

UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Denilson Carvalho Resende

**Monte Carlo em redes de Spins aplicado a estruturas
percolantes.**

Juiz de Fora-MG

2016

Denilson Carvalho Resende

**Monte Carlo em redes de Spins aplicado a estruturas
percolantes.**

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física da Universidade Federal de Juiz de Fora, como requisito parcial para obtenção do grau de Doutor.

Orientador: Prof. Dr. Sócrates de Oliveira Dantas.

Juiz de Fora-MG

2016

Resende, D. C.

Monte Carlo em redes de Spins aplicado a estruturas percolantes /
Denilson Carvalho Resende. – 2016. 87 f.: il.

Tese (Doutorado em Física) – Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz
de Fora, 2016.

1. Magnetismo
2. Dinâmica de Spins
3. Sistemas percolantes
4. Redes quadradas percolantes
5. Relaxação lenta

CDU 87

Denilson Carvalho Resende

Monte Carlo em redes de Spins aplicado a estruturas percolantes.

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física da Universidade Federal de Juiz de Fora, como requisito parcial para obtenção do grau de Doutor.

Aprovada em 10 Março de 2016

Prof. Dr. Sócrates de Oliveira Dantas
Orientador - DF/UFJF

Prof. Dr. Sidiney de Andrade Leonel
DF/UFJF

Prof. Dr. Fábio Zappa
DF/UFJF

Prof. Dr. Vitor Rafael Coluci
FT-UNICAMP/Limeira

Prof. Dr. Francisco Carlos Lavarda
UNESP/Baurú

RESUMO

Este trabalho consiste em estudar sistemas magnéticos percolantes bidimensionais e tridimensionais fora do equilíbrio com um parâmetro de ordem conservado - o nosso parâmetro de ordem é a magnetização total. Estes estudos estarão restritos aos processos que ocorrem a intervalos de tempo (por tempo entendemos o número de passos no processo de simulação) próximos ao início da simulação. O comportamento dos sistemas no início da evolução temporal caracteriza ou não os sistemas como possuindo relaxação lenta. O nosso entendimento do que seja percolação relaxação lenta estão descritas no texto da tese. As simulações que estaremos efetuando levam em conta processos estocásticos ou seja, processos tipo Monte Carlo. Através do mapeamento do comportamento da energia total do sistema e/ou outra propriedade estrutural como fronteiras de aglomerados, verificaremos se os sistemas estudados possuem comportamento fractal ou não. Veremos que existe uma relação íntima entre o comportamento fractal e a natureza da distribuição de spins no sistema. Os sistemas magnéticos mencionados acima, são gerados com uma certa probabilidade de distribuição dos spins na rede, associadas às respectivas probabilidades de percolação (p_c) já determinadas na literatura ou seja: no caso das redes bidimensionais quadradas temos $p_c = 0,5927$ e para as cúbicas simples $p_c = 0,3116$. Veremos que ambos os sistemas (bi ou tridimensionais) possuem o comportamento fractal e relaxação lenta, com o caso bidimensional apresentando situações que não podem ser caracterizadas desta forma enquanto os tridimensionais apresentando relaxação somente relaxação lenta. Gostaria de deixar registrado de pronto, que este trabalho é inédito pois não existe relato na literatura, até o momento, do estudo de sistemas tridimensionais da forma que efetuamos. Somasse a este fato, a descrição inovadora de uma metodologia de abordagem de um problema que não possui transição de fase a temperatura finita.

ABSTRACT

This work is to study two-dimensional and three-dimensional magnetic systems percolating out of balance with an order parameter maintained - our order parameter is the total magnetization. These studies are restricted to the processes that occur at intervals of time (time mean the number of steps in the simulation process) near the start of the simulation. The behavior of systems at the beginning of the temporal evolution features or not systems as having slow relaxation. Our understanding of what slow relaxation and percolation are described in the text of the thesis. The simulations that we will be making take into account stochastic processes namely processes like Monte Carlo. Through the total energy of the system's behavior mapping and / or other structural property as clusters of borders, we check whether the studied systems have fractal behavior or not. We shall see that there is an intimate relationship between the fractal behavior and the nature of the distribution of spins in the system. The magnetic systems mentioned above are generated with a certain probability distribution of the spins in the network, associated with the respective probabilities of percolation (p_c) already determined in the literature that is, in the case of square two-dimensional networks have $p_c = 0.5927$ and the simple cubical $p_c = 0.3116$. We will see that both systems (two- or three-dimensional) have fractal behavior and slow relaxation, with the two-dimensional case presenting situations that can not be characterized thereby presenting three-dimensional relaxation while only slow relaxation. I would like to place on record ready, this work is novel because there is no report in the literature to date, the three-dimensional systems to study the way we make. Added up to this fact, the innovative description of a methodological approach to a problem that does not possess phase transition at finite temperature.

Dedico este trabalho à minha esposa (Arlete) e filhas (Gabriela e Mariana).

AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer a Deus por me oferecer oportunidades de estar um pouco mais perto dele através de cada pequena coisa que faço e sou.

Agradeço a meus pais (Regina (in memoriam) e Paulo) que em toda sua humildade e perseverança souberam me mostrar que o maior dom é estar aqui neste momento.

A minha esposa (Arlete) que soube a cada dia compreender que era importante para mim, e minhas duas filhas (Gabriela e Mariana) que me mostraram mesmo sem saber o que é amar de verdade (mas vocês três são muito, mas muito mais importante que tudo isso, amo vocês).

Ao meu orientador (Sócrates) por acreditar mesmo sabendo que seria difícil a jornada (mas conseguimos!) e, levando a certeza de que poderão haver outros futuros trabalhos, este foi apenas o fim de uma das muitas jornadas futuras.

À Capes por seu investimento e da importância dele para eu conseguir completar meu trabalho.

À Universidade Federal de Juiz de Fora, por existir aqui neste local, isso fez certamente muita diferença, para que eu possa dar prosseguimento em minha caminhada.

Agradeço ao meu país em nome do ex-presidente (LULA).

Não poderia deixar de agradecer a cada amigo(a) que fiz neste período, saibam que cada um de vocês tiveram papel primordial nesta caminhada, citar seus nomes seria um risco, em função da quantidade e da importância, mas fiquem com a certeza que os levarei para sempre um porção de cada um em minha jornada.

Gostaria de agradecer a cada professor do departamento de física da UFJF, pelos conselhos, dicas, e papos estimulantes!

Gostaria de agradecer a duas figuras muito especiais em minha vida acadêmica: Ao mestre Ademar Barbosa Guimarães, certamente atribuo a você grande parte da minha caminhada científica e formação em ciência, certamente aprendi demais de como ser um mestre em sala de aula, bem como todo meu sucesso profissional, que começou sob sua contribuição e muitas outras e você sabe quais são! Outra figura, é o querido amigo das horas difíceis, professor da Universidade Federal de São João Del Rei Dr. André Flávio Soares Ferreira Rodrigues, com-

panheiro mais que um agradecimento vou te dizer, em suas dificuldades tenha certeza que em minha porta é seu caminho mais certo.

Agradeço ao funcionário Domingos da secretaria da pós-graduação, companheiro, obrigado por toda dedicação, saiba que és uma inspiração caso um dia venha trabalhar como funcionário público, você é o cara!

Ao amigo Caio (pastor Caio) confesso que de início tive até medo de você(risos), mas certamente Deus te colocou em meu caminho, e agora posso te dizer com serenidade, "sou a nano partícula do elétron(risos)! na dimensão dos papos de fim de noite nas sextas" obrigado.

Sempre agradecemos àqueles que estão próximos e as vezes esquecemos um pouco do passado, da trajetória, por isto gostaria de deixar aqui registrado meus agradecimentos a todas as pessoas, encontradas em todo o percurso escolar, pessoas estas as vezes anônimas em nossa memória devido ao tempo e a vezes por pouca vivência, que vão desde a auxiliar de serviços gerais (que na época eram chamadas de faxineiras) de cada escola em que estudei com suas respectivas merendeiras, e é claro a todos os professores que tive em toda a minha vida, uns com mais intensidade outros com menos, uns até esquecidos (nomes) em minha memória, mas nunca esquecidos do coração.

Também gostaria de deixar registrado meus profundos agradecimentos ao Sr. Paulo Roberto Soares dono da empresa Viação progresso Ltda, que mesmo sem saber tinha como funcionário um motorista que muitas e muitas vezes deixou de me cobrar a passagem em seu ônibus para que eu pudesse ir a escola, saiba agora que aquele menino que ele ajudou lá na roça, depois de 29 anos está se tornando um doutor em ciências físicas, meu muito obrigado!.

Se você não estiver aqui, entenda!, não foi por falta de carinho mas de esquecimento, mesmo não estando aqui estampado de alguma forma seu nome, de certo estarão claramente estampados em meu coração.

A razão! é como uma equação
de matemática, tira a prática
de sermos um pouco mais
um pouco mais de nós
:... a nossa sina é se ensinar,
a nossa sina é!.

Teatro mágico

LISTA DE FIGURAS

| | | |
|-------------|---|----|
| Figura 1.1 | Percolação por ligação que pode ser verificado no lado esquerdo e, por sítios representadas no lado direito da figura a partir de uma malha 5x5 representada bidimensionalmente. | 19 |
| Figura 1.2 | Percolação por sítios e ligações a partir de uma malha 8x8 representada bidimensionalmente. | 19 |
| Figura 1.3 | Percolação em uma rede bidimensional quadrada, contendo 128×128 sítios, construída com probabilidade $p = p_c$ | 22 |
| Figura 1.4 | Comportamento da energia, com abordagem a) SV e b) SD, considerando somente interações entre primeiros vizinhos para redes bidimensionais utilizando o processo de "non linear curve fitting" A temperatura do sistema, em unidades de J , é $T = 4.0$ | 24 |
| Figura 1.5 | Fluxograma esquemático do algoritmo de Metrópolis | 36 |
| Figura 1.6 | Fluxograma esquemático do algoritmo de Kawasaki | 38 |
| Figura 1.7 | Fluxograma esquemático do algoritmo de Glauber | 39 |
| Figura 1.8 | Gráfico exibindo a probabilidade para o caso de máxima variação de energia entre duas configurações distintas de spins. Para temperatura nula a probabilidade é máxima e para temperatura infinita a probabilidade é 0,5. Para um determinado valor de temperatura (exemplo no gráfico $T=4 \frac{J}{K_B T}$), a região em verde mostra qual seria os valores de probabilidade de aceitação quando a energia cresce entre duas configurações distintas de spins. | 41 |
| Figura 1.9 | O quadro à esquerda ilustra a obtenção dos aglomerados com uma passagem inicial procurando por primeiros vizinhos. O lado direito temos o resultado final após a procura por aglomerados vizinhos. | 42 |
| Figura 1.10 | Figura esquemática representando os aglomerados de Fortuyn-Kasteleyn. | 43 |
| Figura 2.1 | Distribuição inicial de uma rede bidimensional quadrada contendo 128×128 spins para um sistema percolante com $p = p_c = 0,592746$. Os pontos negros | |

| | | |
|------------|---|----|
| | indicam spin para cima e os pontos brancos (dentro da rede) significam spin para baixo. | 45 |
| Figura 2.2 | Distribuição inicial de uma rede tridimensional cúbica contendo $32 \times 32 \times 32 = 32768$ spins para um sistema percolante com $p = p_c = 0,3116$. Os pontos negros indicam spin para cima e os pontos brancos (dentro da rede) significam spin para baixo. | 45 |
| Figura 2.3 | Variação de energia representada no gráfico à esquerda, e da magnetização por spin representada no gráfico à direita, de uma rede bidimensional quadrada contendo 128×128 spins para um sistema percolante com $p = p_c$. A temperatura do sistema é $T = 4.5J$, foi levada em consideração a dinâmica de Kawasaki e interações até segundos vizinhos. | 46 |
| Figura 2.4 | Variação de energia representada na parte (a) e da magnetização representada na parte (b), de uma rede tridimensional cúbica simples contendo $32 \times 32 \times 32 = 32768$ spins para um sistema percolante com $p = p_c$. A temperatura do sistema é $T = 5.0J$, foi levada em consideração a dinâmica de Kawasaki e interações até segundos vizinhos. | 47 |
| Figura 2.5 | A esquerda podemos avaliar o comportamento suave da variação da energia à medida que aumentamos o número de spins no sistema. Por outro lado a direita temos um gráfico do tempo de simulação por spin para a obtenção das curvas à esquerda. Temperatura do sistema $T = 2J$, interações até primeiros vizinhos e dinâmica de Kawasaki. | 48 |
| Figura 2.6 | Comportamento da energia lado esquerdo e do perímetro relativo à direita na figura, representando a interação e mudança de orientação do spin na abordagem SpV e em preto e SpD em vermelho, para sistemas bidimensionais. A temperatura do sistema é $T = 3.5J$, com interações até primeiros vizinhos. | 50 |
| Figura 2.7 | Comportamento da energia lado esquerdo e do perímetro relativo à direita na figura, representando a interação e mudança de orientação do spin na abordagem SpV em preto e SpD em vermelho para sistemas tridimensionais. A temperatura do sistema é $T = 3.5J$, com interações até segundos vizinhos. | 51 |
| Figura 3.1 | Figuras mostrando a distribuição de spins em três instantes distintos (em (a) $PMC = 1 \times 10^4$, em (b) $PMC = 8 \times 10^4$ e em (c) $PMC = 697 \times 10^4$) na situação de troca de spins vizinhos (SpV) e interações de primeiros vizinhos (Prim- | |

| | | |
|------------|--|----|
| | Viz). A temperatura do sistema é $T = 5.0J$ | 55 |
| Figura 3.2 | Figuras mostrando a distribuição de spins em três instantes distintos (em (a) $PMC = 2 \times 10^4$, em (b) $PMC = 8 \times 10^4$ e em (c) $PMC = 697 \times 10^4$) na situação de troca de spins vizinhos (SpV) e interações até segundos vizinhos (Seg-Viz). A temperatura do sistema é $T = 5.0J$ | 56 |
| Figura 3.3 | Figuras mostrando a distribuição de spins em três instantes distintos (em (a) $PMC = 2 \times 10^4$, em (b) $PMC = 8 \times 10^4$ e em (c) $PMC = 697 \times 10^4$) na situação de troca de spins distantes (SpD) e interações de primeiros vizinhos (Prim-Viz). A temperatura do sistema é $T = 5.0J$ | 57 |
| Figura 3.4 | Figuras mostrando a distribuição de spins em três instantes distintos (em (a) $PMC = 2 \times 10^4$, em (b) $PMC = 8 \times 10^4$ e em (c) $PMC = 697 \times 10^4$) na situação de troca de spins distantes (SpD) e interações de segundos vizinhos (Seg-Viz). A temperatura do sistema é $T = 5.0J$ | 58 |
| Figura 3.5 | Figuras mostrando a variação do perímetro relativo em função dos PMC, a primeira linha de gráficos se refere a troca de orientação envolvendo spins vizinhos (SpV) (a) e (b), enquanto a segunda coluna de gráficos está associada à troca de orientação envolvendo spins distantes (SpD) (c) e (d). As flexas vermelhas verticais indicam onde os instantâneos das Figuras 3.1, 3.2, 3.3 e 3.4 foram tirados. Gráficos da coluna à esquerda (a) e (c) interações de primeiros vizinhos, ao passo que gráficos à direita (b) e (d) interações até segundos vizinhos. A temperatura do sistema é $T = 5.0J$ | 59 |
| Figura 3.6 | Figuras mostrando a distribuição de spins quando existe influência externa em três instantes distintos (em (a) $PMC = 2 \times 10^4$, em (b) $PMC = 8 \times 10^4$ e em (c) $PMC = 697 \times 10^4$) na situação de troca de spins distantes (SpD) e interações de segundos vizinhos (Seg-Viz). Compare estas figuras com as Figuras 3.4. A temperatura do sistema é $T = 5.0J$ | 60 |
| Figura 3.7 | Comportamento da energia considerando somente interações entre primeiros vizinhos para redes bidimensionais: a) a simulação completa de trocas SpV e b) escolha de uma parte do gráfico (a) para demonstrar como é feito o ajuste "non linear curve fitting". A temperatura do sistema, em unidades de J , é $T = 4.0$ | 61 |
| Figura 3.8 | Comportamento da energia e do tamanho da fronteira na abordagem SpV, considerando somente interações entre primeiros vizinhos para redes bidimensi- | |

| | | |
|-------------|--|----|
| | onais utilizando o processo de "non linear curve fitting". A temperatura do sistema, em unidades de J , é $T = 4.0$ | 62 |
| Figura 3.9 | Comportamento da energia e do tamanho da fronteira na abordagem SpD, considerando somente interações entre primeiros vizinhos para redes bidimensionais utilizando o processo de "non linear curve fitting". A temperatura do sistema, em unidades de J , é $T = 4.0$ | 63 |
| Figura 3.10 | Evolução do sistema ao longo de PMC para: (a) configuração inicial, (b) 10000 PMC, (c) 22370 PMC e (d) 32768 PMC, com abordagem SpV e somente interações entre primeiros vizinhos para redes bidimensionais. A temperatura do sistema, em unidades de J , é $T = 4.0$ | 64 |
| Figura 3.11 | Evolução do sistema ao longo de PMC para: (a) configuração inicial, (b) 10000 PMC, (c) 22370 PMC e (d) 32768 PMC, com abordagem SpD e somente interações entre primeiros vizinhos para redes bidimensionais. A temperatura do sistema, em unidades de J , é $T = 4.0$ | 65 |
| Figura 3.12 | Comportamento da energia, com abordagem a) SpV e b) SpD, considerando somente interações entre primeiros vizinhos para redes tridimensionais utilizando "non linear curve fitting". A temperatura do sistema, em unidades de J , é $T = 4.0$ | 66 |
| Figura 3.13 | Evolução do tamanho da fronteira, com abordagem a) SpV e b) SpD, considerando somente interações entre primeiros vizinhos para redes tridimensionais utilizando "non linear curve fitting". A temperatura do sistema, em unidades de J , é $T = 4.0$ | 67 |
| Figura 3.14 | Evolução do sistema ao longo de PMC para: na parte superior - o comportamento de energia e perímetro e na parte inferior - o comportamento da magnetização relativa em plano externo e interno da estrutura. Somente interações entre primeiros vizinhos para redes tridimensionais são consideradas. A temperatura do sistema, em unidades de J , é $T = 5.0$ | 68 |
| Figura 3.15 | Evolução do sistema ao longo de PMC para: na parte superior - o comportamento de energia e perímetro e na parte inferior - o comportamento da magnetização relativa em plano externo e interno da estrutura. Interações até segundos vizinhos para redes tridimensionais são consideradas. A temperatura do sistema, em unidades de J , é $T = 5.0$ | 69 |
| Figura 3.16 | Evolução do sistema ao longo de PMC para: na parte superior - o compor- | |

tamento do perímetro relativo para o caso tridimensional e na parte inferior - o comportamento perímetro relativo para os casos bi e tridimensional. Os gráficos à esquerda estão relacionados a interações até primeiros vizinhos, enquanto os gráficos à direita levam em consideração interações até segundos vizinhos. A temperatura do sistema, em unidades de J , é $T = 5.0$ para todos os comportamentos exibidos. 70

Figura 3.17 Comportamento de a_2 baseados no parâmetro energia e perímetro, para temperaturas diferentes, e concentração correspondente 5 a 15%, com abordagem SpV e somente interações entre primeiros vizinhos para sistemas bidimensionais. 71

