

UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS
PRO REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
DEPARTAMENTO DE APOIO A PESQUISA
PROGRAMA INSTITUCIONAL DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE MODELOS MAGNÉTICOS

Bolsista: Cássio Macêdo Maciel, CNPq

MANAUS
2012

UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS
PRO REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
DEPARTAMENTO DE APOIO A PESQUISA
PROGRAMA INSTITUCIONAL DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA

RELATÓRIO FINAL
PIB-E/0137/2011
SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE MODELOS MAGNÉTICOS

Bolsista: Cássio Macêdo Maciel, CNPq
Orientador: Prof. Dr. Octávio Daniel Rodriguez Salmon

MANAUS
2012

RESUMO

Em recentes anos, materiais magnéticos têm sido largamente estudados tanto sob o ponto de vista teórico quanto experimental. Neste relatório, focar-se-á as aplicações de técnicas de simulação computacional no estudo das propriedades magnéticas desses materiais. Entre as técnicas de simulação computacional existentes, dar-se-á especial enfoque ao método de Simulação de Monte Carlo. Este método se mostra bastante eficiente e pode ser empregado em diversas áreas da física em que se utilizem alguns tipos de descrição estatística.

SUMÁRIO

INTRODUÇÃO	5
REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	6
MÉTODOS UTILIZADOS	8
RESULTADOS E DISCUSSÃO	9
CONCLUSÕES	13
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	14
CRONOGRAMA EXECUTADO	15

INTRODUÇÃO

O estudo de materiais magnéticos é importante não só para aprofundar os conhecimentos teóricos da Matéria Condensada, mas também por causa de suas diversas aplicações tecnológicas, que abrangem, desde a fabricação de dispositivos eletrônicos, até aplicações na medicina. Conseqüentemente, surge a necessidade de estudar o comportamento destes materiais em função da temperatura e outros parâmetros que possam afetar o ordenamento magnético, o qual é definido em função de variáveis de spin, as quais são proporcionais aos momentos magnéticos dos sítios da rede cristalina.

Os fenômenos magnéticos foram os primeiros a despertar a curiosidade do homem sobre o interior da matéria. Tais fenômenos são conhecidos a pelo menos 2500 anos, o que torna o magnetismo uma das áreas mais antigas da Física. Aplicações tecnológicas de fenômenos magnéticos são comuns no dia a dia e vão desde os ímãs de geladeira aos dispositivos de armazenamento de informação como os discos rígidos de computadores. Os principais objetivos da pesquisa que os cientistas têm neste campo são a compreensão das origens microscópicas das propriedades magnéticas dos materiais, descoberta dos novos materiais e fenômenos, o estudo das propriedades termodinâmicas e das excitações dinâmicas dos materiais magnéticos, bem como o desenvolvimento de novas aplicações tecnológicas.

Boa parte dos estudos teóricos atuais envolvendo materiais magnéticos são feitos através de técnicas de Física Estatística. Esta tem como principal objetivo obter informações macroscópicas (termodinâmicas) de sistemas físicos a partir dos conhecimentos das interações microscópicas presentes. Uma das principais técnicas da Mecânica Estatística é o método de Monte Carlo.

Transições de fase constituem um dos mais ricos objetos de estudo da Física, com aplicações em várias áreas da ciência. O objetivo principal deste trabalho é a construção de diagramas de fases do Modelo de Blume-Capel, cujo Hamiltoniano é dado por: $\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + D \sum_i S_i^2$ o qual consiste na interação de spins que adquirem os valores $S_i = -1, 0, 1$, o "i" denota o sítio i da rede cristalina e D é o campo de anisotropia. A rede na qual o modelo será implementado será a rede quadrada e/ou a rede cúbica.

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Ensemble Microcanônico

O ensemble microcanônico é usado em sistemas isolados por paredes adiabáticas, rígidas e impermeáveis. Nenhuma ligação entre o sistema em estudo e sua vizinhança é permitida. Definindo os postulados da Mecânica Estatística, temos: Primeiro Postulado ou Hipótese Ergódica.

