–30]. These systems, in the thermodynamic limit, where the relaxation time diverges and the thermodynamic equilibrium is never reached [31], become trapped in a stationary state characterized by a broken ergodicity [28]. Unlike the thermodynamic equilibrium, the stationary state depends explicitly on the initial conditions. An important feature of systems with long-range interactions is that the thermodynamic properties can depend on the form of the ensemble they derived [32], where, for example, the specific heat in the canonical ensemble is always positive, but may become negative in the microcanonical one [30,33].

Paula and Figueiredo [34] have studied the dynamic phase transition, within mean-field theory (MFT), in the kinetic Ising model in the presence of a random magnetic field, by using Glauber-type stochastic dynamics [35] where the change from one state to another occurs by single-spin flips each time. The time variations of the average order parameters and the thermal behavior of the dynamic order parameters were investigated extensively, and as a result, the DPT points were calculated and the dynamic phase diagrams were presented. If the magnetic field is random, varying with a bimodal field distribution, the system again exhibits a phase transition between the

ferromagnetic and paramagnetic phases. In addition, the transition can be continuous or discontinuous depending on the values of the low temperature and of the high amplitude of the random field (H). The point connecting the continuous and discontinuous lines is known as the dynamic tricritical point. The equilibrium [4,5] and nonequilibrium critical lines are identical, while at low temperature the first-order lines are different. At $T = 0$ (ground state) $H_c/J \simeq 2.9$ and $H_c/J \simeq 5.6$ were observed using the dynamic and static mean-field approximations, respectively. There is some controversy about the order of the low-temperature phase transition in the RFIM, but recent Monte Carlo (MC) simulations [36] on cubic lattice up to $L = 60$ have suggested the occurrence of dynamic first-order transition, where at $T = 0$ the $H_c/J \simeq 4.0$ value was found. These different values for H_c in comparison with the Monte Carlo results can be attributed to the approximation (MFT) type.

In recent years, a new effective field theory (EFT) has been used to study equilibrium magnetic properties of classical and quantum spin models, and has found useful qualitative insights for the critical behavior. The EFT method uses as a starting point the differential operator technique developed by Honmura and Kaneyoshi [37]. EFT provides a hierarchy of approximations to obtain thermodynamic properties of magnetic models, which include spin-spin correlation resulting from the usage of the Van der Waerden identity [38], and provides results that are superior to those obtained within traditional MFT. The EFT has been applied [10–13] to treat the RFIM for a bimodal field distribution, and a TCP was observed only for the system with $z \geq 6$ coordination number. Recently, the EFT was generalized to study the kinetic Ising model in the presence of a sinusoidal oscillating external magnetic field [39,40], where the results are qualitatively equivalent to those obtained by Tome and Oliveira using MFT [41].

This paper is organized as follows: The model and the formalism (EFT) for the kinetic Ising model on the presence of a bimodal random-field are presented and discussed in Sec. II. In Sec. III, the results of the behavior of the dynamic order parameter and phase diagram are discussed and compared with the equilibrium results. Finally, the conclusions are summarized in Sec. IV.

II. MODEL AND METHODOLOGY

In this work, we consider a ferromagnetic Ising model on a simple cubic lattice with N lattice sites in the presence of a random field; the spin configuration of the system is represented by $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$, where σ_i is the spin variable at site i , taking the value $+1$ or -1 . The Hamiltonian of the system is given by

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - \sum_i H_i \sigma_i, \quad (1)$$

where $\langle i, j \rangle$ runs over nearest neighbors and H_i is the random field following a bimodal probability distribution

$$\mathcal{P}(H_i) = \frac{1}{2} \delta(H_i - H) + \frac{1}{2} \delta(H_i + H), \quad (2)$$

where $H \equiv \sqrt{\langle H_i^2 \rangle_c}$ is the root mean square deviation of the magnetic field corresponding to the configurational average of the probability distribution $P(H_i)$.

If this spin system is put in contact with a heat reservoir at temperature T , the spin variables σ can be considered stochastic functions of time. The probability $P(\sigma, t)$ of finding the system in the state $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$ at time t is given by the solution of the following master equation:

$$\frac{dP(\sigma, t)}{dt} = \sum_{\sigma'} [P(\sigma', t)w(\sigma', \sigma) - P(\sigma, t)w(\sigma, \sigma')], \quad (3)$$

where $w(\sigma', \sigma)$ is the transition probability, per unit time, from the state $\sigma' = (\sigma'_1, \sigma'_2, \dots, \sigma'_N)$ to the state $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$, when we flip only the spin at the site i . An explicit expression for the transition probability $w(\sigma', \sigma)$ is obtained through the requirement of the detailed balance, Eq. (3), valid at very long times, and therefore, Glauber [35] proposed

$$w(\sigma, \sigma') = \frac{1}{\tau} \frac{\exp[-\beta \Delta \mathcal{H}(\sigma, \sigma')]}{\sum_{\sigma''} \exp[-\beta \Delta \mathcal{H}(\sigma, \sigma'')]}, \quad (4)$$

where $\beta = 1/k_B T$, k_B is the Boltzmann factor, $\sum_{\sigma''}$ is the sum over the two possible values of $\sigma_i = \pm 1$, and $\Delta \mathcal{H}(\sigma, \sigma')$ is the change in the energy of the system when the σ_i spin changes, which can be found by working Eq. (1).

Since the sum of probabilities is normalized to one, by multiplying both sides of Eq. (3) by σ_i and taking the average, we obtain

$$\tau \frac{dm_i(t)}{dt} = -m_i(t) + \left\langle \tanh \left(K \sum_{\delta} \sigma_{i+\delta} + \beta H_i \right) \right\rangle, \quad (5)$$

where $m_i(t) = \langle \sigma_i \rangle$ is the average value of the spin variable σ_i at site i , z the coordination number, and δ the nearest-neighboring vector. Using the field probability distribution, Eq. (2), the Eq. (5) can be rewritten as

$$\tau \frac{dm(t)}{dt} = -m(t) + \left\langle \left\langle \tanh \left(K \sum_{\delta} \sigma_{i+\delta} + \beta H_i \right) \right\rangle \right\rangle_c, \quad (6)$$

where $m(t) = \langle m_i(t) \rangle_c$.

In the MFT, by taking $\tanh(K \sum_{\delta} \sigma_{i+\delta} + \beta H_i) \simeq \tanh[zK m(t) + \beta H_i]$, which neglects all the correlations of the spins, we can get the mean-field equation of the average magnetization [34]:

$$\tau \frac{dm(t)}{dt} = -m(t) + \frac{1}{2} \{ \tanh[zK m(t) + \beta H] + \tanh[zK m(t) - \beta H] \}. \quad (7)$$

Hence, the mean-field dynamic equation for the magnetization is obtained. We fixed $z = 6$ and $\tau = 1$. The solution and a discussion of this equation are given in Ref. [34].

By defining the dynamic order parameter as the time-averaged magnetization over a long time interval,

$$M(T, H) = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \left\{ \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} m(t) dt \right\}. \quad (8)$$

Analyzing the results of MFT of Eq. (8), we have obtained two types of behavior for the magnetization. First, at low

magnetic field, the order parameter decreases as the temperature increases and is null at $T = T_c(H)$ (critical temperature), characterizing a second-order phase transition. Second, at high magnetic field, the order parameter decreases as the temperature increases and is finite at $T = T_c^*(H)$, characterizing a first-order phase transition. A phase diagram in the $T - H$ plane is obtained, where for $h \equiv H/J < 2z \ln(2)/3 \simeq 2.8$ ($z = 6$) and $2.8 < h < 5.6$ we have a second- and first-order transition, respectively. The dynamic TCP is the same obtained in the equilibrium phase transition with the value [4] $TCP = [h_c = 2z \ln(2)/3, k_B T_c/J = 2z/3]$. On the other hand, the complete equilibrium phase diagram in the $T - H$ plane is found by using Maxwell construction [4] and obtaining a first-order line that is different than in the dynamic case, where this line terminates at $h_c \simeq 2.8$, smaller than the value $h_c \simeq 5.6$ of the dynamic case. The two values for h_c obtained by MFT are in contradiction with recent MC simulations [36] $h_c \simeq 4.0$.