Figura 3.18 Comportamento de a_2 baseados no parâmetros, energia e perímetros, para temperaturas diferentes, e concentração correspondente 20 a 30%, com abordagem SpV e somente interações entre primeiros vizinhos para sistemas bidimensionais. 72

Figura 3.19 Comportamento de a_2 baseados no parâmetros, energia e perímetros, para temperaturas diferentes, e concentração correspondente 35 a 50%, com abordagem SpV e somente interações entre primeiros vizinhos para sistemas bidimensionais. 73

Figura 3.20 A figura (a) representa o comportamento para a constante a_2 para energia e na figura (b), tem-se o comportamento para a constante a_2 para o perímetro, com temperaturas variando de 0.5 a $4.5 \frac{J}{k_B}$. Com abordagem SpV e somente interações entre primeiros vizinhos para sistemas bidimensionais. 73

Figura 3.21 Comportamento de a_2 baseados no parâmetro energia e perímetro, para temperaturas entre 0.5 a $1.5 \frac{J}{k_B}$, e concentração correspondente 5 a 50%, com abordagem SpV e somente interações entre primeiros vizinhos. 74

Figura 3.22 Comportamento de a_2 baseados no parâmetro energia e perímetro, para temperaturas entre 2.0 a $3.0 \frac{J}{k_B}$, e concentração correspondente 5 a 50%, com abordagem SpV e somente interações entre primeiros vizinhos. 75

Figura 3.23 Comportamento de a_2 baseados no parâmetro energia e perímetro, para temperaturas entre 3.5 a $4.5 \frac{J}{k_B}$, e concentração correspondente 5 a 50%, com abordagem SpV e somente interações entre primeiros vizinhos. 75

Figura 3.24 Na figura (3.24(a)) tem-se o comportamento geral de a_2 para o parâmetro energia e na figura (3.24(b)), tem-se o comportamento geral de a_2 para o parâme-

tro perímetro em função da concentração. 76

LISTA DE TABELAS

| | | |
|------------|--|----|
| Tabela 1.1 | Valores da probabilidade crítica de percolação p_c para diversos formatos de estruturas físicas. | 20 |
|------------|--|----|

SUMÁRIO

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1 | INTRODUÇÃO | 17 |
| 1.1 | OBJETIVO | 17 |
| 1.2 | PERCOLAÇÃO | 17 |
| 1.2.1 | Propagação e difusão de epidemias em uma determinada região | 19 |
| 1.2.2 | Modelagem computacional para o estudo e propagação de fogo em florestas | 20 |
| 1.2.3 | Percolação em tintas condutoras | 21 |
| 1.2.4 | Distribuição de óleo ou de gás dentro das rochas porosas em reservatórios de óleo | 21 |
| 1.2.5 | Percolação de uma rede de spins | 22 |
| 1.3 | RELAXAÇÃO LENTA | 23 |
| 1.3.1 | Relaxação lenta da condutividade em silício mesoporoso | 25 |
| 1.3.2 | Relaxação lenta de portadores em poços quânticos do grafeno | 26 |
| 1.3.3 | Relaxação lenta e compactação de sistemas granulares | 27 |
| 1.3.4 | Relaxação lenta em condutância de isolantes amorfos | 28 |
| 1.3.5 | Relaxação lenta da magnetoresistência em estruturas de AlGaAs-GaAs | 29 |
| 1.4 | SIMULAÇÃO MONTE CARLO | 29 |
| 1.5 | TRANSIÇÃO DE FASE PARA UMA REDE DE SPINS | 33 |
| 1.6 | ALGORÍTMOS UTILIZADOS NO TRABALHO | 34 |
| 1.6.1 | Algoritmo de Metrópolis | 34 |
| 1.6.2 | Algoritmo de Kawasaki | 37 |
| 1.6.3 | Algoritmo de Glauber | 37 |
| 1.6.3.1 | Probabilidade de Glauber | 40 |
| 1.6.4 | Algoritmo de Hoshen-Kopelman e Formação de aglomerados | 40 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 2 | METODOLOGIA | 44 |
| 2.1 | ALGO VARIA QUANDO O PARÂMETRO DE ORDEM É CONSERVADO? . | 46 |
| 2.2 | A ESCOLHA PARA O TAMANHO DOS SISTEMAS | 48 |
| 2.3 | TROCA DE ORIENTAÇÃO DE QUAIS SPINS? | 49 |
| 3 | ESTUDOS FUTUROS | 52 |
| 3.1 | INTRODUÇÃO | 52 |
| 3.2 | AÇÃO DE AGENTE EXTERNO | 53 |
| 3.3 | CONCENTRAÇÕES E VARIANDO TEMPERATURA: | 68 |
| 3.3.1 | Sistemas bidimensionais | 70 |
| 3.3.2 | Sistemas tridimensionais | 74 |
| 4 | DISCUSSÃO DOS RESULTADOS | 77 |
| | REFERÊNCIAS | 79 |
| | ANEXO A – ARTIGO PUBLICADO | 83 |

1 INTRODUÇÃO

Magnetismo é um ramo da física que fascinou e ainda fascina muitas pessoas. Qual a criança que não fica maravilhada brincando com ímãs que se atraem ou se repelem dependendo de suas posições relativas por meio de *forças misteriosas* que podem atravessar materiais! Einstein mesmo relata ter ficado maravilhado quando criança brincando com ímãs, limalhas de ferro e bússolas.

1.1 OBJETIVO

O objetivo deste trabalho é estudar estruturas magnéticas percolantes bidimensionais quadradas e cúbica simples fora do equilíbrio, com o parâmetro de ordem conservado, que em nosso caso é a **Magnetização**, nos instantes iniciais de relaxação e observar seu comportamento.

1.2 PERCOLAÇÃO

O termo percolação vem do latim *percolatio* que significa filtragem. Historicamente, o modelo de percolação surge do estudo do fenômeno de transporte de um fluido através de um meio poroso. Por exemplo, o petróleo através de uma rocha, ou a água em um filtro de areia. Formulado no final da década de 50, do século passado, por Broadbent e Hammersley [1], o modelo de percolação concentra-se em descrever o meio poroso, que será visto como uma rede de canais aleatórios, por onde escoar um fluido. Ao contrário do que ocorre com outros modelos probabilísticos para um movimento difusivo (como passeios aleatórios e processo de difusão), não é o movimento em si que é aleatório (num meio fixo), aqui o meio é aleatório, e baseados neste fundamento, pode-se aplicar esta idéia em várias situações que podem ser verificadas em ([2],[3], [4] e [5]) ou em outras que serão citadas um pouco mais abaixo.

O processo de percolação pode ser sintetizado da seguinte forma: suponha que os poros e os canais tenham uma disposição espacial regular, na forma de uma rede de que os poros

são os sítios e os canais são os elos entre os sítios. Um exemplo comum é Z^d ou um de seus subconjuntos, onde $d = 1, 2, 3, \dots$ é a dimensão do meio, e seus elos ligando os sítios vizinhos mais próximos. Suponha que cada canal esteja aberto ou fechado à passagem de um certo fluido e que esta característica seja atribuída de forma aleatória para cada canal.

Seja p a probabilidade de que um certo canal esteja aberto, vamos supor também que seja a mesma para todos os canais, temos assim um modelo de percolação de Broadbend e Hammersley [1]. Eles tinham em mente $d = 2$ ou $d = 3$, mas o modelo faz sentido e é interessante em $d \geq 2$. Em $d = 3$, pode-se imaginar o meio como sendo uma rocha (mergulhada em água), uma placa de rocha (sobre um depósito de óleo), ou ainda uma porção de pó de café numa cafeteira (água quente por cima ou vapor quente por baixo). Em $d = 2$ este seria um modelo para difusão de uma epidemia em uma certa região povoada ou para a passagem de corrente através de um componente eletrônico. Em síntese, percolação é um modelo matemático criado para estudar problemas baseados em meios desordenados, como por exemplo:

- ⇒ Propagação e difusão de epidemias em uma determinada região;
- ⇒ Modelagem computacional para o estudo e propagação de fogo em florestas;
- ⇒ percolação em tintas condutoras;
- ⇒ Distribuição de óleo ou de gás dentro das rochas porosas em reservatórios de óleo;
- ⇒ Percolação de uma rede de spins.

À medida que sítios vizinhos estiverem abertos, estes formarão aglomerados, ou seja, farão parte dos aglomerados abertos. Da mesma forma, ao conjunto de ligações abertas que unem sítios vizinhos denominamos aglomerados de ligações. Sítios e ligações abertas formam os aglomerados na percolação por sítios mais ligações, como podem ser observadas na Figura 1.1 temos exemplos de percolação por ligação e sítios, respectivamente; e na Figura 1.2 um exemplo de percolação por ligação e sítio.

No processo de percolação, o tamanho dos aglomerados depende da probabilidade p (probabilidade de cada sítio estar aberto), a medida que aumenta-se o valor de p temos o aumento do número de sítios abertos o que provoca o aumento do tamanho dos aglomerados. Para $p = 1$ a malha estará toda preenchida por sítios abertos. Um dos interesses da percolação é justamente o menor valor de p para o qual existe um aglomerado de tamanho infinito ou da rede. Esse valor é indicado por p_c ; onde p_c é a probabilidade crítica no limiar de percolação.

Para uma malha quadrada, para a percolação por ligações temos $p_c^{bond} = \frac{1}{2}$, já na percolação por sítios o estimado computacionalmente é $p_c = 0,5927$, abaixo segue tabela com os valores de p_c para alguns tipos de malha e a percolação por sítios ou por ligação baseados nos dados obtidos por Aharony [2]. Entretanto, nossos estudos estarão restritos a redes quadradas e cúbicas,

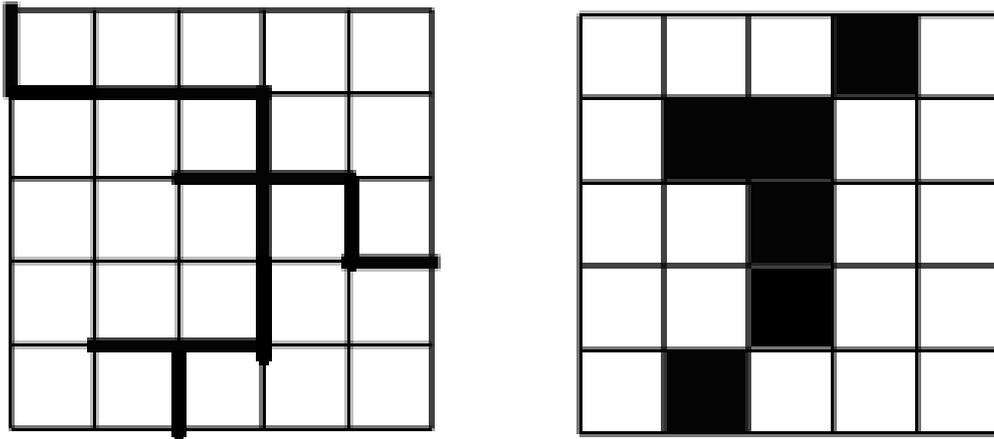


Figura 1.1: Percolação por ligação que pode ser verificado no lado esquerdo e, por sítios representadas no lado direito da figura a partir de uma malha 5x5 representada bidimensionalmente.

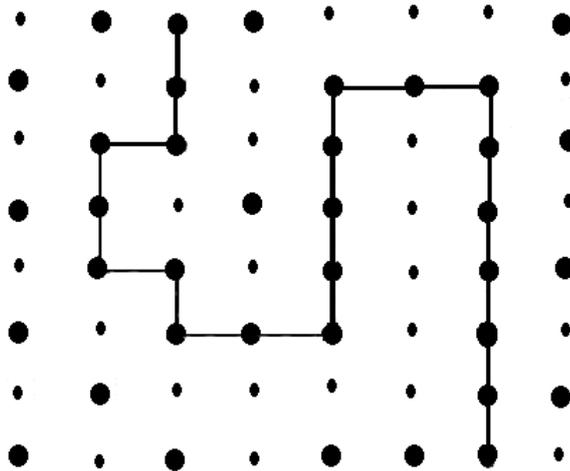


Figura 1.2: Percolação por sítios e ligações a partir de uma malha 8x8 representada bidimensionalmente.

como ver-se-á adiante.

1.2.1 Propagação e difusão de epidemias em uma determinada região

Ao estudarmos a forma de espalhamento de uma determinada epidemia em relação a uma população de uma determinada região, estão envolvidos dois níveis de interação, um microscópico, que se refere às interações entre o agente causador da doença no vetor e no hospedeiro, e um macroscópico, onde o principal fator é a interação entre os indivíduos infectados e os suscetíveis de infecção.

| Malha | Sítio | Ligação |
|-------------------|----------|---------|
| Hexagonal | 0,6962 | 0,65271 |
| Quadrada | 0,592746 | 0,50000 |
| Triangular | 0,50000 | 0,34729 |
| Cúbica Simples | 0,3116 | 0,2488 |
| Hipercúbica D = 4 | 0,197 | 0,1601 |
| Hipercúbica D = 5 | 0,141 | 0,1182 |
| Hipercúbica D = 6 | 0,107 | 0,0942 |
| Hipercúbica D = 7 | 0,089 | 0,0787 |

Tabela 1.1: Valores da probabilidade crítica de percolação p_c para diversos formatos de estruturas físicas.

SOUZA [6], em seu trabalho intitulado Transição de fases em modelos estocásticos para descrever epidemias estuda o modelo de epidemia suscetível-infectado- recuperado (SIR) estocástico e espacialmente estruturado. Nesse modelo, os indivíduos são divididos em três classes: suscetível (S), infectado devido ao contato com um vizinho infectado, e um indivíduo infectado pode recuperar-se espontaneamente. Este modelo exhibe transição de fase em que a doença se espalha e uma fase em que não há espalhamento da doença. Tratando cada par suscetível-infectado como uma conexão através da qual pode haver propagação da epidemia, mostramos que é possível estabelecer uma conexão entre o modelo SIR e o modelo de percolação. Assim, pudemos utilizar métodos da teoria de percolação usual para determinar o limiar de espalhamento epidêmico.

1.2.2 Modelagem computacional para o estudo e propagação de fogo em florestas

Estudar a evolução dos fogos forestais se torna tarefa árdua, uma vez que métodos das ciências experimentais não podem ser utilizados. No entanto, traduzindo o problema para a linguagem da percolação, podemos utilizar o modelo de percolação de sítios, o qual é explicado na tese de LEBENSZTAYN [7], intitulada O modelo de percolação em grafos: Um estudo de condições para a transição de fases. Para este exemplo, a floresta é representada por uma rede quadrada com N sítios. O efeito da desordem é modelado através da ocupação aleatória de uma fração dos sítios da rede. Os sítios estão ocupados por uma árvore, com probabilidade p , $0 \leq p \leq 1$, que representa a densidade de florestação. Em média, pxN sítios estão ocupados e $(1 - p)xN$ sítios estão desocupados.

Segundo BARROSO [8], A propagação do fogo é simulada de acordo com as regras seguintes. Incendeia-se uma fila de árvores na orla esquerda da floresta. Uma árvore começa a arder

se alguma das vizinhas estiver a arder nesse instante. Uma árvore arde durante uma unidade de tempo e uma árvore queimada é equivalente a um sítio sem árvores. O fogo não pode saltar sobre sítios sem árvores e esses sítios não podem arder nem incendiar outros, bloqueando a propagação do fogo. A simulação termina quando o fogo chegar à outra orla da floresta ou quando já não houver árvores a arder. A média sobre várias simulações permite calcular a percentagem de árvores queimadas e a duração do fogo, para cada valor de p .

1.2.3 Percolação em tintas condutoras

Chamamos de compósito a combinação de dois ou mais materiais distintos que formam um terceiro material, no qual seus componentes estão separados em fases. Esse terceiro material forma uma classe de materiais heterogêneos, multifásicos, que podem ser poliméricos ou não. São produzidos artificialmente visando à combinação das melhores propriedades das fases constituintes. Geralmente, uma fase, a matriz, é contínua e envolve a fase dispersa. Ao adicionar certa concentração de algum tipo de carga condutora a uma matriz polimérica, é possível observar que essa matriz, antes isolante, passa a conduzir corrente elétrica. Um compósito condutor apresenta duas fases, uma condutora e a outra isolante.

Esse tipo de sistema exhibe um limiar de percolação. Sendo assim, para compreender o mecanismo de condução nesse compósito condutor utilizamos a teoria de percolação, por possibilitar uma interpretação do comportamento da condução elétrica. Segundo a teoria de percolação, a condutividade elétrica de um compósito é diretamente dependente da concentração de material condutor adicionado a matriz isolante, bem como de quanto condutivo é esse material. A probabilidade de percolação nada mais será que a probabilidade de uma determinada região estar conectada com o resto, compondo, dessa forma, uma trilha condutora.

1.2.4 Distribuição de óleo ou de gás dentro das rochas porosas em reservatórios de óleo

Um dos modelos mais comuns para análise do comportamento de óleos ao entrar em contato com regiões porosas baseia-se numa versão simples de percolação orientada. Para maiores informações sobre este tipo de percolação, sugero a leitura da obra de STOVER [9], intitulada *Oriented Percolation Model*. A espécie de fluxo e o tamanho do derrame dependem da porosidade do solo, que determina a probabilidade de percolação. O comportamento do sistema depende desta probabilidade. O modelo é caracterizado por dois regimes: fluxos contínuos para porosidades elevadas e fluxos superficiais para porosidades baixas.

1.2.5 Percolação de uma rede de spins

A percolação de uma rede de spins está relacionada com um aglomerado geométrico, no qual um spin que está na borda esquerda da rede e um spin que está na borda direita, ou um spin na borda superior da rede a um spin que está na borda inferior pertençam ao mesmo aglomerado geométrico, como representado na Fig. 1.10. Outro exemplo de percolação é a passagem de um fluido em um meio poroso [10]. Estando o meio dividido em sítios (tal como o modelo de Ising) que podem ser sólidos, no qual o fluido não pode passar, e poros, nos quais é permitida a passagem do fluido. Se há uma conexão contínua entre os poros da borda esquerda com a borda direita, ou da borda superior com a borda inferior, o fluido poderá passar pelo meio poroso.

