

ROBSON SANTOS GOBBI

ESTUDO TERMODINÂMICO DE GELOS DE SPIN EM
UMA GEOMETRIA DO TIPO MALHA

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-graduação em Física Aplicada, para obtenção do título de *Magister Scientiae*.

VIÇOSA
MINAS GERAIS - BRASIL
2014

**Ficha catalográfica preparada pela Biblioteca Central da Universidade
Federal de Viçosa - Câmpus Viçosa**

T

G574e
2014 Gobbi, Robson Santos, 1988-
 Estudo termodinâmico de gelos de Spin em uma geomeria
 do tipo de malha / Robson Santos Gobbi. – Viçosa, MG, 2014.
 ix, 42 : il. (algumas color.) ; 29 cm.

Orientador: Lucas Alvares da Silva Mól.
Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Viçosa.
Referências bibliográficas: f. 41-42.

1. Termodinâmica. 2. Materiais nanoestruturados. 3. Física
do estado sólido. 4. Monte Carlo, Método de.
5. Nanomagnetismo. I. Universidade Federal de Viçosa.
Departamento de Física. Programa de Pós-graduação em Física
Aplicada. II. Título.

CDD 22. ed. 536.7

ROBSON SANTOS GOBBI

ESTUDO TERMODINÂMICO DE GELOS DE SPIN EM UMA GEOMETRIA DO
TIPO MALHA

Dissertação apresentada à
Universidade Federal de Viçosa,
como parte das exigências do
Programa de Pós-Graduação em
Física Aplicada, para obtenção do
título de *Magister Scientiae*.

APROVADA: 28 de novembro de 2014.



Lucas Alvares da Silva Mol
(Orientador)



Clodoaldo Irineu Levartoski de Araújo



António Manuel Rosa Cadilhe



Julio Cesar Siqueira Rocha

AGRADECIMENTOS

Eu gostaria de agradecer primeiramente a minha esposa Eliza, pela confiança, incentivo e por me ajudar nos momentos mais difíceis. Aos meus pais pelos conselhos e apoio. As repúblicas Monte Olimpo e Viçosa-BH pelas amizades construídas e o suporte nos momentos certos. Ao público da salinha e sala de pós-graduação pelos momentos de descontração e conhecimento. E por fim ao professor Lucas Mól por ter acreditado e confiado em mim.

Um obrigado a todos.

Sumário

Lista de figuras	iv
Resumo	viii
Abstract	ix
1 Introdução	1
1.1 Gelos de spin	2
1.2 Gelos de spin bidimensionais	5
2 Interações Magnéticas	11
2.1 Interação de troca	11
2.2 Interação dipolar	13
2.3 Anisotropia de forma	14
2.4 Modelo	16
3 Métodos de Simulação	19
3.1 Método de Monte Carlo	19
3.1.1 Método de Metropolis	20
3.2 Soma de Ewald	21
4 Resultados	24
4.1 Grandezas relevantes	24
4.2 Condição de contorno aberta	25
4.3 Condição de contorno fechada	33
5 Conclusões	39

Lista de Figuras

1.1	Ilustração da célula de uma rede triangular, onde os vértices representam os momentos magnéticos.	2
1.2	Na figura da esquerda, as esferas brancas representam os íons O^{-2} e as esferas escuras os prótons H^{+} . Na figura da direita é feita uma analogia entre a configuração do gelo da água e a do gelo de spin, onde os vértices do tetraedro são substituídos por momentos magnéticos.	3
1.3	Ilustração tridimensional da estrutura pirocloro, figura retirada da referência [10]	4
1.4	Comparação entre a energia magnética de coulomb (linha cheia) com o cálculo numérico da energia nos gelos de spin (círculos abertos), para uma configuração dos gelos de spin em função da separação entre os monopólos. Figura retirada da referência [10]	5
1.5	Ilustração da rede quadrada proposta por Wang, as setas representam a direção da magnetização resultante em cada nanoilha. Figura retirada da referência [5]	6
1.6	Classificação energética das configurações possíveis presentes em um vértice da rede. Abaixo de cada tipo está a percentagem esperada da ocorrência de cada configuração, supondo uma distribuição aleatória cada tipo Figura retirada da referência [5]	6
1.7	O gráfico interno representa o potencial de interação entre duas cargas magnéticas (com sinais opostos) em função da distância entre elas. Após um ajuste da curva linear, o potencial foi subtraído deste ajuste gerando o gráfico externo. Figura retirada da referência [16]	7

1.8	Ilustração da vista superior da rede quadrada bidimensional e vista lateral exibindo uma diferença de altura entre as nanoilhas. Figura retirada da referência [17]	8
1.9	Configurações dos estados fundamentais para diferentes valores de altura h : a) Essa configuração é obtida para valores de $h < h_1$; b) para $h > h_1$ e c) Estado que satisfaz a regra do gelo porém tem energia muito maior que a do estado fundamental para qualquer valor de h . Figura retirada da referência [17]	8
1.10	Ilustração da geometria triangular em um sistema bidimensional. Figura retirada da referência [18].	9
1.11	Topologia dos vértices de uma rede triangular em ordem crescente de energia. Figura retirada da referência [18]	9
1.12	Vértice de uma rede retangular, os parâmetros a e b representam os espaçamentos de rede horizontal e vertical respectivamente. Ao centro são indicadas as cargas magnéticas oriundas de cada nanoilha. Figura retirada do artigo [19].	10
1.13	Representação das cinco distintas topologias da rede retangular, abaixo de cada topologia está o valor da carga magnética líquida. Figura retirada do artigo [19].	10
2.1	Ilustração de uma rede 8x8, cada seta na figura representa uma nanoilha. Pode-se perceber que cada nanoilha só tem duas orientações possíveis, similar ao spin no modelo Ising.	17
2.2	Representação do campo gerado por uma nanoilha, as nanoilhas vizinhas possuem o mesmo valor de interação.	18
4.1	Análise energética de um célula contendo 4 nanoilhas em diferentes configurações. O parâmetro b é a unidade de energia, sendo $b = Da^3$, onde D é a constante dipolar e a é o parâmetro de rede.	26
4.2	A figura acima é uma ilustração do estado fundamental de uma rede de tamanho $L=8a$. Em vermelho é destacado o centro do vórtice.	27

4.3	Mapeamento energético de um rede de tamanho $L=80a$. Cada ponto na figura representa a posição de uma nanoilha e a tonalidade indica o quanto de energia é necessário pra flipar o momento magnético na nanoilha.	27
4.4	O eixo vertical indica a intensidade da energia necessária para flipar uma linha inteira de nanoilhas verticais e o eixo horizontal é a posição da linha flipada. Esse cálculo foi feito em uma rede de tamanho $L=80a$.	28
4.5	Ilustração do primeiro estado excitado em uma rede de tamanho $L=8a$.	29
4.6	Resultado da Energia média por spin(nanoilha) em função da temperatura para diferentes tamanhos de rede.	30
4.7	Energia do estado fundamental em função do tamanho da rede. Os pontos representam os valores calculados via simulação e a linha contínua vermelha é o ajuste obtido.	30
4.8	Resultado do calor específico por spin em função da temperatura para diferentes valores de tamanhos de rede.	31
4.9	Gráfico da temperatura crítica do sistema em função do tamanho de rede.	31
4.10	Gráfico do pico (máximo) do calor específico em função do tamanho da rede. Os pontos representam os dados calculados via simulação e a linha contínua vermelha na forma de lei de potencia.	32
4.11	Grafico do parâmetro de ordem ρ em função da temperatura para diferentes valores de tamanhos de rede.	33
4.12	Resultado da energia por spin (nanoilha) em função da temperatura para diferentes tamanhos de rede com o sistema sob condições periódicas de contorno.	34
4.13	Resultado da magnetização normalizada em função da temperatura para diferentes tamanhos de rede com o sistema sob condições periódicas de contorno.	34
4.14	Estado fundamental do sistema em condições de contorno fechadas. . .	36
4.15	Resultado do calor específico em função da temperatura para uma rede contendo condições periódicas de contorno.	37

4.16	Resultado da susceptibilidade magnética em função da temperatura para uma rede contendo condições periódicas de contorno.	37
4.17	Resultado do pico do calor específico em função do tamanho da rede em um sistema sob condições de contorno periódicas.	38

Resumo

GOBBI, Robson Santos, M. Sc., Universidade Federal de Viçosa, Novembro, 2014
Estudo termodinâmico de gelos de spin em uma geometria do tipo malha.
Orientador: Lucas Alvares de Silva Mól. Coorientadores: Afranio Rodrigues Pereira e Winder Alexander de Moura Melo.

Esta dissertação consiste no estudo de materiais denominados gelos de spin, os quais entre várias propriedades exibem excitações magnéticas que se comportam como monopólos magnéticos. Porém, estes monópolos surgem sempre aos pares e com uma energia de ligação (string) entre eles que impedem sua separação. Neste trabalho foi proposta uma nova geometria com intuito de analisar a possibilidade de separação entre tais pares, esta geometria é construída tomando como base o aumento da frustração entre os entes do sistema. Além disso, foram estudadas as propriedades termodinâmicas do sistema bem como: energia, magnetização, susceptibilidade magnética e calor específico. Estas grandezas foram calculadas em tamanhos de rede distintos e sob duas condições de contorno, uma aberta e outra fechada. Para o cálculo destas grandezas foram utilizados os métodos de Monte Carlo (algoritmo de Metropolis) e soma de Ewald. Alguns dos resultados obtidos foram o aparecimento de um vórtice como estado fundamental da rede com condições de contorno aberta, a dependência da energia do estado fundamental com o tamanho da rede e distinção entre fases, uma ordenada e outra desordenada.

Abstract

GOBBI, Robson Santos, M. Sc., Universidade Federal de Viçosa, November, 2014
Thermodynamic study of spin ice in a mesh type geometry. Adviser: Lucas Alvares de Silva Mól. Co-advisers: Afranio Rodrigues Pereira and Winder Alexander de Moura Melo.

This dissertation is the study of materials called spin ice, the among several properties they exhibit magnetic excitations that behave like magnetic monopoles. However, these monopoles always come in pairs and having a binding energy (string) between them that prevents their division. In this paper we proposed a new geometry in order to examine the possibility of separation of such pairs, this geometry is built on the basis of increasing frustration among the entities of the system. We also studied the thermodynamic properties of the system as well as energy, magnetization, magnetic susceptibility and specific heat. These quantities were calculated for different network sizes and under two boundary conditions, one open and one closed. For the calculation of these quantities the Monte Carlo methods (Metropolis algorithm) and Sum of Ewald were used. Some of the results obtained were the emergence of vortex as ground state of the system with open boundary conditions, the dependence of the energy of the ground state with the network size and distinction between phases, one ordered and one disordered.

Capítulo 1

Introdução

Os fenômenos magnéticos despertam a curiosidade do homem desde a antiguidade. A origem do nome magnetismo está associada a uma região da Turquia rica em minério de ferro, a Magnésia. Segundo relatos, que datam de 800 A.C., tais materiais possuíam a propriedade de atrair e influenciar outros materiais que estivessem a sua volta. Desde de então, estes materiais se tornaram intensos objetos de estudo. Até o início do século XIX os fenômenos magnéticos e elétricos eram tidos como distintos, Oersted foi o primeiro a observar que havia uma correlação entre eletricidade e magnetismo. Ainda no mesmo século, o eletromagnetismo obteria contribuições de nomes importantes como Ampère, Faraday e Maxwell. Este último, teve papel decisivo na unificação das equações do eletromagnetismo e também na previsão de ondas eletromagnéticas. Todo conhecimento acumulado ao longo do século XIX, foi de vital importância para o surgimento de dispositivos como o gerador elétrico e a lâmpada incandescente. Posteriormente, a pesquisa em materiais magnéticos possibilitou o uso destes no armazenamento de informação digital. Atualmente, o estudo em materiais magnéticos em escala nanométrica vem se intensificando com a possibilidade da criação de dispositivos que envolvam o uso de correntes magnéticas, que seriam um análogo ao caso da corrente elétrica. Foi previsto que um tipo específico de material, denominado de gelo de spin, apresenta como excitação partículas emergentes que se comportam como monopolos magnéticos[10]. Este trabalho tem como objetivo estudar as propriedades termodinâmicas desses materiais (gelos de spin) em duas dimensões.

Nas próximas seções são definidos o que é um material gelo de spin e o significado

1. Introdução

do termo frustração geométrica, além de citar alguns trabalhos importantes sobre este tópico.