To include some spin-spin correlation, as was initiated by Honmura and Kaneyoshi [37], it is convenient to introduce the differential operator technique into the expression $\tanh(K \sum_{\delta} \sigma_{i+\delta} + \beta H_i)$, i.e.,

$$\begin{aligned} & \tanh \left(K \sum_{\delta} \sigma_{i+\delta} + \beta H_i \right) \\ &= \exp \left(K \sum_{\delta} \sigma_{i+\delta} D_x \right) \tanh(x + \beta H_i)|_{x=0}, \end{aligned} \quad (9)$$

where $D_x = \frac{d}{dx}$ is the differential operator.

Using the Van der Waerden identity [38], i.e., $\exp(\lambda \sigma_i) = \cosh \lambda + \sigma_i \sinh \lambda$, $\sigma_i = \pm 1$, Eq. (6) can be rewritten by

$$\begin{aligned} \tau \frac{dm(t)}{dt} &= -m(t) + \left\langle \left\langle \prod_{\delta} [\cosh(K D_x) + \sigma_{i+\delta} \sinh(K D_x)] \right\rangle \right\rangle_c \\ &\times F(x)|_{x=0}, \end{aligned} \quad (10)$$

with

$$F(x) = \frac{1}{2} [\tanh(x + \beta H) + \tanh(x - \beta H)]. \quad (11)$$

Equation (10) is exactly written in terms of a multiple spin correlation function occurring on the right-hand side. However, it is clear that if we try to treat exactly all boundary spin-spin correlation functions, the problem becomes unmanageable. The simplest and most frequently used approximation is to decouple them according to

$$\langle \sigma_i \sigma_j \dots \sigma_l \rangle \simeq \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \dots \langle \sigma_l \rangle \quad (i \neq j \neq \dots \neq l), \quad (12)$$

which means that the nearest and next-nearest neighbors of site i are assumed to be completely independent of each other. It should be noted that the above decoupling scheme [Eq. (12)] is a better approximation than the approximations used in standard MFT. This is because within the present framework (EFT), the kinematics relations are treated exactly [i.e., $(\sigma_i)^2 = 1$] through the van der Waerden identity; as a consequence it neglects correlations only between different spin variables. On the other hand, in the usual MFT all the self- and multispin correlations are neglected.

In EFT, Eq. (10) is given by

$$\tau \frac{dm(t)}{dt} = -m(t) + [\cosh(KD_x) + m(t) \sinh(KD_x)]^2 F(x)|_{x=0}. \quad (13)$$

For the simple cubic lattice ($z = 6$), expanding Eq. (13), after some manipulations the equation of motion for the magnetizations reads as

$$\tau \frac{dm(t)}{dt} = [A_1(T, H) - 1]m(t) + A_3(T, H)m(t)^3 + A_5(T, H)m(t)^5, \quad (14)$$

where the $A_p(T, H) = \frac{6!}{p!(6-p)!} \cosh^{6-p}(KD_x) \sinh^p(KD_x) F(x)|_{x=0}$ functions can be easily calculated employing the mathematical relation $\exp(\alpha D_x)g(x) = g(x + \alpha)$.

III. RESULTS

The first-order differential equation, Eq. (14), can be solved by using the fourth-order Runge-Kutta method for a given set of parameters and initial values. To check the accuracy of our numerical calculations we have also used the method of the Adams-Moulton predictor corrector, and the results are equivalent. By solving this effective-field equation (14), the $m(t) - t$ curves were obtained for fixed values of H and T . Then, by numerical integration, the dynamic order parameter $M(T, H)$ is calculated using definition (8).

A. Dynamic order parameter

The field variation of $M(T, H)$ is shown in Fig. 1 for fixed reduced temperature $k_B T/J = 4.0$ (high temperature) and 1.4 (low temperature) in order to illustrate the second- and first-order transitions, respectively. In this figure, it has been observed that for high-temperature the dynamic order parameter decreases to zero continuously as the reduced

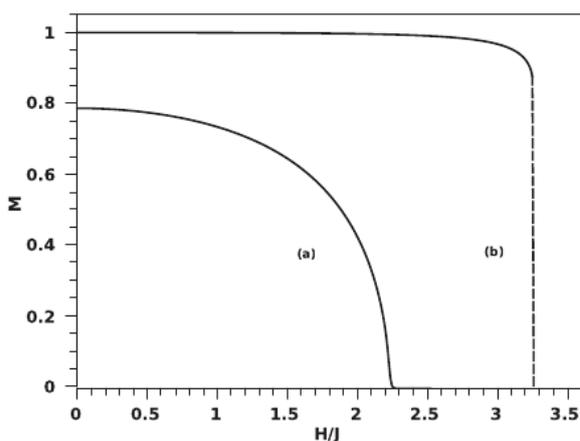


FIG. 1. The behavior of the dynamical order parameter as a function of the H/J reduced magnetic field of the kinetic Ising model on the presence of a bimodal random magnetic field for (a) $k_B T/J = 4.0$ and (b) $k_B T/J = 1.4$, characterizing the second- and first-order phase transitions, respectively. The dashed line indicates the discontinuity of the order parameter.

field approaches the dynamic critical point: the field (T fixed) where $M = 0$ is the second-order phase transition field $h = h_c \simeq 2.25$. On the other hand, for low temperatures the field at which the dynamic order parameter makes a jump, a first-order phase transition goes to zero discontinuously at the dynamic point $h = h_c^* \simeq 3.39$. For h greater than the upper limit of this field (i.e., $h > h_c = 4.0$), the system exhibits no phase transition [the order parameter is null for all finite temperature ($T > 0$)], which is in accordance with recent MC simulations [36]. The temperature dependence of the equilibrium (RFIM) order parameter [10] presents a similar behavior with the nonequilibrium results obtained in this work, only with the first-order line, $T_c^*(H)$, smaller than that of the nonequilibrium system (NRFIM).

B. Phase diagram

Analyzing the field dependence of the order parameter for several values of T , the dynamic phase transition diagram in the $H - T$ plane is depicted in Fig. 2. In the phase diagram, the solid and dashed lines indicate, respectively, the second-order and the first-order dynamic phase transitions; the black point is the TCP. The exact location of the TCP is imprecise, but the numerical results suggest that this point is the same as that obtained in the equilibrium (free energy) by Borges and Silva [10]. In Fig. 2, we can see that the dynamic phase diagram comprises a paramagnetic (P) phase ($M = 0$) at a high value of the field amplitude h and a ferromagnetic (F) phase ($M \neq 0$) at a low value of the field amplitude h , for a fixed value of temperature. The dynamic phase transitions between these phases are of first order for low temperatures and high fields and of second order for high temperatures and low fields, being separated by the TCP. The transition temperature between the ordered (F) and disordered (P) phases decreases as the value of h increases, and is null at $h = h_c = 4.0$. Our qualitative results of the phase diagram are compatible with MC simulations [36].

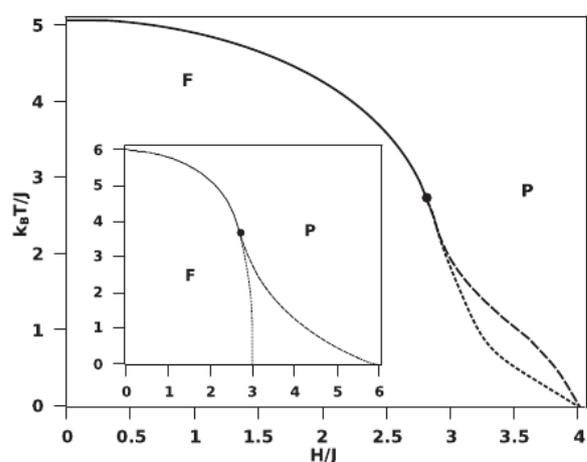


FIG. 2. Phase diagram in the $H - T$ plane for the kinetic Ising model on the presence of a bimodal random magnetic field. The dashed and solid lines correspond to the first- and second-order transition lines, respectively. The black point denotes the tricritical point. The inset shows the MFT results [34].