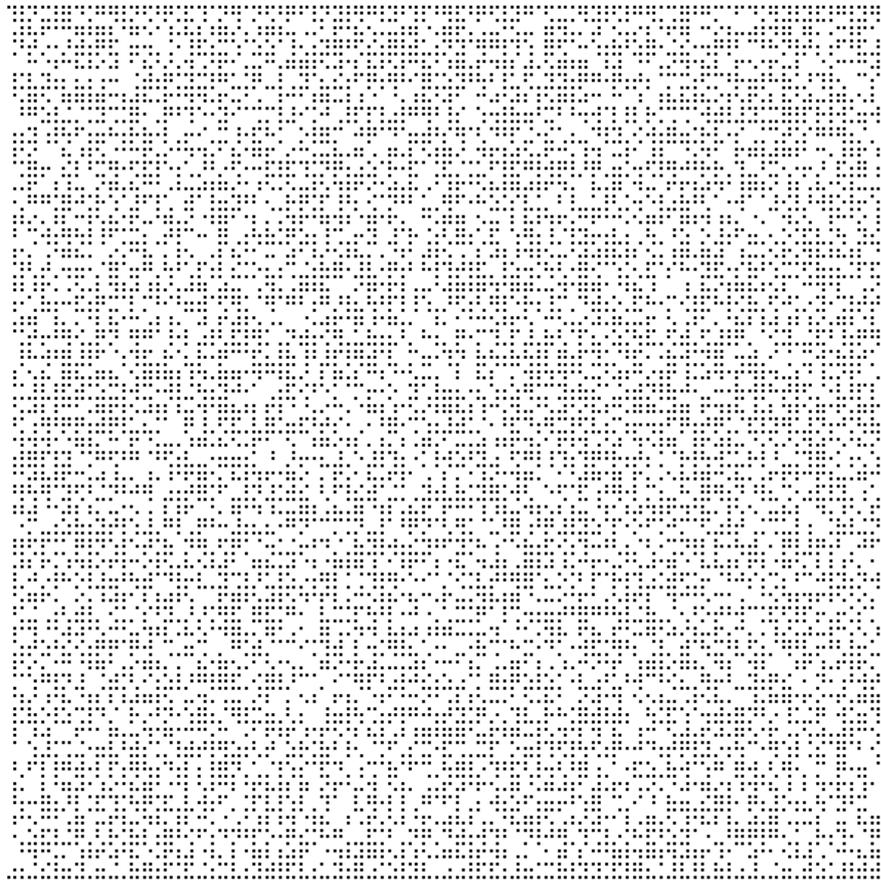


Figura 1.3: Percolação em uma rede bidimensional quadrada, contendo 128×128 sítios, construída com probabilidade $p = p_c$.

Desta forma, para que a percolação ocorra é necessário que o sistema possua um número suficiente de sítios com a mesma orientação para o caso de redes de spin, e de poros em um meio poroso, o que leva à existência de um valor crítico para a percolação. Para uma rede quadrada como as estudadas na seção 1.2 tabela 1.1, podemos analisar o valor da percolação crítica da seguinte maneira [11]. Cada spin da rede terá uma probabilidade p de possuir a orientação

+1, e $1 - p$ de possuir a orientação -1 . Fixando o valor de p e associando aos spins um valor randômico r , se $r \leq p$ o spin terá orientação positiva, se $r \geq p$ o spin terá orientação negativa. Para um determinado valor de p nós verificamos se a rede apresenta uma percolação, fazemos esta verificação N vezes para cada valor de p , assim definimos a probabilidade de percolação:

$$\langle P \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N c_i \quad (1.1)$$

onde c_i possui o valor 1 ou 0, representado desde que para cada i a rede percola ou não, respectivamente.

Realizando este teste para redes de vários tamanhos [11], é possível observar um valor de p , que chamamos de p_c , no qual $\langle P \rangle$ passa de um valor nulo para um valor próximo a 1 para redes grandes, 1000 spins. No limite termodinâmico ($L \rightarrow \infty$) o valor de p_c , como foi mostrado na tabela 1.1 é:

$$p_c = 0,592746 \quad (1.2)$$

Como mencionado na seção 1.6.4, Coniglio e Klein estabeleceram uma relação entre T_c e a formação de um aglomerado de Fortuin-Kasteleyn, esta relação é justamente a percolação da rede.

1.3 RELAXAÇÃO LENTA

Recentemente Paulo Murilo [12] realizou simulações Monte Carlo, onde seu foco de estudo estava baseado nos trabalhos de Albuquerque e Gomes [13]. O objetivo era observar a relação entre relaxação lenta e dimensão fractal do estado do sistema, que são semelhantes a uma superfície amassada. As redes consideradas por ele, foram dois fractais regulares, o tapete de Sierpinski e o triângulo de Sierpinski juntamente com uma superfície amassada, que é uma rede não-fracta, ou seja, um fractal estatístico. Para construir o fractal estatístico Paulo Murilo fez uso do algoritmo de Leath, que a partir de um spin *up* (ou *down*) é capaz de construir um aglomerado único (e portanto percolante) que possui uma dimensão fractal. Seus resultados demonstram que sistemas com dimensão fractal é a chave para explicar este tipo de comportamento, ou seja $a_2 < 1$.

$$f(x) = a_0 \exp(-a_1 x^{a_2}), \quad (1.3)$$

onde a_0 , a_1 e a_2 são constantes características de cada tipo de processo estudado. O caráter atribuído à relaxação lenta está associado ao fato de que a constante a_2 estar contida entre $0 < a_2 < 1$. As curvas na figura 3.7 indicam que podemos analisar como a energia varia ao longo dos PMC, e a direita desta figura temos um ajuste de curva utilizando a exponencial estendida da equação 3.1. Dentro deste gráfico temos ainda os valores das constantes a_0 , a_1 e a_2 . Verificamos que $a_2 < 1$, ou seja este sistema apresenta relaxação lenta.

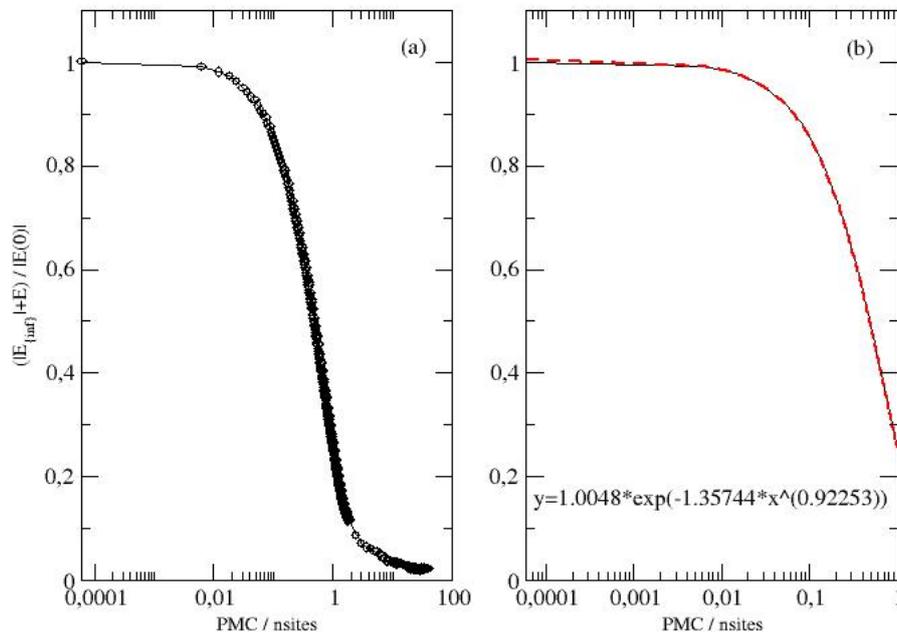


Figura 1.4: Comportamento da energia, com abordagem a) SV e b) SD, considerando somente interações entre primeiros vizinhos para redes bidimensionais utilizando o processo de "non linear curve fitting". A temperatura do sistema, em unidades de J , é $T = 4.0$.

O fato de estarmos interessados em entender a dinâmica deste tipo de sistema, é porque suas características nos leva a crer, que o sistema obedece a um comportamento mais geral, também observado em uma grande variedade de sistemas. primeiramente busca-se compreender um pouco mais onde a teoria da percolação e processos ficam evidentes, estes comportamentos estão aparecendo, em alguns estudos recentes, descreveremos rapidamente cinco casos:

- ⇒ Relaxação lenta da condutividade em silício mesoporoso;
- ⇒ Relaxação lenta de portadores em poços quânticos de grafeno;
- ⇒ Relaxação lenta e Compactação de sistemas granulares;
- ⇒ Relaxação lenta em condutância de isolantes amorfos;

⇒ Relaxação lenta da magnetoresistência em estruturas de AlGaAs-GaAs.

1.3.1 Relaxação lenta da condutividade em silício mesoporoso

O transporte eletrônico em sistemas desordenados tem sido vastamente investigado [14] desde que Mott e Anderson iniciaram seus estudos fundamentais em torno de 50 anos atrás. Contudo, a dinâmica de elétrons fora do equilíbrio em tais sistemas ainda é objeto de pesquisa intensiva tanto do ponto de vista teórico quanto experimental devido ao peculiar fenômeno físico envolvido. Na realidade, algumas características de sistemas vítreos, tais como não ergodicidade, relaxação muito lenta, e envelhecimento, podem ser encontrados em propriedades de transporte de isolantes tipo Anderson. Apesar da existência de vidros de elétrons, onde o papel da desordem e interações Coulombianas proporcionam uma resposta deficiente dos portadores livres à excitações fora do equilíbrio, foi prevista há mais de 20 anos [15, 16], evidências experimentais para tais sistemas foram apenas reportadas no caso de relativamente poucos materiais, incluindo metais granulares (Au [17], Al [18, 19], Bi e Pb [20]) e filmes de óxido de índio [21] a baixas temperaturas. Entre os semicondutores padrões, um comportamento similar foi somente visto em medidas de capacitância em GaAs dopados [22].

Neste sentido, Borini *et al* [23] mostraram que algum fenômeno peculiar associado a transporte dependente do tempo, tal como relaxação **logarítima** lenta da condutividade ou simples envelhecimento, pode ser observado em silício mesoporoso à temperatura ambiente. Silício mesoporoso é uma rede desordenada de nanocristais de silício interconectados cuja produção se dá através do ataque eletroquímico no silício altamente dopado. O tamanho médio destes nanocristais é tipicamente da ordem de 10nm [24], o que proporciona confinamento quântico não ser efetivo como no caso de silício nanoporoso luminescente. Além disso, a condutividade do silício mesoporoso é muito menor quando comparada ao substrato de Si inicial [25], e os portadores de carga livres parecem estar congelados à temperatura ambiente [26]. Com o objetivo de comparação de seus resultados com aqueles dependentes de do tempo associados a literatura, Borini [23] sugere que o este material pode manifestar dinâmica vítrea de não equilíbrio que surge a partir de manifestações de desordem e interações Coulombianas dentro da rede nanocristalina de silício.

1.3.2 Relaxação lenta de portadores em poços quânticos do grafeno

Quando o tamanho de um cristal semiconductor é reduzido no sentido de se aproximar ao raio de Bohr de excitação do material volumétrico, devido ao volume limitado ocorre uma mudança significativa na distribuição eletrônica, resultando em propriedades dependentes do tamanho como o *gap* de energia bem como as dinâmicas relacionadas aos processos de relaxação das energias [27, 28, 29]. Este fenômeno, conhecido como *confinamento quântico*, tem sido investigado em muitos materiais semicondutores e proporcionado aplicações práticas tais como bioimagem, lasers, fotovoltáicos, e diodos emissores de luz. Para estas aplicações eletro-ópticas de pontos quânticos, a relaxação de estados altamente excitados (ou esfriamento de portadores quentes) é de importância central e portanto tem sido extensivamente estudados [30, 31, 32]. Devido ao grande espaçamento entre os níveis eletrônicos em sistemas quânticos confinados comparados com frequências de fônons, relaxações assistidas por fônons requerem a emissão de múltiplos fônons para a conservação de energia. Uma vez que a relaxação assistida por fônons é o mecanismo primário para esfriamento de portadores em semicondutores volumétricos, era de se esperar que o esfriamento de portadores em pontos quânticos deveriam ser significativamente lento que em sistemas volumétricos por causa da baixa probabilidade de processos multifônons [31, 33]. Na realidade, contudo, em pontos quânticos existem mecanismos de relaxação alternativos suficientemente eficientes para proporcionar esfriamento dos portadores da ordem de subpicosegundos que não é significativamente mais lento que em materiais volumétricos [34, 35]. Em particular, elétrons quentes poderiam relaxar rapidamente através de transferência de energia para buracos, os quais sempre possuem uma grande massa efetiva e assim menor espaçamento entre os níveis de energia, através de processos semelhantes a Auger seguidos por relaxação assistida por fônons [36, 37] ou através de canais não adiabáticos envolvendo ligantes de superfícies [38, 39]. Estados de armadilha [40, 41] em pontos quânticos e modos vibracionais de alta frequência em ligantes de superfície [42] proporcionam rotas de relaxação adicionais para promover o rápido esfriamento dos portadores. Tem sido demonstrado que através de um cuidadoso planejamento de múltiplas camadas de heteroestruturas ao redor de poços quânticos coloidais de CdSe e suprimindo estas rotas, os tempos de vida de portadores quentes poderiam ser aumentadas em três (3) ordens de magnitude até 1ns [35]. Com esta abordagem, elétrons e buracos estariam espacialmente separados pelas heteroestruturas para reduzir sua transferência de energia. Crescimento epitaxial de heteroestruturas e o uso de ligantes superficiais fracamente absorvedores de infra-vermelho adicionalmente removeriam estados de armadilha e acoplamento com vibrações dos ligantes.

Neste sentido, Mueller *et al* [43] reportaram observações que indicam uma notável lentidão no esfriamento de portadores em poços quânticos de grafeno coloidal [44, 45, 46]. Comparando com poços quânticos de outros semicondutores tais como CdSe ou PbSe, os poços quânticos de grafeno coloidal possuem características que poderiam naturalmente suprimir as rotas de relaxação dos portadores quentes em adição àquelas assistidos por fônons. Possuindo relações de dispersão de energia simetricamente linear tanto na banda de valência quanto de condução próximo aos limites de banda tornam iguais as massas efetivas para elétrons e buracos [47], eliminando as rotas de transferência tipo Auger entre elétrons e buracos para o esfriamento de portadores. Com um bom controle da química do carbono, podemos criar grafenos que consistem unicamente de carbonos com hibridização tipo sp^2 e passivarmos de maneira perfeita suas fronteiras com átomos de hidrogênio, tal que os poços quânticos possam estar livres de estados de armadilhas (fronteiras). Além disso, todas as ligações químicas nos poços quânticos de grafeno coloidal podem ser precisamente controladas para possuírem pequenos momentos de dipolo de transição na região média de infra-vermelho tal que eles não se acoplem fortemente aos elétrons do grafeno [35]. Os resultados experimentais de [43] sobre a dinâmica de relaxação dos portadores de poços quânticos de grafeno coloidal exibem a ausência de rotas de relaxação rápidas tal que o tempo de vida dos portadores quentes até a ordem de centenas de picosegundos poderiam ser obtidos. Desta forma, o lento esfriamento de portadores, juntamente com a pequena constante dielétrica em grafeno e assim as grandes interações Coulombianas portador-portador, tornam os poços quânticos de grafeno um sistema interessante para a investigação de rotas de relaxação tais como transferência de elétrons quentes ou geração de multi-éxcitons para aumentar a eficiência de dispositivos fotovoltaicos [30].

1.3.3 Relaxação lenta e compactação de sistemas granulares

Materiais granulares estão presentes em todos os lugares da natureza e são o segundo material mais manipulado na indústria (o primeiro é a água), encontrados, por exemplo, em aplicações tecnológicas variando do ramo farmacêutico, comida, pós, mecanosíntese e indústria de semicondutores até fluxos granulares geológicos, tais como avalanches de rochas ou fluxos piroclásticos. Meios granulares, tais como pós ou areia, são muito simples, feitos de partículas discretas de tamanho maior que $100\mu m$ sempre interagindo umas com as outras somente através de forças de contato dissipativas. Sem uma fonte externa sua energia cinética é rapidamente perdida e eles são então referenciados como sistemas não térmicos. Apesar desta ilusória simplicidade, materiais granulares exibem muitos comportamentos complexos, tais como segregação de tamanhos, formação de arcos, rolos de convecção, formação de padrões e instabilidades

dinâmicas [48, 49, 50, 51, 52, 53]. Assim, apesar dos grãos individuais serem sólidos, não é apropriado classificar suas propriedades coletivas como inteiramente semelhantes a sólidos ou líquidos. Atualmente, não existem leis reológicas para tais materiais e suas manipulações industriais são principalmente baseadas em observações empíricas.

Um importante artigo exibindo o comportamento de relaxação lenta e compactação em sistemas granulares é o de Richard *et al* [54]. Ele tenta proporcionar respostas para as seguintes questões:

1. Quais são os mecanismos de compactação dos grãos sujeitos a perturbações mecânicas?
2. Qual é a natureza das dinâmicas de compactação?
3. É possível prever a situação atingida pelo sistema a partir de alguns poucos parâmetros de controle?

Além disso, ele descreve uma profunda correspondência com sistemas térmicos tais como vidros. Na realidade, meios granulares são sempre apresentados como sistemas ideais para o estudo de relaxação complexa no sentido de atingir o equilíbrio.

1.3.4 Relaxação lenta em condutância de isolantes amorfos

Um efeito peculiar de memória em transporte tem sido observado em muitos isolantes amorfos [55, 56]: alterando o sistema tanto do equilíbrio ou do seu estado de transporte estacionário produzido através de, por exemplo, uma alteração brusca da voltagem de gate, δV_g , proporciona um aumento da condutância σ do sistema, o efeito não depende do sinal da alteração. A dependência $\sigma(\delta V_g)$ exibe um efeito de memória característico que pode persistir por um longo período de tempo, ver resultados experimentais em [57]. Explicações para esta interessante observação podem ser agrupadas em duas grandes classes que são sempre referenciadas como mecanismos *intrínsecos* e *extrínsecos*. A primeira classe atribui os efeitos de memória à dinâmica lenta de elétrons fortemente correlacionados sujeitos a disordem **quenched** e assim formando um *vidro de Coulomb* [58, 59]. Recentemente Burin *et al* [60] demonstraram que *lento* flutuações de muitos elétrons podem ser formadas em um sistema de Coulomb e foi analisada sua influência envolvendo ruído tipo $\frac{1}{f}$. Tais flutuações também podem proporcionar relaxação lenta e efeitos de memória.

Um cenário extrínseco assume que efeitos de memória eletrônica são causados por relaxação lenta das configurações *atômicas* influenciando assim os canais de condução e foi proposto

inicialmente por Adkins *et al* [17] para explicar os resultados de condutância em função de tensão de gate em filmes de ouro. Além disso, a possibilidade que efeitos de pólaron podem ser responsáveis pela relaxação lenta em condutores também foi discutida [56, 61]. Neste sentido, recentemente Burin *et al* [62] mostraram que devido à relaxação lenta da estrutura atômica, nuvens de pólarons, que se forma próximo a sítios de salto, suprimindo assim a densidade eletrônica de estados (DOS) primal. Alterando a tensão de gate o potencial químico é modificado, removendo o efeito de blindagem produzida pelos pólarons e, assim, aumentando a condutividade por saltos. A medida que a estrutura atômica se ajusta com o tempo às novas situações do potencial químico, a condutividade relaxa à sua intensidade quase estacionária.

1.3.5 Relaxação lenta da magnetoresistência em estruturas de AlGaAs-GaAs

Um exemplo típico foi observado por Agrinskaya *et al* [63] na magnetoresistência em resposta a um campo magnético aplicado em estruturas de poços quânticos tipo AlGaAs-GaAs com dopagem tipo p com bandas tipo Hubbard parcialmente preenchidas. Em particular, eles concentraram bastante atenção para excluir os efeitos relacionados com flutuações de temperaturas. Apesar destes efeitos serem importante, eles encontraram que as características gerais da relaxação lenta persiste. Eles interpretaram este comportamento como relacionado às propriedades do gás de Coulomb formado pelos centros de carga quando levado em consideração as correlações de spins, que são sensíveis a campos magnéticos externos. Variações no campo magnético altera o número de complexos de impurezas de diferentes tipos. Como resultado, ele afeta a forma e profundidade do *gap* tipo pólaron formado em estados pertencentes ao aglomerado (*cluster*) responsável pela condutância. O modelo sugerido por eles explica tanto o comportamento qualitativo e a ordem de magnitude da relaxação lenta da magnetoresistência.

