

Estudo do modelo XY diluído na rede Kagomé utilizando simulação Monte Carlo.

J. B. dos Santos-Filho¹; T. S. de Araujo Batista²; D. F. Albuquerque³; A. D. Passos⁴;

¹*Departamento de Informática, Instituto Federal de Sergipe, 49100-000, São Cristóvão-SE, Brasil*

²*Departamento de Química, Instituto Federal de Sergipe, 49055-260, Aracaju-SE, Brasil*

³*Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe, 49100-000, São Cristóvão-SE, Brasil*

⁴*Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe, 49100-000, São Cristóvão-SE, Brasil*

santosfilho@ufmg.br

(Recebido em 02 de dezembro de 2014; aceito em 05 de maio de 2015)

Neste trabalho estudou-se a influência de impurezas não magnéticas temperada sobre o modelo XY numa rede Kagome. Esse estudo foi realizado utilizando o método de Monte Carlo híbrido e teoria de escala de tamanho finito para estimar os pontos de transição BKT com boa precisão. O diagrama de transição de fase obtido apresenta uma região de ordem topológica de uma região desordenada, separadas por uma linha de transição BKT. A declividade inicial da temperatura com a diluição apresentou um valor superior à encontrada para rede quadrada.

Palavras-chave: desordem temperada, rede Kagome, simulação Monte Carlo

Study of the XY diluted model in Kagome lattice by Monte Carlo simulation.

The present investigation assessed the influence of quenched non-magnetic impurities over XY model in Kagome lattice. This study was performed using the Monte Carlos method and finite size scale theory in order to estimate BKT transition points with accuracy. The phase transition diagram obtained exhibits a region of topological order and a disordered region separated by a BKT transition line. The initial slope of the temperature with dilution outperformed value found for the square lattice.

Keywords: quenched dilution, Kagome lattice, Monte Carlo simulation.

1. INTRODUÇÃO

O modelo XY representa uma classe de problemas cujo parâmetro de ordem apresenta simetria rotacional no plano. Sendo, portanto, utilizado para descrever problemas ligados a superfluidez, a supercondutividade e também uma classe de materiais magnéticos^[1,2,3]. O modelo XY foi introduzido por Matsubara e Matsuda^[4] para estudar o fenômeno da superfluidez do ⁴He. Desde então ele tem sido muito investigado tanto do ponto de vista teórico como experimental^[5].

Em duas dimensões o modelo XY apresenta uma transição de fase do tipo Berenzinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT). A transição BKT é uma transição topológica de ordem infinita^[6,7,8]. Esta tem sido estudada utilizando a rede quadrada e na rede triangular. Nessas redes há trabalhos analíticos e de simulação computacional^[9].

A rede Kagome possui o mesmo número de coordenação da rede quadrada, mas diferente dessa, cada vizinho tem outro vizinho em comum. Assim, a rede de Kagome apesar de apresentar os mesmos expoentes críticos da rede quadrada, apresenta temperatura de transição e concentração de percolação diferentes. A rede de Kagome tem sido muito utilizada em estudos de gelos de spin, devido a sua frustração geométrica em modelos antiferromagnéticos^[10,11]. A compreensão de suas propriedades pode, portanto, ajudar a elucidar problemas distintos.

A influência da desordem é outro fator muito investigado, pois esta altera significativamente diferentes quantidades termodinâmicas. Por outro lado, argumentos baseados na teoria de escala predizem que quando o expoente crítico do calor específico é negativo para um sistema puro, uma desordem temperada não deve alterar os pontos fixos desse sistema. Esse argumento é

conhecido como critério de Harris ^[12]. Nesse caso, o comportamento crítico do sistema desordenado será governado pelos pontos fixos e pela classe de universalidade do caso puro. Partindo desse critério, a desordem não afetará os expoentes críticos do modelo XY bidimensional. No entanto, a transição de fase desse modelo é do tipo BKT, o que torna interessante essa investigação.