By comparison, we find that the dynamic phase transition lines of the EFT lie underneath those of the MFT [34], and the region of the first-order transition of the EFT is smaller than that of the MFT (see inset in Fig. 2, the MFT result). This scenario is quite different from the two-dimensional lattice [for example, $z = 4$ in Eq. (13)] when EFT was considered, where only second-order transition is observed and the equilibrium [10] and nonequilibrium results are identical.

The results of MC simulations [36], due to finite-size effects, present imprecise values for the first-order transition at low temperature and the extrapolated value shows an incorrect value for the ground state. We speculated that the $h_c = 4.0$ value obtained in this work can be found by more precise MC simulations ($L = 128$, for example). The MC simulations in Ref. [36] have been performed only for values of $h < 3.9$, while our results were numerically analyzed for all values of h , including the $h = h_c = 4.0$ value, that correctly treat the ground state. We have also analyzed the case of a Gaussian field probability distribution, but the equilibrium and nonequilibrium results are identical with only second-order transitions.

IV. CONCLUSIONS

In summary, we have studied the nonequilibrium phase diagram of the kinetic spin-1/2 Ising model on a simple cubic lattice ($z = 6$) in the presence of a random magnetic field (NRFIM) by using effective-field theory with correlations. We use a Glauber-type stochastic dynamic to describe the time evolution of the system. We have analyzed the behavior of the time dependence of the magnetization $m(t)$ and calculated the behavior of the average magnetization as a function of the reduced temperature and the reduced magnetic field. The order of the phase transitions was determined by analyzing by the behavior of the dynamic order parameter, which decreases to zero continuously in the second-order transition and shows a discontinuous jump in the first-order transition.

The dynamic phase diagrams of the system were obtained in the $T - H$ plane. It was found that the model presents both second- and first-order phase transitions. In the RFIM case, the stability limit was analyzed through free energy (Maxwell construction).

We found that the behavior of the system strongly depends on the values of the field and probability distribution. For a Gaussian field distribution, we found that the NRFIM and RFIM present the same phase diagram, which always undergoes a second-order transition between the ferromagnetic and paramagnetic phases. On the other hand, in the case of a bimodal distribution, was observed a first-order transition at low temperatures (high field) indicating the existence of a nonequilibrium TCP having the same coordinates as the equilibrium case. We compared the nonequilibrium results with the equilibrium results [10] and noticed a smaller first-order line. We also observed that there is an upper limit of this field (i.e., $h > h_c = 4.0$) where the system exhibits no phase transition. An analysis of the MFT results [34] has shown that the ground state was not correctly treated, obtaining a wrong value for h_c . Different results obtained by using EFT and MFT indicate that the correlations of spin fluctuations play an important role in nonequilibrium magnetic properties at low temperatures.

Finally, it is important to mention that the effective-field dynamic study suggests that the NRFIM has an interesting dynamic behavior, quite different from the standard RFIM. Our qualitative results of the nonequilibrium phase diagram are in accordance with MC simulations [36].

ACKNOWLEDGMENTS

This work started during a visit to Universidade Federal de Pernambuco. J. R. S. thanks Dr. Sergio Galvão Coutinho for hospitality and Dr. Octavio Salmon and Mircea of the Universidade Federal do Amazonas for a critical reading of the manuscript. This work was partially supported by CNPq (Brazilian Research Agency).

-
- [1] H. E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena* (Oxford University Press, Oxford, 1971).
 - [2] K. Hui and A. N. Berker, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2507 (1989); K. Hui and A. Nihat Beker, *ibid.* **63**, 2433(E) (1989).
 - [3] Y. Imry and S. K. Ma, *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1399 (1975).
 - [4] A. Aharony, *Phys. Rev. B* **18**, 3318 (1978).
 - [5] T. Schneider and E. Pytte, *Phys. Rev. B* **15**, 1519 (1977).
 - [6] A. Houghton, A. Khurana, and F. J. Seco, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 856 (1985).
 - [7] M. Gofman, J. Adler, A. Aharony, A. B. Harris, and M. Schwartz, *Phys. Rev. B* **53**, 6362 (1996).
 - [8] J. Machta, M. E. J. Newman, and L. B. Chayes, *Phys. Rev. E* **62**, 8782 (2000).
 - [9] N. G. Fytas, A. Malakis, and K. Eftaxias, *J. Stat. Mech.* (2008) P03015.
 - [10] H. E. Borges and P. R. Silva, *Physica A* **144**, 561 (1987).
 - [11] E. F. Sarmiento and T. Kaneyoshi, *Phys. Rev. B* **39**, 9555 (1989).
 - [12] D. F. Albuquerque, I. P. Fittipaldi, and J. Ricardo de Sousa, *J. Magn. Magn. Mater.* **306**, 92 (2006).
 - [13] U. Akinci, Y. Yüksel, and H. Polat, *Phys. Rev. E* **83**, 061103 (2011).
 - [14] E. Albayak and O. Canko, *J. Magn. Magn. Mater.* **270**, 333 (2004).
 - [15] L. Hernández and Horacio Ceva, *Physica A* **387**, 2793 (2008).
 - [16] J. Marro and R. Dickman, *Nonequilibrium Phase Transitions in Lattice Models* (Cambridge University Press, Cambridge, 1999).
 - [17] J. Cardy, *Phys. Rev. B* **29**, 505 (1984).
 - [18] D. P. Belanger, *Spin Glasses and Random Fields*, edited by A. P. Young (World Scientific, Singapore, 1998).
 - [19] N. Crokidakis and F. D. Nobre, *J. Phys. Condens. Matter* **20**, 145211 (2008).
 - [20] O. R. Salmon, N. Crokidakis, and F. D. Nobre, *J. Phys. Condens. Matter* **21**, 056005 (2009).

- [21] A. J. Bray and M. A. Moore, *J. Phys. C* **18**, L927 (1985).
[22] D. S. Fisher, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 416 (1986).
[23] J. Villain, *J. Phys. (Paris)* **46**, 1843 (1985).
[24] E. Brezin and C. De Dominicis, *Europhys. Lett.* **44**, 13 (1998).
[25] A. P. Young and M. Nauenberg, *Phys. Rev. Lett.* **54**, 2429 (1985).
[26] J. W. Gibbs, *Collected Works* (Longmans, Green, New York, 1928).
[27] V. A. Antonov, *IAU Symp.* **113**, 525 (1985).
[28] J. Barré, D. Mukamel, and S. Ruffo, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 030601 (2001).
[29] D. Mukamel, S. Ruffo, and N. Schreiber, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 240604 (2005).
[30] Z. Bertalan, T. Kuma, Y. Matsuda, and H. Nishimori, *J. Stat. Mech.* (2001) P01016.
[31] K. Jain *et al.*, *J. Stat. Mech.* (2007) P11008.
[32] A. Campa, T. Dauxois, and S. Ruffo, *Phys. Rep.* **480**, 57 (2009).
[33] D. Lynden-Bell and R. Wood, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **138**, 495 (1968).
[34] G. L. S. Paula and W. Figueiredo, *Euro. Phys. J. B* **1**, 519 (1998).
[35] R. J. Glauber, *J. Math. Phys.* **4**, 294 (1963).
[36] N. Crokidakis, *Phys. Rev. E* **81**, 041138 (2010).
[37] R. Honmura and T. Kaneyoshi, *J. Phys. C* **12**, 3979 (1979).
[38] J. W. Tucker, *J. Phys. A: Math. Gen.* **27**, 659 (1994).
[39] Xiaoling Shia, Guozhu Weia, and Lin Li, *Phys. Lett. A* **372**, 5922 (2008).
[40] Bayram Deviren, Osman Canko, and Mustafa Keskin, *Chin. Phys. B* **19**, 050518 (2010).
[41] T. Tome and M. J. de Oliveira, *Phys. Rev. A* **41**, 4251 (1990).