“Todos os estados microscópicos acessíveis a um sistema fechado em equilíbrio são igualmente prováveis.”

Esta pergunta define o ensemble microcanônico. Como todos os estados são igualmente acessíveis, a probabilidade de encontrar o sistema em um dos estados com energia interna U , volume V , magnetização M e por um número de partículas N é

$$P_i = \frac{1}{\Omega(U,V,M,N)}, \quad (1)$$

sujeito a

$$\sum_i P_i = 1. \quad (2)$$

Dessa forma, podemos utilizar a distribuição de probabilidades (1) para tratar estatisticamente um processo termodinâmico.

E para o Segundo Postulado temos: *A entropia é definida por*

$$S(U, V, M, N) = -k_B \sum_i P_i \ln P_i. \quad (3)$$

No caso do Ensemble Microcanônico, temos que:

$$\begin{aligned} S(U, V, M, N) &= -k_B \sum_i \frac{1}{\Omega(U, V, M, N)} \ln \frac{1}{\Omega(U, V, M, N)} \\ &= k_B \ln \Omega(U, V, M, N) \sum_i \frac{1}{\Omega(U, V, M, N)} \\ &= k_B \ln \Omega(U, V, M, N). \end{aligned} \quad (4)$$

A entropia acima possibilita a conexão do ensemble microcanônico com a termodinâmica.

Ensemble Canônico

Como na termodinâmica, temos representações alternativas, dependendo da conveniência. Suponha um sistema em contato, por uma parede diatérmica, fixa e impermeável, com um reservatório térmico. Seja esse reservatório R muito grande em relação ao sistema S , de forma que o número de graus de liberdade que descreve o sistema é desprezível perto dos que descrevem o reservatório, ou seja, $\Omega_R \gg \Omega_S$. Quando o sistema ($S + R$) estiver isolado, com energia total U_0 , a probabilidade P_j de encontrar o sistema em um estado microscópico j será dada por

$$P_j = c\Omega(U_0 - U_j). \quad (5)$$

Fazendo o logaritmo da relação acima, temos:

$$\ln P_j = \ln(c) + \ln\Omega(U_0 - U_j). \quad (6)$$

Substituindo a relação (4), temos que:

$$\ln P_j = \ln(c) + \frac{1}{k_B} S(U_0 - U_j). \quad (7)$$

Expandindo em série de Taylor em torno de U_0 , temos:

$$\ln P_j = \text{constante} + \left(\frac{\partial S}{\partial U}\right)(-U_j) + \left(\frac{\partial^2 S}{\partial U^2}\right)(-U_j) + \dots \quad (8)$$

como $\left(\frac{\partial S}{\partial U}\right) = \frac{1}{T}$ e a temperatura é constante $T = T_R$, devido ao reservatório ser térmico.

Temos que $\left(\frac{\partial^2 S}{\partial U^2}\right) = \left(\frac{\partial T}{\partial U}\right) = 0$, portanto:

$$\ln P_j = \text{constante} - \frac{1}{k_B T} U_j, \quad (9)$$

ou seja

$$P_j = \frac{e^{(-\beta U_j)}}{Z}, \quad (10)$$

onde $\beta = \frac{1}{k_B T}$ e Z é a constante de normalização, denominada *função de partição*,

assim sendo

$$Z = \sum_j e^{(-\beta U_j)}. \quad (11)$$

Dessa forma, podemos utilizar a distribuição de probabilidades (10) para tratar estatisticamente um processo termodinâmico em contato com um reservatório térmico.