1.1 Gelos de spin

Em geral, sistemas que possuem interações competitivas apresentam um estado fundamental degenerado. Esta característica surge como efeito da frustração do sistema. A frustração é definida como a incapacidade do sistema de minimizar a energia simultaneamente de todas as interações presentes entre seus entes. Quando este efeito aparece como consequência da geometria da rede, é dito que houve uma frustração geométrica. Uma forma de entender este conceito é analisando a rede triangular, proposta por Wannier et al[11], com spins do tipo Ising (duas direções possíveis) os quais interagem de maneira antiferromagnética.

A interação antiferromagnética faz com os spins próximos tendam a se alinhar antiparalelamente. Assim, observando a figura 1.1 nota-se que com exceção dos pares de spins 1 e 3, todos os outros minimizam sua energia. Mesmo invertendo o spin 1 para minimizar energia com o spin 3, este não o faria com o spin 2. Ou seja, o sistema se “frustra” por não conseguir minimizar a energia entre todos os seus entes. Daí a origem do nome frustração.

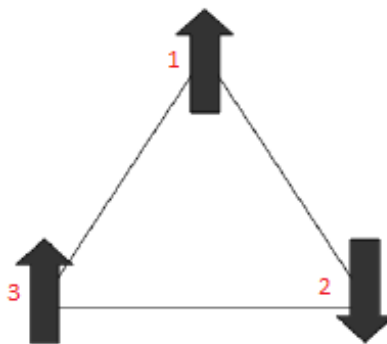


Figura 1.1: Ilustração da célula de uma rede triangular, onde os vértices representam os momentos magnéticos.

Antes de sua utilização em materiais magnéticos, o conceito de frustração geométrica foi primeiro abordado em 1935 por William Giauque et al [12][13] ao estudarem o com-

1. Introdução

portamento do calor específico da água no estado sólido. Estes observaram que mesmo a baixas temperaturas a água apresentava uma entropia residual não nula, o que contrariava a 3ª lei da termodinâmica. A explicação para este resultado foi dada por Linus Pauling [14], onde ele sugere que tal entropia residual seja um efeito da desordem configuracional dos prótons no gelo da água. Pauling notou em seu trabalho que o gelo da água apresentava uma configuração de tetraedro, onde quatro íons de O^{-2} estariam posicionados nos vértices do tetraedro e um no centro. Nessa configuração os prótons estariam posicionados de maneira a ter dois deles próximos ao íon central e dois afastados (ver Fig. 1.2).

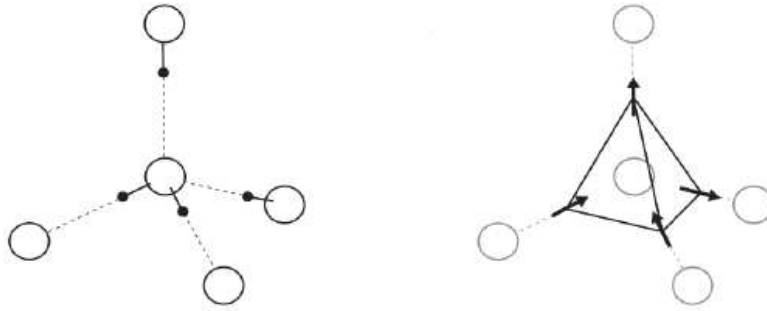


Figura 1.2: Na figura da esquerda, as esferas brancas representam os íons O^{-2} e as esferas escuras os prótons H^{+} . Na figura da direita é feita uma analogia entre a configuração do gelo da água e a do gelo de spin, onde os vértices do tetraedro são substituídos por momentos magnéticos.

A este arranjo dos íons de oxigênio e hidrogênio foi dado o nome de regra do gelo. Posteriormente, esta propriedade do gelo da água foi estendida para explicar o comportamento de alguns materiais magnéticos. Harris et al [15], ao estudarem os compostos $Ho_2Ti_2O_7$ e $Dy_2Ti_2O_7$, observaram que estes apresentavam uma estrutura cristalina do tipo pirocloro (rede tridimensional composta por tetraedros com vértices em comum, ver Fig. 1.3). Nesta rede, no lugar dos íons O^{-2} e prótons H^{+} , os vértices de cada tetraedro são tratados como possuindo um momento magnético $\vec{\mu}_i$ do tipo Ising. Foi observado que ao minimizar a energia do sistema, cada tetraedro possui dois momentos magnéticos apontando para o centro e dois para fora, similar à regra do gelo na água. Devido a esta semelhança estes materiais foram designados como gelos de spin.

1. Introdução

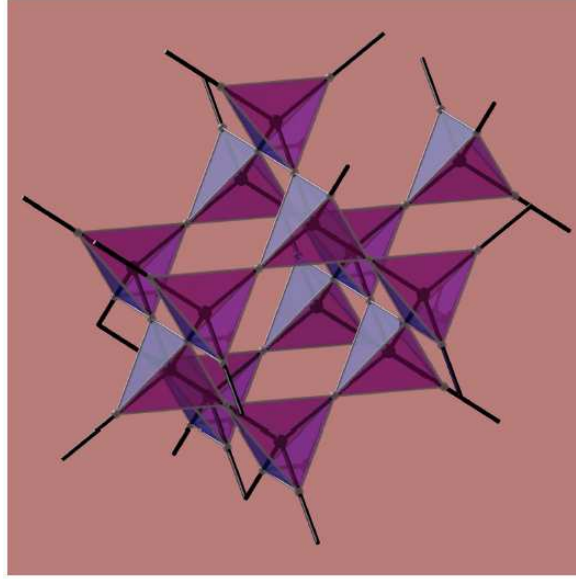


Figura 1.3: Ilustração tridimensional da estrutura pirocloro, figura retirada da referência [10]

Inspirados pelos trabalhos descritos até o momento, Castelnovo et al[10] propuseram que excitações sobre o estado fundamental nos gelos de spin poderiam ser interpretadas como partículas emergentes que se comportariam como monopólos magnéticos. O surgimento de tais monopólos seria oriunda de uma violação na regra do gelo, ou seja, ao se inverter o momento magnético de um sítio no sistema que se encontra no estado fundamental (onde todos os momentos magnéticos respeitam a regra do gelo) surge um tetraedro com três momentos magnéticos entrando e outro com três saindo. Essa magnetização líquida não nula é interpretada como um par monopolo-antimonopolo. A interação entre esses pares seria análoga a interação Coulombiana na eletrostática, porém com cargas magnéticas ao invés de elétricas. Castelnovo calculou essa interação entre as cargas magnéticas e comparou com o resultado de um modelo efetivo que descreve os gelos de spin de forma satisfatória, onde ele considera que os momentos magnéticos tipo Ising interagem por interações de troca e dipolar. O resultado é exibido na figura 1.4 onde nota-se que as curvas coincidem, o que corrobora a interpretação dos monopolos magnéticos.

1. Introdução

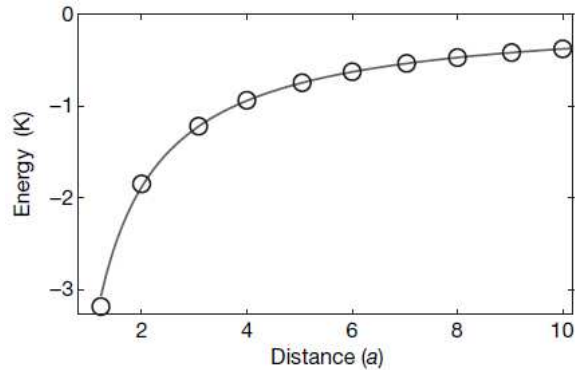


Figura 1.4: Comparação entre a energia magnética de coulomb (linha cheia) com o cálculo numérico da energia nos gelos de spin (círculos abertos), para uma configuração dos gelos de spin em função da separação entre os monopólos. Figura retirada da referência [10]

1.2 Gelos de spin bidimensionais

A regra do gelo da água e o surgimento de monopolos também foi observada em sistemas bidimensionais. Wang et al[5] através de técnicas litográficas estudaram uma rede quadrada(ver fig. 1.5) composta por nanoilhas alongadas de permalloy, cujo parâmetro de ordem (distância que separa os centros de nanoilhas adjacentes) variava entre 320 nm e 880 nm e as dimensões de cada nanoilha eram fixas em 25 nm x 220 nm x 80 nm. Esses valores nas dimensões das nanoilhas obrigavam todos os momentos magnéticos a apontarem ao longo do eixo maior, produzindo uma magnetização resultante com dois sentidos possíveis de mesmo módulo. Neste trabalho, Wang organizou as configurações possíveis em cada vértice da rede, as classificou de acordo com a energia e calculou a percentagem esperada da ocorrência de cada tipo, supondo uma distribuição aleatória dos momentos de dipolo magnético (ver fig. 1.6). Note que as configurações do tipo I e II respeitam a regra do gelo, com dois momentos magnéticos apontando para o vértice e dois para fora deste, enquanto que os tipos III e IV não. Wang observou em seu trabalho que a proporção de cada tipo de vértice era dependente do espaçamento de rede entre as nanoilhas. Na situação de maior proximidade (menor espaçamento de rede) cerca de mais de 70% das configurações observadas eram aquelas que obedeciam a regra do gelo, tipo I e II. Um valor que é mais de 30% maior que o esperado. Ele notou também que este valor decrescia monotonicamente com o au-

1. Introdução

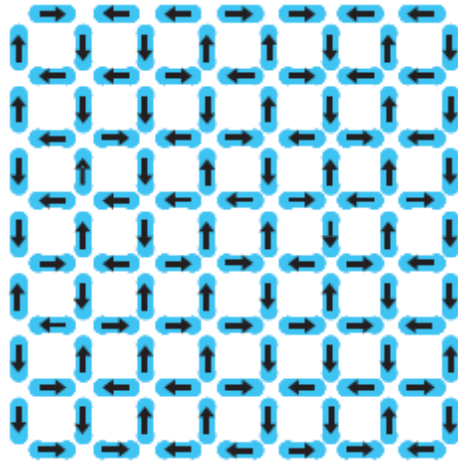


Figura 1.5: Ilustração da rede quadrada proposta por Wang, as setas representam a direção da magnetização resultante em cada nanoilha. Figura retirada da referência [5]

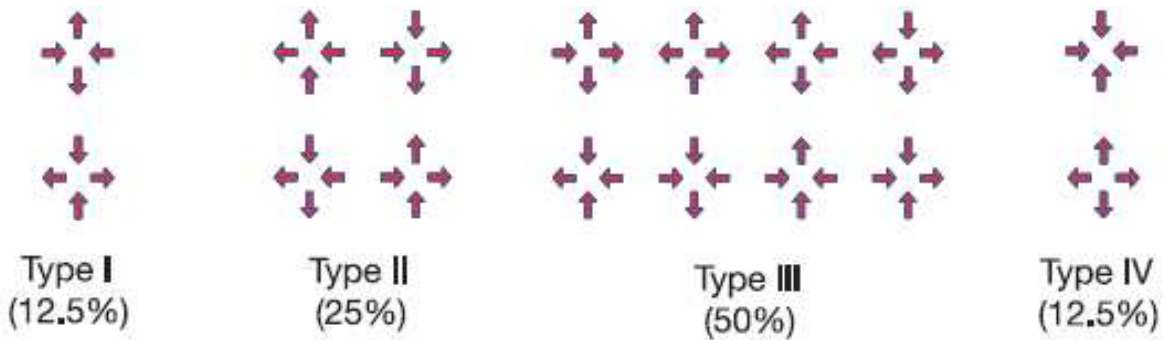


Figura 1.6: Classificação energética das configurações possíveis presentes em um vértice da rede. Abaixo de cada tipo está a percentagem esperada da ocorrência de cada configuração, supondo uma distribuição aleatória cada tipo Figura retirada da referência [5]

mento do espaçamento de rede, tendendo aos valores esperados para uma distribuição aleatória dos momentos magnéticos.

Análogo ao trabalho de Castelnovo, porém em uma rede bidimensional, Mól et al [16] propuseram que as excitações acima do estado fundamental de uma rede quadrada bidimensional de nanoilhas magnéticas também se comportariam como um par de monopolos magnéticos. Assim como ocorre na rede pirocloro, essas excitações sugiriam como violações a regra do gelo. Neste trabalho foi calculado o potencial de interação entre esses pares em função de sua distância (ver fig. 1.7). À primeira vista o potencial $V(r)$ aparenta ter um comportamento linear, como pode ser visto no gráfico

1. Introdução

interno da figura 1.7. Entretanto, foi realizado um ajuste linear dos pontos obtidos, que foi posteriormente subtraído dos pontos, resultando no gráfico externo da figura 1.7.