Atualmente, há pouco estudo sobre a desordem no modelo XY aplicado à rede Kagome. A ausência de resultados em simulação computacional motivou o desenvolvimento dessa pesquisa. Assim, nesse trabalho realizou-se um estudo extensivo do modelo XY com diluição por sítio numa rede Kagome.

2. MODELO E SIMULAÇÃO

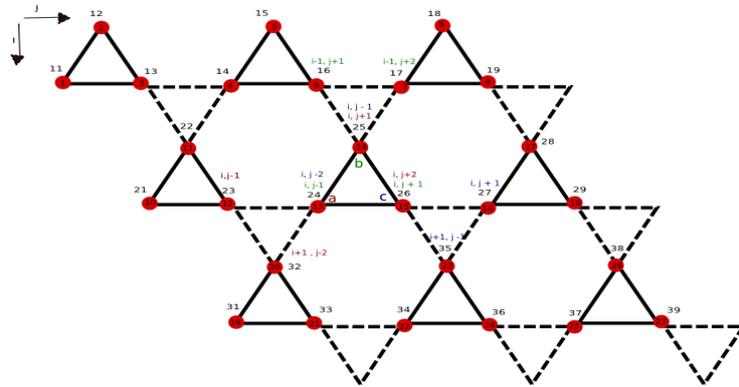


Figura 1: Representação esquemática da rede Kagome. Os números dentro dos círculos representam a posição do sítio no vetor utilizado na simulação

A rede de Kagome foi modelada utilizando um vetor unidimensional, os vizinhos de cada sítio são determinados através das relações apresentadas na figura 1. Diferente da rede quadrada que possui o número total de sítios igual a L^2 , onde L é a dimensão linear do sistema, na rede utilizada o número total de sítios é igual a $3L^2$. Isso ocorre porque a rede de Kagome não é uma rede de Bravais, sendo essa a melhor forma de implementar a simulação.

O hamiltoniano do problema em estudo é descrito por

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \varepsilon_i \varepsilon_j [S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y],$$

onde S_i é um vetor de spin clássico tridimensional com $S^2 = (S^x)^2 + (S^y)^2 + (S^z)^2 = 1$, o somatório é executado sobre todos os pares de primeiros vizinhos na rede Kagome, e ε é uma variável aleatória descorrelacionada do tipo temperada, que representa a existência de duas classes de partículas no sistema, as partículas magnéticas ($\varepsilon_i=1$) e as não magnéticas ($\varepsilon_i=0$).

As variáveis ε_i obedecem a seguinte distribuição de probabilidade

$$P(\varepsilon_i) = p\delta(\varepsilon_i - 1) + q\delta(\varepsilon_i) ,$$

onde p é a concentração de sítios magnéticos e $q=1-p$ é a concentração de impurezas, tal que $p=1$ corresponde ao sistema puro.

O primeiro passo da simulação é gerar uma amostra aleatória $\epsilon = \{ \epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3, \dots, \epsilon_n \}$. Para isso é utilizado um algoritmo de Monte Carlo que sorteia $p \times 3L^2$ sítios da rede e os preenche com $\epsilon_i=1$, preenchendo o restante dos sítios com $\epsilon_i=0$. Assim, para cada configuração de concentração p , temperatura T e tamanho de rede L são geradas diferentes amostras aleatórias sendo $\{ \epsilon \}$ o conjunto de todas amostras aleatórias.

A simulação propriamente dita foi realizada utilizando um algoritmo de Monte Carlo Híbrido consistindo de um passos do algoritmo Metropolis (M), um passo de uma versão não ergódica do algoritmo de Wolff (W)^[13,14], e um passos do algoritmo de Superrelaxação a energia configuracional constante (O)^[15,16]. Este é considerado então um passo de Monte Carlo Híbrido (MCS). Esta configuração de passos que compõe o algoritmo de Monte Carlo Híbrido foi escolhida com base nos resultados de Krech e Landau^[17]. Com essa configuração eles obtiveram boa redução das correlações entre as sucessivas configurações de spin. Para toda configuração é realizado 5×10^4 MCS. O tamanho da rede varia de $L=20, 40, 60, 80$ e 100 . Estes valores foram escolhidos para que $p \times L^3$ fosse um número inteiro.