MÉTODOS UTILIZADOS

Não é possível falarmos de magnetismo sem referência ao modelo de Ising. Proposto em 1920 por Wilhelm Lenz ao seu aluno de doutorado Ernest Ising, tinha como objetivo estudar um dos fenômenos mais importantes em matéria condensada, o ferromagnetismo de momentos localizados. O modelo trata o comportamento de elementos individuais como os componentes de spins, presença de átomos ou moléculas em sítios, atividade neural, etc. Esses elementos modificam suas propriedades de acordo com outros elementos da vizinhança e também com o ambiente que está presente, no caso dos spins o ambiente interfere com a temperatura e campo magnético externo.

O modelo inicial era bem simples, uma cadeia linear de momentos magnéticos S_i interagindo com seus vizinhos S_{i+1} e S_{i-1} na forma $-JS_i(S_{i+1} + S_{i-1})$. A hamiltoniana do sistema é:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} s_i s_j - H \sum_i s_i \quad (12)$$

com $s = \pm 1$ e a condição de primeiros vizinhos

$$J_{ij} = \begin{cases} J & \text{se } i, j \text{ forem vizinhos} \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}$$

A magnetização no modelo de Ising é dada simplesmente pela soma de cada de todos os spins. M é definido como:

$$M = \sum_i s_i \quad (13)$$

A crescente sofisticação dos modelos descrevendo magnetismo tem aumentado consideravelmente as dificuldades matemáticas em suas abordagens. A técnica de campo médio (TCM), de longe a mais simples de todas, permite que se faça um estudo preliminar do modelo, que pode servir de base para implementações mais sofisticadas. O fato do modelo de Ising ter solução exata constitui oportunidade, um tanto rara, de se verificar o valor de TCM.

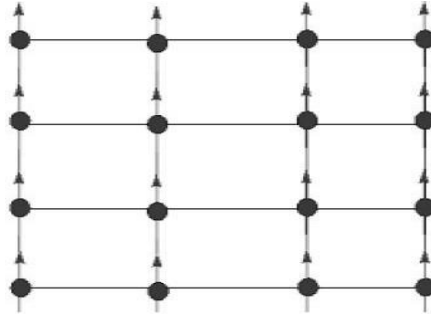


Figura 01. Representação de uma rede de spin bidimensional.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Equação Mestra

De modo geral, quando nos referimos à Equação Mestra, estamos mencionando um conjunto de equações que descrevem a evolução temporal de probabilidades de um determinado sistema. O intuito da Equação Mestra é, portanto, determinar a evolução temporal de um conjunto de probabilidades de ocupação dos estados do sistema.

A Equação Mestra define a mudança dessa probabilidade (do sistema estar no estado k e no tempo t) com o tempo t .

Seja $P_k(t)$ a probabilidade do estado k ser ocupado no instante t . Logo, temos:

$$\frac{dP_k(t)}{dt} = \sum_{n \neq k} [P_n(t)W_{nk} - P_k(t)W_{kn}], \quad (14)$$

onde, W_{kn} é a taxa de transição (por unidade de tempo) para uma partícula passar do estado k para o estado n .

No equilíbrio, $\frac{dP_k(t)}{dt} = 0$, logo, no equilíbrio as taxas em que o sistema realiza transições para o estado k e fora dele devem ser iguais, ou seja:

$$P_n W_{nk} = P_k W_{kn}, \text{ onde } P_n = ce^{(-\beta U_n)} \quad (15)$$

$$\frac{P_n}{P_k} = \frac{W_{kn}}{W_{nk}} = \frac{e^{(-\beta U_n)}}{e^{(-\beta U_k)}} = e^{-\beta(U_n - U_k)}$$

se $U_n < U_k$, então $W_{kn} = 1$. Então temos:

$$\frac{1}{W_{nk}} = e^{-\beta(U_n - U_k)}$$

$$W_{nk} = e^{-\beta(U_k - U_n)}$$

$$W_{nk} = e^{-\beta \Delta U}$$

Método de Monte Carlo

Monte Carlo é um método utilizado por séculos, mas convencionalmente nasceu em 1949 com a publicação de um artigo “*The Monte Carlos Method*” pelos matemáticos John Von Neumam e Stasirlav Ulan. Nas ultimas década, com o incrível

desenvolvimento da ciência da computação o método tornou-se ferramenta importante no estudo de sistemas complexos em vários campos como na biologia molecular, química, geofísica e engenharia. Na física, utiliza-se Monte Carlo em diversos sistemas tal como o transporte de radiação através da atmosfera terrestre, simulação de processos sub-nucleares de alta energia, flutuações térmicas no modelo de Ising.