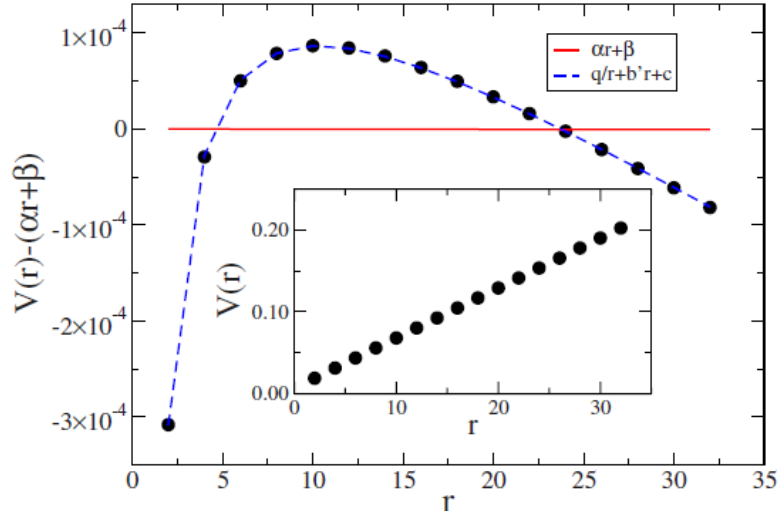


Figura 1.7: O gráfico interno representa o potencial de interação entre duas cargas magnéticas (com sinais opostos) em função da distância entre elas. Após um ajuste da curva linear, o potencial foi subtraído deste ajuste gerando o gráfico externo. Figura retirada da referência [16]

Através dessa análise, os autores concluíram que o potencial de interação entre as cargas magnéticas seria melhor descrito por uma expressão com o formato abaixo:

$$V(R) = \frac{a}{R} + b \cdot X(R) + C \quad (1.1)$$

onde o primeiro termo é claramente Coulombiano, o segundo termo está associado a energia da “string” que liga as cargas e o último termo representa a energia necessária para a criação das cargas.

Em um outro trabalho, também publicado por Mól et al [17], foi estudada uma rede quadrada bidimensional que exibiria uma diferença de altura (ver fig.1.8) entre as nanoilhas verticais e horizontais. Foi verificado que dada uma determinada altura ($h_1 = 0.444a$) a configuração do estado fundamental era alterada (ver fig. 1.9). Denominando GS1, o estado fundamental para $h < h_1$, e GS2, o estado para $h > h_1$ as configurações a e b da figura 1.9, respectivamente, os autores notaram que estes dois

1. Introdução

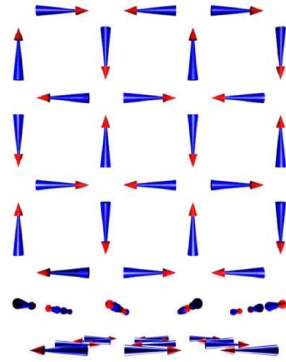


Figura 1.8: Ilustração da vista superior da rede quadrada bidimensional e vista lateral exibindo uma diferença de altura entre as nanoilhas. Figura retirada da referência [17]

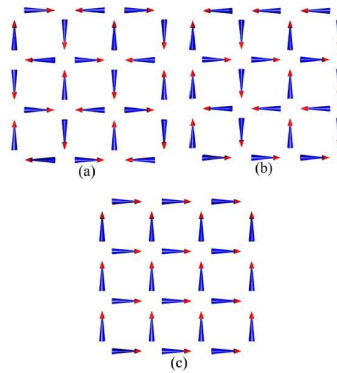


Figura 1.9: Configurações dos estados fundamentais para diferentes valores de altura h : a) Essa configuração é obtida para valores de $h < h_1$; b) para $h > h_1$ e c) Estado que satisfaz a regra do gelo porém tem energia muito maior que a do estado fundamental para qualquer valor de h . Figura retirada da referência [17]

estados são mínimos locais e não podem ser transformados um no outro sem gastar uma quantidade razoável de energia, tornando improvável que ocorra mudança espontânea de estado a medida que aumenta-se a altura h .

Ainda falando de gelos de spins bidimensionais, em um outro artigo, Mól et al[18] estudaram a influência da geometria sob o sistema. Neste novo trabalho foi proposto um arranjo triangular das nanoilhas do sistema (ver fig. 1.10). Traçando um paralelo entre ambas as geometrias (rede quadrada e triangular) foi verificado uma propriedade distinta no que concerne a topologia do vértice. Foi notado que ao contrário do que ocorre na rede quadrada, em que a ordem crescente de energia está associado aos vértices respeitarem ou não a regra do gelo. Na rede triangular, os vértices 1, 2 e 5

1. Introdução

(que seguem a regra do gelo; 3 entrado e 3 saindo) não são as configurações de energia mais baixa. A configuração 3, por exemplo, tem uma energia menor que a 5 (ver fig. 1.11).

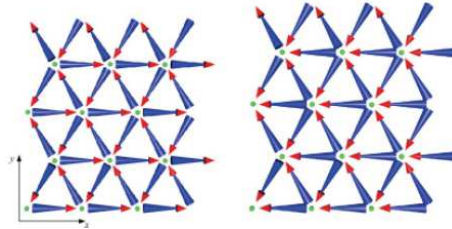


Figura 1.10: Ilustração da geometria triangular em um sistema bidimensional. Figura retirada da referência [18].

1 2 configurations Energy: -50 D	2 12 configurations Energy: -23 D	3 12 configurations Energy: -19 D	4 6 configurations Energy: -17 D
5 6 configurations Energy: 9 D	6 12 configurations Energy: 13 D	7 12 configurations Energy: 27 D	8 2 configurations Energy: 82 D

Figura 1.11: Topologia dos vértices de uma rede triangular em ordem crescente de energia. Figura retirada da referência [18]

Um outro aspecto interessante é o formato do potencial de interação das excitações topológicas que é similar ao da rede quadrada, possuindo um termo de interação Coulombiana somado a um termo de string. Os resultados também indicaram que enquanto os valores das cargas magnéticas convergem para uma comportamento universal, a tensão da string é modificada pela geometria do sistema. Seguindo na mesma linha, em um outro trabalho de Fábio Nascimento et al[19], os autores estudaram uma rede retangular e a influência da razão γ entre os espaçamentos de rede com as propriedades do sistema. Ao contrário do que ocorre na rede quadrada, em que as 16 configurações possíveis dos momentos magnéticos de cada vértice da rede são classificadas em quatro distintas topologias, na rede retangular esse número aumenta para cinco nos casos em que $\gamma \neq 1$, voltando a quatro para $\gamma = 1$ (ver figura 1.13). Uma outra diferença entre as redes retangular ($\gamma \neq 1$) e quadrada ($\gamma = 1$) é a emergência de

1. Introdução

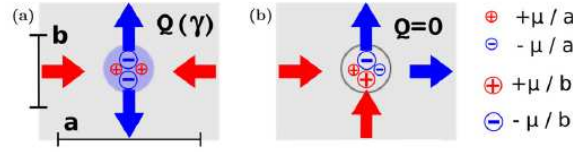


Figura 1.12: Vértice de uma rede retangular, os parâmetros a e b representam os espaçamentos de rede horizontal e vertical respectivamente. Ao centro são indicadas as cargas magnéticas oriundas de cada nanoilha. Figura retirada do artigo [19].

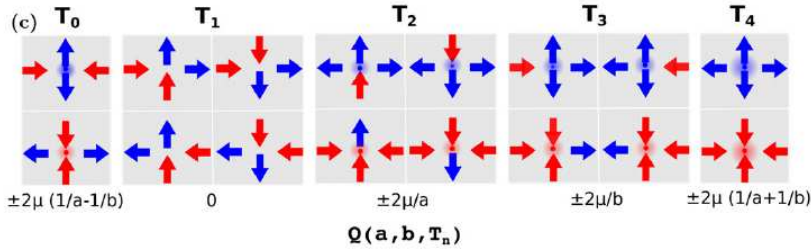


Figura 1.13: Representação das cinco distintas topologias da rede retangular, abaixo de cada topologia está o valor da carga magnética líquida. Figura retirada do artigo [19].

cargas magnéticas líquidas na topologia T_0 . Uma maneira de entender esse efeito é substituindo o momento magnético da nanoilha por um par de cargas nos vértices desta. Assim, os momentos magnéticos horizontais seriam representados por cargas de sinais opostos dados por $q_h = \pm\mu/a$, enquanto que os momentos magnéticos verticais seriam dados por $q_v = \pm\mu/b$ (ver figura 1.12). Logo, sendo os espaçamentos de rede distintos, as combinação de tais cargas resultaria em uma carga magnética líquida diferente de zero. Uma outra característica da rede retangular é que ela também exhibe excitações magnéticas que podem ser representadas pela expressão (1.1) e assim como ocorre na rede com diferença de altura, a tensão na string pode ser controlada, porém, nunca possuindo um valor nulo. Tais resultados impulsionam a busca por uma geometria onde a string teria valor nulo e os monopolos possam ser mais facilmente controlados.

Capítulo 2

Interações Magnéticas

Neste capítulo são apresentadas interações magnéticas que são de fundamental importância no estudo dos fenômenos magnéticos. Inicialmente é abordada a interação de troca, logo depois é feita uma descrição da interação dipolar e da interação de anisotropia de forma. Ao final do capítulo será discutido o modelo em que este trabalho foi desenvolvido.

2.1 Interação de troca

Com o intuito de evitar uma matemática excessiva, a interação de troca será apresentada para um sistema mais simples contendo somente dois elétrons em posições \vec{r}_1 e \vec{r}_2 , respectivamente. Este sistema será descrito por uma função de onda total (Ψ) composta por uma combinação dos produtos dos autoestados espaciais $\psi_a(\vec{r}_1)$ e $\psi_b(\vec{r}_2)$ de cada elétron com os autoestados de spin (χ). Sabendo que os elétrons, são férmions, tem-se que a função de onda total deve ser anti-simétrica (lembrando que a função de onda total é constituída por parte espacial e outra de spin). Para tanto, existem duas possibilidades: o auto estado espacial ψ ser simétrico e o de spin χ anti-simétrico ou vice-versa.

Abaixo é exibida a parte simétrica e anti-simétrica dos autoestados espacial e de spin:

$$\psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(\vec{r}_1)\psi_b(\vec{r}_2) + \psi_a(\vec{r}_2)\psi_b(\vec{r}_1)] \quad (2.1)$$

2. Interações Magnéticas

$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(\vec{r}_1)\psi_b(\vec{r}_2) - \psi_a(\vec{r}_2)\psi_b(\vec{r}_1)] \quad (2.2)$$

$$\chi_S = \begin{cases} |\uparrow\uparrow\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases} \quad (2.3)$$

$$\chi_A = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (2.4)$$

Assim, a função de onda total será:

$$\Psi_{TOTAL} = \begin{cases} \psi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \otimes \chi_A \\ \psi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \otimes \chi_S \end{cases} \quad (2.5)$$

através desses autoestados pode-se calcular a energia para os estados singleto $S_{TOTAL} = 0$ e tripleto $S_{TOTAL} = 1$.

$$E_S = \int \psi_S^* H \psi_S dV_1 dV_2 \quad (2.6)$$

$$E_T = \int \psi_A^* H \psi_A dV_1 dV_2 \quad (2.7)$$

sendo H a Hamiltoniana do sistema. Levando em conta que a autofunção de spin é normalizada, tem-se

$$S_1 \cdot S_2 = \begin{cases} \frac{-3}{4} & , S_{TOTAL} = 0(\textit{singleto}) \\ \frac{+1}{4} & , S_{TOTAL} = 1(\textit{tripleto}) \end{cases} \quad (2.8)$$

O Hamiltoniano efetivo desse sistema é descrito como:

$$H = \frac{1}{4}(E_S + 3E_T) - (E_S - E_T)S_1 \cdot S_2 \quad (2.9)$$

onde o primeiro termo é constante e o segundo termo depende do spin, esse último é fundamental na descrição de propriedades nos materiais magnéticos. Definindo a integral de troca ou constante de troca por:

2. Interações Magnéticas

$$J = \frac{E_S - E_T}{2} = \int \psi_a^*(\vec{r}_1)\psi_b^*(\vec{r}_2)H\psi_a(\vec{r}_2)\psi_b(\vec{r}_1)dV_1dV_2 \quad (2.10)$$

tem-se que a parte do Hamiltoniano dependente de spin pode ser reescrita no formato abaixo:

$$H_{spin} = -2J\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \quad (2.11)$$

Dessa forma, se $J > 0$ implica que $E_S > E_T$, ou seja, o estado tripleto (spins alinhados) é mais favorável energeticamente. Por outro lado, se $J < 0$ então $E_S < E_T$ o que torna o estado singleto mais favorável.