As quantidades termodinâmicas calculadas foram a magnetização, a susceptibilidade no plano e o cumulante de Binder. Elas são representadas respectivamente nas equações

$$M_{xy} = M^x + M^y$$

$$c_{xy} = 3L^2 \frac{\langle M_{xy}^2 \rangle + \langle M_{xy} \rangle^2}{T}$$

$$U_4^x = 1 - \frac{\langle M_{xy}^4 \rangle}{\langle M_{xy}^2 \rangle^2}$$

onde a temperatura T é dada em unidades de J/k_B , sendo k_B a constante de Boltzmann, e para o cumulante de Binder é utilizado somente a componente x , por esta ter se mostrado mais apropriada para esse modelo^[18].

Para estimar a temperatura de transição BKT a partir da simulação computacional foram utilizadas duas quantidades termodinâmicas, a primeira é o modulo de helicidade^[19 - 22]. Essa quantidade apresenta um salto no valor $2T/\pi$ a zero na temperatura de transição BKT para o sistema de tamanho infinito^[8]. Já em sistemas de tamanho finito o módulo da helicidade apresenta uma relação dada por^[23, 24]

$$\Upsilon = \frac{2}{\pi} T \left(1 + \frac{1}{2 \ln(L) + c} \dots \right),$$

onde c é uma constante não universal. Embora essa equação tenha sido obtida considerando o caso em que não há impurezas, espera-se que sua extensão ao caso impuro seja válida. Argumentos baseados na aproximação harmônica auto consistente mostram que o módulo da helicidade em $2T/\pi$ deve ser independente da concentração de impurezas^[25].

A segunda quantidade termodinâmica utilizada para estimar a temperatura de transição foi a susceptibilidade magnética. Segundo a teoria de escala de tamanho finito na transição de fase BKT ela apresenta uma dependência com o tamanho da rede dada pela relação^[26]

$$\chi = aL^{2-\eta} (1 - bQ),$$

onde a e b são constantes não universais, η é o expoente da função de correlação e Q é dado por

$$Q = \frac{\pi^2}{2[\ln L + u]} + O[\ln(L)^{-5}],$$

sendo u é uma outra constante não universal. Uma vez que na temperatura de transição o expoente η possui um valor bem estabelecido de $\eta(T_{BKT}) = 1/4$ ^[8] é possível alcançar bom resultado fazendo $b=0$, ou seja, buscando o ponto de cruzamento das curvas de $\frac{c}{L^{7/4}}$ para diferentes tamanhos de rede.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Na figura 2, podem-se observar as curvas do módulo da helicidade como função da temperatura para diferentes tamanhos de redes. A temperatura de transição foi obtida do cruzamento da curva do módulo de helicidade com a reta $2T/\pi$. No detalhe da figura observa-se que o ponto de cruzamento depende do tamanho da rede. Cada ponto de cruzamento define uma temperatura de transição de um sistema finito, ou seja, define uma $T_{BKT}(L)$. Essas temperaturas estão apresentadas na figura 3 para os diferentes valores de L simulado.

