

MÉTODO DE MONTE CARLO APLICADO AO MODELO DE ISING SUPERANTIFERROMAGNÉTICO

INTRODUÇÃO

O método de Monte Carlo (MMC) é um método estocástico, muito utilizado em simulações computacionais. Nesse trabalho simulamos o modelo de Ising (MI) superantiferromagnético em uma rede quadrada. Para isso, utilizamos o algoritmo de Metropolis, um dos mais conhecidos dentre os algoritmos que utilizam o princípio do MMC.

METODOLOGIA

Após realizarmos um estudo do MMC com o algoritmo de Metropolis, desenvolvemos programas em Fortran 95 para simular o comportamento da magnetização por spin e energia interna no MI com interação antiferro(AF), que é dado pelo Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j$$

Onde assumimos $J < 0$ e a soma é feita sobre os segundos vizinhos da rede.

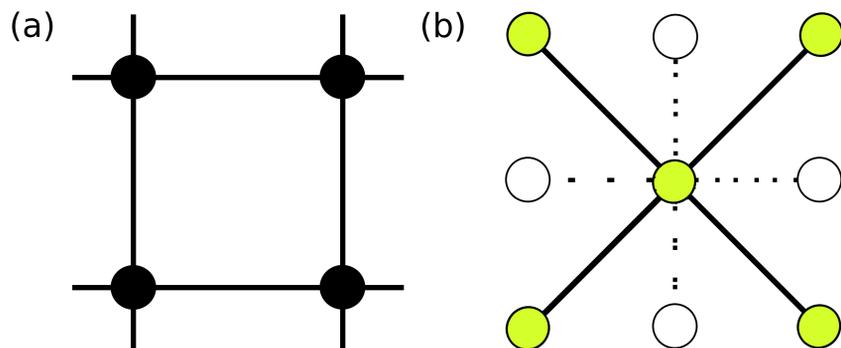


Figura 1: Geometria de rede quadrada (a) e número de coordenação de uma rede quadrada (b), sendo os primeiros vizinhos representados por linhas pontilhadas e os segundos vizinhos representados por linhas cheias.

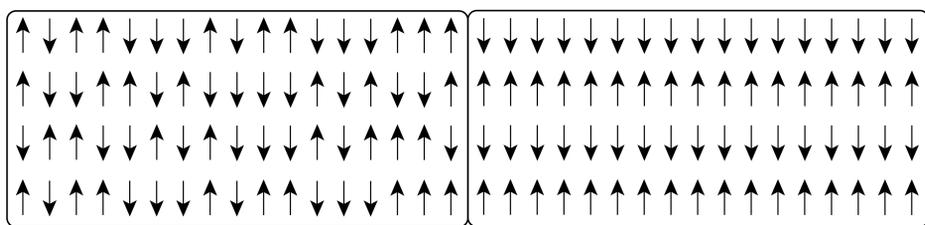


Figura 2 - Representação das fases paramagnética (esquerda) e superantiferromagnética (direita).

Na figura 2 temos a ilustração do algoritmo de Metropolis em forma de fluxograma.

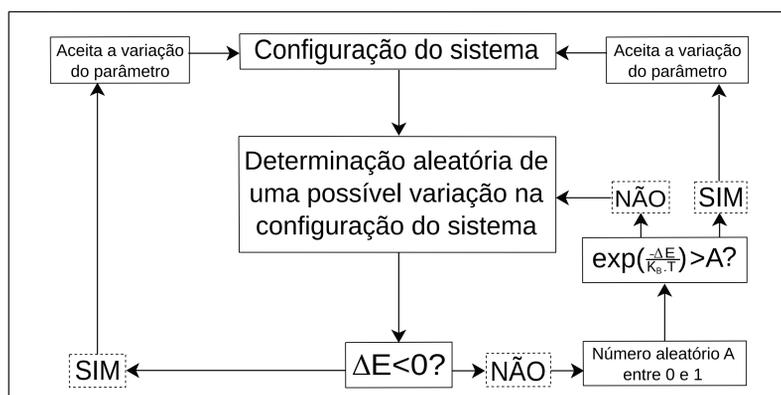


Figura 3 - Fluxograma do algoritmo de Metropolis

Utilizamos como comparação para o sistema que simulamos, a solução exata da rede quadrada proposta por Lars Onsager, e a Teoria de Campo Médio (TCM), que é uma teoria que considera a T_c como sendo o número de coordenação (z), que é dado pelo número de primeiros vizinhos.

RESULTADOS

Apresentamos os resultados obtidos através do MMC para a rede quadrada, comparando eles com TCM e a solução exata.

Para as simulações foram realizadas 100 milhões de PMC para cada temperatura, em uma rede 100x100 spins.

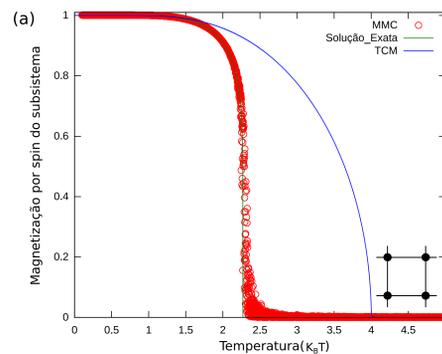


Figura 4 - a) A T_c exata é igual a 2.27 e as simulações mostram a transição em aproximadamente 2.35.

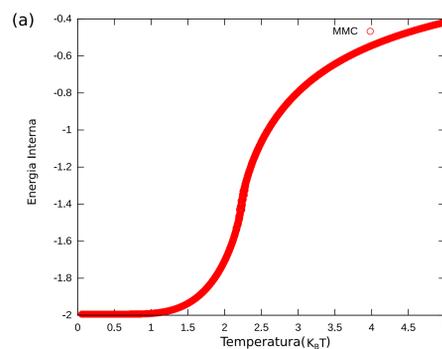


Figura 5 - Podemos perceber uma mudança de comportamento da energia interna na T_c .

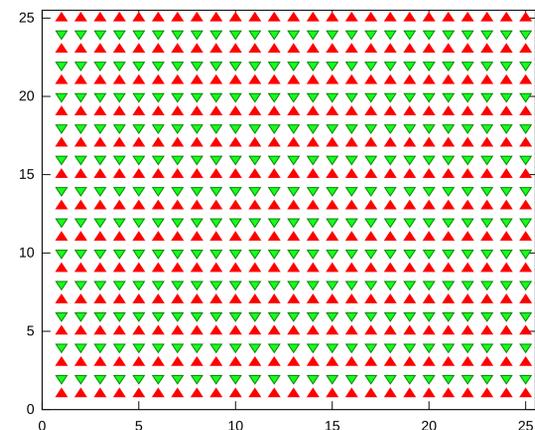


Figura 6 - A imagem mostra as configurações dos spins na temperatura de 0.01 (representando o estado fundamental).

CONCLUSÕES

Com base nos resultados obtidos, conseguimos perceber que o princípio do MMC aplicado no algoritmo de Metropolis é uma poderosa ferramenta para descrever o comportamento de sistemas magnéticos clássicos apresentando resultados com grande precisão.

Com este trabalho foi possível obter noções básicas de mecânica estatística e termodinâmica. Assim, conseguimos perceber o quão úteis são os métodos estocásticos e quão precisos eles podem ser.

REFERÊNCIAS

- Kadanoff, L. P., *J. Stat. Phys.* 137 (2009) 777.
 Newman, M. E. J., e Barkema, G. T., *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Oxford: Clarendon Press, 1999.
 Salinas, S. R. A., *Introdução à Física Estatística*. São Paulo: Edusp, 2005.