The kinetic spin-1 Blume-Capel model with Glauber dynamic

E. Costabile¹, O.R. Salmon¹, and J.R. de Sousa^{1,2,a}

¹ Departamento de Física, Universidade Federal do Amazonas, 3000, Japiim, 69077-000 Manaus-AM, Brazil

² National Institute of Science and Technology for Complex Systems, Universidade Federal do Amazonas, 3000, Japiim, 69077-000 Manaus-AM, Brazil

Received 7 December 2011 / Received in final form 10 February 2012

Published online (Inserted Later) – © EDP Sciences, Società Italiana di Fisica, Springer-Verlag 2012

Abstract. We study the dynamic phase transitions (DPT), within a mean-field approach, in the kinetic spin-1 Blume-Capel model by using the Glauber-type stochastic dynamics. The nature of the transition is characterized by investigating the behavior of the thermal variation of the dynamic order parameter and the Lyapunov exponent. The phase diagram is constructed in the temperatures (T) and single-ion anisotropy amplitude (D) plane. Our results predict first-order transitions at low temperature and large anisotropy strengths, which correspond in the phase diagram to the existence of a nonequilibrium tricritical point (TCP). We compare our results with the equilibrium phase diagram.

1 Introduction

The spin-1 Blume-Capel (BC) model is one of the most studied spin models in statistical mechanics due to its wide theoretical interest and practical applications. In this work, we consider the ferromagnetic spin-1 Ising model on a simple cubic lattice with N lattice sites in the presence of a single-ion anisotropy (D); the spin configuration of the system is represented by $\mathbf{S} = (S_1, S_2, \dots, S_N)$, where S_i is the spin variable at site i , taking the value $-1, 0$ or 1 . The Hamiltonian of the system is given by

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + D \sum_i (S_i)^2, \quad (1)$$

where $\langle i, j \rangle$ runs over nearest-neighbors and D the single-ion anisotropy parameter.

The equilibrium version of this model is known to exhibit a phase transition from the high-temperature disordered paramagnetic (P) phase to the low-temperature ferromagnetic (F) phase [1,2] that is dependent of the T and D values. With the increase of the D positive values, we have a decrease of the F order, that at null temperature there is a first-order transition point at $\delta_c = D_c/J = z/2$ (z is the coordination number) such that for $\delta > \delta_c$ the system exhibits no magnetic order. At finite temperature, the spin-1 BC model presents a phase diagram in the T - D plane which exhibits a phase transition between the F and P phases. Besides, the transition can be continuous or discontinuous depending on the values of the low temperature and of the high amplitude of the anisotropy (D). The point connecting the continuous and discontinuous

lines is known as the tricritical point (TCP). The mean-field approximation (MFA) [1,2] was the first technique used to obtain an approximate solution to the BC model, where was observed a TCP locate at $\delta_t = 2z \ln(2)/3$ and $k_B T_t/J = z/3$.

The equilibrium phase transitions properties of the spin-1 BC model has been studied in detail by using different approaches [3–9] and the equilibrium phase diagrams presented, but the nonequilibrium or dynamic phase transition (DPT) of the model has been slightly explored. The equilibrium aspects of cooperative physical systems are now rather well known within the framework of equilibrium statistical physics. On the other hand, the nonequilibrium properties of the systems are not yet well known either theoretically or experimentally due to the complexity [10]. Some interesting problems in nonequilibrium systems are the nonequilibrium or the DPT in which the mechanism behind it has not yet been explored rigorously and the basic phenomenology is still undeveloped. In particular, the kinetic Ising models on the lattice are very often used to describe the time evolution and the corresponding steady states of a great variety of interacting particle systems, as, for example, catalysis, contact process, domain growth, phase separation, and transport phenomena. Not only is it an interesting system from a purely theoretical point of view, but also the kinetic Ising model can be used to describe experimental observations [11,12]. Aside from a few approximate analytical methods used to investigate these systems, computational methods have been the main tool to study nonequilibrium steady states.

At the Hamiltonian system level, it is conjectured that for particles interacting through short-range potentials, the final stationary state reached by a system corresponds to the thermodynamic equilibrium [13]. Although

^a e-mail: jsousa@ufam.edu.br

1 no rigorous proof exists, in practice it is found that non-
 2 integrable systems always relax to an unique stationary
 3 state. The equilibrium state does not depend of the initial
 4 conditions. The situation is very different for systems
 5 in which particles interact through long-range potentials.
 6 This is the case for self-gravitating system [14] and spin systems
 7 treated at mean-field level [15–17]. For these systems,
 8 in the thermodynamic limit, the relaxation time diverge,
 9 and the thermodynamic equilibrium is never reached [18],
 10 become trapped in a stationary state characterized by a
 11 broken ergodicity [15]. Unlike the thermodynamic equilibrium,
 12 the stationary state depends explicitly on the initial
 13 conditions. An important feature of systems with long-
 14 range interactions is that the thermodynamic properties
 15 can depend on the form of the ensemble they derived [19],
 16 where, for example, the specific heat in the canonical ensemble
 17 is always positive, but may become negative in the
 18 microcanonical one [17,20].

19 The stationary states of the kinetic spin-1 BC model
 20 in the presence of a time-dependent oscillating field
 21 were studied by using mean-field approximation (MFA)
 22 Glauber dynamic [21–26]. The system strongly depends
 23 on the crystal field anisotropy D and were found two
 24 types of solutions: (i) a symmetric one, which corresponds
 25 paramagnetic phase, where the magnetization (m) oscillates
 26 in time around zero, and (ii) an antisymmetric one,
 27 where m oscillates in time around a finite value different
 28 from zero. There are regions of the phase diagram
 29 where both solutions coexist. The DPT from one regime
 30 to the other can be a first- or a second-order depending
 31 on the region in the phase diagram. The stability of the
 32 solutions is investigated by analyzing the behavior of the
 33 Liapunov exponent, where Tomé and Oliveira [27] have
 34 applied to study the kinetic spin-1/2 Ising model in the
 35 presence of a time-dependent oscillating field. The effects
 36 of the random-crystal-field on the stationary of this kinetic
 37 spin-1 BC model also have been studied within the MFA.
 38 By using Monte Carlo simulations and exact finite-size
 39 analysis, the spin-1 BC model was studied with competing
 40 dynamics (Glauber and Kawasaki) [28]. More recently
 41 this model was treated on the Bethe lattice [29] and by
 42 using effective-field theory (EFT) [30]. In all these studies
 43 a comparison of the equilibrium and nonequilibrium (stationary
 44 solution) phase diagram in the D - T plane was not
 45 discussed.

46 The objective of this work is to investigate the stationary
 47 solution of the phase diagram in the D - T plane of
 48 the spin-1 BC model and compared with equilibrium solution
 49 [1,2]. The outline of this work is as follows. In Section
 50 2, we define the formalism and present the MFA. In
 51 Section 3, the model is solved numerically, and the phase
 52 diagram and magnetization curves are discussed. Section 3
 53 is devoted to brief conclusion.

54 2 Formalism

55 If the spin system is put in contact with a heat reservoir
 56 at temperature T , the spin variables \mathbf{S} can be considered
 57 as stochastic functions of time. The probability $\mathcal{P}(\mathbf{S}, t)$

of finding the system in the state $\mathbf{S} = (S_1, S_2, \dots, S_N)$ at
 time t is given by the solution of the following master
 equation [10]:

$$\frac{d\mathcal{P}(\mathbf{S}, t)}{dt} = \sum_{\mathbf{S}'} [\mathcal{P}(\mathbf{S}', t)w(\mathbf{S}', \mathbf{S}) - \mathcal{P}(\mathbf{S}, t)w(\mathbf{S}, \mathbf{S}')], \quad (2)$$

where $w(\mathbf{S}', \mathbf{S}) \equiv w(\mathbf{S}' \rightarrow \mathbf{S})$ is the transition probability,
 per unit time, from the state $\mathbf{S}' = (S'_1, S'_2, \dots, S'_N)$ to the
 state $\mathbf{S} = (S_1, S_2, \dots, S_N)$, when we flip only the spin at
 the site i . An explicit expression for the transition probability
 $w(\mathbf{S}', \mathbf{S})$ is obtained through the requirement of the
 detailed balance equation (3), which is valid at very long
 times, so Glauber [31] proposed

$$w(\mathbf{S}, \mathbf{S}') = \frac{1}{\tau} \frac{\exp[-\beta\Delta\mathcal{H}(\mathbf{S}, \mathbf{S}')]}{\exp[-\beta\Delta\mathcal{H}(\mathbf{S}, \mathbf{S}')]}, \quad (3)$$

where $\beta = 1/k_B T$, k_B is the Boltzmann constant, $\sum_{\mathbf{S}'}$ is
 the sum over the three possible values of $S_i = 0, \pm 1$, τ
 defines a time scale (characteristic mean time interval for
 one spin flip) and $\Delta\mathcal{H}(\mathbf{S}, \mathbf{S}')$ is the change in the energy of
 the system when the S_i spin changes, which can be found
 by working of equation (1) and given by

$$\Delta\mathcal{H}(\mathbf{S}, \mathbf{S}') = -J(S'_i - S_i) \sum_{\delta} S_{i+\delta} + D(S_i'^2 - S_i^2). \quad (4)$$