Um das formas de simular as flutuações térmicas no modelo de Ising é considerar a inversão de um único spins por vez. Fazendo um sistema de spins passar continuamente de um estado particular para outro. Para isso utilizamos uma probabilidade e números aleatórios. A probabilidade é baseada na função de partição do sistema do estado em que se encontra e no estado para o qual ele poderá passar.

Qualquer taxa de transição que satisfaça a equação (15), chamada de *balanço detalhado*, pode ser utilizada em uma simulação de Monte Carlo. De acordo com prescrição de Metropolis:

$$W_{kn} = \begin{cases} e^{-\beta\Delta U}, & \text{se } \Delta U > 0 \\ 1, & \text{se } \Delta U < 0 \end{cases}$$

onde $\Delta U = U_k - U_n$. Como W_{nk} é uma grandeza diferente de zero para todos os estados k e n , o 1º postulado da Mecânica Estatística é obedecido. A forma que o algoritmo pode ser implementado é dado pelo fluxograma abaixo

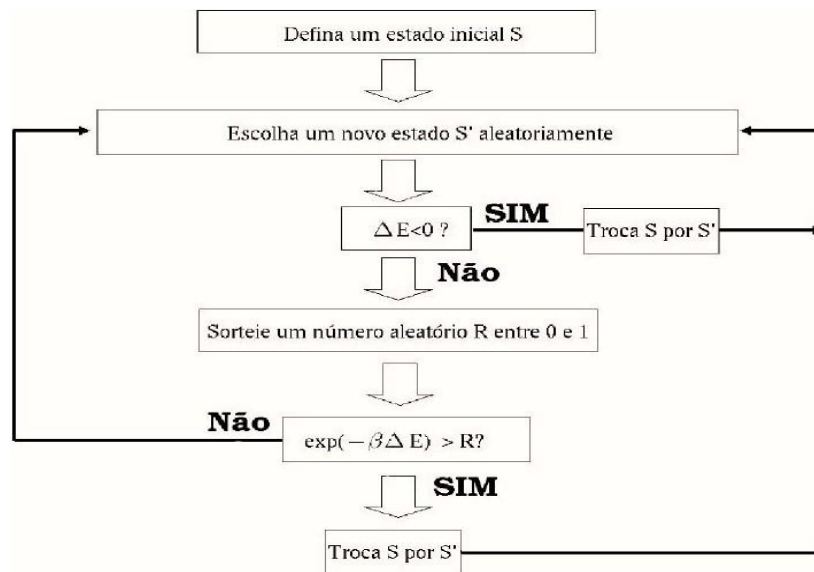


Figura 02. Fluxograma do Algoritmo de Metropolis

Em sistemas de spins, deve-se determinar o tipo de rede e as condições de contorno usadas na simulação, condições de contorno periódicas são comuns. As configurações iniciais usuais são aquelas com os spins completamente ordenados ou desordenados. Um novo estado resulta da mudança do valor do spin.

Nos gráficos abaixo, temos o cálculo de duas grandezas físicas que são obtidas simplesmente calculando a média de seus valores durante os passos de

Monte Carlo sob as mesmas condições do tamanho da rede $L (N \times N)$ (no caso dos gráficos 1, 2 e 3). A intenção é fazer a probabilidade da equação (10) depender apenas da diferença de energia entre dois estados, um estado inicial e um final. Desta forma, a função de partição pode ser desconsiderada.

