

# Aplicação do método de Monte Carlo para o problema de ligações mistas em uma rede cúbica

(Application of Monte Carlo's method for the problem of mixed-bond in a cubic lattices)

J. B. Santos Filho<sup>1</sup>, D. F. de Albuquerque<sup>2</sup>, A. S. de Arruda<sup>3</sup>, N. O. Moreno<sup>1</sup>.

<sup>1</sup> Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe, 49100-00, São Cristóvão, SE, Brazil

<sup>2</sup> Departamento de Matemática, Universidade Federal de Sergipe, 49100-000, São Cristóvão, SE, Brazil.

<sup>3</sup> Departamento de Física, Universidade Federal de Mato Grosso, 78060-900, Cuiabá, MT, Brazil.

(Recebido em 02 de outubro de 2006; aceito em 24 de novembro de 2006)

A transição de fase do modelo de Ising com ligações mistas (*Mixed-bond*) numa rede cúbica é estudada tanto numericamente com analiticamente. Analiticamente estudos do modelo de Ising *mixed-bond* através de técnica de grupo de renormalização predizem a existência de reentrâncias magnéticas em certos valores do parâmetro de competição  $\alpha$  ( $\alpha$  positivo). Este fenômeno é tipicamente encontrado em sistemas (a exemplo do composto  $\text{Eu}_p\text{Sr}_{1-p}$ ) que apresentam fase vidro-de-spin (*spin-glass*). Neste trabalho, usamos o algoritmo cluster de Wolff para simular a dinâmica do sistema e obter as quantidades termodinâmicas magnetização e susceptibilidade magnética. A temperatura crítica do sistema foi estimada do máximo de susceptibilidade e com estes valores construímos o diagrama de fase  $T_c$  versus  $p$  para diferentes valores de  $\alpha$  ( $\alpha > 0$ ). Nossos resultados foram comparados com aqueles obtidos pelo método de teoria de campo efetivo que emprega uma distribuição de probabilidade similar dentro de uma estrutura de cluster com dois spins.

Palavras chaves: Monte Carlo, Teoria de Campo Efetivo, Modelo de Ising.

The phase transition of a random mixed-bond Ising ferromagnet on a cubic lattice model is studied both numerically and analytically. Analytical studies on Mixed-bond Ising model by using renormalization group technique predict the existence of reentrant magnetism in a certain range of values of the competition parameter  $\alpha$ . This phenomenon typically is found in systems presenting spin glass phase, for instance  $\text{Eu}_p\text{Sr}_{1-p}$ . We seek the existence of the reentrance by means of Monte Carlo simulations. In this work, we use the Cluster algorithms de Wolff to simulate the dynamics of the system. We obtained the thermodynamic quantities such as magnetization and susceptibility. Critical temperatures were estimated of the maximum of the susceptibility and with these values we made the phase diagram  $T_c$  versus  $p$  for different  $\alpha$  values. Our results were compared with those obtained using a new technique in effective field theory which employs similar probability distribution within the framework of two-site clusters.

Key word: Monte Carlo Method, Effective field theory, Ising model.

## 1. INTRODUÇÃO

O estudo dos efeitos das desordens em sistemas magnéticos tem sido objeto de intensas investigações durante as últimas cinco décadas. Com o advento dos recentes computadores, novos softwares e técnicas analítico-numéricas, o estudo destes sistemas pode contar com uma ferramenta poderosa conhecida por simulação computacional. Em particular, uma das técnicas utilizadas é o método Monte Carlo o qual tem possibilitado, em muitos casos, melhores resultados em relação a outros métodos de aproximações analíticas.

A grande motivação de estudar sistemas desordenados reside no fato de ter se tornado possível controlar, de maneira adequada, as propriedades físicas dos materiais através de várias técnicas de dopagem de defeitos. Sem dúvida, o domínio de tal tecnologia certamente fornecerá uma grande versatilidade quanto ao emprego desses materiais nas aplicações tecnológicas, a exemplo do crescente emprego de novos materiais desordenados como os vidros metálicos, os semicondutores amorfos e mais recentemente, as cerâmicas supercondutoras a altas temperaturas.