In addition, by substituting the possible values of S_i and
 S'_i , one obtains

$$\begin{cases} w(1 \rightarrow 0) = w(-1 \rightarrow 0) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp(\beta D)}{2 \cosh(x) + \exp(\beta D)} \\ w(1 \rightarrow -1) = w(0 \rightarrow -1) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-x)}{2 \cosh(x) + \exp(\beta D)} \\ w(-1 \rightarrow 1) = w(0 \rightarrow 1) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp(x)}{2 \cosh(x) + \exp(\beta D)} \end{cases} \quad (5)$$

where $x = \beta J \sum_{\delta} S_{i+\delta}$, z is the coordination number, and δ
 the nearest-neighboring vector. Notice that, since $w(\mathbf{S} \rightarrow$
 $\mathbf{S}')$ does not depend on the value S_i , we can write $w(\mathbf{S}' \rightarrow$
 $\mathbf{S}) = w(\mathbf{S}')$.

Since the sum of probabilities is normalized to one, by
 multiplying both sides of equation (2) by S_i and taking
 the average, we obtain

$$\tau \frac{dm}{dt} = -m + \left\langle \frac{2 \sinh(x)}{2 \cosh(x) + \exp(\beta D)} \right\rangle, \quad (6)$$

where $m(t) = \langle S_i \rangle$ is the average value of the S_i spin
 variable at site i .

In the MFA, by taking $\sinh(K \sum_{\delta} \sigma_{i+\delta}) \simeq \sinh(zKm)$

and $\cosh(K \sum_{\delta} \sigma_{i+\delta}) \simeq \cosh(zKm)$, $K = \beta J$, which
 neglects all spin correlations, we can get the mean-field equation
 of the average magnetization

$$\tau \frac{dm}{dt} \equiv F(m, t) = -m + \frac{2 \sinh(zKm)}{2 \cosh(zKm) + \exp(\beta D)}. \quad (7)$$

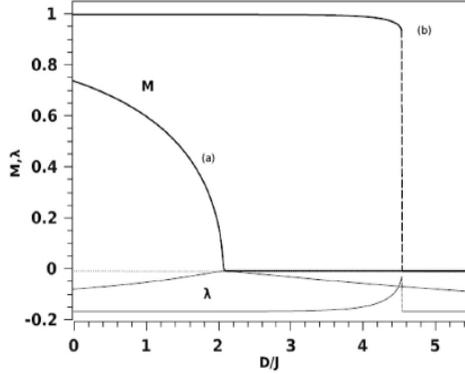


Fig. 1. The reduced anisotropy dependence of the average magnetization M and the Lyapunov exponent λ for reduced temperature (a) $k_B T/J = 3.0$ and (b) $k_B T/J = 0.4$.

- 1 Hence, the MFA dynamic equation for the magnetization
- 2 is obtained. We fixed $z = 6$ and $\tau = 1$. The solution and
- 3 a discussion of this equation are given below.
- 4 The dynamic order parameter as the time-averaged
- 5 magnetization over a long time interval is defined by

$$M(T, D) = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \left\{ \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} m(t) dt \right\}. \quad (8)$$

- 6 Now we can check and verify the stability of solutions, and
- 7 as well as the DPT points by calculating the Lyapunov
- 8 exponent λ , that is obtained by [27]

$$\lambda = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \left\{ \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} \frac{\partial F}{\partial m} dt \right\}. \quad (9)$$

9 3 Results

10 Equations (7)–(9) are numerically solved as a function of
 11 the reduced temperature and several values of D . To solve
 12 the equation of motion, equation (7), we use the numerical
 13 method of Adams-Moulton predictor corrector, where
 14 the $m(t) - t$ curves are obtained. Furthermore, the average
 15 magnetization, $M(T, D)$, which is the dynamical parameter
 16 has been calculated by using the Simpson integration
 17 method. By analyzing the results provided of equation (8)
 18 and (9) we observe two types of behavior for the dynamic
 19 magnetization. First, at low anisotropy ($\delta \equiv D/J <$
 20 $\delta_t \simeq 2.78$), the order parameter decreases as increases
 21 of the temperature and is null at $T = T_c(D)$ (critical
 22 temperature), characterizing a second-order phase transition.
 23 Second, at high anisotropy ($\delta > \delta_t$), the order
 24 parameter decreases to zero discontinuously as the reduced
 25 temperature increases, therefore a first-order phase
 26 transition occurs. The variation of $M(T, D)$ as a function
 27 of reduced anisotropy parameter $\delta = D/J$ is shown
 28 in Figure 1 for fixed reduced temperature $k_B T/J = 3.0$

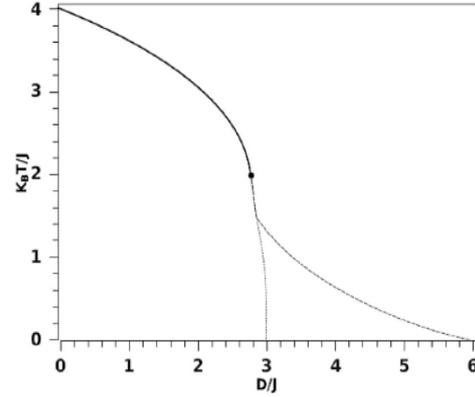


Fig. 2. Phase diagram in the D - T plane for the kinetic spin-1 Blume-Capel model. The dashed, dotted and solid lines corresponds the nonequilibrium first-, equilibrium first- and second-order transitions lines, respectively. The black point denotes the *tricritical point* (TCP).

(high-temperature) and 0.4 (low-temperature) in order to 29
 illustrate the second and first-order transitions, respec- 30
 tively. In this figure, it has been observed that for high- 31
 temperature (i.e., $k_B T/J > 2.0$) the dynamic order param- 32
 eter decrease to zero continuously as the reduced 33
 anisotropy approaches to the dynamic critical point, the 34
 anisotropy (T fixed) where $M = 0$ is the second-order 35
 phase transition field, $\delta = \delta_c \simeq 2.0$. On the other hand, 36
 at low temperatures (i.e., $k_B T/J < 2.0$) the anisotropy 37
 value, at which the dynamic order parameter goes to zero 38
 discontinuously, is at $\delta = \delta_c^* \simeq 4.6$, so indicating a first- 39
 order phase transition. For a δ value greater than the up- 40
 per limit of this field (i.e., $\delta > \delta_c = 6.0$), the system 41
 exhibits no phase transition (the order parameter is null 42
 for all finite temperature ($T > 0$)). The behavior of the 43
 Lyapunov exponent λ as a function of reduced anisotropy 44
 parameter is also shown in Figure 1. In the critical point 45
 $\delta = \delta_c$ (at high-temperature) we have that $\lambda(\delta_c) = 0$, char- 46
 acterizing a second-order transition. On the other hand, at 47
 low temperature (in Fig. 1, curve (b)) when λ increases to 48
 zero discontinuously as the reduced anisotropy approaches 49
 the phase transition anisotropy parameter, the anisotropy 50
 δ_c^* at which the discontinuity occurs is the first-order phase 51
 transition anisotropy parameter. 52