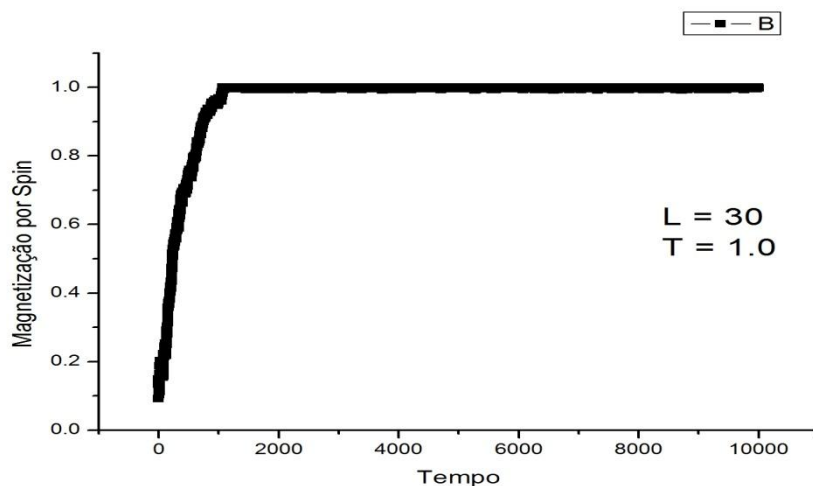


Gráfico 01. Magnetização por spin em função do tempo (passos de Monte Carlo). Onde L é o tamanho da rede bidimensional (quadrada) e T é a temperatura dada ao sistema.

Podemos observar que, a medida que o número de passos de Monte Carlo aumenta a magnetização tende a permanecer em somente um determinado valor, é o que podemos chamar de magnetização média, onde o sistema tende a um equilíbrio.

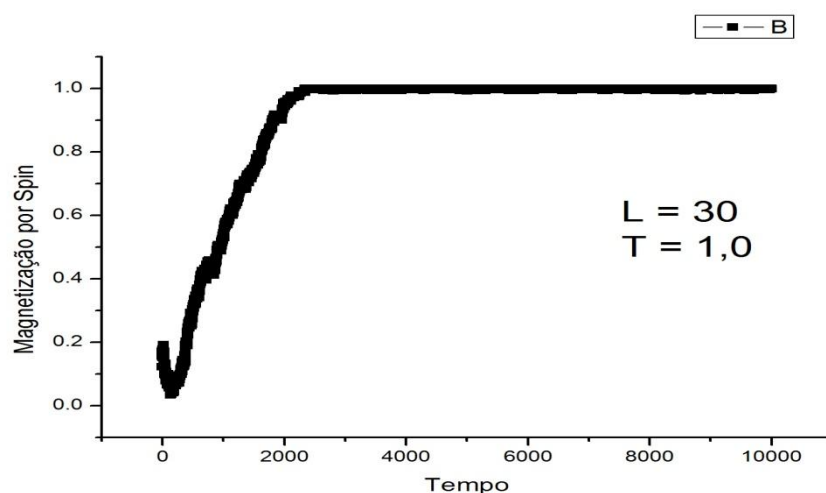


Gráfico 02. Magnetização por spin em função do tempo (passos de Monte Carlo). Onde L é o tamanho da rede bidimensional (quadrada) e T é a temperatura dada ao sistema.