1.4 SIMULAÇÃO MONTE CARLO

Apesar do avanço de diversas técnicas analíticas hoje disponíveis, com o progresso alcançado pelos computadores o cálculo numérico passou a ser uma ferramenta importante, com profundo impacto no desenvolvimento das ciências em geral. Hoje é comum considerar-se que a física se divide em experimental, teórica e computacional. Para enfatizar aqui a importância de cálculos numéricos, basta dizer que ainda não sabemos a solução analítica exata do modelo de Ising em três dimensões, mas de simulações numéricas sabemos todas as suas características. Soma-se também o fato de em simulações podermos alterar parâmetros físicos de forma

conveniente, que dificilmente conseguiríamos experimentalmente (por exemplo, parâmetros de rede, valores de potenciais atômicos, etc).

O marco histórico no desenvolvimento dessa técnica é o trabalho de Metropolis e colaboradores em 1953 [64]. Um sistema termodinâmico é composto por um grande número de partículas microscópicas, aproximadamente 10^{23} por mol. Fica inviável analisar todas as equações de movimento das partículas, e com isso obter alguma grandeza macroscópica (propriedade física: como temperatura, pressão, magnetização, calor específico, etc.) do respectivo sistema [65, 66, 67]. Mesmo em uma experiência de Física Molecular, após criar vácuo a $1,36 \times 10^{-12}$ atm em uma câmara, ela ainda possuirá aproximadamente $3,24 \times 10^{13}$ partículas por m^3 , ou seja, mesmo com um vácuo considerável o sistema ainda será composto por muitas partículas. Além desta dificuldade, ainda deve-se considerar o fato de que cada partícula do sistema terá o seu estado alterado com o passar do tempo, por causa de flutuações naturais na situação de equilíbrio, ou porque o sistema ainda está em transição para a situação de equilíbrio.

A mecânica estatística tem como objetivo contornar este problema e possibilitar a análise de um grande número de partículas microscópicas, através do tratamento estatístico, e assim obter informações a nível macroscópico. Neste trabalho, os sistemas analisados são redes de momentos de dipolos magnéticos em contato com um reservatório térmico a várias temperaturas, acompanhadas em várias concentrações da razão entre quantidades de spins (ou momentos magnéticos) em uma dada direção em relação ao número total de spins do sistema. Sistemas como estes juntamente com suas orientações determinam um conjunto de informações físicas como a energia, magnetização macroscópica, susceptibilidade magnética entre outras.

Sabe-se que para cada estado macroscópico do sistema existe um número muito grande de configurações microscópicas possíveis para os momentos de dipolos magnéticos. Isso se deve à grande quantidade destes momentos de dipolos existentes no sistema. Com isso, para analisar as transições entre uma configuração e outra, utiliza-se um processo estocástico para a simulação, o método Monte Carlo, e os algoritmos de Metrópolis [64], Wolff [68], Glauber [69] e Kawazaki [70].

De maneira geral, pode-se entender o ensemble estatístico como sendo constituído pela coleção de estados microscópicos, ou microestados, acessíveis a uma certa preparação do sistema a ser estudado [71]. Por exemplo, em um sistema isolado, os estados acessíveis são aqueles cuja energia total corresponde à energia do sistema. Em um sistema em contato com um reservatório térmico, os estados acessíveis podem possuir diferentes energias, respeitando somente o vínculo, que é temperatura constante, igual à do reservatório.

A equação mestra que irá descrever a transição entre os estados microscópicos, definindo

$P(a \rightarrow b)dt$, como a probabilidade de que, a partir do estado inicial a , o sistema estará em um estado b após um intervalo de tempo dt . Podemos então escrever a equação mestra como:

$$\frac{dp_a(t)}{dt} = \sum_b [p_b(t)P(b \rightarrow a) - p_a(t)P(a \rightarrow b)] \quad (1.4)$$

que calcula a probabilidade de encontrar o sistema em um estado a no instante t , $P(b \rightarrow a)$ e $P(a \rightarrow b)$ são as transições de probabilidades entre os respectivos estados, e $p_a(t)$ e $p_b(t)$ são os pesos associados aos estados a e b , respectivamente. Sendo $p_a(t)$ e $p_b(t)$ as variáveis estatísticas do problema, que podem ser normalizadas, ou seja:

$$\sum_a p_a(t) = 1 \quad \sum_b p_b(t) = 1 \quad (1.5)$$

Para um sistema em equilíbrio com um reservatório térmico à temperatura T , a probabilidade de encontrar o sistema em um microestado a com energia E_a , é dada pela distribuição de Boltzmann [67]

$$p_a = \frac{e^{-\beta E_a}}{Z}, \quad (1.6)$$

uma vez que estamos interessados em estudar um sistema puramente clássico. Em simulação Monte Carlo envolvendo o estudo de spins, é comum expressar a temperatura T , em unidades de $\frac{J}{k_B}$, onde J é a constante ferromagnética e k_B é a constante de Boltzmann, desta forma teremos:

$$\beta = \frac{1}{T} \quad (1.7)$$

além disso Z é a função partição do ensemble canônico:

$$Z = \sum_a e^{-\beta E_a}. \quad (1.8)$$

Esta distribuição satisfaz à descrição do problema, devido ao fato de ser a mais geral para o caso de um ensemble clássico canônico em equilíbrio. A estatística de Fermi-Dirac, por exemplo, não corresponde às redes de spins, pois ela é uma distribuição para um gás ideal (interação fraca entre as partículas) e se trata de um sistema quântico que obedece ao Princípio de Exclusão de Pauli [67].

Uma vez que o sistema tenha chegado à situação de equilíbrio, pode-se realizar medidas de uma determinada grandeza física Q . A média destas medidas pode ser avaliada segundo:

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_a Q_a e^{-\beta E_a}}{\sum_a e^{-\beta E_a}}. \quad (1.9)$$

Este resultado nos leva a imaginar que devemos gerar várias configurações de microestados associados à temperatura T e ao macroestado específico. Com estas várias configurações de equilíbrio, determinar o valor mais provável da(s) grandeza(s) física(s) a investigar.

No entanto, (1.9) só valerá se a soma é realizada sobre todos os microestados do sistema. Entretanto, é impraticável utilizarmos um número tão grande de microestados, somente um número pequeno desses microestados serão suficientes para chegarmos na situação de equilíbrio [65] (explicação na seção 2). Formamos então um subconjunto s com N microestados compatível com o macroestado estabelecido, a média de uma grandeza nesse subconjunto será:

$$\langle Q_s \rangle = \frac{\sum_{b=1}^N Q_b e^{-\beta E_b}}{\sum_{b=1}^N e^{-\beta E_b}} \quad (1.10)$$

Este pequeno número de microestados são escolhidos através de uma distribuição de probabilidades p_s , então, a medida da grandeza Q_s será dada por:

$$\langle Q_s \rangle = \frac{\sum_{b=1}^N Q_b p_b^{-1} e^{-\beta E_b}}{\sum_{b=1}^N p_b^{-1} e^{-\beta E_b}} \quad (1.11)$$

Devemos então escolher p_b de tal forma que os microestados amostrados do subconjunto s , sejam aqueles que conduzem ao equilíbrio, a situação mais trivial seria escolher estes microestados de tal forma que obedeçam à distribuição de probabilidades de Boltzmann, assim a equação (1.11) ficará:

$$\langle Q_s \rangle = \frac{\sum_{b=1}^N Q_b}{N} \quad (1.12)$$

Para esta maneira de escolher os microestados que serão mais relevantes na descrição do sistema, é dado o nome de amostragem seletiva (*importance sampling*). Basicamente a simulação Monte Carlo executa as tarefas de: simular o processo de passagem de um estado para o outro da equação mestra, isto é realizado sorteando aleatoriamente spins de uma rede e suas respectivas orientações, por exemplo. O processo consiste em estabelecer condições para a transição entre dois estados na simulação com o objetivo de chegar na situação de equilíbrio, após um determinado "intervalo de tempo", ou seja, um certo número de passos Monte Carlo. Para isso é necessário que as transições de probabilidade da equação mestra, $P(b \rightarrow a)$ e $P(a \rightarrow b)$, sejam escolhidas de tal maneira que a distribuição de Boltzmann seja a solução de equilíbrio da equação mestra. A maneira de gerar as distintas configurações de equilíbrio, é o objeto de desenvolvimento de vários algoritmos, onde a equação mestra é aplicada.

1.5 TRANSIÇÃO DE FASE PARA UMA REDE DE SPINS

Um sistema que tenha as mesmas propriedades em todos os seus pontos é chamado de homogêneo, se o sistema possui propriedades diferentes em regiões distintas ele é heterogêneo. Mas se um sistema é heterogêneo, ele pode conter várias partes homogêneas, com isso, as partes homogêneas de um sistema heterogêneo são chamadas fases [72]. Por exemplo, gelo, água e vapor d'água, possuem propriedades distintas mas podem coexistir em um mesmo sistema. Estas são considerações usadas pela *Lei de Fases de Gibbs*, que informa quantas variáveis de estados intensivas serão necessárias para descrever um sistema físico:

$$F = K - P + 2 \quad (1.13)$$

onde P é o número de fases em equilíbrio termodinâmico, K é o número de espécies químicas do sistema e F as variáveis intensivas ou seja, energia total, magnetização e etc. No entanto, a *Lei de Fases de Gibbs* só se aplica a sistemas que tenham fases sólida, líquida e gasosa, e não faz menção às características das transições de fase.

Para os sistemas que serão considerados neste trabalho, pode-se determinar a temperatura em que ocorre a transição de fase (temperatura crítica), efetuando experimentos em que a temperatura externa ou do banho térmico é variada. Segundo a *Teoria de Landau para Transições de Fase*, a temperatura crítica pode ser determinada pelo parâmetro de ordem, que é uma grandeza do sistema que possui um valor nulo (ou constante) em uma fase, e um valor não-nulo (ou variável) em outra fase. Se em uma fase o parâmetro de ordem é nulo, ela pode ser classificada como desordenada, devido ao fato de que as propriedades do sistema possuem valores diferentes em determinadas regiões. Em contrapartida, se o parâmetro de ordem é não-nulo, a fase é ordenada, e portanto as propriedades do sistema são as mesmas em todo o seu volume. Ao discutir um pouco mais adiante sobre redes de spins, ver-se-á que é a magnetização do sistema é a grandeza ideal para representar o parâmetro de ordem.

Uma transição de fase de um sistema pode ser de primeira ou de segunda ordem. Um exemplo de transição de fase de primeira ordem é um sistema constituído por água e vapor d'água. Ao aquecermos a água até a temperatura crítica, o acréscimo de calor não resulta num aumento de temperatura, a energia que é fornecida ao sistema é utilizada para quebrar as ligações entre ou afastar as moléculas e para elevar a entropia do sistema. Sendo S_g a entropia para o vapor d'água e S_l para a água, teremos a seguinte relação envolvendo a diferença de entropia nas duas fases:

$$\delta Q = T_c(S_g - S_l) \quad (1.14)$$

em que T_c é a temperatura crítica (aproximadamente 100°C ao nível do mar) e δQ é chamado de calor latente de vaporização.

Uma transição é dita de segunda ordem, aquela em que o sistema passa imediatamente de uma fase para outra, ou seja, a energia fornecida ao sistema, mesmo durante a transição de fase, é utilizada para aumentar a temperatura do sistema, e portanto, pode-se concluir que não há calor latente para uma transição de segunda ordem.

Atualmente a *Teoria do Grupo de Renormalização*, é o estudo mais avançado sobre transições de fase, estabelecendo a divergência da distância de correlação entre os spins de uma rede na temperatura crítica [71].

1.6 ALGORÍTMOS UTILIZADOS NO TRABALHO

1.6.1 Algoritmo de Metrópolis

O algoritmo de Metrópolis, que utilizamos neste trabalho, baseia-se na seguinte abordagem: em cada passo Monte Carlo (PMC) é efetuado um teste para a mudança de orientação de um único spin da rede, ou seja, o sistema que estava inicialmente em um estado a é levado a outro estado b (aleatoriamente escolhido), realizada esta troca, o sistema determina a energia do estado para esta nova configuração b . A seguir é calculada a diferença de energia entre os dois estados considerados, ou seja, a estado com a nova configuração (estado b) e aquele sem a mudança na orientação do spin (estado a), $\Delta E = E_b - E_a$ [64]. Uma vez calculado os valores, deve-se verificar como este algoritmo satisfaz as condições de ergodicidade e balanço detalhado.

Quando se realiza uma mudança na orientação de um spin por passo Monte Carlo, o algoritmo obedecerá à condição de ergodicidade, pois se podemos alterar a orientação de cada um dos spins da rede, podemos a partir de um microestado gerar qualquer outro com um número finito de PMC.

Para a escolha aleatória têm-se que levar em conta a probabilidade de seleção da respectiva transição, ou seja, $S(a \rightarrow b)$, que é determinada pelo spin que escolhe-se aleatoriamente para realizar o teste. Se N é o número total de spins na rede, então, a partir de um microestado a tem-se N possibilidades de escolher aleatoriamente um spin e realizar o teste que irá gerar um novo microestado, b . A probabilidade de seleção será:

$$\frac{P(a \rightarrow b)}{P(b \rightarrow a)} = \frac{p_b}{p_a} = e^{-\beta(E_b - E_a)}. \quad (1.15)$$

com isso, temos

$$S(a \rightarrow b) = \frac{1}{N}. \quad (1.16)$$

Após esta iteração ter sido realizada, há de se realizar o próximo PMC, a probabilidade de seleção $S(b \rightarrow a)$ será igual a $\frac{1}{N}$, pois a probabilidade de escolha do estado a , tem o mesmo valor, devido ao fato da escolha ser aleatória, a chance de se escolher o mesmo spin que foi selecionado no passo anterior é a mesma. A condição de balanço detalhado equação (1.15) ficará:

$$\frac{P(a \rightarrow b)}{P(b \rightarrow a)} = \frac{S(a \rightarrow b)A(a \rightarrow b)}{S(b \rightarrow a)A(b \rightarrow a)} = \frac{A(a \rightarrow b)}{A(b \rightarrow a)} = e^{-\beta(E_b - E_a)}. \quad (1.17)$$

Tem-se portanto a liberdade de escolha em qualquer transição, seja $A(a \rightarrow b)$ ou de $A(b \rightarrow a)$ de qualquer maneira, desde que a divisão resulte na distribuição de Boltzmann entre dois microestados. No entanto, para tornar o algoritmo mais eficiente escolhe-se a probabilidade de aceitação na forma:

$$A(a \rightarrow b) = \begin{cases} e^{-\beta(E_b - E_a)} & \text{se } E_b > E_a, \\ 1 & \text{se } E_b < E_a. \end{cases} \quad (1.18)$$

A escolha utilizando a relação acima, leva a troca de orientação do spin sempre ser aceita, se a energia do estado gerado é menor do que a energia do estado atual, ou seja, a energia da nova orientação do spin é menor que a energia da antiga orientação. Esta foi a consideração na construção do algoritmo de Metrópolis [64] em que configurações diferentes para o sistema são escolhidas com probabilidade $e^{-\beta E}$ e pesos iguais.

O algoritmo pode ser organizado da seguinte maneira (observar também a Figura 1.5):

1. Especifica-se uma configuração inicial (macroestado) para os spins, por exemplo todos os spins com orientação +1 a uma temperatura superior a T_c , isso fornece uma configuração inicial, com a menor energia possível para o sistema.
2. Escolhe-se aleatoriamente qualquer um dos spins da rede, troca sua orientação, calcula-se o valor da expressão $\exp(-\beta\Delta E)$, e gera-se um número aleatório entre 0 e 1, para que

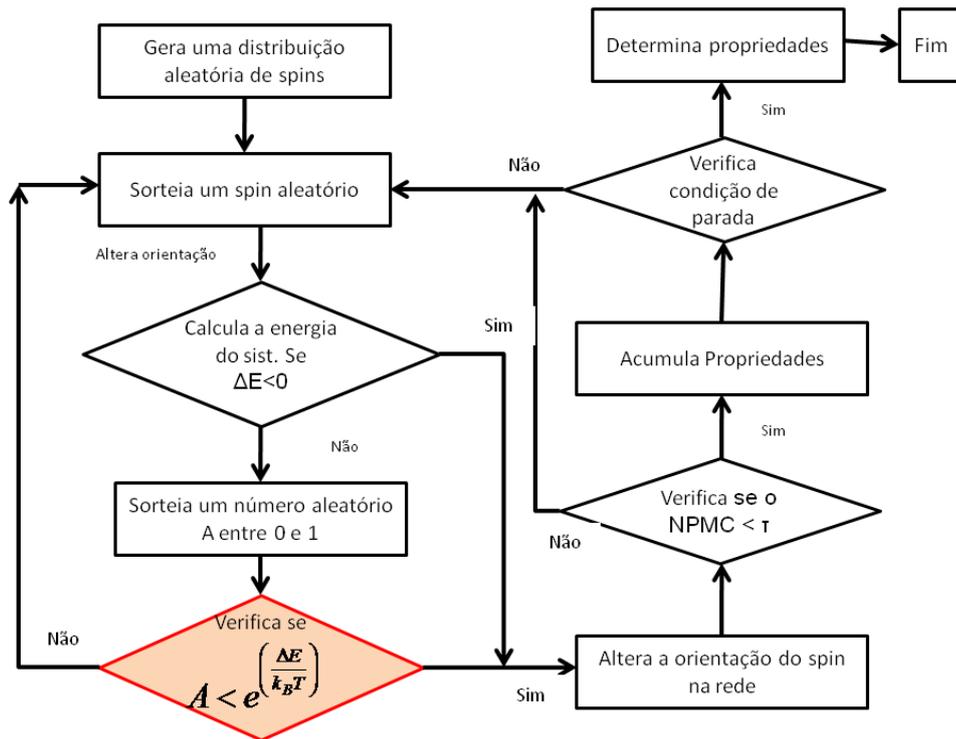


Figura 1.5: Fluxograma esquemático do algoritmo de Metrópolis

baseados neste valor aleatório, o algoritmo decide se aceita ou não esta configuração.

3. Se $\exp(-\beta\Delta E)$ é menor do que o número aleatório gerado, retorna-se ao valor inicial da orientação do spin e executa-se novamente o passo 2, ou seja esta configuração não foi aceita.
4. Se $\exp(-\beta\Delta E)$ é maior do que o número aleatório gerado, aceita-se a mudança de orientação do spin e um novo microestado é gerado.

Apesar do algoritmo de Metrópolis ser amplamente utilizado, ele possui um inconveniente, o efeito de *Critical Slowing Down*, ou seja, o algoritmo que simula o sistema, próximo da temperatura crítica, é lento para a convergência em torno do valor médio da energia. Isto se deve ao fato do expoente crítico dinâmico do algoritmo de Metrópolis possuir o valor de aproximadamente $z = 2,17$ ([73], [74]), que resulta em um tempo de correlação ($\tau \sim \xi^z$) muito grande, esse tempo de correlação depende do tamanho da rede do sistema físico estudado, quanto maior for o tamanho L da rede, maior será o tempo de correlação.

1.6.2 Algoritmo de Kawasaki

É necessário um novo algoritmo para a dinâmica do modelo de Ising com o parâmetro de ordem conservado pois os algoritmos de Metrópolis e de Wolff mudam a magnetização total da rede, ou seja, não conservam este parâmetro de ordem. O algoritmo de Kawasaki segue os mesmos passos que o algoritmo de Metrópolis com o diferencial de que dois spins, um com orientação positiva outro negativa, serem escolhidos aleatoriamente para troca de orientação.