By analyzing the anisotropy dependence of the order 53
 parameter for several values of T , we depicted the dynamic 54
 phase transition diagram in the D - T plane in 55
 Figure 2, where for $\delta < \delta_t \simeq 2.77$ and $\delta_t < \delta < \delta_c$, 56
 on a simple cubic lattice ($z = 6$), we have a second 57
 and first-order transition, respectively. In the phase dia- 58
 gram, the solid and dashed lines indicate the second and 59
 first-order phase transition, respectively, and the black 60
 point stands for the TCP. The exact location of the TCP 61
 is unknown, but the numerical results suggest that this 62
 point is the same obtained in the equilibrium (free energy) 63
 [1], i.e., $TCP = (\delta_t = 2z \ln(2)/3, k_B T_t/J = z/3)$. 64
 In Figure 2, we can see that the dynamic phase diagram 65

1 comprises a paramagnetic-P phase ($M = 0$) at high value
 2 of the anisotropy amplitude D and a ferromagnetic-F
 3 phase ($M \neq 0$) at low value of the anisotropy amplitude
 4 D for a fixed value of temperature. The complete equilib-
 5 rium phase diagram in the T - D plane is found by using
 6 the Maxwell Construction [1], however the shape of its
 7 first-order line is different to that of dynamic case. So for
 8 the former one this line terminates at $\delta_c = 3.0$, and for
 9 the latter one it happens at $\delta_c = 6.0$.

10 4 Conclusions

11 In summary, we have studied within MFA the phase dia-
 12 gram in the T - D plane of the kinetic spin-1 Blume-Capel
 13 model on a simple cubic lattice by using the Glauber
 14 dynamic and compared with the equilibrium solution.
 15 The phase transition nature was determined by analyz-
 16 ing the behavior of the dynamic order parameter, which
 17 decreases to zero continuously in the second-order transi-
 18 tion, but has discontinuous jump in the first-order transi-
 19 tion. The Lyapunov exponent was calculated in order to
 20 verify the stability of a given solution. In the equilibrium
 21 case, the stability limit is analyzed through the free en-
 22 ergy (*Maxwell construction*). We compare our results of
 23 the DPT with the equilibrium phase diagram [1] and was
 24 verified a smaller first-order line. We have observed that
 25 there is an upper limit of these anisotropy (i.e., $\delta > \delta_c$,
 26 where $\delta_c = 3$ and 6 for the equilibrium and nonequilib-
 27 rium results, respectively) where the system exhibits no
 28 phase transition. A similar behavior in the equilibrium
 29 and nonequilibrium phase diagram have been observed in
 30 the study of the random field Ising model in the mean-field
 31 approximation [32], also with difference in the first-order
 32 lines.

33 This work started during a visit at Universidade Federal de
 34 Pernambuco. The author J.R.S. thanks Dr. Sergio Galvão
 35 Coutinho for hospitality. This work was partially supported
 36 by CNPq (Brazilian Research Agency).

37 References

- 38 1. M. Blume, Phys. Rev. **141**, 517 (1966)
 39 2. H.W. Capel, Physica **32**, 966 (1966)

3. J. Oitmaa, Phys. Lett. A **33**, 1071 (1970) 40
 4. T. Kaneyoshi, J. Phys. C **21**, L679 (1988) 41
 5. A.K. Jain, D.P. Landau, Phys. Rev. B **22**, 445 (1980) 42
 6. A. Du, Y.Q. Yu, H.J. Liu, Physica A **320**, 387 (2003) 43
 7. M. Jurcisin, A. Bobak, M. Jascur, Physica A **224**, 684 44
 (1996) 45
 8. E. Vives, T. Castan, P.A. Lindgard, Phys. Rev. B **53**, 8915 46
 (1996) 47
 9. C. Buzano, A. Pelizzola, Physica A **189**, 333 (1992) 48
 10. J. Marro, R. Dickman, *Nonequilibrium Phase Transitions* 49
in Lattice Models (Cambridge University Press, 50
 Cambridge, 1999) 51
 11. B.K. Chakrabarti, M. Acharyya, Rev. Mod. Phys. **71**, 847 52
 (1999) 53
 12. Q. Jiang, H.N. Yang, G.C. Wang, J. Appl. Phys. **79**, 5122 54
 (1996) 55
 13. J.W. Gibbs, *Collected Works* (Longmans, Green and Co, 56
 New York, 1928) 57
 14. V.A. Antonov, IAU Symp. **113**, 525 (1985) 58
 15. J. Barré, D. Mukamel, S. Ruffo, Phys. Rev. Lett. **87**, 59
 030601 (2001) 60
 16. D. Mukamel, S. Ruffo, N. Schreiber, Phys. Rev. Lett. **95**, 61
 240604 (2005) 62
 17. Z. Bertalan, T. Kuma, Y. Matsuda, H. Nishimori, J. Stat. 63
 Mech, P01016 (2001) 64
 18. K. Jain et al., J. Stat. Mech., P11008 (2007) 65
 19. A. Campa, T. Dauxois, S. Ruffo, Phys. Rep. **480**, 57 66
 (2009) 67
 20. D. Lynden-Bell, R. Wood, Motn. Not. R. Astron. Soc. **138**, 68
 495 (1968) 69
 21. S. Puri, Phys. Rev. E **55**, 1752 (1997) 70
 22. S. Puri, P. Sharma, Phys. Rev. E **57**, 1873 (1998) 71
 23. K. Tafa, S. Puri, D. Kumar, Phys. Rev. E **63**, 046115 72
 (2001) 73
 24. K. Tafa, S. Puri, Phys. Rev. E **64**, 056139 (2001) 74
 25. M. Keskin, O. Canko, U. Temizer, Phys. Rev. E **72**, 036125 75
 (2005) 76
 26. M. Keskin, O. Canko, U. Temizer, J. Exp. Theor. Phys. 77
104, 936 (2007) 78
 27. T. Tomé, M.J. de Oliveira, Phys. Rev. A **41**, 4251 79
 (1990) 80
 28. F. Hontinfinde, S. Bekhechi, R. Ferrando, Eur. Phys. J. B 81
16, 681 (2000) 82
 29. S.A. Deviren, E. Albayrak, Physica A **390**, 3283 (2011) 83
 30. X. Shi, G. Wei, Physica A **391**, 29 (2012) 84
 31. R. Glauber, J. Math. Phys. **4**, 294 (1963) 85
 32. G.L.S. Paula, W. Figueiredo, Eur. Phys. J. B **1**, 519 86
 (1998) 87

Referências Bibliográficas

- [1] Herbet B. Callen, Thermodynamics, John Wiley, New York, 1960.
- [2] S. R. Salinas, Introdução à física estatística, EDUSP, 2005.
- [3] R. K. Pathria. Statistical Mechanics, segunda edição, Plnta Three, 2000.
- [4] E. J. S. Lage, Física Estatística, Fundação Calouse Gulbenkian, 1995.
- [5] H. E. Stanley, Introduction to phase transitions and critical phenomena (Oxford University Press, Oxford, 1971).
- [6] K. Hui e A. N. Berker, Phys. Rev. Lett. 62, 2507(1989); Ibid 63,2433 (1989) (errata).
- [7] Y. Imry, J. Stat. Phys. 34, 849 (1984).
- [8] W. K. Heisenberg, Z. Phys., 49, 619 (1928).
- [9] D. C. Mattis, The Theory of Magnetism I - Springer-Verlag, New York (1985).
- [10] Y. Frenkel, Z. Phys. 49, 619 (1928).
- [11] Y. Dorfman, Nature 119, 353 (1928).
- [12] P. A. M. Dirac, The Principles of quantum mechanics (1958).
- [13] L. J. de Jongh e A.R.Miedema, Experiments on simple magnetic model systems- Taylor and Francis Ltd., London, Pag.133 (1974).
- [14] K. Yosida, Theory of Magnetism - Springer-Verlag, New York, Pag.125 (1996).
- [15] J. G. Ramos, II Simpósio Brasileiro de Física Teórica - Rio de Janeiro-RJ (1969).
- [16] N. D. Mermin e H. Wagner, Phys. Rev. Lett. 22, 1133 (1966).