Este resultado foi obtido considerando um sistema simples. Para uma situação mais realística, contendo vários elétrons, a expressão 2.11 é generalizada no somatório abaixo:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij}\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (2.12)$$

o qual é denominado modelo de Heisenberg, com J_{ij} sendo a constante de troca entre os sítios i e j . Como a interação de troca tem sua origem na superposição das funções de onda, tem-se que esta é relevante somente a curtas distâncias. Assim, o somatório na eq.(2.12) é feito sobre os primeiros vizinhos de cada sítio do sistema. Esse modelo é o responsável pelo ordenamento ferromagnético e é largamente utilizado no estudo de materiais magnéticos, sendo o primeiro modelo a explicar a nível microscópico as propriedades destes materiais.

2.2 Interação dipolar

A maioria dos momentos magnéticos são compostos por um conjunto de íons que possuem um momento de dipolo magnético resultante diferente de zero, devido a isto, torna-se importante levar em consideração a interação entre tais dipolos, a qual é denominada interação dipolar. A origem da interação dipolar é dada justamente pelo efeito que os campos magnéticos, produzidos pelos dipolos, tem sobre os outros dipolos do material. Pode-se mostrar que o campo magnético criado por um dipolo magnético

2. Interações Magnéticas

\vec{m} , a uma distância \vec{r} deste, é dado por [1]:

$$\vec{B}_{dip}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi r^3} [3(\vec{m} \cdot \hat{r})\hat{r} - \vec{m}] \quad (2.13)$$

em que \hat{r} é o vetor unitário que aponta na direção de onde se pretende calcular o campo e μ_0 é a permeabilidade magnética no vácuo. Sabendo que a energia de um dipolo magnético \vec{m}_j na presença de um campo magnético \vec{B} é [1]:

$$E = -\vec{m}_j \cdot \vec{B} \quad (2.14)$$

e considerando o material magnético como sendo constituído por momentos magnéticos (dipolos) localizados, tem-se que estes irão interagir entre si resultando em uma energia dipolar dada pela equação 2.15 abaixo,

$$E_{dip} = \frac{\mu_0}{4\pi} \sum_{i>j} \left[\frac{\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - 3(\vec{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{r_{ij}^3} \right] \quad (2.15)$$

onde \vec{m}_i é o momento magnético no sítio i , r_{ij} é a distância que separa o sítio i do sítio j com o vetor apontando de i até j . Além disso, o somatório é realizado sobre todos os momentos magnéticos do material, exceto a auto-interação ($i = j$).

2.3 Anisotropia de forma

Um efeito interessante que é muito presente em materiais magnéticos, é a anisotropia. Quando afirmamos que uma grandeza é isotrópica, significa que suas propriedades são as mesmas independentemente da direção. Porém, nem todas as grandezas físicas são isotrópicas. A esses casos dá-se o nome de anisotropia. Existem diversas formas de anisotropia, neste trabalho trataremos somente da anisotropia de forma, que nada mais é que o efeito da geometria (formato) do sistema sobre as grandezas físicas.

A origem da anisotropia de forma advém da interação dipolar entre os momentos magnéticos do material. Por serem finitos, estes materiais exibem polos em sua superfície que geram um campo magnético fora da amostra, que é chamado *stray field*. Este, por sua vez, induz o surgimento de um campo no interior da amostra, denominado campo de desmagnetização, \vec{H}_d . No intuito de entender o campo \vec{H}_d , será feito

2. Interações Magnéticas

uso das equações de Maxwell em materiais magnéticos na sua forma local.

$$\vec{\nabla} \times \vec{H}_d = \vec{0} \quad (2.16)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (2.17)$$

Da primeira equação tem-se que o campo \vec{H}_d pode ser representado na forma de um potencial escalar ϕ , dado por:

$$\vec{H}_d = -\vec{\nabla}\phi \quad (2.18)$$

Fazendo uso da relação $\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M})$ na equação (2.17), segue que:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{H} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{M} \quad (2.19)$$

Substituindo (2.18) em (2.19),

$$\nabla^2 \phi_{int} = \vec{\nabla} \cdot \vec{M} \quad (2.20)$$

Comparando a equação (2.20) com a equação de Poisson para o caso eletrostático, onde $\rho_M = \vec{\nabla} \cdot \vec{M}$, tem-se

$$\phi_{int} = -\frac{1}{4\pi} \int_V \frac{\vec{\nabla}' \cdot \vec{M}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r' \quad (2.21)$$

Na qual a integral é realizada sobre todo o volume da amostra, \vec{r}' é a posição de uma porção infinitesimal de volume na amostra e \vec{r} é a posição de onde se pretende valorar o potencial. Na região externa ao material, $\vec{M} = \vec{0}$ segue,

$$\nabla^2 \phi_{ext} = 0 \quad (2.22)$$

onde a densidade de carga superficial, σ_M , é obtida via equação $\rho_M = \vec{\nabla} \cdot \vec{M}$. Aplicando o teorema da divergência,

$$\sigma_M = \vec{M} \cdot \hat{n} \quad (2.23)$$

2. Interações Magnéticas

Dessa forma, o potencial mais geral para uma amostra finita contendo condições de contorno superficiais será dado pela equação 2.24:

$$\phi(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} \int_V \frac{\vec{\nabla}' \cdot \vec{M}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3r' + \frac{1}{4\pi} \int \frac{\hat{n}' \cdot \vec{M}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dS' \quad (2.24)$$

sabendo que a energia magnetostática é calculada pela expressão (2.25) abaixo:

$$E_{mag} = \frac{1}{2} \int \mu_0 \vec{M} \cdot \vec{H}_d d^3r \quad (2.25)$$

e que usando as equações (2.24) e (2.18) pode-se obter a forma do campo de desmagnetização, \vec{H}_d . Vê-se que a energia magnetostática terá o seu valor mínimo, justamente quando $\vec{\nabla} \cdot \vec{M} = 0$ e $\hat{n} \cdot \vec{M} = 0$. No caso de sistemas magnéticos alongados e bidimensionais (nanoilhas) estas condições são satisfeitas impondo à rede que os momentos magnéticos apontem ao longo do eixo maior desta.

2.4 Modelo

Como citado na introdução deste trabalho, o estudo de gelos de spin bidimensionais foi feito em diferentes geometrias e todas elas apresentavam o surgimento de excitações magnéticas, as quais podiam ser modeladas pela equação (1.1). Esta equação exibe um termo de confinamento, string, que impede os monópolos magnéticos de serem encontrados livres no material. Neste trabalho é proposta uma nova geometria com intuito de verificar o aparecimento de excitações magnéticas e verificar a dependência dessa constante de confinamento. Nesta nova geometria, a rede é constituída por nanoilhas alongadas bidimensionais, que devido a sua geometria apresentam como solução uma magnetização resultante apontando ao longo do eixo maior da nanoilha (magnetização in-plane). Esta solução surge como efeito da anisotropia de forma na nanoilha. Um estudo mais detalhado sobre as configurações exibidas nestes materiais pode ser encontrado na referência [7]. Assim, cada nanoilha foi tratada como se fosse um spin do tipo Ising, onde a magnetização resultante pode estar tanto paralela quanto antiparalela a direção do eixo maior. Estas nanoilhas foram organizadas alternando o eixo maior ora na posição horizontal e ora na vertical, de maneira que o eixo maior

2. Interações Magnéticas

das nanoilhas horizontais coincidem com o ponto médio das nanoilhas verticais. A figura 2.1 faz uma ilustração da rede para um tamanho $L=8$. O intuito dessa geometria é aumentar a competição energética entre as nanoilhas, uma vez que os vizinhos perpendiculares não teriam preferência de orientação. Tome como exemplo a figura 2.2. Ao centro é representado o campo magnético de uma nanoilha (que é equivalente ao campo gerado por um dipolo magnético); note que o campo magnético possui uma simetria azimutal (ao longo do eixo z), o que indica que as nanoilhas vizinhas que estão diametralmente opostas possuem o mesmo valor de interação. Acreditamos que essa característica possa fornecer um estado fundamental degenerado.

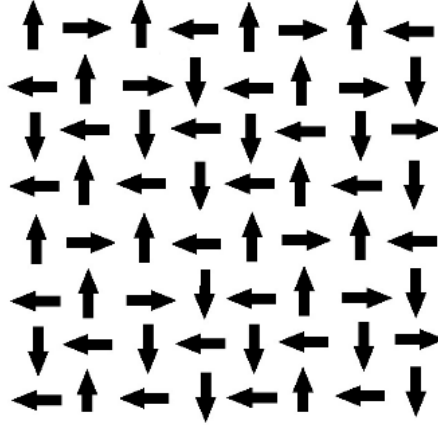


Figura 2.1: Ilustração de uma rede 8×8 , cada seta na figura representa uma nanoilha. Pode-se perceber que cada nanoilha só tem duas orientações possíveis, similar ao spin no modelo Ising.

Em nosso modelo, a interação de troca está presente na estrutura interna de cada nanoilha. Como iremos tratar de um arranjo de nanoilhas, que é algumas ordens de grandeza maior que os momentos magnéticos presentes na nanoilha, o papel da interação de troca se torna irrelevante. Dessa forma, a única interação capaz de fornecer informações relevantes sobre o sistema é a interação dipolar.

$$E_{dip} = \frac{\mu_0}{4\pi} \sum_{i>j} \left[\frac{\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - 3(\vec{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{r_{ij}^3} \right] \quad (2.26)$$

onde os momentos magnéticos \vec{m}_1 e \vec{m}_2 foram substituídos pela magnetização resultante de cada nanoilha.

2. Interações Magnéticas

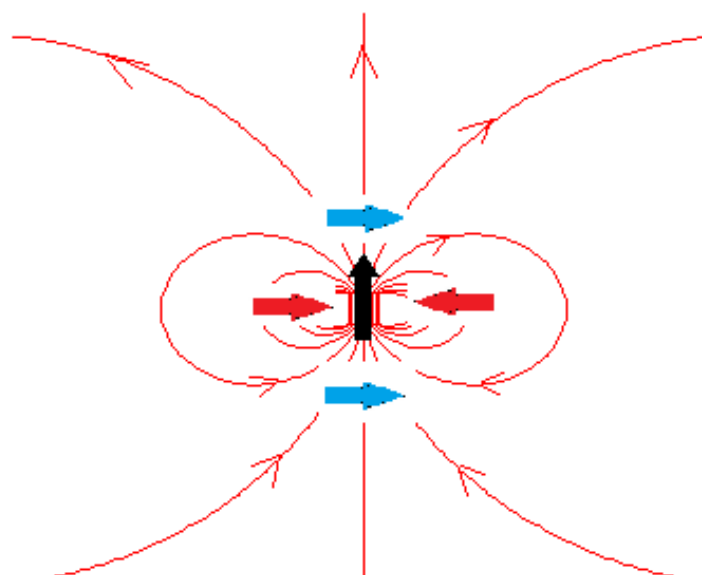


Figura 2.2: Representação do campo gerado por uma nanoilha, as nanoilhas vizinhas possuem o mesmo valor de interação.

Capítulo 3

Métodos de Simulação

Neste capítulo são introduzidos os métodos computacionais usados no desenvolvimento deste trabalho. Iniciando com uma noção do método de Monte Carlo e uma apresentação ao algoritmo de Metropolis e finalizando com o método da soma de Ewald.

3.1 Método de Monte Carlo

Sabe-se da física estatística que para calcular o valor esperado de uma grandeza termodinâmica, no ensemble canônico, é usada a seguinte equação:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{\{\sigma\}} A_{\sigma} e^{-\beta E_{\sigma}}}{\sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta E_{\sigma}}} \quad (3.1)$$

onde σ é um microestado que é caracterizado pelas configurações das partes do sistema e a soma é feita sobre todos os microestados. Porém, umas das dificuldades em física da matéria condensada se deve justamente ao fato de que os sistemas são compostos por muitas partes. O que leva a um número excessivo de microestados e inviabiliza a operação.

No intuito de resolver este impasse surge o método de Monte Carlo. O sistema ao invés de acessar todos os estados possíveis, acessará uma quantidade M de estados que respeitam a distribuição de probabilidade de Boltzmann e que são obtidos via processos Markovianos. Essa quantidade M deverá ser suficientemente grande, de modo a fornecer resultados precisos.

