

SILVEIRA; Michel Xisto Silva¹, THOMAS; Christopher²

RESUMO

As propriedades magnéticas de materiais são objetos de estudos devido às aplicações tecnológicas que proporcionam, e também à compreensão da Física da Matéria Condensada. Para estudar tais propriedades, podem ser utilizados modelos que representam as estruturas dos materiais. Este trabalho tem como objetivo apresentar e discutir o modelo de Ising antiferromagnético. O modelo foi implementado por meio de modelagem computacional, com a utilização do método de Monte Carlo e o algoritmo de Metropolis. O sistema estudado foi uma rede quadrada bidimensional com condições de contorno periódicas. A rede é composta por sítios com posições bem definidas que possuem um momento magnético cada, representado por um spin S . O spin pode ter o estado $+1$ (apontado para cima) ou estado -1 (apontado para baixo) e interagir com seus primeiros e segundos vizinhos. Na rede quadrada, o primeiro vizinho está ao longo da lateral do quadrado, enquanto o segundo vizinho está na diagonal do mesmo. A energia do sistema é representada pelas interações de troca entre os spins, J_1 e J_2 , devido as interações entre os primeiros e os segundos vizinhos, respectivamente. Para o estudo em questão, foi tomado $J_1 = -1$ fixo e obtido o diagrama de fases em função da interação J_2 e da temperatura T , possibilitando a análise das diferentes fases magnéticas do sistema. No intervalo de $J_2 = [0; -1]$, o sistema se encontra na fase paramagnética a altas temperaturas e em uma fase ordenada antiferromagnética a baixas temperaturas, caracterizado por uma transição de fase de segunda ordem. A baixas temperaturas e J_2 no intervalo de 0 a $-0,5$, o sistema está na fase Néel e para J_2 de $-0,5$ a -1 o sistema está na fase colinear. Estas duas fases antiferromagnéticas se diferenciam pelo formato da estrutura de spins: enquanto na fase Néel os primeiros vizinhos possuem spins opostos e os segundos vizinhos possuem spins paralelos ao spin central, na fase colinear a estrutura é formada por colunas (linhas), onde todos os sítios de uma coluna (linha) possuem spins para cima e os sítios da coluna (linha) subsequente possuem spins para baixo. As estruturas se repetem até preencherem toda a rede. Existe uma transição de primeira ordem entre estas fases ordenadas citadas. É possível compreender o comportamento de grandezas termodinâmicas, tais como magnetização, energia interna e calor específico conforme há variação de temperatura e da interação J_2 (OLIVEIRA, 2012). Da parte da solução numérica, foi observado que aumentar o número de passos Monte Carlo resulta em gráficos com curvas mais suaves e isso se dá pelo fato dos valores representarem as médias em função da quantidade de passos. A modelagem computacional mostrou ser uma ferramenta poderosa e conforme foi refinado o programa, o custo computacional foi melhorado. (KOTZE, 2008).

PALAVRAS-CHAVE: Física da matéria condensada, Modelo de Ising, Antiferromagnetismo

¹ Universidade do Porto, xisto.michel@gmail.com

² Universidade Federal do Rio Grande do Sul, chris@if.ufrgs.br