- [17] J. Ricardo de Sousa e N. S. Branco, Phys. Rev. B 72, 13442 (2005).
- [18] J. H. Van Vleck, J.Phys. Rad. 12, 262 (1931); Phys.Rev. 52, 1178 (1937).
- [19] T. Moryia, Magnetism vol 1 - Ed. G. T. Rado e H. Suhl (1963).
- [20] I. E. Dzyaloshinski, J. Phys. Chem. Solids 4, 241 (1958).
- [21] E. Ising , Z. Physik 31, 253(1925).
- [22] J. P. Changeux, Sc. Am. 212, 244(1965).
- [23] J. Monod, J. Wyman e J.P. Changeux, J. Mal. Biol. 12, 88 (1965).
- [24] E. W. Montroll e N. S. Goel, Biopolymeis 4, 884(1966).
- [25] N. S. Goel e E. W. Montroll, Biopolymeis 6, 731 (1952).
- [26] P. Weiss, J. Phys. Radium 4, 661 (1907).
- [27] R. E. Peierls, Proc. Camb. Phil. Soc. 32, 471 (1936), ibid 32, 477 (1936).
- [28] H. A. Kramer e G. H. Wannier, Phys Rev. 60, 252, 263 (1941).
- [29] L. Onsager, Phys. Rev. 65, 117 (1944).
- [30] C. N. Yang, Phys. Rev. 65, 117 (1944).
- [31] B. M. McCoy e T. T. Wei, The two-dimensional Ising Model (Harvard University Press, 1973).
- [32] T. Matsubara e H. Matsuda, Progr. Theor. Phys. 16, 416 (1956).
- [33] E. H. Lieb, Phys. Rev. Lett., 18, 1046 (1967).
- [34] J. M. Kosterlitz e D. J. Thouless, J. Phys. C 6, 1181 (1973).
- [35] L. de Jongh e A. R. Miedema, Adv. Phys. 23, 1 (1974).
- [36] A. N. Berker e D. R. Nelson, Phys. Rev. B, 19, 2488 (1979).
- [37] H. Bethe, Z. Phys. 71, 205 (1931).
- [38] H. Hulthén, Arkiv. Nat. Astron. Fys. 26A, 11 (1938).

- [39] P. Walker, Phys. Rev. 116, 1089 (1959).
- [40] G. Shirane, Y. Endoh, R. J. Birgeneau, M. A. Kastner, Y. Hidaka, M. Oda, M. Suzuki, e T. Murakami, Phys. Rev. Lett. 59, 1613 (1987).
- [41] Y. Endoh, et.al., Phys. Rev.B 37, 7443 (1988).
- [42] J. Mario e R. Dickman, Nonequilibrium Phase transitions in lattice models (Cambridge University Press, Cambridge, 1999).
- [43] T. Tomé e M. J. Oliveira, Dinâmica estocástica e irreversibilidade, EDUSP, São Paulo, 2001.
- [44] L. Landau e E. Lifshitz, Phys. Z. Sowjetunion 8,183 (1935).
- [45] C. Kittel, Introduction to Solid State Physics (John Wiley, New York, 1966), pag. 495.
- [46] P. Bruno, et al.,J. Appl. Phys. 68,575 (1990).
- [47] Q. Jiang, Yang e G. C. Wang, Phys. Rev.B 52,14911 (1996); J. Appl. Phys. 79,5122 (1996); J. Vac. Sli. Technol. A 14,3180 (1996).
- [48] J. S. Suen e J. L. Erskine, Phys. Rev. Lett. 78,3567 (1997).
- [49] T. Tomé e M.J. de Oliveira, Phys. Rev. A 41,4251 (1990).
- [50] C. N. Luse e A. Zangwill, Phys. Rev. E 50, 224 (1994).
- [51] B. K. Chakrabarti e M. Acharyya, Rev. Mod. Phys. 71, 847 (1999); Phys. Rev. B 52, 6550 (1995).
- [52] M. Acharyya, Phys. Rev. E 56, 1234 (1997); Phys. Rev. E 58, 179 (1998); Phys. Rev. E 59, 218 (1999).
- [53] G. Berkolaiko e M. Grinfeld, Phys. Rev. E 76, 061110 (2007).
- [54] M. Acharyya e B.K. Chakrabarti, Annual Reviews of computational Physics, Vol. I, editado por D. Stauffer (World scientific, Singapore, 1994), pag. 107.
- [55] W. S. Lo e R.A. Pelcovits, Phys. Rev. A 42, 7471 (1990).

- [56] M. Acharyya, Phys. Rev. E 59, 218 (1999).
- [57] G. Korniss, C.J. Write, P.A. Rikvold e M.A. Novotny, Phys. Rev. E 63, 016120 (2001).
- [58] G. Korniss, P.A. Rikvold e M.A. Novotny, Phys. Rev E 66, 056127 (2002).
- [59] H. Fujisaka, H. Tutu e P.A. Rikvold, Phys. Rev. E 63, 036109 (2001).
- [60] H. Jang e M. J. Grimson, Phys. Rev. B 55, 12556 (1997); J. Phys. Condens. Matter 10, 9641 (1998).
- [61] K. Binder e D.P. Landau, Phys. Rev. B 13, 1140 (1976).
- [62] H. Jang e M. J. Grimson, Phys. Rev.E 63, 066119 (2001); H. Jang e M. J. Grimson e C. K. Hall, Phys. Rev. B 67, 094411 (2003).
- [63] M. E. J. Newman e G. T. Barkema, Monte Carlo Methods in Statistical Physics (Clarendon, Oxford, 1999).
- [64] H. Jang, M. J. Grimson e T. B. Woolf, Phys. Rev. E 70, 047101 (2004).
- [65] X. L. Shi, G.Z.Wei e L.Li, Phys. Lett.A 372, 5922 (2008).
- [66] T. Kaneyoshi e H. Honmura, J. Phys.C: Solid State Phys. B 12,3979 (1979) .
- [67] B. Deviren, O.Canko e M.Keskin, Chin. Phys. B 19, 050518 (2010).
- [68] S. A. Deviren e E.Albayrak, Phys. Rev.E 82, 022104 (2010).
- [69] R. J. Baxter, Exactly Solvable Models in Statistical Mechanics (Academic, New York, 1982).
- [70] J. R. Glauber, J. Math. Phys. 4, 294 (1963); Bull. Am. Phys.Soc. 5,296 (1960)
- [71] V. Privman, Nonequilibrium statistical mechanics in one dimensional (Cambridge University Press, Cambridge, 1997).
- [72] Y. Yamada e Y. Fujii, J. Phys. Soc. Jpn. 24, 1053 (1968).
- [73] K. Kawasaki, Phys. Rev. 145, 224 (1966).

- [74] L. P. Kadanoff e J. Swift, Phys. Rev. 165, 310 (1968).
- [75] Y. Imry e S. K. Ma, Phys. Rev. Lett. 35, 1399 (1975).
- [76] A. Aharony, Phys. Rev. B. 18, 3318 (1978).
- [77] T. Scheider e E. Pythe, Phys. Rev. B 15, 1519(1977).
- [78] A. Houghton, A. Khurana e F. J. Seco, Phys. Rev. Lett. 55, 856 (1985).
- [79] M. Gofman, J. Adler, A. Aharanoy, A. B. Harris e M. Schawartz, Phys. Rev. B 53, 6362 (1996).
- [80] A. Houghton, A. Khurana Imry e F. J. Seco, Phys. Rev. B 34, 1700 (1986).
- [81] J. Machta, M. E. J. Newman e Chayes, Phys. Rev. E 63, 8782 (2000).
- [82] A. A. Middleton e D. S. Fisher, Phys. Rev. B 65, 134411 (2002).
- [83] N. G. Fytas, A. Malakis e K. Eftaxias, J. Stat. Mech. P 03015, (2008).
- [84] L. Hernandez e H. T. Diep, Phys. Rev. B 55, 14080 (1997); L. Hernandez e H. Ceva, Physica A 387, 2793 (2008).
- [85] S. Fishman e A. Aharony, J. Phys. C: Solid State Phys. 12, 1729 (1979).
- [86] S. Galam, Phys. Rev. B 31, 7274 (1985).
- [87] H. E. Borges e P. R. Silva, Phys. Status Solidi B 121, K19 (1984); *ibid* 121, K25 (1984); Physica A 144, 561 (1987).
- [88] D. F. de Albuquerque, I. P. Fittipaldi e J. Ricardo de Sousa, J. Magn. Magn. Mater. 306, 92 (2006); D. F. de Albuquerque, I. P. Fittipaldi , J. Ricardo de Sousa e N. O. Moreno, Physica B 306, 230 (2006).
- [89] M. Jascur e T. Kaneyoshi, Physica A 195, 497 (1993).
- [90] Y. Q. Liang, G. Z. Wei, Q. Zhang, Z. H. Xin e G. L. Song, J. Magn. Magn. Mater. 284, 47 (2004).
- [91] E. F. Sarmiento e T. Kaneyoshi, Phys. Rev. B 39, 9555 (1989).