Neste trabalho estudamos o modelo de Ising com ligações mistas através do método de simulação Monte Carlo, empregando o algoritmo cluster de Wolff<sup>1</sup>. Este algoritmo apresenta atualizações coletivas, sendo um aprimoramento do algoritmo cluster de Swendsen and Wang<sup>2</sup>.

O cluster de Wolff foi o primeiro algoritmo a eliminar completamente o problema do decaimento crítico lento (*critical slowing down*). Esta era a principal dificuldade para realizar simulações de sistemas desordenados próximos do ponto crítico. Problema este que impossibilitava, por exemplo, simulações computacionais do modelo *Mixed-Bond*.

O modelo de Ising utilizado neste trabalho é definido pela seguinte Hamiltoniana:

$$H = \beta \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j, \quad (1)$$

com  $\beta \equiv \frac{1}{K_B T}$  e a constante de interação obedece a seguinte distribuição de probabilidade:

$$P(J_{ij}) = p\delta(J_{ij} - J) + (1 - p)\delta(J_{ij} - \alpha J), \quad (2)$$

onde  $p$  representa a concentração de ligações magnéticas e  $\alpha$  é um do parâmetro de competição.

Nosso objetivo central no problema *Mixed-Bond* consiste na determinação dos diagramas de fase no plano  $T_c$  versus  $p$  onde ocorre a presença do fenômeno de reentrância magnética. Este tipo de comportamento é característico de sistemas que apresentam a fase vidro de spin. Como é o caso do  $\text{Eu}_p\text{Sr}_{(1-p)}$  que foi estudado inicialmente por Malleta e colaboradores.<sup>3</sup> Simultaneamente, realizamos uma análise da magnetização e susceptibilidade magnética.

## 2. MÉTODO

A técnica da simulação utilizada neste trabalho, baseia-se no algoritmo Cluster de Wolff com condições de contorno periódicas. As quantidades termodinâmicas de interesse são a magnetização e a susceptibilidade magnética, obtidas através das equações:

$$M = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sigma_i, \quad (3)$$

$$\chi = \beta (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2). \quad (4)$$

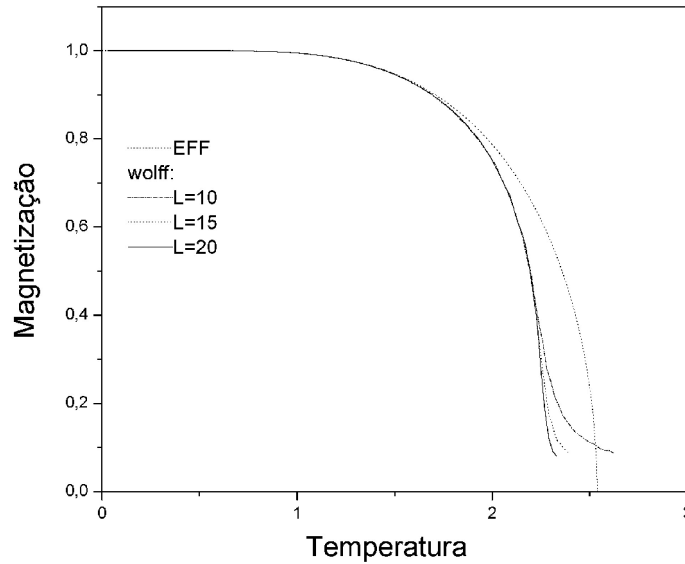
O diagrama de fase é obtido numericamente considerando o ponto máximo de uma quantidade divergente. Aqui escolhemos a susceptibilidade, uma vez que nesse sistema o expoente crítico do calor específico é negativo<sup>4,5</sup> e assim o erro que se obteria utilizando o calor específico seria maior que utilizando a susceptibilidade magnética. Por outro lado, a susceptibilidade é calculada para todos os valores de temperatura no intervalo onde a magnetização é igual a 1 até o ponto em que a magnetização cai abaixo de 0.1. Para determinar os máximos de susceptibilidade utilizamos um algoritmo que comparava todos os valores obtidos durante a simulação. Esta consistiu de 5000 passos de Monte Carlo (MCS) para cada temperatura. Os 2500 primeiros passos não são utilizados para o cálculo das quantidades termodinâmicas e sim para que o sistema atinja o equilíbrio. O número de passos de Monte Carlo é justificado pelo incremento da energia de autocorrelação no tempo<sup>4</sup>.