Portanto, no lugar da equação 3.1 as médias termodinâmicas serão calculadas

3. Métodos de Simulação

por uma média aritmética simples.

$$\langle A \rangle = \frac{1}{M} \sum_i^M A_i \quad (3.2)$$

Para levarmos o sistema de um estado a outro ao longo das M configurações, necessitamos de um protocolo de seleção. Tal procedimento não é único, podendo ser encontrado mais detalhes nas referências [3] e [2]. Foi utilizado neste trabalho o algoritmo de Metropolis como protocolo de seleção. Os detalhes deste algoritmo são dados na sequência.

3.1.1 Método de Metropolis

Como foi dito na última sessão o método de Monte Carlo consiste na seleção de estados acessíveis ao sistema, de modo que ao calcular o valor esperado de uma grandeza este possa ser obtido com maior eficiência. Foi dito também que existem diversas maneiras de fazer essa seleção. No entanto para que o método funcione, estes devem seguir três condições:

I- Cadeia de Markov

O processo de Markov é um mecanismo que leva o sistema de um estado μ para um novo estado ν , onde a probabilidade de transição $W(\mu \rightarrow \nu)$ não pode variar com o tempo e só pode depender das propriedades do último estado acessado. Quando este processo é repetido várias vezes, damos o nome de cadeia de Markov.

II-Ergodicidade

A condição de ergodicidade diz que qualquer estado do sistema pode ser acessado independente da sua configuração anterior. Em resumo, a condição afirma que deve haver pelo menos um caminho no qual a probabilidade de transição $W(\mu \rightarrow \nu)$ é não nula.

III-Balanco detalhado

A terceira e última condição é derivada da equação mestra.

$$\frac{dP_\mu}{dt} = \sum_\nu [P_\nu(t)W(\nu \rightarrow \mu) - P_\mu(t)W(\mu \rightarrow \nu)] \quad (3.3)$$

onde $P_\mu(t)$ é a probabilidade do sistema estar em um estado μ em uma dado instante

3. Métodos de Simulação

de tempo e W é probabilidade de transição de um estado para outro. Quando o sistema alcança o equilíbrio a probabilidade de acessar um dado estado é constante, assim, da equação acima temos, que:

$$\sum_{\nu} P_{\nu}(t)W(\nu \rightarrow \mu) = \sum_{\mu} P_{\mu}(t)W(\mu \rightarrow \nu) \quad (3.4)$$

que é a condição de balanço detalhado.

O algoritmo de Metropolis foi o método escolhido para fazer a seleção dos estados. Abaixo são apresentados os passos que devem ser seguidos para sua implementação.

1. Escolha um estado inicial qualquer para o sistema;
2. Selecione um sítio i da rede;
3. Calcule a variação de energia ΔE quando se inverte a direção do spin (momento magnético da nanoilha)
4. Se $\Delta E < 0$ inverta o spin e volte ao passo 2;
5. Se $\Delta E > 0$ sorteie um número aleatório r entre 0 e 1;
6. Se $e^{-\beta\Delta E} > r$ inverta o spin e volte ao passo 2;
7. Se $e^{-\beta\Delta E} < r$ só volte ao passo 2.

Quando este procedimento for repetido N vezes, onde N é número de sítios da rede, dizemos que o sistema executou um passo de Monte Carlo. Antes do sistema chegar ao equilíbrio, ele passa por transiente no qual não obedece a distribuição de Boltzmann e, portanto, deve ser excluído dos cálculos dos valores esperados. O intervalo de tempo que o sistema demora a alcançar o equilíbrio é denominado de tempo de termalização.

3.2 Soma de Ewald

Como foi apresentado, o modelo estudado neste trabalho é constituído por nanoilhas que interagem entre si via interação dipolar, a qual por sua vez possui um

3. Métodos de Simulação

longo alcance. Esta propriedade da interação dipolar dificulta consideravelmente o estudo de sistemas maiores, principalmente quando se pretende anular o efeito que a borda tem sobre o sistema.

Uma maneira de atenuar o efeito de borda é implementando condições periódicas de contorno. Para tanto, são feitas n_c cópias do sistema em todas as direções ao redor da rede principal. A energia total do sistema nessa situação é calculada pela expressão abaixo:

$$H_{dip} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \sum_{\vec{n}=\vec{0}}^{n_c} \left\{ \frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{(\vec{r}_{ij} + \vec{n}L)^3} - 3 \frac{[\vec{S}_i \cdot (\vec{r}_{ij} + \vec{n}L)][\vec{S}_j \cdot (\vec{r}_{ij} + \vec{n}L)]}{(\vec{r}_{ij} + \vec{n}L)^5} \right\} \quad (3.5)$$

onde a linha no somatório em $\vec{n} = (n_x, n_y, n_z)$ indica que para $\vec{n} = \vec{0}$ o termo $i=j$ não é considerado e n_α ($\alpha = x, y, z$) é um número inteiro que representa o total de réplicas do sistema ao longo de uma direção.

Entretanto, existe uma forma mais eficaz de se calcular a equação 3.5, denominada soma de Ewald. Este método consiste em separar a interação dipolar em duas partes: uma contendo o termo de curto alcance e outra o de longo alcance, em que este último será calculado no espaço recíproco. Os detalhes podem ser encontrados nas referências [8] e [9]. O resultado é expresso abaixo.

$$H_{ewald} = H_{real} + H_{fourier} + H_{surf} + H_{self} \quad (3.6)$$

onde H_{real} é parte da soma realizada no espaço real, $H_{fourier}$ é referente a soma efetuada no espaço recíproco (também chamado de espaço de Fourier), H_{surf} leva em consideração os termos de superfície e H_{self} é o termo associado à auto-interação. Cada um desses termos são calculados pelas equações abaixo:

$$H_{real} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \sum_{\vec{n}}' \left\{ B(|\vec{r}_{ij} + \vec{n}L|) \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + C(|\vec{r}_{ij} + \vec{n}L|) [\vec{S}_i \cdot (\vec{r}_{ij} + \vec{n}L)][\vec{S}_j \cdot (\vec{r}_{ij} + \vec{n}L)] \right\} \quad (3.7)$$

3. Métodos de Simulação

$$H_{fourier} = \frac{\pi}{A} \left[\sum_{\vec{G} \neq \vec{0}} h_1(\vec{G}) F_{\parallel}(\vec{G}) F_{\parallel}^*(\vec{G}) + \sum_{\vec{G} \neq \vec{0}} h_2(\vec{G}) F_{\perp}(\vec{G}) F_{\perp}^*(\vec{G}) \right] \quad (3.8)$$

$$H_{surf} = \frac{2\alpha\sqrt{\pi}}{A} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N S_i^z S_j^z \quad (3.9)$$

$$H_{self} = -\frac{2\alpha^3 N}{3\sqrt{\pi}} \quad (3.10)$$

onde a linha na soma sobre $\vec{n} = (n_x, n_y)$, com n_x e n_y inteiros, significa que o termo $i=j$ é omitido quando $\vec{n} = \vec{0}$. Nestas expressões N é o número total de sítios na rede, $A = L^2$ é a área da rede, $\vec{G} = (2\pi/L)\vec{n}$ é o vetor de onda, $erfc$ é a função erro complementar,

$$B(r) = -\frac{erfc(\alpha r)}{r^3} - \frac{2\alpha \exp(-\alpha^2 r^2)}{r^2 \sqrt{\pi}} \quad (3.11)$$

$$C(r) = 3\frac{erfc(\alpha r)}{r^5} + \frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{3}{r^2} + 2\alpha^2 \right) \frac{\exp(-\alpha^2 r^2)}{r^2} \quad (3.12)$$

$$h_1(\vec{G}) = \frac{erfc\left(\frac{G}{2\alpha}\right)}{G} \quad (3.13)$$

$$h_2(\vec{G}) = \left[\frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{G^2}{4\alpha^2}\right) - G erfc\left(\frac{G}{2\alpha}\right) \right] \quad (3.14)$$

$$F_{\parallel}(\vec{G}) = \sum_{i=1}^N (\vec{G} \cdot \vec{S}_i) \exp(i\vec{G} \cdot \vec{r}_i) \quad (3.15)$$

$$F_{\perp}(\vec{G}) = \sum_{i=1}^N S_i^z \exp(i\vec{G} \cdot \vec{r}_i) \quad (3.16)$$

com $F_{\parallel}^*(\vec{G})$ e $F_{\perp}^*(\vec{G})$ sendo os complexos conjugados de $F_{\parallel}(\vec{G})$ e $F_{\perp}(\vec{G})$, respectivamente. Observando as expressões acima, nota-se a existência de um parâmetro α . Este parâmetro tem com função regular a convergência das somas tanto do espaço real quanto do espaço recíproco, de modo que os resultados possam ser precisos.

Capítulo 4

Resultados

Este capítulo contém os resultados obtidos neste trabalho. Inicialmente, são apresentadas as grandezas calculadas via simulação; em seguida, são exibidos os resultados para uma rede com condições de contorno abertas e depois com a rede sob condições periódicas de contorno.

4.1 Grandezas relevantes

Antes de expor as grandezas, convém apresentar o protocolo adotado para o cálculo das mesmas. Primeiramente, o sistema inicia com um tamanho de rede pré-definido L , uma temperatura inicial $T_i = 1.81J/k_B$ e uma configuração aleatória dos momentos magnéticos das nanoilhas. Depois, o sistema é submetido a 20 000 passos de Monte-Carlo (MCS), em que o MCS foi definido na seção 3.1.1. Para cada MCS foi calculado um valor de energia e magnetização. Sabe-se também da sessão 3.1.1 que antes do sistema termalizar (atingir o equilíbrio), este passa por um transiente. Os valores de energia e magnetização obtidos dentro desse transiente foram excluídos.

Ao término do último passo de Monte Carlo, era reduzida a temperatura do sistema e este era sujeito a uma nova sequência de passos de Monte Carlo. Este procedimento era repetido até o sistema alcançar a temperatura final de $T_f = 0.01J/k_B$.

Uma vez que o sistema chegue a temperatura final, o protocolo acima é reiniciado mantendo o mesmo valor do tamanho de rede e temperatura inicial. Porém, com uma nova configuração dos momentos magnéticos. As grandezas calculadas neste trabalho foram:

4. Resultados

Energia por spin (nanoilha):

$$E = \frac{\langle H \rangle}{N} \quad (4.1)$$

Magnetização normalizada:

$$M = \frac{1}{M_{sat}} \sqrt{\left(\sum_i^N S_i^x\right)^2 + \left(\sum_i^N S_i^y\right)^2} \quad (4.2)$$

Calor específico:

$$C = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{Nk_B T^2} \quad (4.3)$$

Susceptibilidade magnética:

$$\chi_M = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{Nk_B T} \quad (4.4)$$

em que N se refere ao número de sítios da rede, S_i^x e S_i^y são os valores das componentes dos momentos magnéticos de cada nanoilha, M_{sat} é a magnetização de saturação, T é a temperatura do sistema e k_B é a constante de Boltzmann. A magnetização de saturação é o valor máximo que o sistema pode assumir, no caso da geometria desse trabalho, será quando todas as nanoilhas verticais e horizontais apontarem ao longo de uma mesma direção, obtendo um valor igual a $M_{sat} = N/\sqrt{2}$.

4.2 Condição de contorno aberta

Após expor o sistema ao protocolo descrito na sessão anterior, observou-se que no estado fundamental os momentos magnéticos se organizam de modo a formar uma configuração similar a um vórtice (ver figura 4.2). Com intuito de melhor entender a formação dessa configuração e inspirado nos artigos [18] e [5], foi feita uma análise da energia em células menores da rede contendo apenas quatro nanoilhas. O resultado é exibido na figura 4.1.

O primeiro grupo de configurações apresentam a menor energia e note que cada configuração pode ser obtida via uma operação de rotação da primeira célula. O segundo grupo apresenta uma energia nula e as suas configurações são reproduzidas via rotação e inversão dos momentos magnéticos de cada nanoilha. No terceiro e

4. Resultados

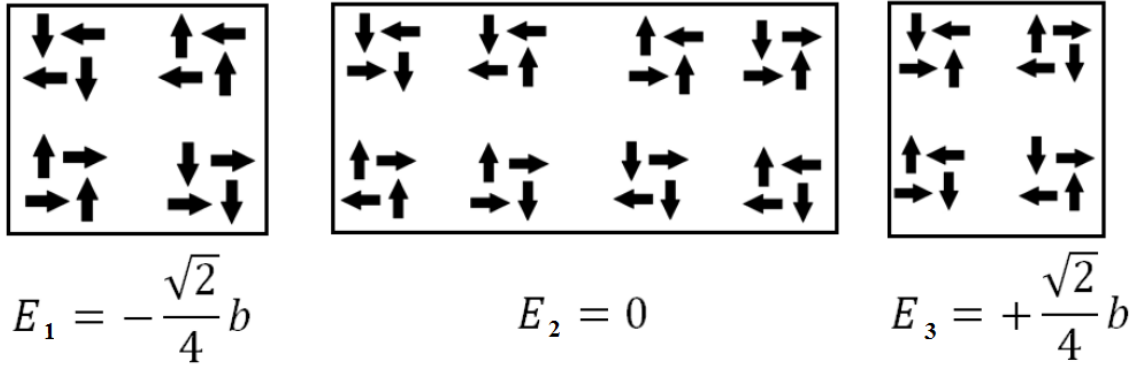


Figura 4.1: Análise energética de um célula contendo 4 nanoilhas em diferentes configurações. O parâmetro b é a unidade de energia, sendo $b = Da^3$, onde D é a constante dipolar e a é o parâmetro de rede.