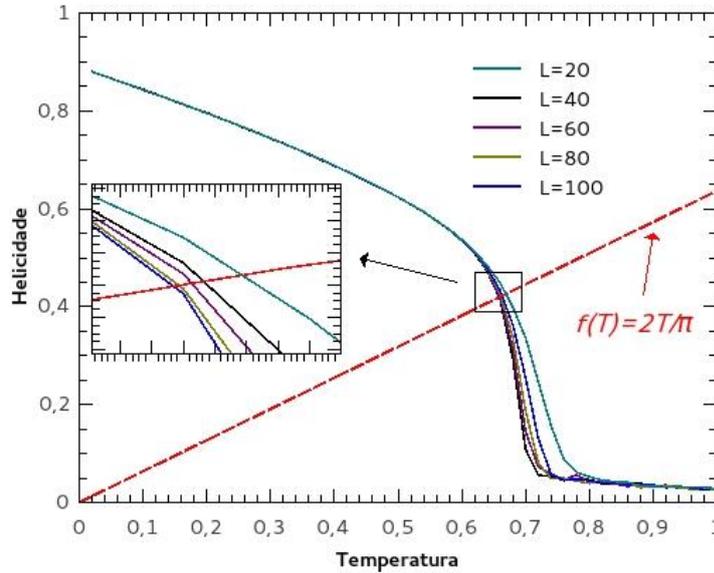


Figura 2: Curva do módulo de helicidade como função da temperatura para diferentes tamanhos de rede. O cruzamento das curvas apresentado no detalhe da figura localiza o ponto de transição BKT do sistema finito.

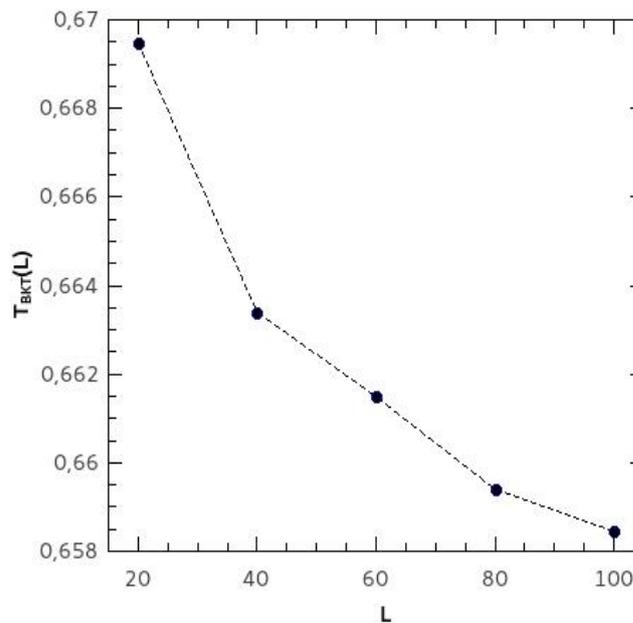


Figura 3: Temperatura de transição BKT para diferentes tamanhos de rede.

Para estimar a temperatura de transição do sistema no limite termodinâmico tomando como base a temperatura do sistema finito, necessitamos utilizar a relação aproximada obtida da teoria de escala de tamanho finito ^[27], dada pela relação $T_{BKT}(L) \propto L^{-\nu}$ sendo $\nu = -1/2$.

Na figura 4 está apresentada a extrapolação da temperatura de transição. A melhor estimativa para a temperatura de transição é então a média das temperaturas obtidas pela susceptibilidade e pelo módulo de helicidade. A temperatura obtida apresentou erro na quarta casa decimal e uma boa exatidão, o que sugere um bom resultado diante da dificuldade de calcular a temperatura de transição BKT de um sistema utilizando redes finitas. Pois as características da transição nessas redes tendem a se assemelham a transição de segunda ordem numa posição deslocada. Esse resultado só foi possível graças às técnicas desenvolvidas na ultima década.