## 3. RESULTADOS

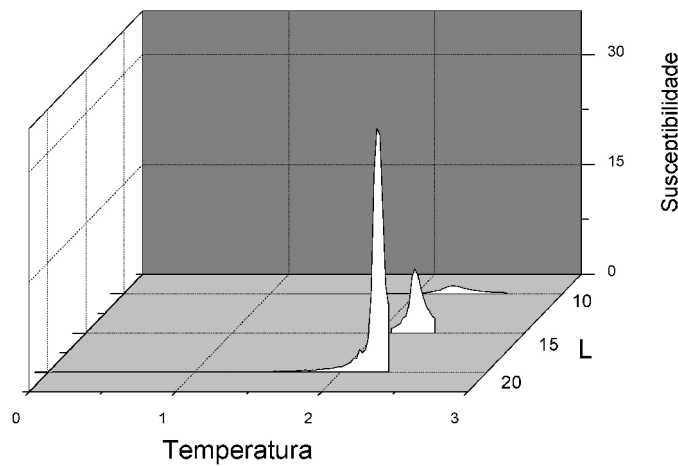
O resultado obtido com a simulação para temperatura crítica no sistema puro foi de  $T_{C=} 4.52$  Este valor está próximo do exato que é de  $T_{C=} 4.51$ <sup>6</sup>. Isso demonstra que os resultados da simulação têm uma melhor precisão quando comparados com as técnicas de campo médio  $T_{C=} 5.84$  e técnicas de campo efetivo  $T_{C=} 5.06$  Traçando as curvas de magnetização (Figura 1) através de campo efetivo (EFF) e simulação computacional para  $p=0$  e para  $\alpha=0.5$ , observamos que as curvas mantêm o mesmo comportamento, apesar de se afastarem nas proximidades do ponto crítico. Note, também, que por se tratar de simulação de sistema finito, o gráfico da magnetização não atinge o valor zero. Sendo assim, para se encontrar o ponto de

temperatura crítica buscamos o ponto de inflexão da curva; ou seja, o máximo de susceptibilidade.

Podemos observar que aumentando o tamanho do sistema, ou seja, o valor de  $L$ , a curva de susceptibilidade fica mais centrada (Figura 2), isto proporciona uma maior precisão ao se estimar a temperatura crítica. Nas Figuras 3, 4 e 5 destacamos as curvas de *susceptibilidade versus temperatura* para diferentes valores de concentração  $p$  e para  $\alpha = 0.5$  quando  $L = 10, 15$  e  $20$ .



*Figura 1. Gráfico da magnetização versus temperatura para o modelo de Ising em uma rede cúbica com  $\alpha = 0.5$  e  $p = 0$ .*



*Figura 2. Curvas de susceptibilidade versus temperatura para o modelo de Ising em um rede cúbica com  $\alpha = 0.5$  e  $p = 0$ .*

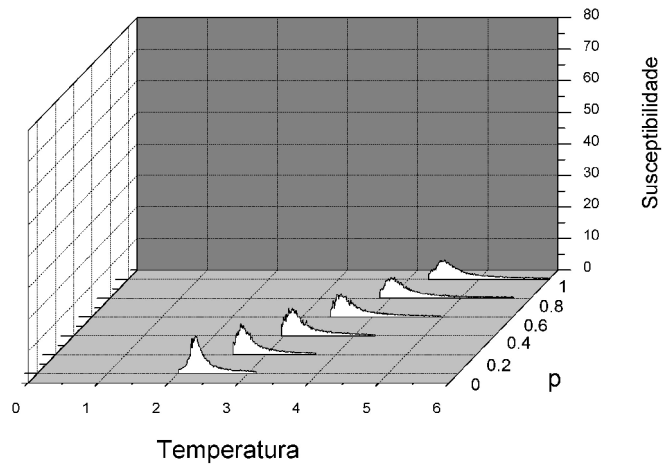


Figura 3. Curvas de susceptibilidade de susceptibilidade versus temperatura para o modelo de Ising em um rede cúbica com  $\alpha = 0.5$  e  $L=10$ .