A condição de ergodicidade é obedecida, pois para uma rede de gás finita é possível que cada uma de suas partículas seja transferida para um sítio desocupado. Desta forma, todas as configurações do ensemble estatístico podem ser alcançadas em um número finito de processos de Markov.

Para uma rede com N spins e coordenada de rede z , o número total de primeiros vizinhos é $\frac{1}{2}zN$, a probabilidade de selecionar um par de primeiros vizinhos e a probabilidade de selecioná-los novamente no passo seguinte terá como resultado:

$$\frac{S(a \rightarrow b)}{S(b \rightarrow a)} = \frac{2/zN}{2/zN} = 1 \quad (1.19)$$

Pela probabilidade de aceitação (1.18), a condição de balanço detalhado será:

$$\frac{P(a \rightarrow b)}{P(b \rightarrow a)} = \frac{S(a \rightarrow b)A(a \rightarrow b)}{S(b \rightarrow a)A(b \rightarrow a)} = \frac{A(a \rightarrow b)}{A(b \rightarrow a)} = e^{-\beta(E_b - E_a)}. \quad (1.20)$$

No entanto, uma vez que as partículas devem se deslocar pela rede no decorrer da simulação, o algoritmo de Kawasaki [70] definido desta maneira é muito lento devido ao fato de que somente sítios que são primeiros vizinhos são incluídos na probabilidade de transição. Para solucionar este problema deve-se considerar que uma partícula possa ser deslocada para qualquer sítio não preenchido, ou que um spin altere a sua orientação com qualquer outro spin em um PMC. Também utiliza-se o algoritmo de Glauber [69] para realizar o teste entre a troca dos spins. Na seção seguinte pode-se verificar como estas duas dinâmicas influenciam o comportamento do sistema com o parâmetro de ordem conservado a alcançar o equilíbrio. O fluxograma exibindo o algoritmo de Kawasaki pode ser visualizado na figura 1.6, com detalhes.

1.6.3 Algoritmo de Glauber

Roy J. Glauber construiu em 1963 desenvolveu um algoritmo que realiza a dinâmica para o modelo de Ising dependente do tempo [69], na qual a transição de probabilidades de um spin é dependente do reservatório térmico e do valor do spin dos vizinhos. O valor da transição de

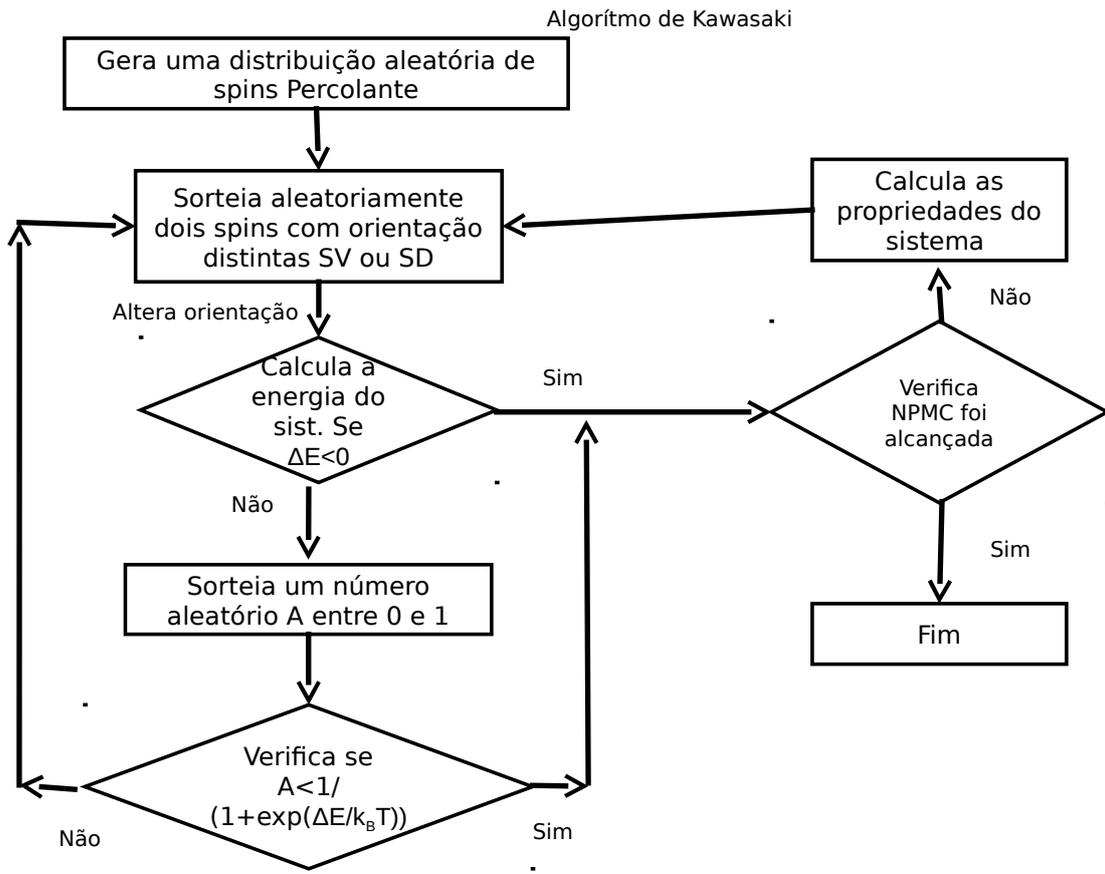


Figura 1.6: Fluxograma esquemático do algoritmo de Kawasaki

probabilidade para uma rede unidimensional é definida como:

$$P_i(a \rightarrow b) = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \frac{1}{2} \tanh(2J\beta) S_i (S_{i+1} - S_{i-1}) \right\}, \quad (1.21)$$

e a probabilidade de transição inversa:

$$P_i(b \rightarrow a) = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \frac{1}{2} \tanh(2J\beta) S_i (S_{i+1} + S_{i-1}) \right\}. \quad (1.22)$$

Pode-se escrever estas probabilidades na forma:

$$P_i(a \rightarrow b) = \frac{e^{-\beta J S_i (S_{i+1} + S_{i-1})}}{2}, \quad (1.23)$$

$$P_i(b \rightarrow a) = \frac{e^{-\beta J S_i (S_{i+1} - S_{i-1})}}{2}, \quad (1.24)$$

sendo $JS_i(S_{i+1} + S_{i-1})$ a diferença de energia entre os microestados a e b , com estas informações, pode-se obter a condição de balanço detalhado:

$$\frac{P_i(a \rightarrow b)}{P_i(b \rightarrow a)} = \frac{e^{-\beta\Delta E}}{e^{\beta\Delta E}} = e^{-2\beta\Delta E}. \quad (1.25)$$

O fluxograma exibindo o algoritmo de Glauber pode ser visualizado na figura 1.7, com detalhes. A condição de ergodicidade também é obedecida pois, tal como o algoritmo de Me-

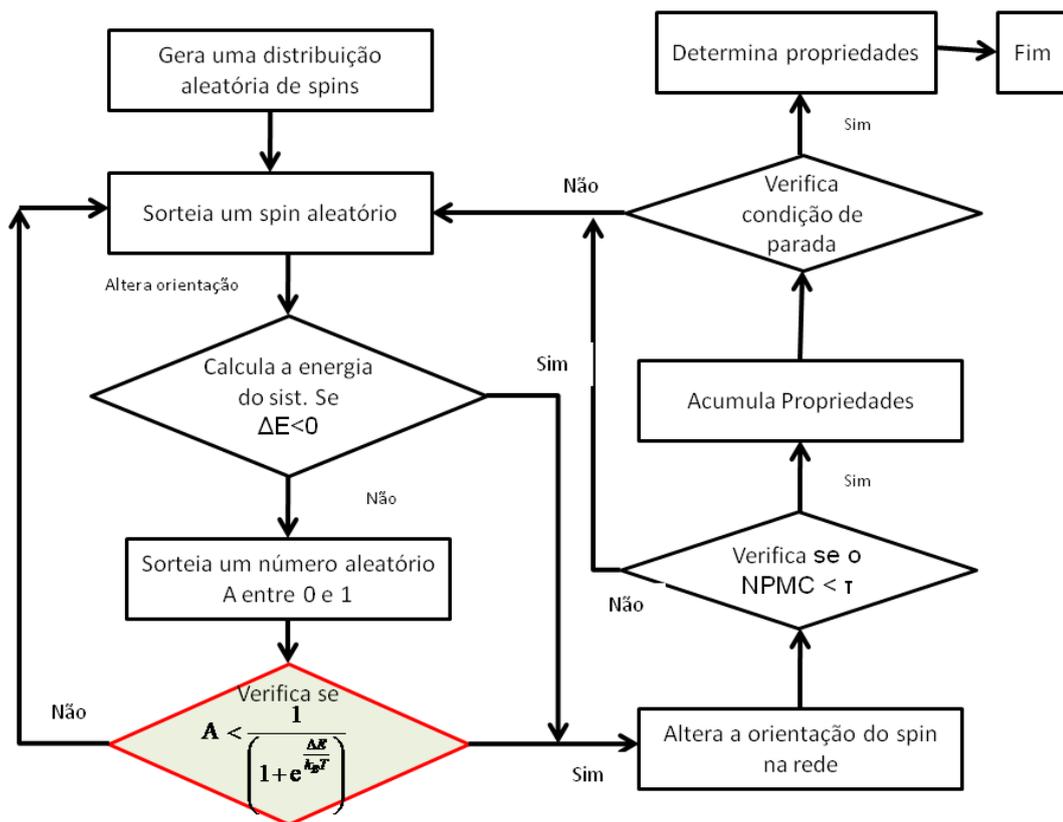


Figura 1.7: Fluxograma esquemático do algoritmo de Glauber

trópolis, o processo realiza um teste para alterar a orientação de um spin por PMC.

O inconveniente envolvendo os algoritmos de Metrópolis e Glauber ([64], [69]), que utilizamos, é que eles efetuam a alteração de orientação de um único spin por PMC. Além disso ambos, por serem muito parecidos (basta observar os Fluxogramas) uma vez que apenas a probabilidade de transição é diferente, possuem o inconveniente do *critical slowing down*. Consequentemente, à medida que aumentamos o tamanho linear do sistema estudado, fica mais complicado para caracterizar de forma precisa a sua temperatura de transição de fase. Portanto, temos que empregar outra técnica se desejarmos estudar os sistemas próximos à T_c , é o que faremos na próxima seção.

1.6.3.1 Probabilidade de Glauber

Tecendo alguns comentários adicionais sobre a questão da obtenção de valores médios. O algoritmo de Glauber prevê a obtenção de probabilidades envolvendo a expressão 1.25 e a Figura 1.8 exibe o comportamento desta probabilidade para a situação em que a variação de energia entre duas configurações de spins é máxima, em função da temperatura. Podemos averiguar neste gráfico dois limites, quando temperatura nula ($prob = 1$) ou infinita ($prob = 0,5$). Por sua vez o algoritmo de Kawasaki pressupõe um sistema em contato com um reservatório a temperatura infinita, nesta situação as taxas de aceitação ou recusa de uma dada configuração sendo idênticas introduz grandes flutuações tanto na energia quanto no perímetro do sistema. Em consequência, dezenas de simulações são necessárias para a obtenção de valores médios. Para minimizar um pouco o problema o algoritmo de Glauber a temperatura finita, permite uma taxa de aceitação menor o que possibilita obter flutuações menores tanto em energia como perímetro. Permitindo assim, a realização de um número menor de simulações para a obtenção de médias. Contudo, somos levados a fazer simulações com temperaturas distintas para obter tendências de comportamento.

1.6.4 Algoritmo de Hoshen-Kopelman e Formação de aglomerados

Para confirmar a existência de percolação em uma rede, uma maneira interessante de utilizar o algoritmo de Hoshen-Kopelman [75]. Para estabelecer a orientação da rede podemos utilizar o mesmo processo da seção anterior, com a probabilidade p_c , eq. (1.2). Realizada esta tarefa, nós iremos determinar os aglomerados geométricos que serão formados com orientação $+1$ e -1 . Construiremos uma lista, m_k , onde k é um rótulo para cada aglomerado, para isto nós comparamos, por exemplo, o spin (i, j) com o seu primeiro vizinho á direita $(i, j + 1)$, e seu primeiro vizinho abaixo $(i + 1, j)$ se eles tiverem a mesma orientação eles serão adicionados à lista como $k = 1$. Este processo é repetido para cada spin da rede.

Em seguida deve-se verificar se primeiros vizinhos que possuem a mesma orientação, estando em aglomerados diferentes, ou seja, com rótulo k diferente. O processo de comparar um spin com seus vizinhos é repetido mas agora a comparação entre os rótulos, ou seja, os valores de k , se dois primeiros vizinhos de mesma orientação pertencerem a aglomerados distintos, faremos com que os dois passam a pertencer ao mesmo aglomerado, atribuindo o mesmo valor de k a ambos. Realizando este processo em todos os spins, consegue-se determinar quantos aglomerados há no sistema e qual o respectivo tamanho de cada um. Por último, checa-se se algum

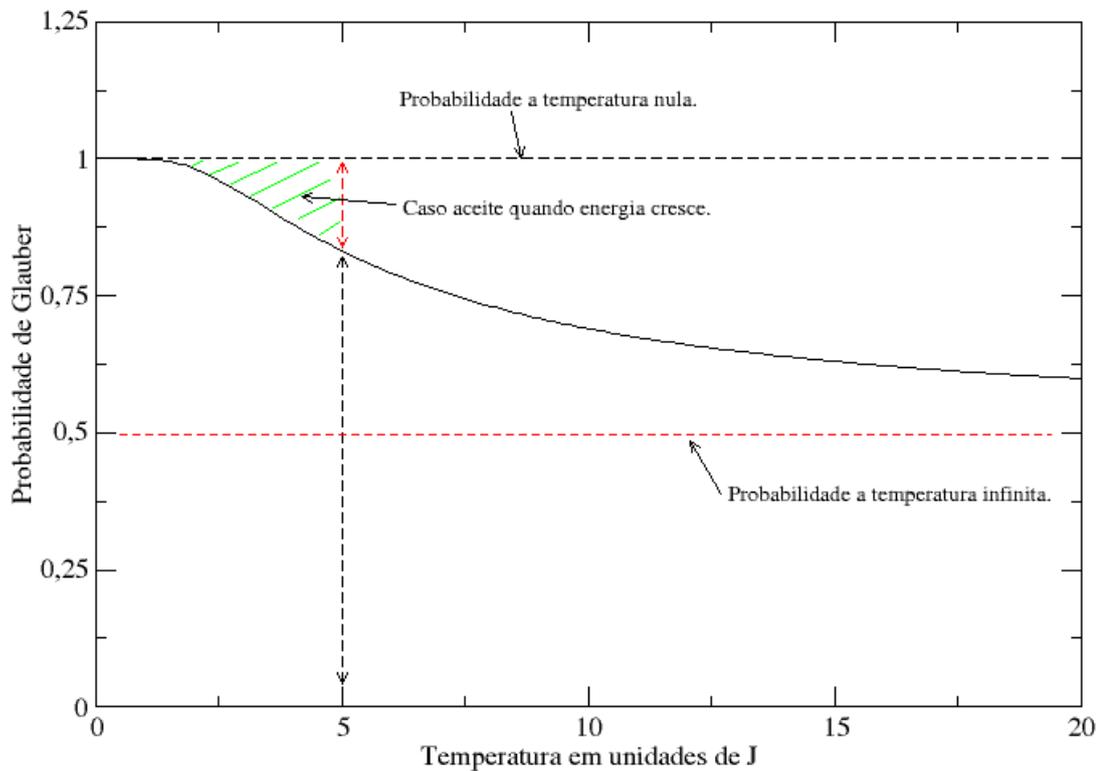


Figura 1.8: Gráfico exibindo a probabilidade para o caso de máxima variação de energia entre duas configurações distintas de spins. Para temperatura nula a probabilidade é máxima e para temperatura infinita a probabilidade é 0,5. Para um determinado valor de temperatura (exemplo no gráfico $T=4 \frac{J}{K_B T}$), a região em verde mostra qual seria os valores de probabilidade de aceitação quando a energia cresce entre duas configurações distintas de spins.

destes aglomerados conduz a percolação, caso a resposta seja negativa, é descartada esta configuração e uma nova distribuição de spins é gerada e a verificação se a ocorrência de percolação é efetuada novamente. Este processo é repetido até que a percolação ocorra.

Existem duas definições para a construção dos aglomerados de uma rede de spins, os aglomerados geométricos em que os primeiros vizinhos que estão no mesmo estado formando um aglomerado, e os algoritmos de Fortuin-Kasteleyn [76], formulado em 1972, que além da condição dos aglomerados geométricos, os primeiros vizinhos devem estar ligados.

Para entender como esta ligação é realizada, deve-se observar a função partição apresentada

| | | | | | | | |
|----|----|----|----|---|----|----|----|
| 1 | 1 | 2 | 2 | 3 | 3 | | |
| 1 | 1 | | 4 | 3 | | 5 | |
| | | | 4 | 4 | | 6 | 6 |
| | 7 | 7 | 8 | | 9 | 9 | |
| | 7 | | | | 9 | | 10 |
| 11 | 11 | | 12 | | 13 | | |
| 11 | | 14 | 12 | | | 15 | |
| 16 | | 17 | 17 | | 18 | 18 | |

| | | | | | | | |
|---|---|----|----|---|----|----|----|
| 1 | 1 | 1 | 1 | | 3 | 3 | |
| 1 | 1 | | 1 | | 3 | | 5 |
| | | | 1 | 1 | | 5 | 5 |
| | 1 | 1 | 1 | | 5 | 5 | |
| | 1 | | | | 5 | | 10 |
| 1 | 1 | | 12 | | 5 | | |
| 1 | | 12 | 12 | | | 15 | |
| 1 | | 12 | 12 | | 15 | 15 | |

Figura 1.9: O quadro à esquerda ilustra a obtenção dos aglomerados com uma passagem inicial procurando por primeiros vizinhos. O lado direito temos o resultado final após a procura por aglomerados vizinhos.

abaixo, para o modelo de Ising manipulada por Fortuin-Kasteleyn:

$$Z = \sum_S = \pm \sum_n \left\{ \prod_{i,j}^{n_{ij}=1} p_{ij} \delta_{S_i S_j} \right\} \left\{ \prod_{i,j}^{n_{ij}=0} (1 - p_{ij}) \right\}, \quad (1.26)$$

sendo:

$$p_{ij} = 1 - \exp\left(\frac{-2J}{\beta}\right), \quad (1.27)$$

a probabilidade de haver uma ligação entre dois primeiros vizinhos, i e j , como está representada no primeiro produtório, e $1 - p_{ij}$ a probabilidade de não haver ligação entre os spins i e j . Desta forma um aglomerado é definido como um conjunto de spins ligados continuamente [11].

Em 1980, Coniglio e Klein [77] estabeleceram para o modelo de Ising bidimensional, utilizando a técnicas de grupo de renormalização, determinou uma relação entre T_c e a probabilidade para a formação de um aglomerado formulada por Fortuin-Kasteleyn [76].