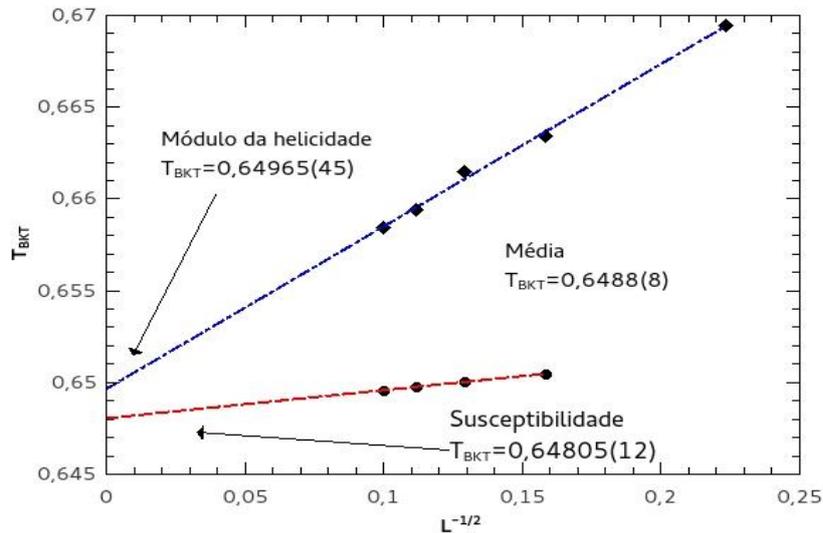


Figura 4: Ajuste linear da temperatura BKT para diferentes valores de L obtidas da susceptibilidade e do módulo de helicidade. Os valores no gráfico marcam a extrapolação no limite termodinâmico.

Na figura 5 estão apresentadas as curvas de $\frac{c}{L^{7/4}}$ médias para diferentes concentrações de sítios magnéticos p . Observa-se que o valor da temperatura BKT diminui com a redução de p como esperado.

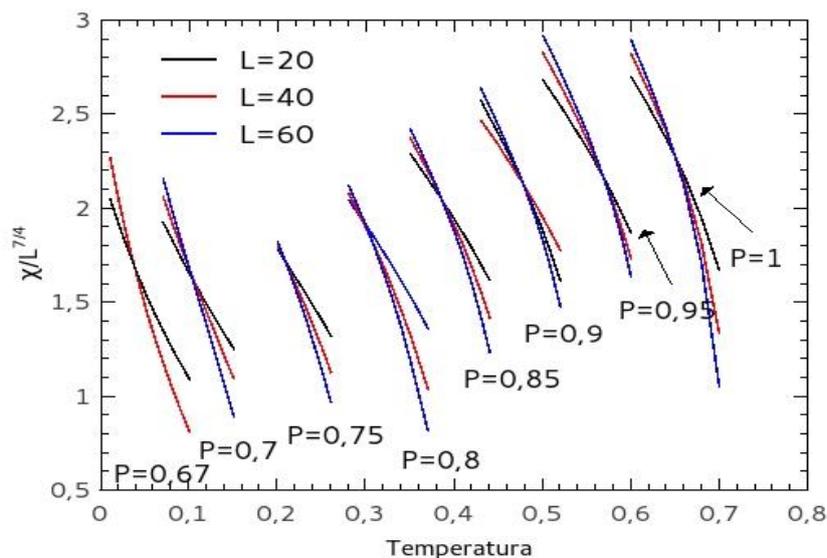


Figura 5: Curva de susceptibilidade para diferentes tamanhos de L e concentração de impurezas p .

Na figura 6 está apresentado o diagrama de transição de fase. Uma linha de transição BKT separa o diagrama em duas regiões, uma de ordem topológica e outra de desordem. A curva assemelha-se bastante a uma reta, diferindo do diagrama obtido para rede quadrada. Na rede

quadrada observa-se que nas proximidades do ponto de percolação a curva apresenta uma declividade próxima de 90°. Na rede Kagome, no entanto, ela decresce até o ponto de percolação de forma mais suave. Esse resultado demonstra a importância da topologia da rede nas propriedades dos sistemas. A rede Kagome por apresentar o mesmo número de coordenação e dimensionalidade da rede quadrada em muitas das técnicas de análise não apresentam diferenças, a exemplo da teoria de campo médio que não consegue diferencia-las adequadamente.