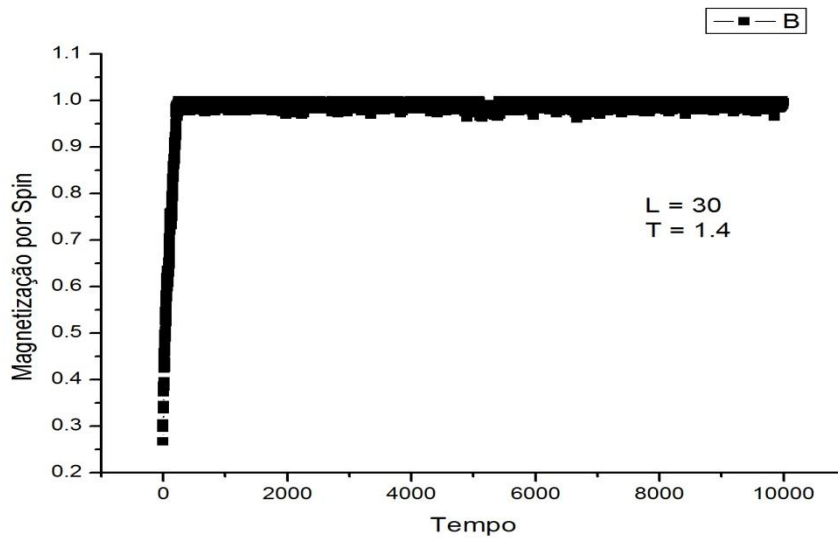


Gráfico 03. Magnetização por spin em função do tempo (passos de Monte Carlo). Onde L é o tamanho da rede bidimensional (quadrada) e T é a temperatura dada ao sistema.

No gráfico abaixo, temos uma situação diferente. O mesmo trata da medida da evolução temporal da energia E para diferentes valores de T (temperatura), a partir de uma configuração desordenada de spins, configuração essa que estabelecida no momento em que o programa é colocado para rodar. Depois de um determinado número de passos a energia tende a estado de pouca flutuação, mas quando próxima à temperatura crítica (no caso $T = 2.4$) a energia tende a ter uma maior flutuação.

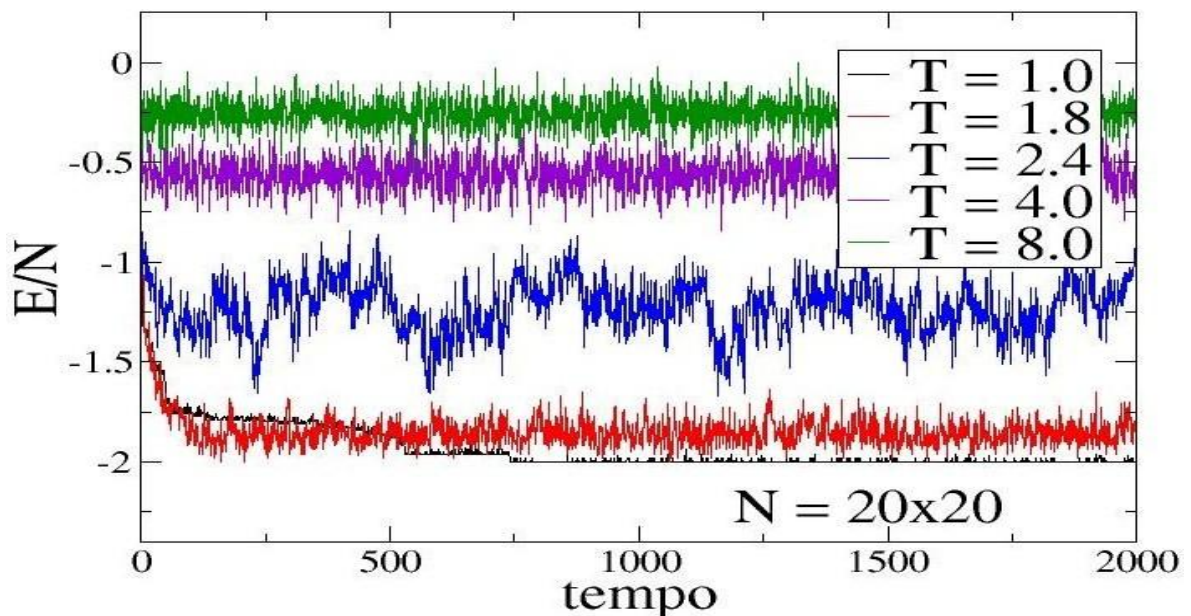


Gráfico 04. Valores para a Energia E em função do número dos passos de Monte Carlo.