Em 1987, Swendsen e Wang [78] realizaram simulações Monte Carlo utilizando a definição de formação de aglomerados de Fortuin-Kasteleyn [76], que ao contrário do algoritmo de Metrópolis, este tipo algoritmo realiza um *cluster-flip*, ou seja, para cada passo Monte Carlo haverá uma probabilidade de que todo um aglomerado tenha a sua orientação alterada, ao contrário do algoritmo de Metrópolis ou Glauber ([64], [69]) em que, provavelmente, só um spin é alterado por passo Monte Carlo.

Neste algoritmo, cada par de spins que são primeiros vizinhos e possuem a mesma orientação sofrem um teste para a formação de um aglomerado, utilizando a probabilidade p_{ij} deduzida por Fortuin-Kasteleyn, ilustramos estes passos pela figura 1.10, pontos negros representam spins $+1$ e pontos brancos spins -1 e pelas linhas podemos observar quais são os spins ligados. Estabelecidas as ligações iremos realizar um teste em cada um dos aglomerados, em

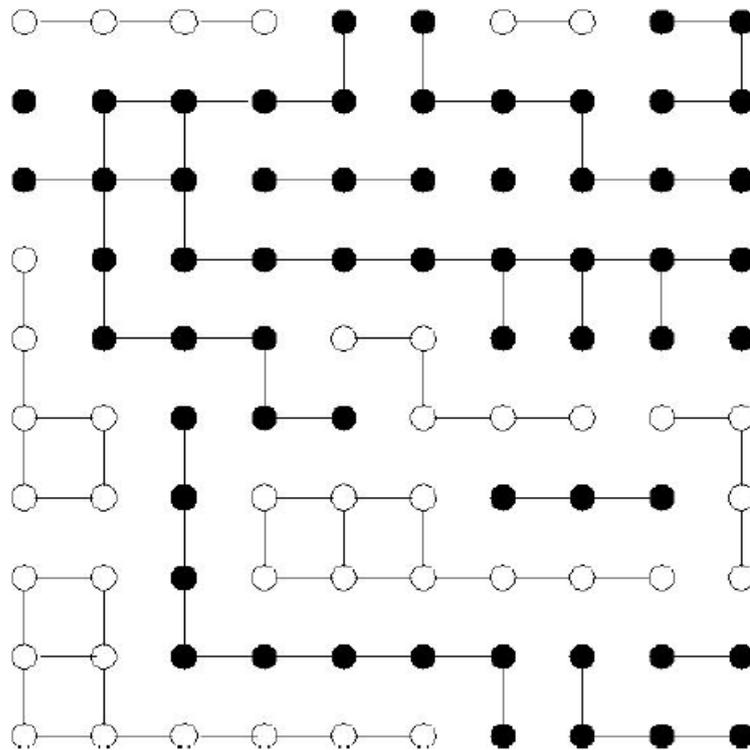


Figura 1.10: Figura esquemática representando os aglomerados de Fortuyn-Kasteleyn.

que a sua orientação pode ser alterada com probabilidade $\frac{1}{2}$. Ao realizarmos outro passo Monte Carlo, novamente cada spin da rede sofre um teste para ser adicionado a um aglomerado, e novamente cada aglomerado tem sua orientação alterada com probabilidade $\frac{1}{2}$.

2 METODOLOGIA

Os sistemas estudados são constituídos por redes bidimensionais quadradas e tridimensionais cúbicas simples de spins tipo Ising, conforme figuras 2.1 e 2.2 abaixo, ou seja cada spin na rede possui a liberdade de estar apontando para cima (*spin up* +1 ou 1) ou para baixo (*spin down* -1 ou 0). A dimensão linear, ou seja, o tamanho de um lado deste quadrado é $nspin$, portanto o sistema possuirá um número total de $nsites$ spins (com $nsites = nspin \times nspin$). Apesar do valor de $nspin$ ser arbitrário, iremos exibir resultados com $nspin = 128$, assim o número total de spins é $nsites = 16384$, para as redes bidimensionais e com $nspin = 32$ para as redes tridimensionais perfazendo $nsites = 32768$. A razão para a escolha destes valores para $nspin$ será explicitada mais adiante.

A orientação destes spins na rede quadrada é atribuída de forma aleatória; utilizando um algoritmo simples e que associa a orientação *up* (spin para cima) com um determinado valor de probabilidade p , ou seja, caso um número gerado aleatoriamente seja menor que uma certa probabilidade (p) e, caso contrário, tenha orientação em sentido contrário, *down* (spin para baixo) com o complementar da probabilidade ($1 - p$). Da teoria de percolação sabe-se que para uma rede quadrada, este modelo de distribuição de spins produzirá distribuições percolantes se e somente se $p \geq p_c = 0,5927$, conforme tabela 1.1 retirada de [2]. Assim, poderemos utilizar distribuições de spins cuja probabilidade seja menor ou maior que a probabilidade crítica p_c e, consequentemente, o comportamento do sistema será distinto nestas duas faixas de probabilidade.

A abordagem descrita acima gerará um conjunto de distribuições, dentre todas as distribuições obtidas quando $p \geq p_c$ serão aceitas somente aquelas que são percolantes, ou seja, estas são as que nos interessam. Para identificar os aglomerados e verificar se ocorre ou não percolação utilizamos o algoritmo de Hoshen-Kopelman [75], [79] discutido na seção 1.6.4. Vale lembrar que a teoria de percolação estabelece que somente os primeiros vizinhos são considerados para testar se o sistema percola ou não. Quando a probabilidade de percolação utilizada é menor que a probabilidade de percolação crítica, $p < p_c$, o fato de utilizar apenas sistemas percolantes não será aplicada. Ou seja, de modo geral não haverá percolação se os sistemas forem obtidos com

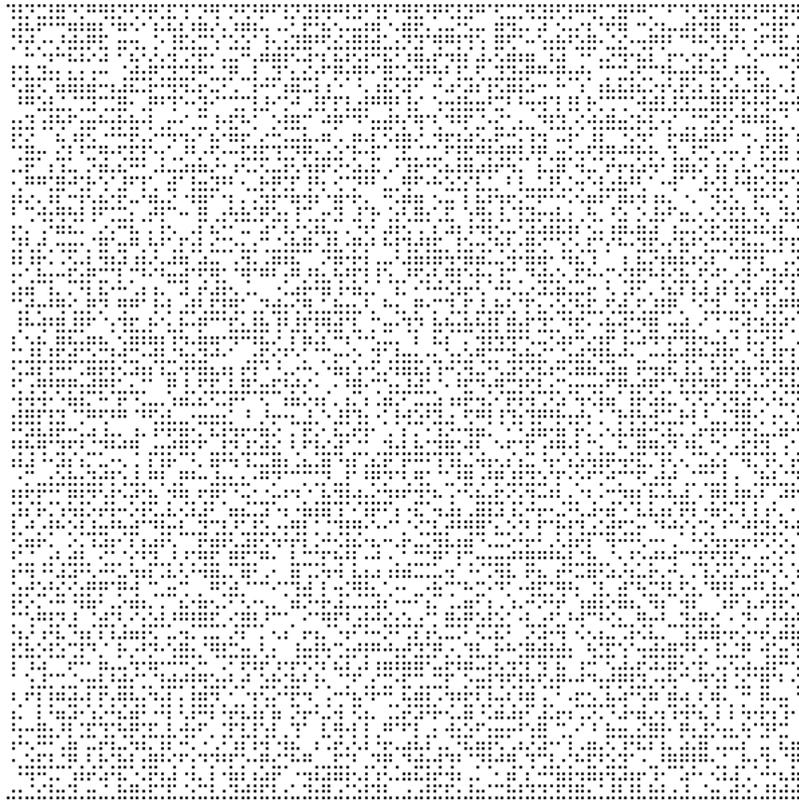


Figura 2.1: Distribuição inicial de uma rede bidimensional quadrada contendo 128×128 spins para um sistema percolante com $p = p_c = 0,592746$. Os pontos negros indicam spin para cima e os pontos brancos (dentro da rede) significam spin para baixo.

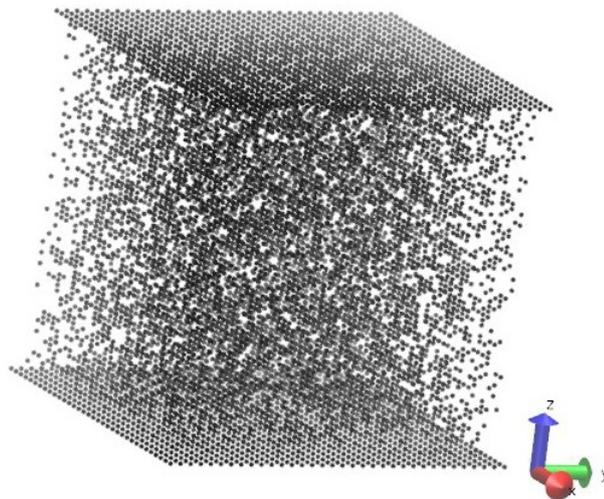


Figura 2.2: Distribuição inicial de uma rede tridimensional cúbica contendo $32 \times 32 \times 32 = 32768$ spins para um sistema percolante com $p = p_c = 0,3116$. Os pontos negros indicam spin para cima e os pontos brancos (dentro da rede) significam spin para baixo.

a utilização de uma probabilidade p menor que a crítica.

2.1 ALGO VARIA QUANDO O PARÂMETRO DE ORDEM É CONSERVADO?

Para uma dada distribuição de spins percolante, correspondente a uma das distribuições possíveis para um determinado valor de p , vamos manter um parâmetro de ordem constante, neste caso, a magnetização total do sistema.

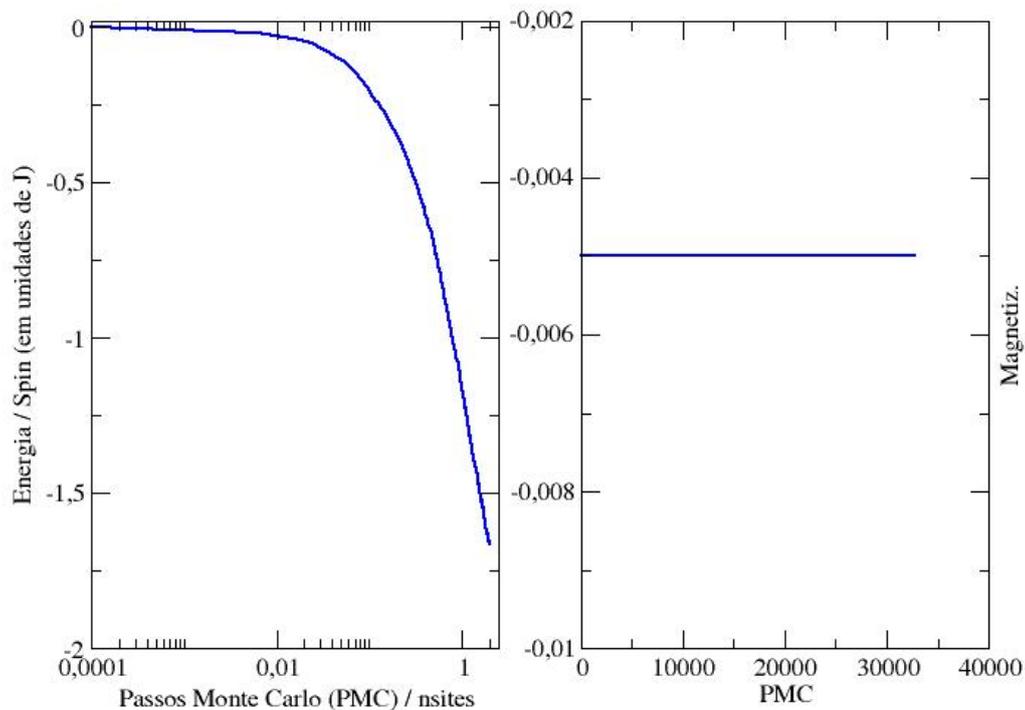


Figura 2.3: Variação de energia representada no gráfico à esquerda, e da magnetização por spin representada no gráfico à direita, de uma rede bidimensional quadrada contendo 128×128 spins para um sistema percolante com $p = p_c$. A temperatura do sistema é $T = 4.5J$, foi levada em consideração a dinâmica de Kawasaki e interações até segundos vizinhos.

Manter a magnetização constante, não significa que a energia permanecerá constante, como pode ser verificado na figura 2.3, com isso, deve-se avaliar qual a variação da energia entre duas configurações anterior e posterior à troca de orientação dos spins opostos. Se a variação de energia é negativa significa que esta troca é vantajosa em termos energéticos, ou seja, este *movimento*

é aceito, conforme mencionado anteriormente. Contudo se a variação de energia é positiva, o *movimento* só é aceito se ele satisfizer a estatística de Glauber. A palavra movimento está em itálico nas duas frases anteriores porque se observarmos as distribuições de spins ao longo dos PMC, as orientações dos spins se alteram de tal forma que nos dá a impressão que os spins se movimentam na rede como se fossem partículas. Assim, só contamos como PMC aquele que foi aceito pelo algoritmo, as situações rejeitadas não são contadas como PMC. da mesma forma

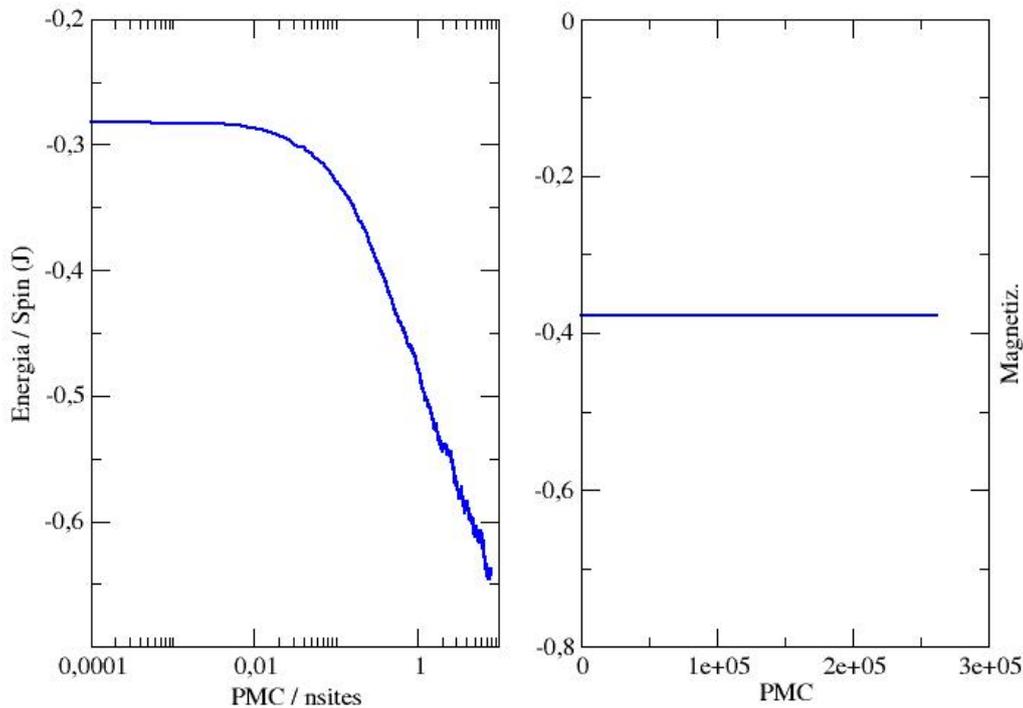


Figura 2.4: Variação de energia representada na parte (a) e da magnetização representada na parte (b), de uma rede tridimensional cúbica simples contendo $32 \times 32 \times 32 = 32768$ spins para um sistema percolante com $p = p_c$. A temperatura do sistema é $T = 5.0J$, foi levada em consideração a dinâmica de Kawasaki e interações até segundos vizinhos.

acontece para o caso tridimensional, a Figura 2.4 exhibe este comportamento. A energia por spin varia lentamente ao longo da simulação enquanto a magnetização total do sistema permanece constante. com isso serão utilizados a energia e o tamanho médio da fronteira (perímetro) para estudar o comportamento dos sistemas gerados no início do processos de relaxação.

2.2 A ESCOLHA PARA O TAMANHO DOS SISTEMAS

Uma questão importante consiste ao tamanho adotado para os sistemas em estudo, para os sistemas bidimensionais, a escolha de $nspin = 128$ está associada ao compromisso entre comportamento suave da energia ao longo dos PMC e do tempo de simulação. Na figura 2.5 exibimos o comportamento destas duas informações e podemos perceber que se formos além de $nspin = 128$ teremos intervalos de tempos proibitivos para efetuar as simulações. Por exemplo, com $nspin = 128$ ou $nsites = 16384$, demorou aproximadamente 68 horas para efetuar a simulação.

Da mesma forma, no caso tridimensional escolhemos o caso onde $nspin = 32$ e $nsites = nspin^3 = 32768$ por causa da limitação associado ao tempo de simulação dos sistemas.

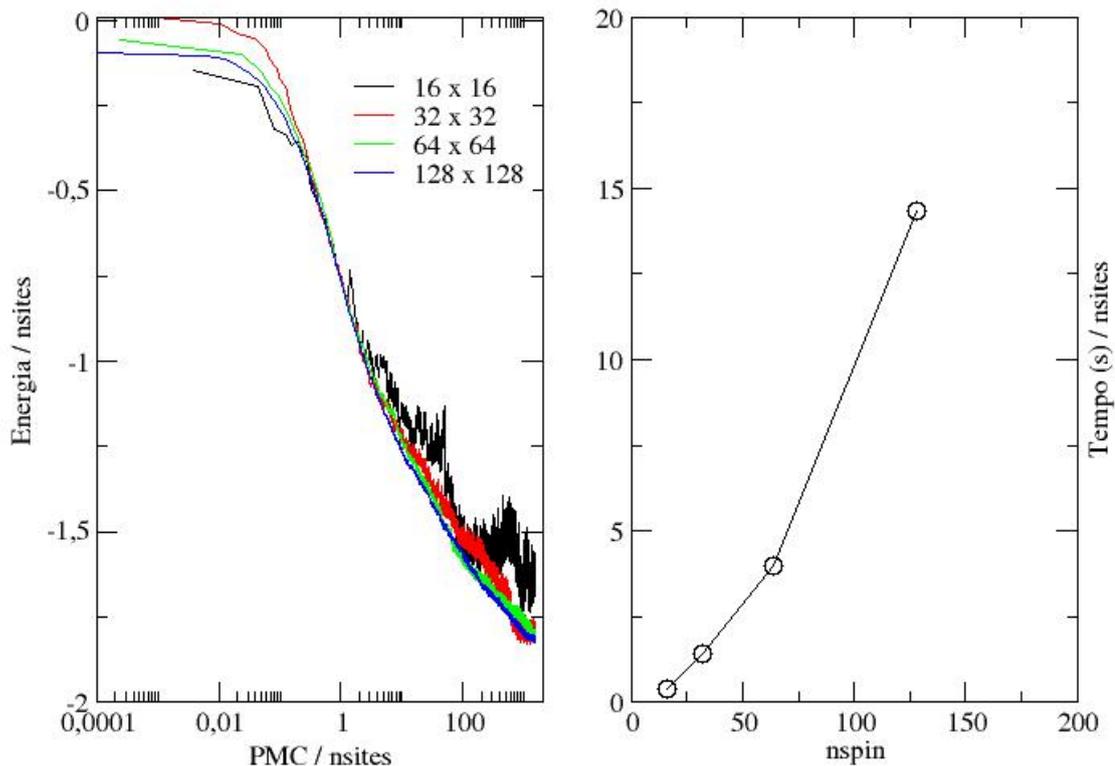


Figura 2.5: A esquerda podemos avaliar o comportamento suave da variação da energia à medida que aumentamos o número de spins no sistema. Por outro lado a direita temos um gráfico do tempo de simulação por spin para a obtenção das curvas à esquerda. Temperatura do sistema $T = 2J$, interações até primeiros vizinhos e dinâmica de Kawasaki.