Um importante parâmetro estudado nos sistemas diluídos é a redução inicial da temperatura $T_{BKT}(p)$ com a diluição, que é definido por

$$\iota = \frac{d}{dp} \left(\frac{T_{BKT}(p)}{T_{BKT}(1)} \right) \Bigg|_{p=1}$$

Esse é um parâmetro bastante utilizado para comparar resultados teóricos e experimentais. O valor de ι encontrado neste trabalho foi $\iota = 2,44$ que é maior que B. Berche et al.^[28] encontraram para o mesmo modelo, mas na rede quadrada $\iota = 1,01$. Um valor muito baixo comparado com o obtido na rede Kagome, porém coerente, visto que a concentração de percolação da rede de Kagome é maior que a da rede quadrada.

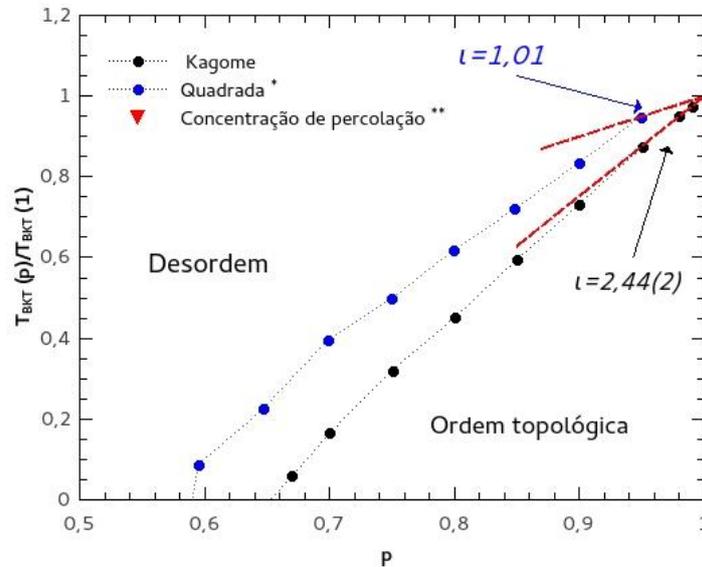


Figura 6: Diagrama de fase no plano temperatura reduzida $T_{BKT}(p)/T_{BKT}(1)$ versus concentração de sítios magnéticos para o modelo XY com diluição por sítios na rede Kagome. A barra de erro é menor que os símbolos utilizados. * Ref^[28] ** Ref^[29].

4. CONCLUSÃO

Nessa pesquisa foi realizado um extensivo estudo do comportamento crítico do modelo XY na rede Kagome com diluição temperada por sítio. Apesar dessa não ser uma rede de Bravais o sistema apresentou um comportamento de transição BKT como esperado para o modelo XY bidimensional. Por meio da técnica de simulação encontrou-se com boa precisão a temperatura BKT no limite termodinâmico para a rede Kagome e o valor da declividade inicial da temperatura com a diluição, resultados expressivos para a literatura científica. Foi possível comparar os resultados com resultados para rede quadrada, denotando as diferenças na topologia da curva do diagrama de transição de fase da rede Kagome.