último grupo são exibidas as configurações de maior energia e suas células são obtidas por uma operação de inversão. Fazendo uma analogia com a regra do gelo ([5]), pode-se perceber que as células de menor energia são aquelas em que as nanoilhas paralelas tem os seus momentos magnéticos apontados na mesma direção (alinhados). A medida em que essas nanoilhas não respeitem esse critério, surge um aumento na energia. Note que no segundo grupo um dos pares de nanoilhas paralelas tem os seus momentos magnéticos apontando em direções opostas e no terceiro grupo, ambos os pares de nanoilhas paralelas apontam em direções opostas. Analisando a interação dipolar (eq. 2.26) é visível que as nanoilhas paralelas tem uma maior correlação, uma vez que este possui uma interação nula com os seus vizinhos perpendiculares.

Foi feito também um mapeamento energético da rede, calculando quanto de energia seria necessário para flipar o momento magnético de cada nanoilha; levando em consideração que o sistema esteja no estado fundamental (ver Fig. 4.3).

Comparando as figuras 4.1, 4.2 e 4.3, vemos que as configurações do grupo 1 (menor energia) se encontram na região alaranjada da figura 4.3 enquanto que as configurações do grupo 2 correspondem as linhas azuis. De fato, note que o estado fundamental é composto por quatro regiões quadradas compostas por configurações do grupo 1 separadas por configurações do tipo 2 formando uma linha horizontal e outra vertical, estando ainda os spins do centro da rede numa configuração correspondente ao grupo 3. Os sítios na região laranja são os mais difíceis de serem flipados como

4. Resultados

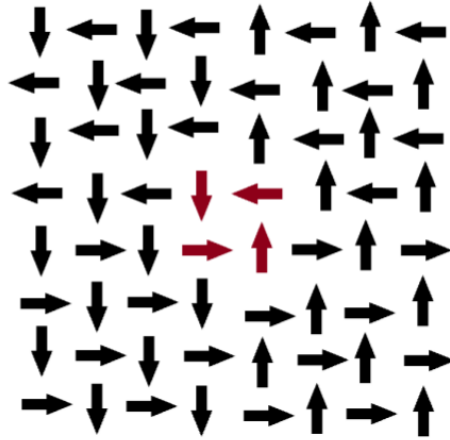


Figura 4.2: A figura acima é uma ilustração do estado fundamental de uma rede de tamanho $L=8a$. Em vermelho é destacado o centro do vórtice.

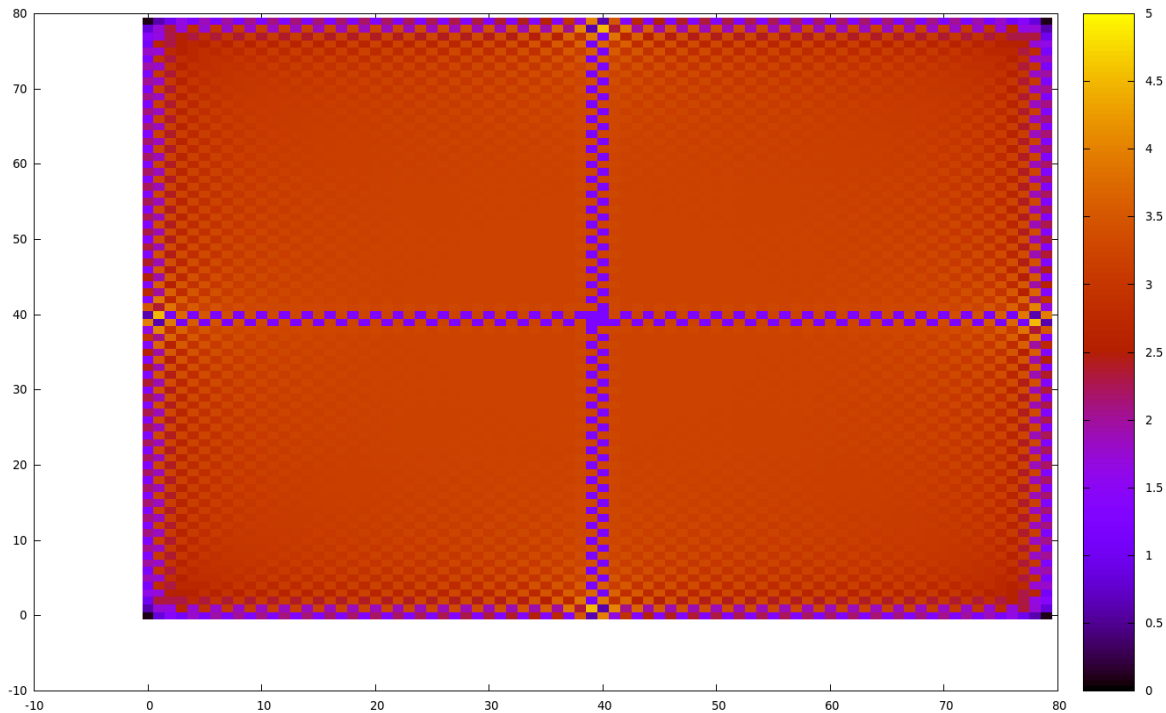


Figura 4.3: Mapeamento energético de um rede de tamanho $L=80a$. Cada ponto na figura representa a posição de uma nanoilha e a tonalidade indica o quanto de energia é necessário pra flipar o momento magnético na nanoilha.

4. Resultados

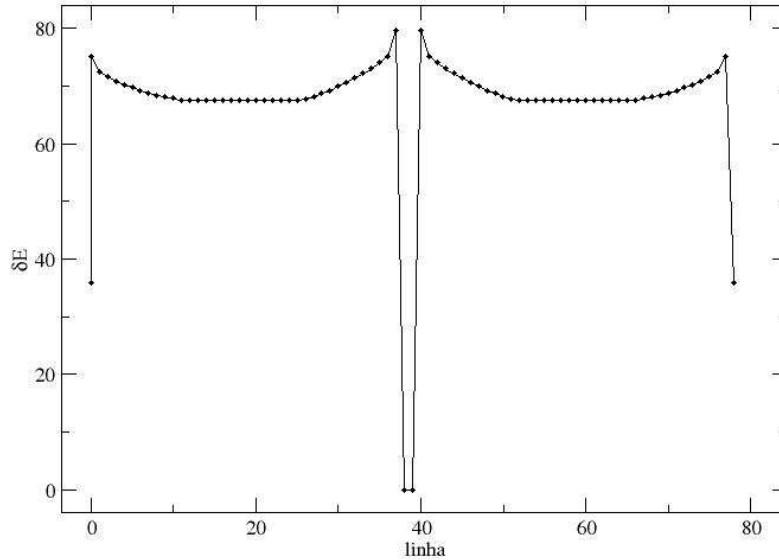


Figura 4.4: O eixo vertical indica a intensidade da energia necessária para flipar uma linha inteira de nanoilhas verticais e o eixo horizontal é a posição da linha flipada. Esse cálculo foi feito em uma rede de tamanho $L=80a$.

indicado na própria figura; por outro lado, as linhas azuis e as nanoilhas nas pontas da rede são os mais suscetíveis a tal conversão. Portanto, a análise feita considerando que o sistema é composto por células menores é coerente com o mapeamento de energia mostrado na figura 4.3.

Com objetivo de determinar o primeiro estado excitado, foi feito um estudo semelhante ao do mapeamento. Porém, flipando linhas verticais ao invés de uma única nanoilha. A figura 4.4 exhibe o resultado desse estudo, pode-se perceber na figura que as nanoilhas verticais nas linhas do centro da rede são mais fáceis de serem flipadas. O resultado numérico indica que o custo energético para flipar uma linha inteira de nanoilhas verticais no centro da rede é menor do que flipar somente uma única nanoilha, independente de onde esteja. Portanto, o primeiro estado excitado nada mais é do que a configuração do estado fundamental com o seu núcleo deslocado de uma unidade (ver Fig. 4.5).

Os resultados exibidos abaixo são referentes às grandezas introduzidas na sessão

4. Resultados

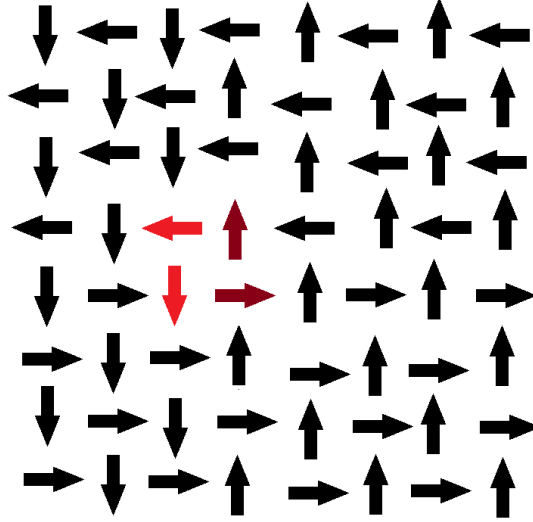


Figura 4.5: Ilustração do primeiro estado excitado em uma rede de tamanho $L=8a$.

4.1. Primeiro, apresentamos o gráfico da energia por nanoilha em função da temperatura (ver Fig.4.6). Observe na figura que para altos valores de temperatura as curvas tendem a colapsar. Entretanto, para a configuração de menor energia (estado fundamental) existe uma dependência desta com o tamanho da rede. Na figura 4.7 é mostrada a forma dessa dependência e feito um ajuste linear do tipo $y = a_1 + a_2 \ln L$, onde $a_1 = -0.45 \pm 0.01$ e $a_2 = -0.067 \pm 0.003$. Devido ao efeito de borda, as redes com tamanhos $L = 10a$ e $L = 20a$ foram excluídas. Este ajuste foi escolhido por possuir o maior coeficiente de correlação.

Na sequência apresentamos o gráfico do calor específico por spin (nanoilha) em função da temperatura (ver Fig.4.8) para diferentes tamanhos de rede. A curva de tamanho de rede $L = 10a$ é menos acentuada que as restantes, acreditamos que isso seja um efeito de finitude da rede. E, além disso, ao contrário do que ocorre no modelo de Ising, a temperatura onde está localizado o pico do calor específico aumenta com o tamanho da rede até um valor limite de $T = 0.97J/k_B$. Este resultado é exibido na figura 4.9.

Foi estudada também a dependência do pico do calor específico com o tamanho da rede (ver Fig.4.10) e realizado um ajuste do tipo lei de potencia $y = a_1 t^{a_2}$. Os coeficientes a_1 e a_2 , respectivamente foram: $a_1 = 0.17 \pm 0.05$ e $a_2 = 0.51 \pm 0.01$.

4. Resultados

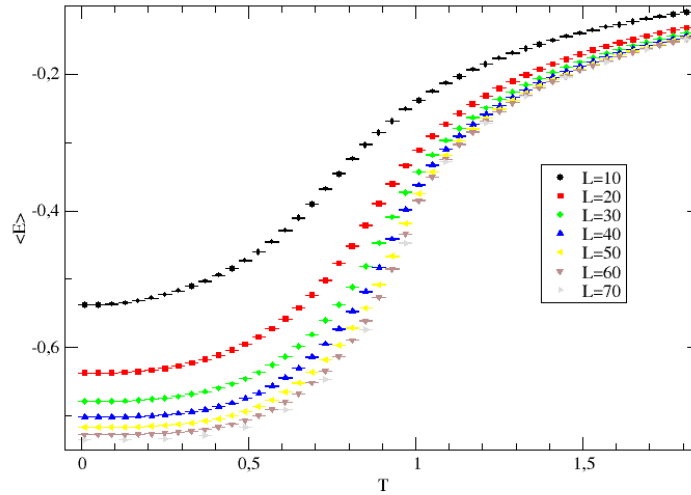


Figura 4.6: Resultado da Energia média por spin(nanoilha) em função da temperatura para diferentes tamanhos de rede.