2.3 TROCA DE ORIENTAÇÃO DE QUAIS SPINS?

A simulação de uma rede de spins percolantes como explicitado na seção 1.2.5, terá como base, a troca de orientação de spins que podem estar próximos (Spins Vizinhos) denominada de troca SpV, ou distantes que denominaremos de troca SpD. Por outro lado, em ambas abordagens, as interações podem ser consideradas até segundos vizinhos. Além disso, os spins são escolhidos aleatoriamente mesmo quando na troca SpV, uma vez que no máximo teremos 4 e 6 primeiros vizinhos, respectivamente no caso bi e tridimensional.

Para entender melhor o comportamento de um sistema típico, realizamos uma simulação e o resultado encontra-se ilustrado na figura 2.6. Podemos observar que: a) no gráfico à esquerda ilustramos o comportamento da energia relativa (veja eixo vertical nas figuras 2.3 e 2.4) em função dos PMC para as configurações adotadas nas interações SpD (em preto) e SpV (em vermelho) e, b) no gráfico à direita mostra como o tamanho relativo da fronteira (fronteiras entre spins up e down - que também podemos chamar de perímetro) varia em função dos PMC, tanto no cálculo das interações em SpV quanto na SpD. Ambas abordagens (SpD e SpV) com interações até primeiros vizinhos. Por tamanho relativo da fronteira entendemos como sendo o valor da razão entre o tamanho da fronteira (L_{PMC}) em dado PMC e o seu valor inicial (L_0). Da mesma forma, a energia relativa é interpretada como sendo a razão entre a diferença de energia ($|E_\infty| - |E_{PMC}|$) em um determinado PMC e o valor da diferença de energia no instante inicial ($|E_\infty| - |E_0|$). Observa-se que o comportamento dinâmico, para a energia relativa quanto para o comprimento das fronteiras (perímetro), é nitidamente distinto baseado nos resultados das simulações em trocas SpD e SpV. Nos parece que levando apenas as características de simulação SpV a dinâmica do sistema é mais lenta; mais a frente iremos discutir em detalhes este comportamento distinto.

O mesmo pode ser verificado para uma distribuição de spins obedecendo uma rede cúbica simples como indicado na figura 2.2. A figura 2.7 exhibe o comportamento da energia relativa por spin e do perímetro relativo em função dos PMC. Comparações entre as figuras 2.6 e 2.7 determinam que os dois sistemas possuem comportamentos semelhantes para a propriedades exibidas tanto para a troca SpD quanto para a SpV.

Os gráficos das figuras 2.6 e 2.7 nos informam que as trocas envolvendo spins vizinhos (SpV) são aquelas que possuem um comportamento dinâmico menos acentuado. Isto quer dizer que, em princípio, as trocas associadas aos spins distantes (SpD), conduzem o sistema a varrer o espaço de fase de forma distinta da troca envolvendo SpV. Como a maneira de varrer o espaço de fase é distinta, o comportamento dinâmico deve também acompanhar esta tendência.

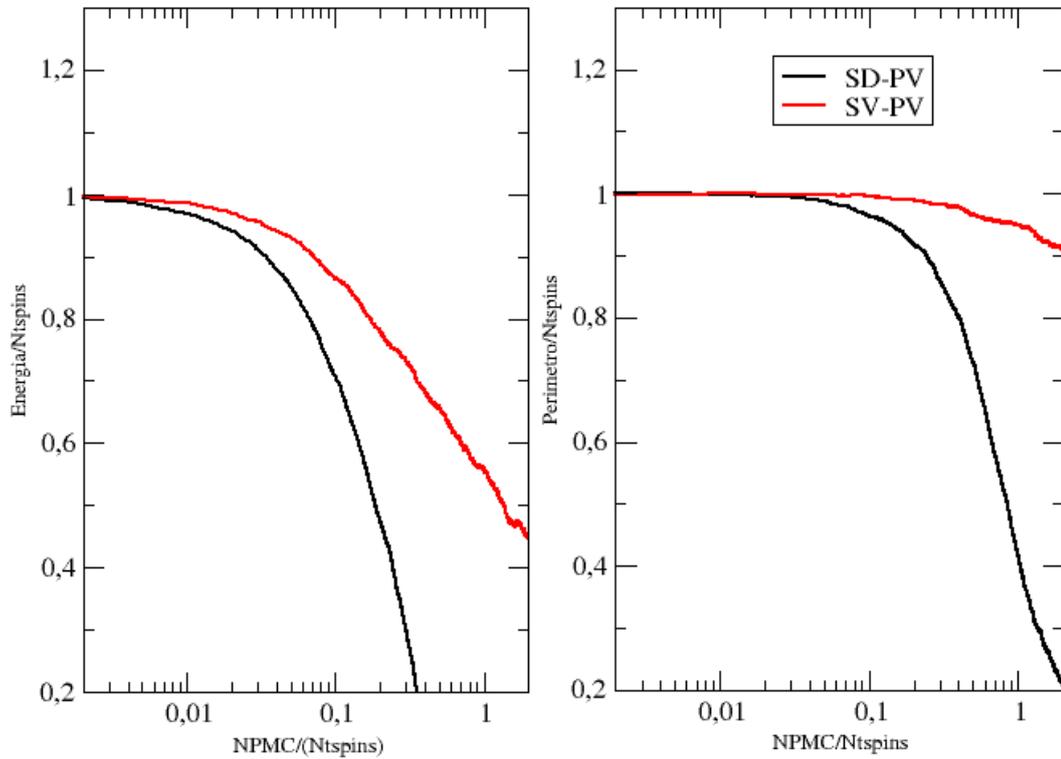


Figura 2.6: Comportamento da energia lado esquerdo e do perímetro relativo à direita na figura, representando a interação e mudança de orientação do spin na abordagem SpV e em preto e SpD em vermelho, para sistemas bidimensionais. A temperatura do sistema é $T = 3.5J$, com interações até primeiros vizinhos.

Acreditamos que, além de proporcionar uma dinâmica mais lenta, a abordagem de troca SpV permite uma comparação mais apropriada, quando estamos interessados em estudar sistemas percolantes.

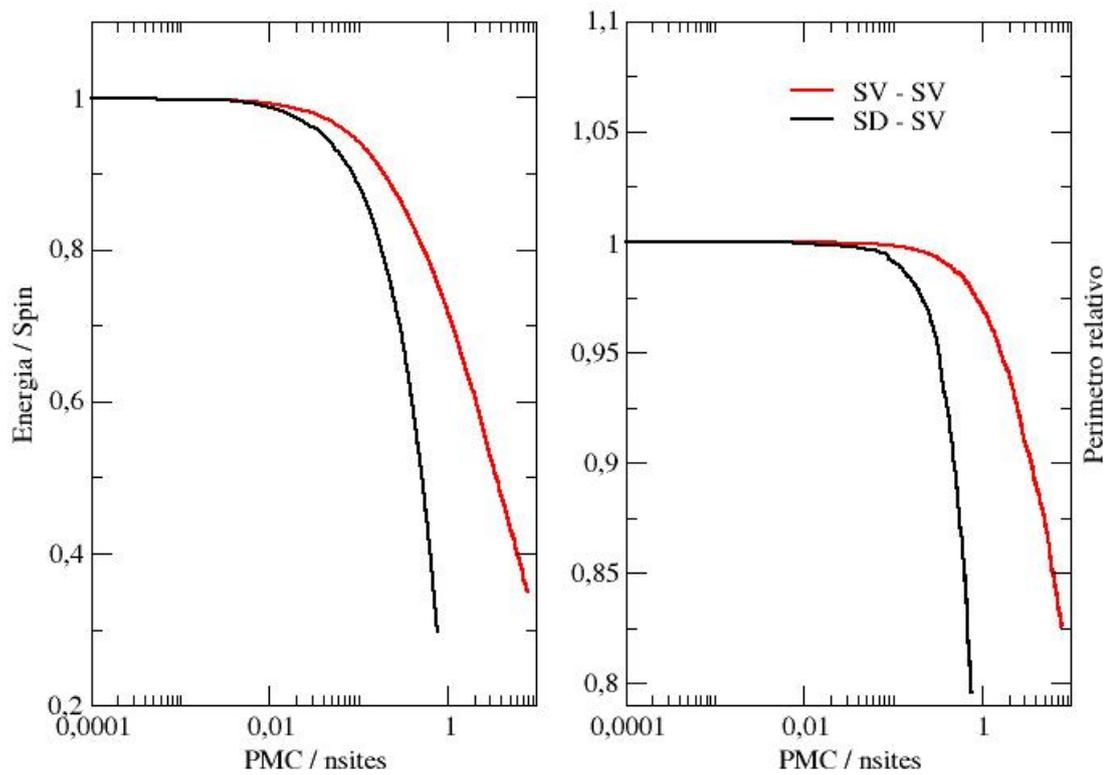


Figura 2.7: Comportamento da energia lado esquerdo e do perímetro relativo à direita na figura, representando a interação e mudança de orientação do spin na abordagem SpV em preto e SpD em vermelho para sistemas tridimensionais. A temperatura do sistema é $T = 3.5J$, com interações até segundos vizinhos.

3 ESTUDOS FUTUROS

3.1 INTRODUÇÃO

Os resultados apresentados foram obtidos através das simulações realizadas envolvendo a metodologia descrita no Capítulo 2 juntamente com a seção 1.3. O problema continua sendo o comportamento de sistemas magnéticos com parâmetro de ordem conservado, que em nosso caso é a *magnetização*, mantida constante durante todas as simulações. De início, é gerado um sistema com uma determinada distribuição de spins com probabilidade de percolação $p = p_c = 0.592746$ para as redes quadradas bidimensionais e $p = p_c = 0,3116$ para as redes cúbicas simples, conforme Tabela 1.1. Em seguida, utilizamos o algoritmo de Hoshen-Kopelman [75], [79] para verificar se a estrutura gerada percola ou não, conforme descrito nos Capítulo 2 seção 1.2.5. Um exemplo para sistemas bidimensionais percolantes encontra-se na Figura 2.1 e outro para sistemas tridimensionais na Figura 2.2. Caso o sistema seja percolante, o *processo de simulação* é executado.

Nas Figuras citadas acima, os spins *up* são representados pelos pontos negros e os *down* representados por espaços brancos, as distribuições apresentadas, obtidas quando $p = p_c$, exibe portanto uma situação com percolação. Além disso, a Figura 2.1 exibe duas linhas de spins *up* no topo e na parte de baixo, na interpretação de que o modelo de Ising com o parâmetro de ordem conservado pode ser analisado como uma rede de gás, as linhas de spins, acima e abaixo, representam duas paredes que exercem pressão sobre o gás - influência externa (campo externo) sobre o sistema. A Figura 2.2 exibe um plano de spins acima e abaixo para representar a influência externa.

Conforme discutido no final do Capítulo 2: o processo de simulação prevê a utilização da probabilidade de de Glauber para aceitar/recusar uma determinada configuração de spins, baseado em valores de diferença de energia de configurações sucessivas a temperatura finita. Esta abordagem nos possibilita varrer de forma coerente o espaço de fase dos estados microscópicos acessíveis ao sistema mantendo fixo o parâmetro de ordem (magnetização) - algoritmo de Kawasaki.

O estudo para a determinação da constante a_2 , encontram-se baseados nos resultados relacionado à forma com que a energia e o tamanho da fronteira respondem aos parâmetros físicos de interesse, ou seja, em função da escolha das condições iniciais e com as quais vamos obter informações sobre o sistema. Apesar do tamanho da fronteira representar melhor o processo de relaxação, os resultados aqui representados serão mostrados em função dos dois parâmetros que conseguimos expressar o comportamento do sistema que é a energia e o tamanho dos aglomerados (perímetro), para isso adotou-se a seguinte estratégia:

1. Mapear a relação que existe entre a concentração de spins (relação entre spins *up* e *down*) com os valores de a_2 para sistemas bi e tridimensionais;
2. Mapear como a temperatura influencia os valores de a_2 para sistemas bi e tridimensionais.

Associado a esta estratégia, todas as simulações foram repetidas com valores distintos de sementes para geração de números aleatórios. Este enfoque nos possibilita mapear um número extraordinariamente grande de microestados acessíveis aos sistemas com o objetivo de determinar valores médios confiáveis para a constante a_2 nas diversas situações descritas nos itens acima.

3.2 AÇÃO DE AGENTE EXTERNO

Os sistemas estudados não possuem condições periódicas de contorno. Neste sentido, é possível simular como a ação de agentes externos influenciam suas propriedades físicas. Nos casos bidimensionais que iremos analisar, quem fará o papel de um campo de interação externo são duas linhas de spins posicionadas no topo e base do sistema - como podemos observar na Figura 2.1. Em relação aos casos tridimensionais, são dois planos de spins também posicionados da mesma forma - observar na Figura 2.2.

A influência destes campos externos pode ser analisada respondendo à seguinte questão: se eles não existissem, como o sistema se comportaria? Nossos conhecimentos de Física Estatística nos levam a imaginar que o sistema evoluiria naturalmente para apresentar, nas situações de menor energia, segregação completa envolvendo as duas orientações de spins.

Para confirmar ou não esta suspeita, retiramos estas duas linhas (ou estes dois planos no caso 3D) e efetuamos simulações e o resultado encontrado em termos de (energia e perímetro por partícula) de distribuição de spins pode ser observado nas Figuras 3.1, 3.2, 3.3 e 3.4. Estas figuras exibem o comportamento do sistema em quatro situações distintas (todas as configura-

ções iniciais são semelhantes à exibida na Figura 2.1, além disso todos os instantâneos foram obtidos nos mesmos PMC):

1. Figuras 3.1 se referem ao sistema com trocas envolvendo spins vizinhos próximos (SpV) e interações de primeiros vizinhos (PV), podemos observar que durante toda a simulação as características do sistema permanecem as mesmas. Visualmente não há alteração significativa no sistema - continua com configurações percolantes;
2. Figuras 3.2 se referem ao sistema com trocas envolvendo spins vizinhos próximos (SpV) e interações até segundos vizinhos (SV), observamos que o comportamento é significativamente distinto do caso anterior. O sistema evolui, ao longo da simulação, de tal forma que surgem distribuições de spins que conduzem a um comportamento semelhante àquele encontrado em blendas poliméricas em suas fases lamelares - veja figuras ilustrativas em [81, 82], obtidas utilizando a técnica AFM no modo fase. Visualmente há alteração significativa no sistema - apesar de continuar exibindo configurações percolantes;
3. Figuras 3.3 estão associadas a um sistema onde ocorre trocas envolvendo spins distantes (SpD) e interações de primeiros vizinhos (PV), este caso é distinto dos anteriores. Nos parece que a distribuição de spins com orientações para cima (ou para baixo) não é uniforme ao longo do plano. A evolução do sistema apresenta bastantes semelhanças com o primeiro caso estudado;
4. Figuras 3.4 estão associadas a um sistema onde ocorre trocas envolvendo spins distantes (SpD) e interações até segundos vizinhos (SV). Aqui verificamos o que supusemos anteriormente, uma segregação completa dos spins. Ou seja, é a única situação onde ocorre este fato.

Portanto, analisando estas Figuras em conjunto, podemos perceber que o sistema apenas evolui para segregação completa na situação onde a interação ocorre até segundos vizinhos e troca de spins envolvendo sítios distantes (Figuras 3.4). Contudo, quando analisamos os gráficos de variação de perímetro relativo ao longo da simulação Figuras 3.5 percebemos que o comportamento do sistema em função do número de PMC nos leva a considerar que:

1. Comparando as colunas de gráficos percebemos que as interações até segundos vizinhos (coluna à direita) permite que o sistema se comporte de forma mais estável, ou seja não ocorre tantas flutuações - principalmente quando analisamos as configurações mais no final das simulações. Os eixos verticais indicam que os sistemas evoluem para menores perímetros claramente evidenciados nas situações de tipo fase lamelar na Figura (c) de

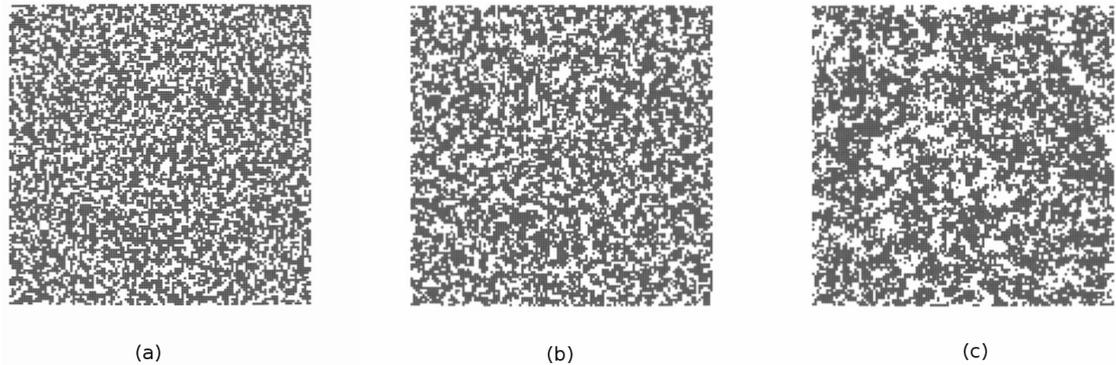


Figura 3.1: Figuras mostrando a distribuição de spins em três instantes distintos (em (a) $PMC = 1 \times 10^4$, em (b) $PMC = 8 \times 10^4$ e em (c) $PMC = 697 \times 10^4$) na situação de troca de spins vizinhos (SpV) e interações de primeiros vizinhos (Prim-Viz). A temperatura do sistema é $T = 5.0J$.

3.2 e completa segregação indicado na Figura (c) de 3.4. Observando a inclinação no final da Figura (b) de 3.5 podemos especular que eventualmente a fase lamelar na Figura (c) de 3.2 evolua para a completa segregação como indicado na Figura (c) de 3.4;

2. Comparando as linhas de gráficos percebemos que a troca de orientações envolvendo spins distantes (SpD - segunda linha) permite que o sistema alcance menores perímetros em intervalos de tempo (PMC) mais curtos. Assim, poderíamos especular que a troca SpD se comporta como uma espécie de técnica de envelhecimento (*aging*) para o sistema. Isto significa dizer que uma troca SpD pode ser representada por diversas trocas SpV consecutivas - indicando a existência de uma cadeia de Markov com trocas SpV representando uma única troca SpD;
3. Dos gráficos podemos perceber que as situações ilustradas a tempos avançados na Figura (a) eventualmente conduzem às configurações semelhantes às do final da Figura (c) após um intervalo de tempo extremamente longo. Neste sentido, podemos também especular que estas configurações na Figura (a) podem ser consideradas como *metaestáveis*;
4. Assim, eventualmente, após experimentar todas as configurações estatisticamente possíveis o sistema evoluiria para a segregação completa. Em alguns casos, exemplificado pelas Figuras 3.1 e (a) de 3.5, o intervalo tempo para isto ocorrer seria proibitivo. Este fato não impacta de forma definitiva nossa pesquisa, pois não estamos interessados no comportamento do sistema a tempos longos.