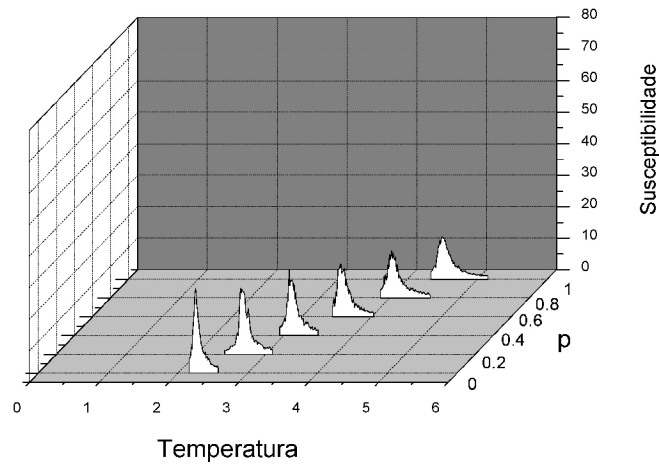


Figura 4. Curvas de susceptibilidade de susceptibilidade versus temperatura para o modelo de Ising em um rede cúbica com  $\alpha = 0.5$  e  $L=15$ .

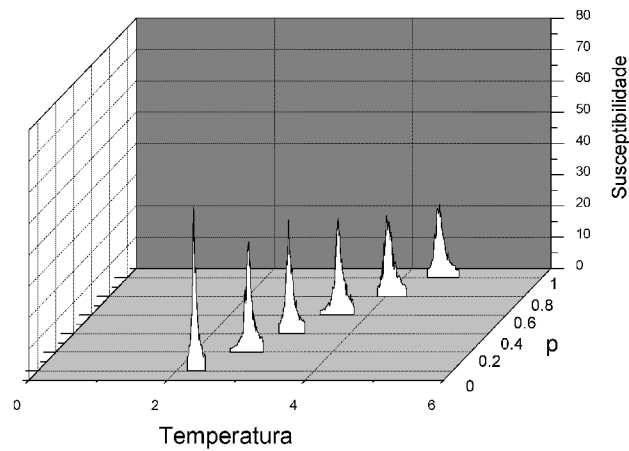


Figura 5. Curvas de susceptibilidade de susceptibilidade versus temperatura para o modelo de Ising em um rede cúbica com  $\alpha = 0.5$  e  $L=20$ .

Por outro lado, tomando os pontos de temperatura crítica ( $T_c$ ) nas curvas de susceptibilidade, traçamos o diagrama de fase para  $\alpha=0.5$  o qual é destacado na Figura 6. Naquela, observamos que o diagrama de fase obtido na simulação comporta-se da mesma forma que o obtido com aproximação de campo efetivo para cluster de dois spin. Dentro do contexto da simulação, nós verificamos que o diagrama de fase para diferentes valores de  $L$  se sobrepõe, indicando que a posição dos pontos de temperatura crítica não são influenciados pelo tamanho da rede. A Figura 7, podemos observar que o gráfico para  $\alpha = 0.2$  que simulação computacional e a aproximação de campo efetivo coincidem no intervalo de  $p=0$  a  $p = 0.2$ . Para  $\alpha = 0.1$  (veja Figura 8) os gráficos possuem o mesmo comportamento, com valores cruzando-se nas vizinhanças de  $p = 0.0$  e  $p = 0.4$ . Levando em consideração a incerteza de 0.01, pode-se inferir que as curvas “praticamente” coincidem no intervalo de  $p = 0.0$  a  $0.4$ .