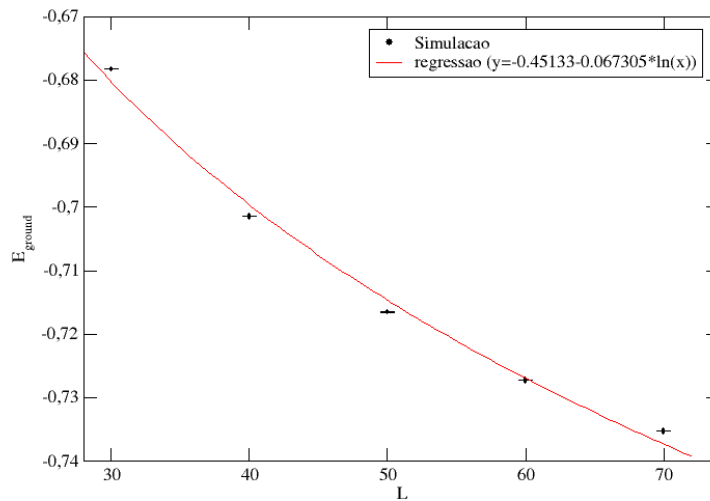


Figura 4.7: Energia do estado fundamental em função do tamanho da rede. Os pontos representam os valores calculados via simulação e a linha contínua vermelha é o ajuste obtido.

4. Resultados

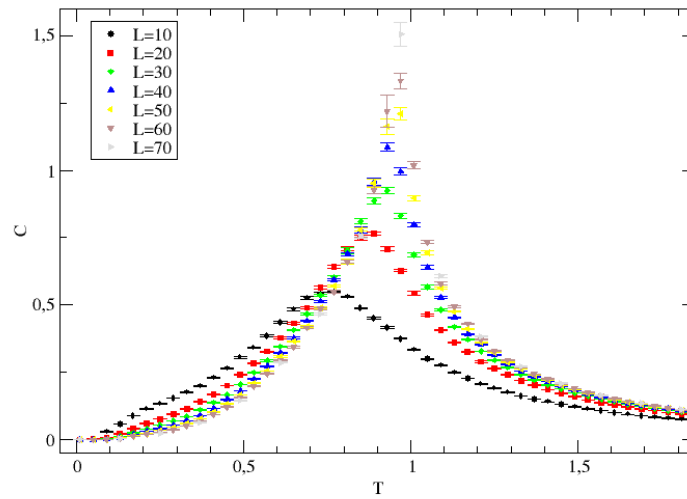


Figura 4.8: Resultado do calor específico por spin em função da temperatura para diferentes valores de tamanhos de rede.

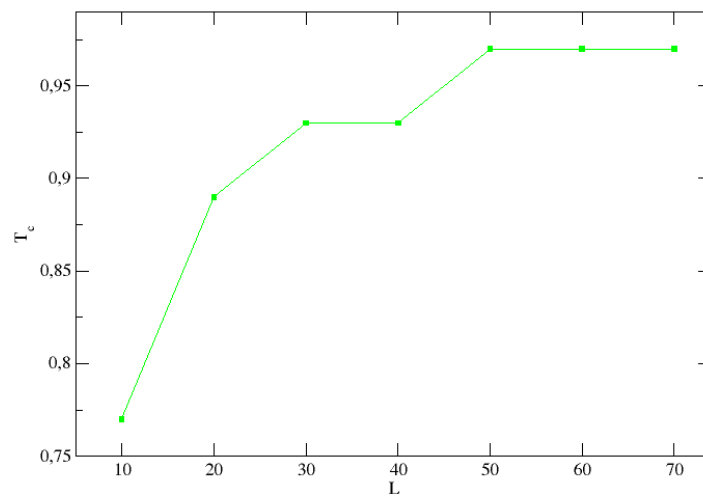


Figura 4.9: Gráfico da temperatura crítica do sistema em função do tamanho de rede.

4. Resultados

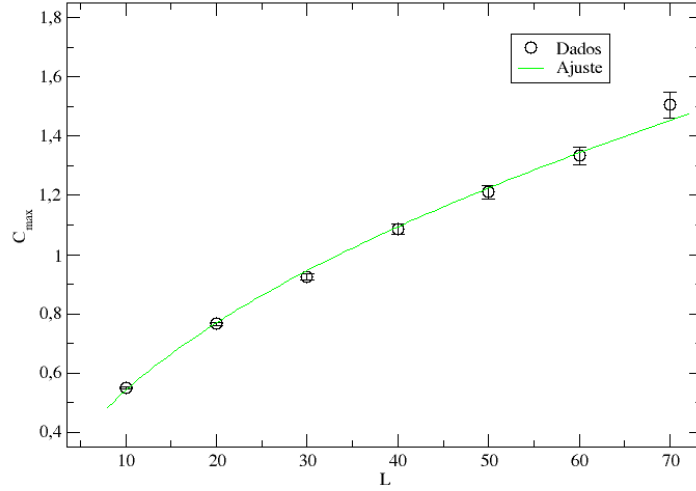


Figura 4.10: Gráfico do pico (máximo) do calor específico em função do tamanho da rede. Os pontos representam os dados calculados via simulação e a linha contínua vermelha na forma de lei de potência.

Analisando o gráfico do pico do calor específico, vemos que no limite termodinâmico este diverge. Nesse sentido, se faz necessário definir algum critério que seja possível estimar o quão próximo o sistema esteja do estado fundamental ou mesmo, localizar a temperatura crítica. Ou seja, é preciso de um parâmetro de ordem. Na maioria dos casos, a magnetização é escolhida como parâmetro de ordem. No entanto, a rede exibe uma magnetização nula no estado fundamental e tende a zero para temperaturas muito altas, fato este que invalida a sua escolha. O parâmetro de ordem pode ser escolhido livremente, a única restrição é que este possua um valor diferente de zero a baixas temperaturas e seja nulo a altas temperaturas. Dessa forma, definimos o seguinte parâmetro de ordem:

$$\rho = \frac{1}{N} \sum_i^N \langle \mu_{GS} | \mu_i \rangle \quad (4.5)$$

onde $|\mu_{GS}\rangle$ representa os momentos magnéticos na configuração do estado fundamental (ground state), $|\mu\rangle$ a configuração dos momentos em um estado qualquer e N é o número de sítios da rede. Este parâmetro de ordem foi retirado da referência [6]. O resultado

4. Resultados

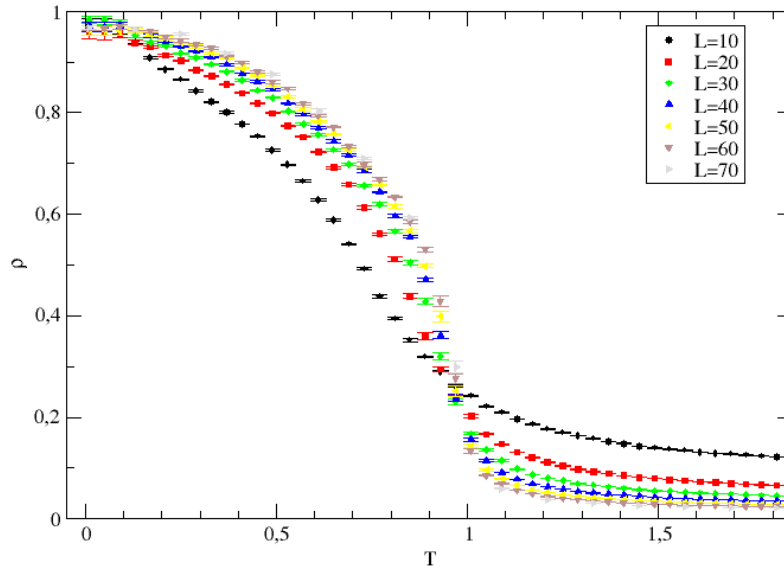


Figura 4.11: Gráfico do parâmetro de ordem ρ em função da temperatura para diferentes valores de tamanhos de rede.

é exibido na figura 4.11.

4.3 Condição de contorno fechada

Uma outra etapa desse trabalho, foi estudar o sistema no limite termodinâmico. Em outras palavras, anular o efeito que a borda tem sobre a rede e analisar como a energia, magnetização e as outras grandezas se comportam nessa nova situação. Uma maneira muito utilizada para simular este efeito é impor condições de contorno periódicas ao sistema. Porém, como discutido na sessão 3.2, impor esse tipo de restrição a um sistema com interação dipolar não é uma tarefa simples. Nesse sentido, convém a utilização do método da soma de Ewald, que propõe uma maneira mais eficaz de se calcular essa interação. Nós, portanto, fizemos uso deste método e apresentamos os resultados no que segue:

Ao contrário do que ocorre no sistema com condições de contorno abertas (sessão 4.2), em que para valores de temperaturas menores que T_c a energia exibia uma de-

4. Resultados

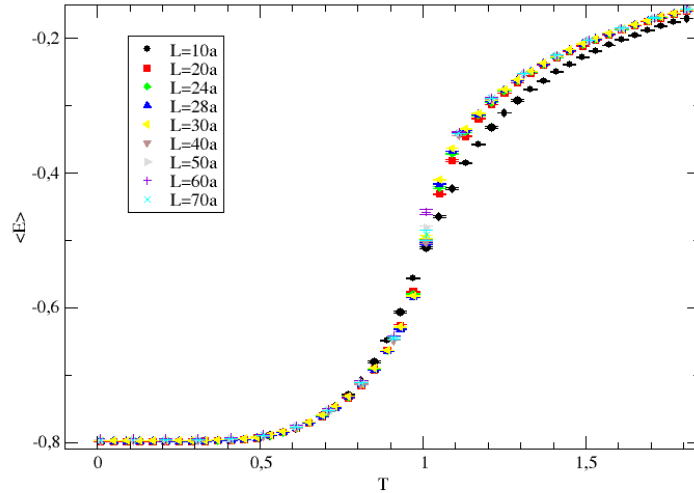


Figura 4.12: Resultado da energia por spin (nanoilha) em função da temperatura para diferentes tamanhos de rede com o sistema sob condições periódicas de contorno.

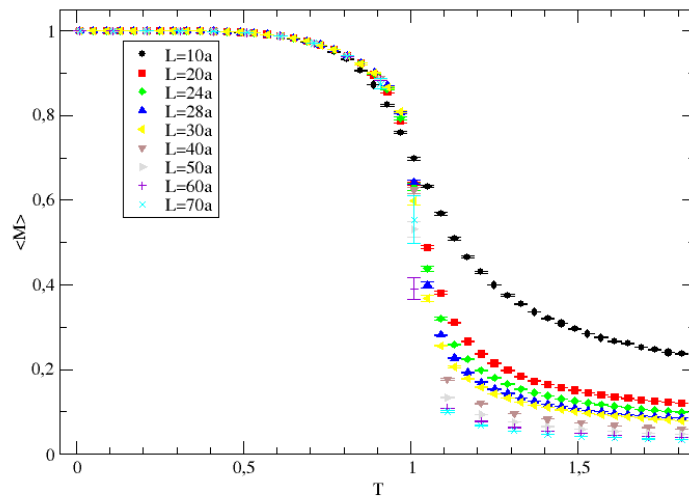


Figura 4.13: Resultado da magnetização normalizada em função da temperatura para diferentes tamanhos de rede com o sistema sob condições periódicas de contorno.

4. Resultados

pendência com o tamanho da rede, agora os gráficos de energia tendem a uma única curva e independem dos valores de temperatura e tamanho de rede no limite de temperatura nula. Um outro resultado interessante é o comportamento da magnetização. Foi discutido na sessão 4.2 que os valores da magnetização tendiam a zero tanto para valores de temperatura maiores que T_c quanto menores. Nessa sessão, por outro lado, a magnetização possui dois regimes: Para $T > T_c$ o sistema é completamente desordenado, com os momentos magnéticos apontando em direções aleatórias e para $T < T_c$ os momentos magnéticos das nanoilhas paralelas ficam todos alinhados (comportamento ferromagnético, figura 4.14). Ou seja, no estado fundamental todas as células da rede estão em uma das quatro configurações do primeiro grupo (ver Fig. 4.1). Tal comportamento da magnetização a torna excelente escolha como parâmetro de ordem.

Continuando com a apresentação dos resultados, as próximas figuras (4.15, 4.16 e 4.17) exibem o comportamento do calor específico e susceptibilidade magnética em função da temperatura.