- [92] V. K. Saxena, Phys. Rev. B 35, 2058 (1987).
- [93] O. Canko, E. Albayrak e M. Keskin, J. Magn. Magn. Mater. 294, 63 (2005).
- [94] S. Galam e A. Aharony, J. Phys. C: Solid State Phys. 13, 1065 (1980); S. Galam, J. Phys. C: Solid State Phys. 15, 529 (1982)
- [95] S. Galam , Euro. phys. Lett. 37, 615 (1997); J. Non-Cryst. Solids 235-237, 570 (1998).
- [96] I. A. Hadjiagapiou, Physica A 389, 3945 (2010).
- [97] I. A. Hadjiagapiou, Physica A 390, 2229 (2011).
- [98] I. A. Hadjiagapiou, Physica A 390, 3204 (2011).
- [99] N. Crokidakis e F. D. Nobre, J. Phys.: Condens Matter 20, 145211 (2008).
- [100] E. Pytte, Y. Imry e D. Mukamel, Phys. Rev. Lett. 46, 1173 (1981); D. Mukamel e E. Pytte, Phys. Rev. B 25, 4779 (1982).
- [101] J. Z. Imbrie, Phys. Rev. Lett. 53, 1747 (1984); J. Bricmont, Phys. Rev. Lett. 59, 1829 (1987).
- [102] C. Frontera e E. Vives, Phys. Rev. E 59, R1295 (1998).
- [103] Y. Yuksel, U. Akinci e H. Polat, Physica A 391, 415 (2012).
- [104] A. I. Larkin, Sov. Phys. JETP 31, 1399 (1970).
- [105] D. P. Belanger, A. R. King e V. Jaccarino, Phys. Rev. B 31, 4538 (1985).
- [106] A. R. King , V. Jaccarino, D. P. Belanger e S. M. Rezende, Phys. Rev. B 32, 503 (1983).
- [107] J. B. Ferreira, A. R. King , V. Jaccarino, J. L. Cardy e H. J. Guggenheim, Phys. Rev. B 28, 5192 (1983).
- [108] H. Yoshizawa, R. A. Cowley, G. Shirane, R. J. Birgeneau, H. J. Guggenheim e H. Ikeda, Phys. Rev. Lett. 48, 438 (1982).

- [109] J. Kushauer, R. Van Bentum, W. Kleemann e D. Bertrand, Phys. Rev. B 53, 11647 (1996); R.J Belanger, J. Magn. Mater.
- [110] R.J Belanger, Spin glasses and random fields, editado por A. P. Young (World scientific, Singapore, 1998).
- [111] N. Crokidakis, Phys. Rev. E 81, 041138 (2010).
- [112] Emanuel Costabile e J. Ricardo de Sousa, Phys. Rev. E 85, 011121 (2012).
- [113] G. L. S. Paula e W. Figueiredo, Eur. Phys. J. B 1, 519 (1998).
- [114] M. Blume, Phys. Rev. 141, 517 (1966).
- [115] H. Capel, Physica 32, 966 (1966).
- [116] A. F. Siqueira e I. P. Fittipaldi, Phys. Stat. Sol. B 119, k31 (1983); Physica A 138, 592 (1986).
- [117] A. Brognara, A. Parola e L. Reatto, Phys. Rev. E 65, 066113 (2002).
- [118] W. Selke e J. Yeomans, J. Phys. A 16, 2789 (1983); A. K. Jain e D. P. Landau, Phys. Rev. B 22, 445 (1980); N. B. Wilding e P. Nielaba, Phys. Rev. E 53, 926 (1996); M. Deserno, Phys. Rev. E 56, 5204 (1997).
- [119] P. D. Beale, Phys. Rev. B 33, 1717 (1986); J. C. Xavier, F. C. Alcaraz, D. P. Lara e J. A. Plascak, Phys. Rev. B 57, 11575 (1998); J. C. Lessa e R. F. S. Andrade, Phys. Rev. E 62, 3083 (2000).
- [120] D. M. Saul, M. Wartis e D. Stauffer, Phys. Rev. B 9, 4964 (1974).
- [121] M. Blume, V. J. Emery e R. B. Griffiths, Phys. Rev. A 4, 1071 (1971).
- [122] T. Kaneyoshi e I. P. Fittipaldi, J. Phys. Cond. Matter 1, 6513 (1989).
- [123] J. R. Viana e J. Ricardo de Sousa, Phys. Rev. B 75, 052403 (2007).
- [124] J. R. Viana, J. Ricardo de Sousa e M. A. Continentino, Phys. Rev. B 77, 0121041 (2008); Rosana A. dos Anjos, J. R. viana e J. Ricardo de Sousa, Phys. Lett. A 372, 1180 (2008); Octavio R. Salmon, J. Ricardo de Sousa e F. D. Nobre, Phys. Lett A 373, 2525 (2009); G. Mendonça, Rodrigo S. Lapa, J. Ricardo de Sousa, K.

- Majumdar e T. Datta, *J. Stat. Mech.* V06, P06022 (2010); Wagner Nunes, J. R. Viana, J. Ricardo de Sousa e R. Richter, *J. Phys. Cond. Matter* 22, 146004 (2010).
- [125] J.W. Gibbs, *Collect Words* (Longmans, Green, New York, 1928).
- [126] V. A. Antonov, *IAU Symp.* 113, 525 (1985).
- [127] J. Barré, D. Mukamel e S. Ruffo, *Phys. Rev. Lett.* 87, 030601 (2001).
- [128] D. Mukamel e S. Ruffo e M. Schreiber. *Phys. Rev. Lett.* 95, 240604 (2005).
- [129] Z. Bertalan, T. Kuma, Y. Matsuda e H. Nishimori, *J. Stat. Mech.* P 01016 (2001).
- [130] K. Jain, et al., *J. Stat. Mech.* P11008 (2007).
- [131] A. Campa, T. Dauxais e S. Ruffo, *Phys. Rep.* 480, 57 (2009).
- [132] D. Lynden-Bell e R. Wood, *Man. Not. R. Astron. Soc.* 138, 495 (1968).
- [133] R. Pakter e Y. Levin, *Phys. Rev. Lett.* 106, 200603 (2011).
- [134] F. Manzo, M. Keskin e O. Yalcin, *Physica A* 293, 215 (2001).
- [135] F. Manzo e E. Oliveira, *J. Stat. Phys.* 104, 1029 (2001).
- [136] M. Keskin, O. Canko e U. Temizr, *Phys. Rev. E* 72, 036125 (2005); *J. Exp. and Theor. Phys.* 104, 936 (2007).
- [137] B. Deviren e M. Keskin, *J. Mag. Mater.* 324, 1051 (2012).
- [138] S. A. Deviren e E. Albayrak, *Physica A* 390, 3283 (2011).
- [139] S. Arenales e A. Darezzo, *Cálculo numérico: Aprendizagem com apoio de software*, São Paulo: Thomson Learning, (2008).
- [140] L. Lara; C. Stoico; R. Machado e M. Castagnino, *M. Computacional* vol.XXII,1441 (2003).
- [141] *A First Course in Computacional Physics-* Paul De Vries