1. Betts DD. Critical properties of the XY model. *Physica B+ C*. 1977; 86:556-561.
2. Betts DD, Lee MH. Critical properties of the XY model. *Physical Review Letters*. 1968; 20(26): 1507-1514.
3. Reeve JS. The magnetically dilute XY ferromagnet II. The annealed site case. *Journal of Physics C: Solid State Physics*. 1976; 9(13):2575-1985.
4. Matsubara T, Matsuda, H. A lattice model of liquid helium, I. *Progress of Theoretical Physics*. 1956; 16(6), 569-582.
5. Lublin DM. Critical Phenomena in the Two-Dimensional XY Model Using a Real-Space Renormalization Group. *Physical Review Letters*. 1975; 34(10): 568-573.
6. Berezinskii VL. Destruction of long-range order in one-dimensional and two-dimensional systems having a continuous symmetry group I classical systems. *Sov. Phys. JETP*. 1971; 32(3):493-500.
7. Kosterlitz JM, Thouless DJ. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems. *Journal of Physics C: Solid State Physics*. 1973; 6(7): 1181-1203.
8. Kosterlitz JM. The critical properties of the two-dimensional xy model. *Journal of Physics C: Solid State Physics*. 1974; 7(6): 1046-1060.
9. Russell J, Cohn R. *Kagome Lattice*. EUA: Book on Demand Ltd. 2013.
10. Chern GW, Mellado P, Tchernyshyov O. Two-stage ordering of spins in dipolar spin ice on the Kagome lattice. *Physical review letters*. 2011; 106(20): 207202-4.
11. Qi Y, Brintlinger T, Cumings J. Direct observation of the ice rule in an artificial Kagome spin ice. *Physical Review B*. 2008; 77(9): 094418.
12. Harris AB. Effect of random defects on the critical behaviour of Ising models. *Journal of Physics C: Solid State Physics*. 197; 7(9): 1671.
13. Newman MEJ, Barkema GT. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. USA, Oxford University Press. 1999; chapter 1-4.
14. Wolff U. Collective Monte Carlo updating for spin systems. *Physical Review Letters*. 1989; 62(4):361-364.
15. Creutz M. Overrelaxation and monte carlo simulation. *Physical Review D*. 1987; 36(2): 515-519.
16. Pawig SG, Pinn K. Monte Carlo algorithms for the fully frustrated XY model. *International Journal of Modern Physics C*. 1998; 9(05): 727-736.
17. Krech M, Landau DP. Spin-dynamics simulations of the three-dimensional XY model: Structure factor and transport properties. *Physical Review B*. 1999; 60(5): 3375-3387.
18. Landau DP, Krech M. Spin dynamics simulations of classical ferro-and antiferromagnetic model systems: comparison with theory and experiment. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 1999; 11(18): 179-213.
19. Garg A, Pandit R, Solla SA, Ebner C. Helicity moduli of three-dimensional dilute XY models. *Physical Review B*. 1984; 30(1): 106-113.
20. Weber H, Minnhagen P. Monte Carlo determination of the critical temperature for the two-dimensional XY model. *Physical Review B*. 1988; 37(10): 5986-5989.
21. Li YH, Teitel S. Finite-size scaling study of the three-dimensional classical XY model. *Physical Review B*. 1989; 40(13): 9122-9125.
22. Olsson P. Monte Carlo analysis of the two-dimensional XY model. II. Comparison with the Kosterlitz renormalization-group equations. *Physical Review B*. 1995; 52(6): 4526-4535.
23. Hasenbusch M. The two-dimensional XY model at the transition temperature: a high-precision Monte Carlo study. *Journal of Physics A: Mathematical and General*. 2005; 38(26): 5869.
24. Hasenbusch M. The thermodynamic Casimir effect in the neighbourhood of the λ -transition: a Monte Carlo study of an improved three-dimensional lattice model. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*. 2009; 2009(07): 07031-07077.
25. Castro LM, Pires AST, Plascak JA. Low-temperature thermodynamic study of the diluted planar rotator model using a self-consistent harmonic approximation. *Journal of magnetism and magnetic materials*. 2002; 248(1): 62-67.
26. Butera P, Pernici M. High-temperature expansions through order 24 for the two-dimensional classical XY model on the square lattice. *Physical Review B*. 2007; 76(9): 092406-1-4.
27. Cardy J. *Finite-size scaling*. USA, Elsevier, 2012.
28. Berche B, Fariñas-Sánchez AI, Holovatch Y, Paredes R. Influence of quenched dilution on the quasi-long-range ordered phase of the model. *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems*. 2003; 36(1): 91-98.
29. De Jongh LJ. *Static Thermodynamic Properties of Site-Random Magnetic Systems and the Percolation Problem*. In *Magnetic Phase Transitions*. USA. Springer Berlin Heidelberg. 1983; pp. 172-194.