Através do resultado do calor específico, foi feito um gráfico do pico deste, C_{max} , em função do tamanho da rede L (ver Fig.4.17). Apesar deste gráfico exibir um comportamento aproximadamente linear, o ajuste de maior coeficiente de correlação foi o do tipo de lei de potencia. Onde os coeficientes foram: $a_1 = 0.22 \pm 0.09$ e $a_2 = 0.73 \pm 0.03$. Este gráfico também diverge no limite termodinâmico.

4. Resultados

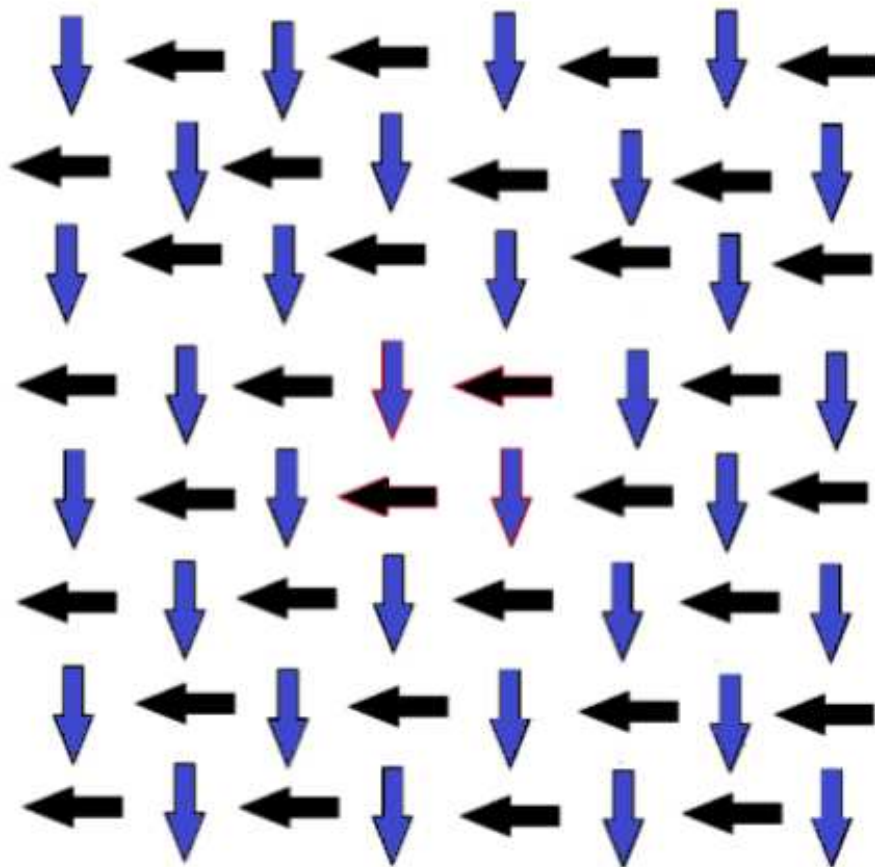


Figura 4.14: Estado fundamental do sistema em condições de contorno fechadas.

4. Resultados

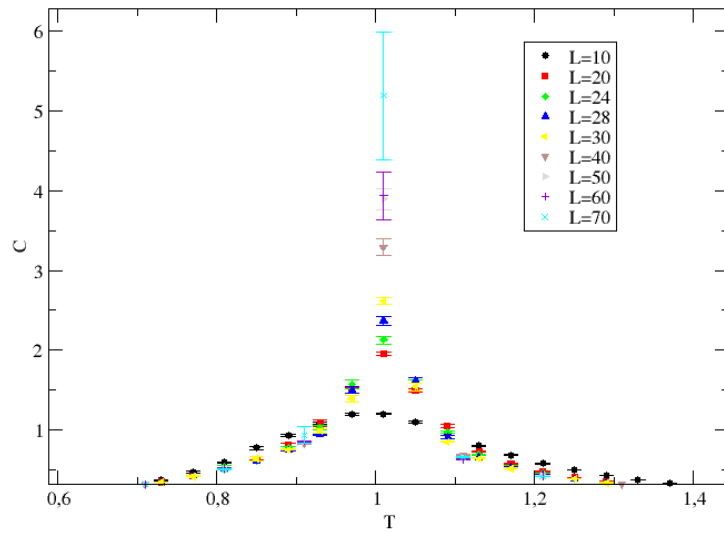


Figura 4.15: Resultado do calor específico em função da temperatura para uma rede contendo condições periódicas de contorno.

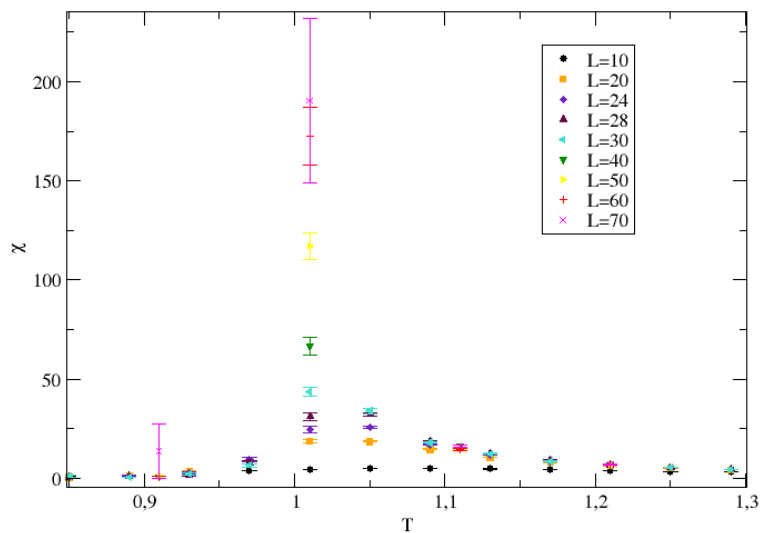


Figura 4.16: Resultado da susceptibilidade magnética em função da temperatura para uma rede contendo condições periódicas de contorno.

4. Resultados

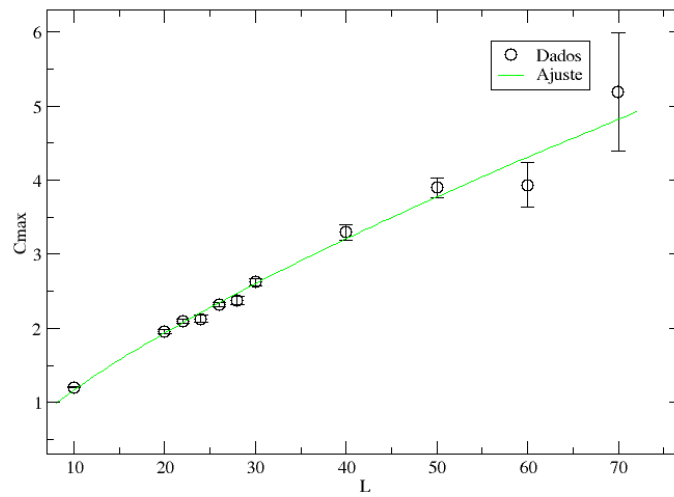


Figura 4.17: Resultado do pico do calor específico em função do tamanho da rede em um sistema sob condições de contorno periódicas.

Capítulo 5

Conclusões

Como já dito anteriormente, o foco deste trabalho era analisar o efeito da geometria sobre gelos de spins bidimensionais. A nova geometria analisada explora a simetria dipolar das nanoilhas que constituem a rede, gerando assim um aumento da frustração no sistema. A nossa expectativa era perceber a influência desta geometria na separação entre monopolos magnéticos. Porém, essas excitações magnéticas não surgem em nossa rede, ao invés disso, emerge uma configuração de vórtice como estado fundamental no sistema com condições de contorno aberta e outra ferromagnética no sistema com condições de contorno fechada. Apesar disso, a partir das grandezas termodinâmicas calculadas pudemos perceber a separação em duas fases no nosso sistema. Uma desordenada, com os momentos magnéticos das nanoilhas apontando em sentidos aleatórios e outra ordenada. No caso da rede com condição de contorno aberta, foi necessário definir um parâmetro de ordem, ρ , para distinguir tais fases. Além disso, a energia do estado fundamental exibe uma dependência com o logaritmo do tamanho da rede, diminuindo o seu valor para sistemas maiores. Uma outra característica que distingue esse sistema de outros materiais magnéticos se refere a temperatura crítica do sistema. Esta ao contrário do que ocorre em sistemas com a classe de universalidade de Ising, tende a aumentar com o tamanho da rede até um patamar de $T_c = 0.97J/k_B$. Este resultado estimula o estudo de redes maiores em que a transição de fase possa se dar em temperaturas mais acessíveis. Para tanto, será necessário maior tempo de simulação e estratégias mais eficientes como, por exemplo, programação paralela.

No caso do sistema sob condição de contorno fechada, vimos que este tende a se

5. Conclusões

comportar de maneira ferromagnética. Ainda temos a separação entre duas fases (ordenada e desordenada), porém na fase ordenada os momentos magnéticos estão todos alinhados ao longo do mesmo sentido sem surgimento de vórtice. Analisando o resultado do calor específico, vemos que a região do pico deste é mais pronunciada que o caso do sistema com condição de contorno aberta, a temperatura crítica quase não varia e no entanto o pico do calor específico em função do tamanho da rede ainda obedece uma lei de potência. Pudemos ver, comparando ambos os casos, que o efeito de borda traz sistemas com características muito distintas o que suscita novos estudos para esclarecer este comportamento. Aparentemente, o sistema tem um comportamento local ferromagnético, porém, domínios são formados em sistemas finitos, assim como ocorre em materiais ferromagnéticos. Talvez, estudando redes maiores poderemos estabelecer se em algum momento a configuração com um único vórtice deixa de ser a de mais baixa energia, dando lugar a estruturas mais complexas.

Referências Bibliográficas

- [1] D. J. Griffiths, “Introduction to Electrodynamics”, Prentice Hall, New Jersey, Third Edition (1999).
- [2] D. P. Landau, K. Binder, “A Guide to Monte Carlo Simulation In Statistical Physics”, Cambridge University Press, Third Edition (2009)
- [3] M. E. J. Newman, G. T. Bakerma, “Monte Carlo Methods in Statistical Physics”, Oxford University Press, First Edition (2001)
- [4] A. Aharoni, “Introduction to the Theory of Ferromagnetism”, Oxford Science Publications, Second Edition (2000).
- [5] R. F. Wang, C. Nisoli, R. S. Freitas, J. Li, W. McConville, B. J. Cooley, M. S. Lund, N. Samarth, C. Leighton, V. H. Crespi, P. Schiffer; Nature **439**, 303 (2006)
- [6] G. M. Wysin, W. A. Moura-Melo, L. A. S. Mól, and A. R. Pereira, J. Phys.: Condens. Matter **24**, 286001 (2012).
- [7] G. M. Wysin, W. A. Moura-Melo, L. A. S. Mól, A. R. Pereira; J. Phy.: Condens. Matter **24** 296001 (2012)
- [8] M. P. Allen and D. J. Tildesley; “Computer simulation of Liquids”, Oxford, New York (1991).
- [9] J. J. Weiss; “Simulation of quasi two dimensional dipolar systems”; Journal of Physics: Condensed Matter, 15 S1471 (2003).
- [10] C. Castelnovo, R. Moessner and L. Sondhi; Nature **451**, 42 (2008).

5. Conclusões

- [11] G.H. Wannier; Phys. Rev. **79**, 357 (1950); erratum Phys. Rev. **B7**, 5017 (1973).
- [12] W.F. Giaunque, M.F. Ashley; Phys. Rev. **43**, 81 (1993).
- [13] W.F. Giaunque, J.W. Stout; J. Am. Chem. Soc. **58**, 1144 (1936).
- [14] L. Pauling; J. Am. Chem. Soc. **57**, 2680 (1935).
- [15] M.J. Harris, S.T. Bramwell, D.F. McMorrow, T. Zeiske and K.W. Godfrey; Phys. Rev. Lett. **79**, 2554 (1997).
- [16] L. A. Mol, R. L. Silva, R. C. Silva, A. R. Pereira, W. A. Moura-Melo, B. V. Costa; Journal of Applied Physics, **106**, 063913 (2009)
- [17] L. A. S. Mol, W. A. Moura-Melo, A. R. Pereira; Phys. Rev. B, **82**, 054434 (2010)
- [18] L. A. S. Mol, A. R. Pereira, W. A. Moura-Melo; Phys. Rev. B, **85**, 184410 (2012)
- [19] F. S. Nascimento, L. A. S. Mol, W. A. Moura-Melo, A. R. Pereira; New Journal of Physics, **14**, 115019 (2012)