Gerando as curvas de magnetização versus temperatura para esse valores de concentração notamos que os resultados da simulação se assemelham aqueles obtidos pela teoria de campo com exceção da região onde  $M \sim 0$ , conforme mostra as Figuras 9 e 10.

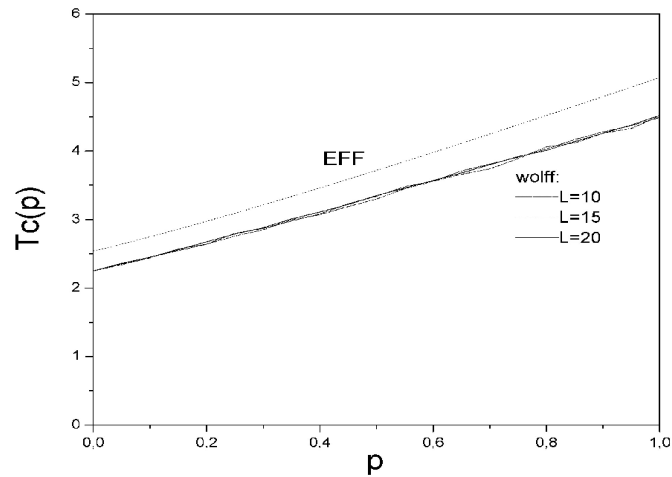


Figura 6. Diagrama de transição de fase  $T_c(p)$  versus  $p$  para o modelo de Ising em um rede cúbica com  $\alpha = 0.5$  e  $L=10, 15$  e  $20$

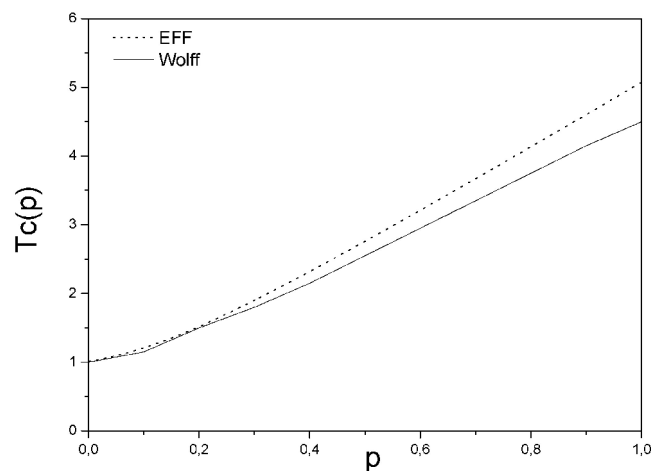


Figura 7. Diagrama de transição de fase  $T_c(p)$  versus  $p$  para o modelo de Ising em um rede cúbica com  $\alpha = 0.2$  e  $L=20$ .

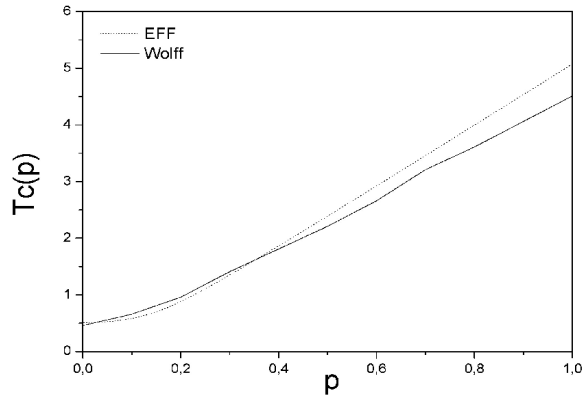


Figura 8. Diagrama de transição de fase  $T_c(p)$  versus  $p$  para o modelo de Ising em um rede cúbica com  $\alpha = 0.1$  e  $L=20$ .