CONCLUSÕES

A Física da Matéria Condensada é uma das áreas mais importantes e abrangentes da Física contemporânea. Suas descobertas têm gerado ao longo dos anos grandes avanços tecnológicos vividos atualmente como dispositivos semicondutores que são a base da eletrônica moderna, novos materiais magnéticos utilizados nas mais diversas tecnologias do nosso cotidiano.

A Física da Matéria Condensada é também uma das áreas mais difíceis da Física, pois as propriedades dos sólidos (um dos objetos de estudos) são manifestações de efeitos quânticos, exigindo, portanto a “Teoria Quântica” para a sua descrição. Por outro lado, devido uma amostra de um material sólido ser constituído por um número muito grande de partículas (da ordem de 10^{23}) necessita de uma descrição estatística. Portanto, para uma descrição completa de um sistema sólido são necessárias duas teorias avançadas, Mecânica Quântica e Mecânica Estatística. A Física computacional, no caso das simulações, requer um considerável conhecimento da informática, para isso foi necessário o aprendizado de uma linguagem de programação, visto que o objetivo principal do projeto é calcular as propriedades termodinâmicas e magnéticas através de um programa computacional.

A leitura dos artigos e livros textos foi proposta como um estudo dirigido, partindo de textos mais simples aos mais avançados. Buscou-se na literatura que se possuía os conceitos prévios que se precisava para obter uma máxima compreensão dos textos propostos pelo Orientador.

Depois se iniciou a implementação do algoritmo Metropolis, no ambiente de programação C. Este ambiente possibilitou o desenvolvimento de um programa interativo de processamento rápido, e que gera resultados concordantes com os da literatura.

Conclui-se que o projeto foi realizado com sucesso utilizando o Modelo de Ising para o estudo de algumas grandezas físicas como magnetização M e energia média $\langle E \rangle$, o programa de simulação para redes quadradas está funcionando de acordo com o esperado produzindo bons resultados. Pretende-se agora, com a continuação do projeto, utilizar o Modelo de Blume-Capel para a construção de diagramas de fase, que não foram possíveis de serem encontrados neste trabalho.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] V. L. Líbero, ***De Ising a Metropolis***, Revista Brasileira de Ensino de Física, vol. 22, nº 03, 2000.
- [2] L. M. da Costa, ***O Modelo de Ising 2D***, Física Estatística.
- [3] H. D. Young & R. A. Freedman (Sears e Zemansky), ***Física III – Eletromagnetismo***, University Physics, Vol. 3.
- [4] O. R. Salmon, ***Contribuições Analíticas e Computacionais para Modelos Magnéticos Desordenados***, Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF), Rio de Janeiro, 2009.
- [5] L. A. da Silva Mól, ***Transições de fase em modelos magnéticos bi-dimensionais com interações dipolares***, UFMG, 2009.
- [6] N. Martins, ***Novos Materiais com Propriedades Magnéticas***, Universidade de Coimbra, 2008.
- [7] G. A. Pavan Ribeiro, ***As Propriedades Magnéticas da Matéria: um Primeiro Contato***, Revista Brasileira de Ensino de Física, vol. 22, nº03, 2000.

CRONOGRAMA EXECUTADO

Nº	Descrição	Ago 2010	Set	Out	Nov	Dez	Jan 2011	Fev	Mar	Abr	Mai	Jun	Jul
	Revisão da Bibliografia . Estudo de algoritmos elementares para implementar o modelo.	X	X	X									
	Implementar o algoritmo num programa estruturado.				X	X	X						
	Simulação do Modelo para diferentes valores de temperatura e campo de anisotropia.	X	X	X	X								
	Estudo aprofundado do equilíbrio termodinâmico							X					
	Construção do Diagrama de fases do modelo								X	X	X	X	
	Construção do Diagrama de fases do modelo								X	X	X	X	
	- - Elaboração do Resumo e Relatório Final (atividade obrigatória) - Preparação da Apresentação Final para o Congresso (atividade obrigatória)												X