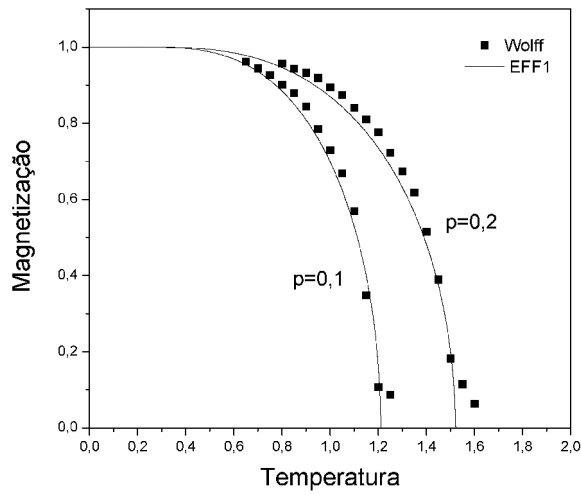


Figura 9- Gráfico da magnetização versus temperatura para o modelo de Ising em uma rede cúbica com  $\alpha = 0.2$  e  $L=20$ .

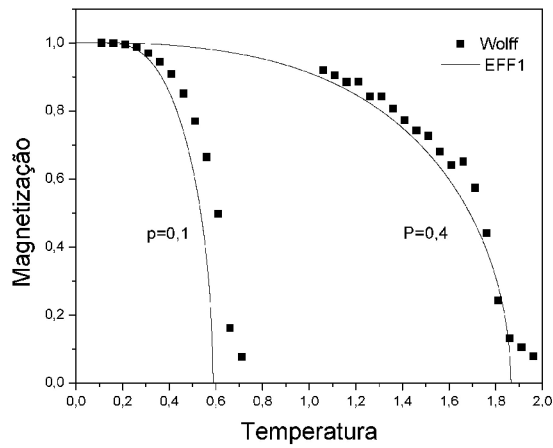


Figura 10. Gráfico da magnetização versus temperatura para o modelo de Ising em uma rede cúbica com  $\alpha = 0.1$  e  $L = 20$ .

#### 4. CONCLUSÕES

Apresentamos, através de um estudo analítico-numérico, a influencia da diluição por ligações mistas para o comportamento termodinâmico do sistema (1) sob regime temperado ditado pela distribuição de probabilidade (2), considerando valores de  $\alpha \geq 0$ . Dentro deste contexto, obtivemos resultados satisfatórios usando o algoritmo de Wolff e mostramos que a técnica utilizada para a simulação Monte Carlo é apropriada para tratar o problema *Mixed-bond*. Observamos, também, que a teoria de campo efetivo, para alguns valores particulares de  $\alpha$ , são similares aos obtidos pela técnica de Monte Carlo. O que demonstra ser a técnica de teoria de campo efetivo capaz de discutir, sob alguns aspectos, em pé de igualdade com a técnica de Monte Carlo.

#### 5. AGRADECIMENTOS

Os autores J. B. Santos Filho e N. O. Moreno agradecem o apoio parcial das agências CAPES e CNPq, respectivamente.

- 
1. WOLFF, U. *Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems*. Phys. Rev. Lett. 62, #4, 361-364, 1989.
  2. SWENDSEN, R. H.; WANG, JIAN-SHENG. *Nonuniversal Critical Dynamics in Monte Carlo Simulations*. Phys. Rev. Lett. 58, #4, 86-88, 1987.
  3. MALETTA, H.; AEPPLI, G.; S. M. Shapiro. Phys. Rev. Lett. 48, 1490, 1982.
  4. JANKE, W.; BERCHE, P. E.; CHATELAIN, C.; BERCHE, B. *Quenched disorder distributions in three-dimensional diluted ferromagnets*. Em forma de preprint, 2003. (arXiv: cond-mat/0304642v1 28 de abril 2003)
  5. ZAMORA, Ligia E., ALCÁZAR G. A. P., and BOHÓRQUEZ A., W. *Phase diagrams of the diluted and random-bond Ising model*. Phy. Rev. B Vol 51 n. 14 (1995).
  6. DOMB C & Green, M. S. 1976. *Phase Transitions and Critical Phenomena*, ed. por C. Domb e M. S. Green, (Academic, London).