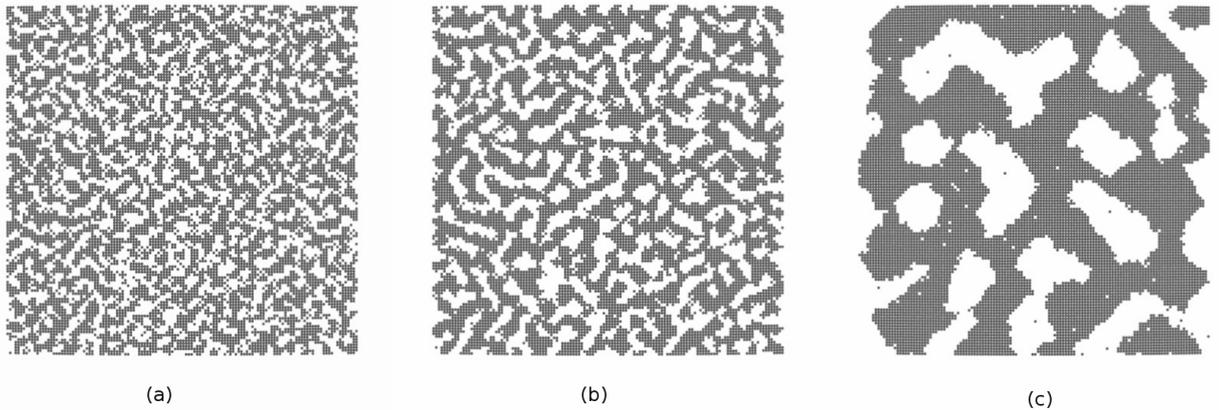


Figura 3.2: Figuras mostrando a distribuição de spins em três instantes distintos (em (a) $PMC = 2 \times 10^4$, em (b) $PMC = 8 \times 10^4$ e em (c) $PMC = 697 \times 10^4$) na situação de troca de spins vizinhos (SpV) e interações até segundos vizinhos (Seg-Viz). A temperatura do sistema é $T = 5.0J$.

De certa forma, o comportamento a longos tempos não deve ser diferente nas situações com ou sem influência externa. Com efeito, as Figuras 3.6 exibem este comportamento na situação de troca de orientação de spins distantes com interações até segundos vizinhos com a presença de influência externa. A longos tempos existe a segregação completa Figura (c) como no caso sem influência externa, a diferença principal é que a ação do agente externo provoca uma distribuição estatisticamente uniforme dos spins ao longo do sistema. Por outro lado, nos instantes iniciais - Figuras (a) e (b) - percebe-se diferenças estruturais na distribuição dos spins quando comparados àquelas referentes ao mesmo caso sem influência externa Figuras 3.4.

O fato de estarmos interessados em entender a dinâmica deste tipo de sistema é porque suas características nos leva a crer que obedeça a um comportamento mais geral, também observado em uma grande variedade de experimentos envolvendo interação com campos externos. Estes fenômenos podem ser descritos por uma expressão matemática que traduz o aspecto de relaxação lenta:

$$f(x) = a_0 \exp(-a_1 x^{a_2}), \quad (3.1)$$

onde a_0 , a_1 e a_2 são constantes características de cada tipo de processo estudado. O caráter atribuído à relaxação lenta está associado ao fato de que a constante a_2 estar contida entre $0 < a_2 < 1$. As curvas exibidas na Figura 3.7 indicam que podemos analisar como a energia varia ao longo dos PMC, e a direita desta figura temos um ajuste de curva utilizando a exponencial estendida da equação 3.1. Dentro deste gráfico temos ainda os valores das constantes a_0 , a_1 e a_2 . Verificamos que $a_2 < 1$, ou seja este sistema apresenta relaxação lenta.

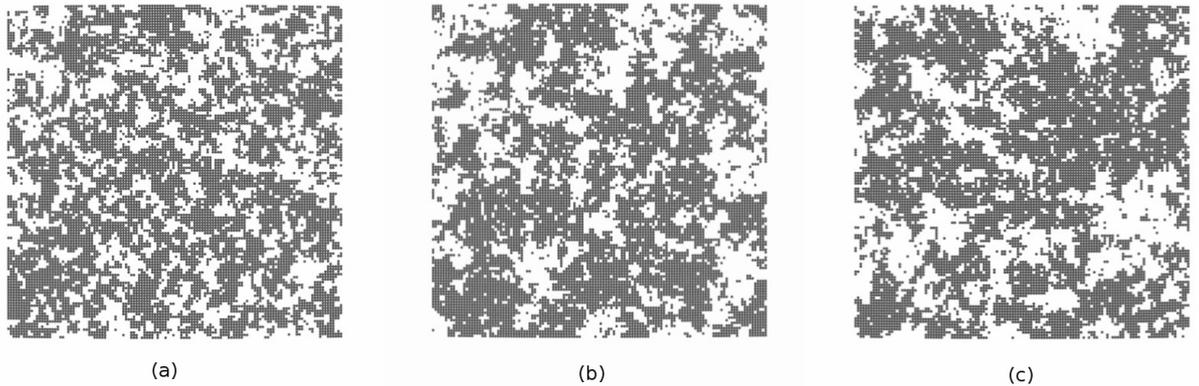


Figura 3.3: Figuras mostrando a distribuição de spins em três instantes distintos (em (a) $PMC = 2 \times 10^4$, em (b) $PMC = 8 \times 10^4$ e em (c) $PMC = 697 \times 10^4$) na situação de troca de spins distantes (SpD) e interações de primeiros vizinhos (Prim-Viz). A temperatura do sistema é $T = 5.0J$.

Agora vamos buscar os valores de a_2 , com o intuito de verificar ser o processo de relaxação lenta é um comportamento bem mais geral, ao que se apresenta em sistemas fractais. Para isso vamos determinar as equações que descreve o fitting e com isso encontrar o valor da constante a_2 .

Observando os resultados apresentados acima, bem como as Figuras 3.10 e 3.11 que representam a evolução do comportamento dos sistemas bidimensionais em distintas configurações ao longo da simulação, pode-se verificar a característica da interação com abordagem SpV na Figura 3.10 e com interação SpD mostrado na Figura 3.11 ao longo dos PMC distintos. Pode-se verificar que na abordagem SpV mais uma vez, a dinâmica do sistema possui um comportamento sob o ponto de vista da relaxação lenta, mais lento do que na dinâmica realizada para o processo de interação com SpD.

Para sistemas tridimensionais, o comportamento da evolução dinâmica dos sistema deve apresentar o mesmo caráter da relaxação lenta? Os resultados encontram-se caracterizados nas Figuras 3.12 e 3.13 com suas respectivas equações, onde observar-se que os valores encontrados para a constante a_2 são menores que 1 tanto para a energia quanto o tamanho médio das fronteiras.

Quando analisamos os resultados apresentados acima, bem como as Figuras (3.10, 3.11) que representam os sistemas bidimensionais, em PMC distintos com abordagem SpV e SpD durante a simulação, pode-se verificar que a abordagem SpV demora um pouco mais (número de PMC) para a formação dos aglomerados em relação ao processo de interação SpD. Este

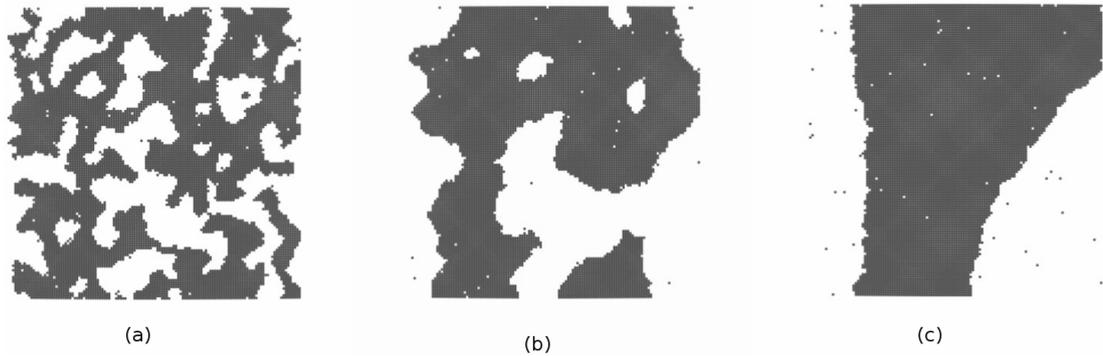


Figura 3.4: Figuras mostrando a distribuição de spins em três instantes distintos (em (a) $PMC = 2 \times 10^4$, em (b) $PMC = 8 \times 10^4$ e em (c) $PMC = 697 \times 10^4$) na situação de troca de spins distantes (SpD) e interações de segundos vizinhos (Seg-Viz). A temperatura do sistema é $T = 5.0J$.

comportamento nos interessa, pois estamos focados em como o sistema evolui nos instantes iniciais da simulação.

O mesmo pode ser observado nas Figuras (3.14, 3.15) que representam algumas propriedades dos sistemas tridimensionais, as estruturas de spins foram geradas utilizando a p_c referente à rede cúbica simples - Tabela 1.1. Estas Figuras exibem na parte superior o comportamento de energia e perímetro ao longo dos PMC, na parte inferior o comportamento da magnetização relativa para dois planos da rede cúbica (um interno e outro externo) ao longo da simulação. No caso tridimensional não exibiremos figuras de distribuição de spins pois são de difícil análise uma vez que as diferenças entre as configurações - mesmo quando distantes em PMC - é de difícil percepção. Este é o motivo de escolhermos outras propriedades que exibem de forma mais clara o comportamento das configurações.

Antes de discutirmos estas Figuras vale a pena explicar o que os termos plano e espaço significam em suas legendas. Apesar das interações ocorrerem no espaço:

- o indicativo **plano** - significa que as trocas de spins ocorrem no mesmo plano envolvendo spins de orientações distintas, o que nos leva a imaginar que a magnetização relativa nos planos permanecem constantes ao longo dos PMC;
- o indicativo **espaço** - significa que as trocas de spins ocorrem no espaço envolvendo spins de orientações distintas, o que nos leva a crer que a magnetização relativa nos planos se alteram durante a simulação. Desta forma, por esta informação ser mais rica que a

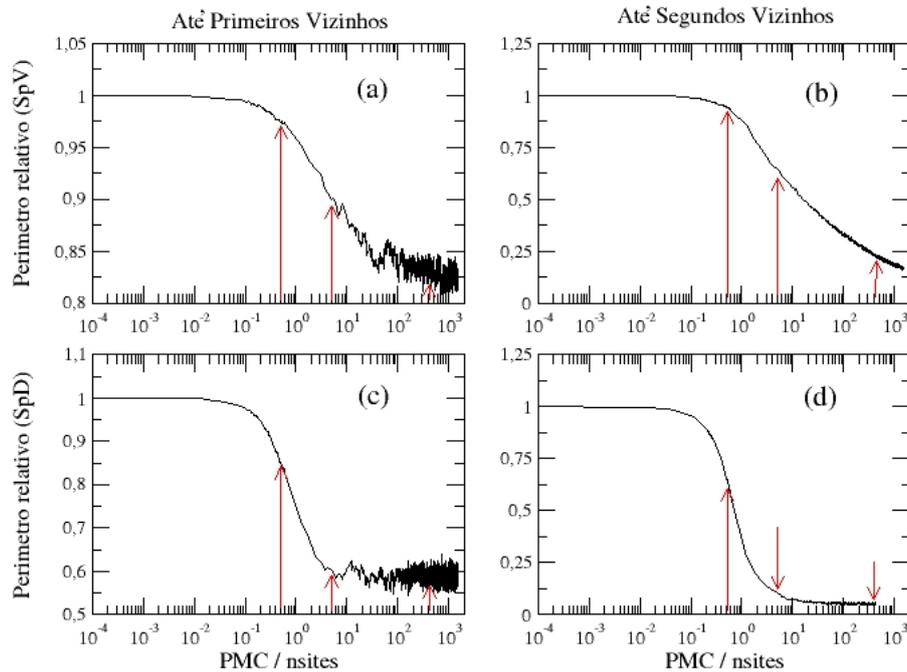


Figura 3.5: Figuras mostrando a variação do perímetro relativo em função dos PMC, a primeira linha de gráficos se refere a troca de orientação envolvendo spins vizinhos (SpV) (a) e (b), enquanto a segunda coluna de gráficos está associada à troca de orientação envolvendo spins distantes (SpD) (c) e (d). As flexas vermelhas verticais indicam onde os instantâneos das Figuras 3.1, 3.2, 3.3 e 3.4 foram tirados. Gráficos da coluna à esquerda (a) e (c) interações de primeiros vizinhos, ao passo que gráficos à direita (b) e (d) interações até segundos vizinhos. A temperatura do sistema é $T = 5.0J$.

situação anterior (plano) é este comportamento que é apresentado na parte inferior das Figuras (3.14, 3.15).

A Figura 3.14, exhibe estas propriedades quando consideramos apenas interações entre primeiros vizinhos tanto para troca de spins vizinhos (SpV) quanto para spins distantes (SpD). Novamente aqui percebemos que o comportamento de trocas de SpV possui um comportamento mais lento tanto para energia quanto para perímetro (curvas preta e vermelha) quando comparado ao comportamento das trocas SpD (curvas verde e azul). Observando o comportamento destes dois grupos percebemos que, do ponto de vista dos PMC, eles caminham mais ou menos da mesma forma - uma vez que as curvas se sobrepõem em grande parte. Isto quer dizer, que do ponto de vista de energia e perímetro, é difícil perceber na média diferenças entre as abordagens de trocas no plano ou espaço.

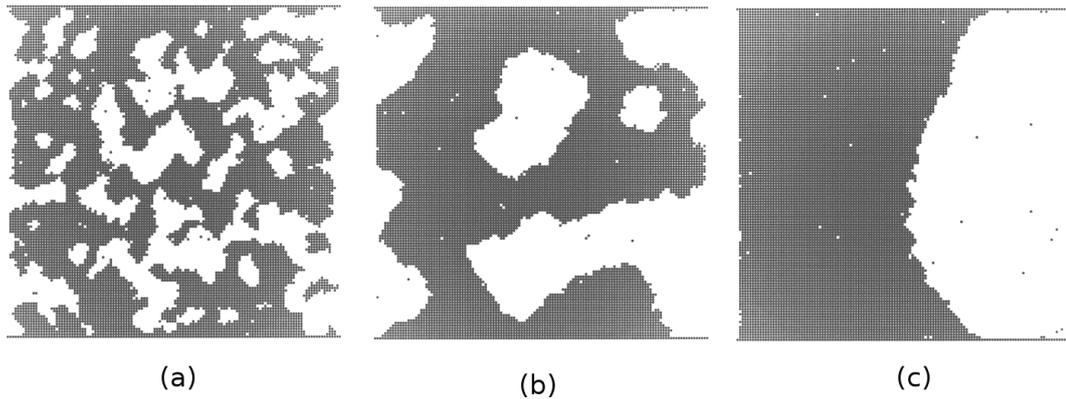


Figura 3.6: Figuras mostrando a distribuição de spins quando existe influência externa em três instantes distintos (em (a) $PMC= 2 \times 10^4$, em (b) $PMC= 8 \times 10^4$ e em (c) $PMC= 697 \times 10^4$) na situação de troca de spins distantes (SpD) e interações de segundos vizinhos (Seg-Viz).

Compare estas figuras com as Figuras 3.4. A temperatura do sistema é $T = 5.0J$.

Por outro lado, quando analisamos as magnetização relativa, gráficos inferiores nesta mesma Figura envolvendo um plano externo (curva preta) e outro interno (curva vermelha) à estrutura:

- percebemos que no caso de SpV a magnetização oscila mas parece que tende a manter uma média;
- enquanto que no caso SpD parece que existe uma pequena migração de spins para a parte externa da estrutura. Se imaginarmos que SpD é um envelhecimento do SpV, seria de se esperar que após um longo período de tempo o caso SpV também exibisse este tipo de comportamento. Podemos imaginar que este comportamento ocorre porque nosso sistema não possui periodicidade.

Vale a pena enfatizar que, apesar da magnetização relativa nos planos se alterarem, a magnetização total do sistema - que é o nosso parâmetro de ordem - fica constante durante todas as simulações.

No caso da Figura 3.15, na parte superior, percebemos um comportamento mais diferenciado. As simulações com trocas no plano *descolam* das com trocas no espaço mesmo nos estágios iniciais. Sendo que a troca no espaço tendo um comportamento de estabilização mais precoce que seu similar com troca no plano (SpV - curvas cores preta e vermelha, SpD - curvas cores verde e azul). Ainda quanto a precocidade, o comportamento com trocas SpD é mais rápido que aqueles com trocas SpV.

Quanto a magnetização relativa envolvendo camadas interna (curva vermelha) e externa (curva preta), gráficos na parte inferior da Figura 3.15, podemos perceber uma migração de

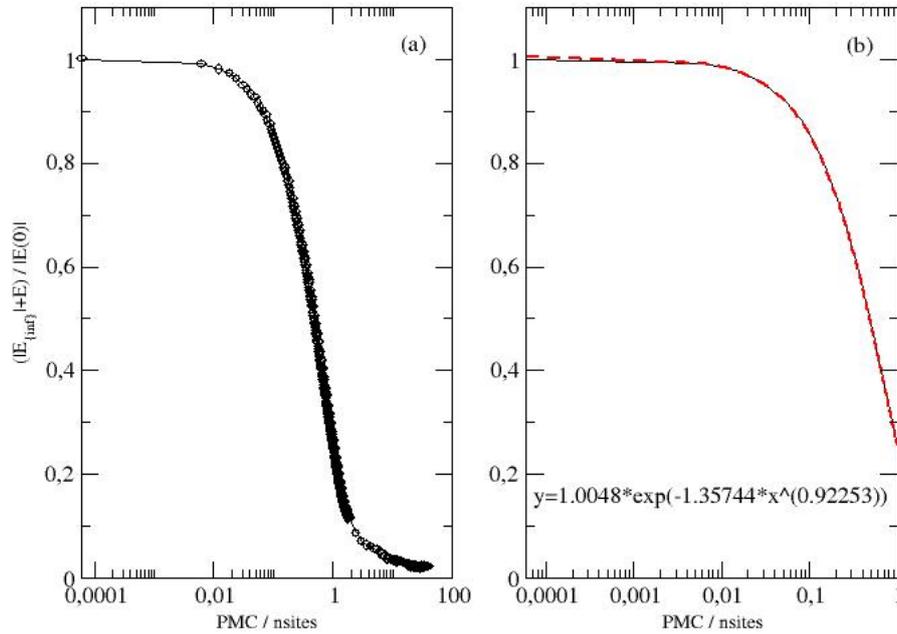


Figura 3.7: Comportamento da energia considerando somente interações entre primeiros vizinhos para redes bidimensionais: a) a simulação completa de trocas SpV e b) escolha de uma parte do gráfico (a) para demonstrar como é feito o ajuste "non linear curve fitting". A temperatura do sistema, em unidades de J , é $T = 4.0$.

spins de camadas internas para camadas externas. Contudo, tanto para trocas SpV quanto SpD isto acontece muito mais cedo durante as simulações. Poderíamos inferir que interações até segundos vizinhos - da mesma forma que no caso bidimensional - tendem a estabilizar mais cedo os sistemas e devido à falta de periodicidade dos sistemas há migração de spins para a parte externa das configurações.

Assim, dos diversos estudos e simulações efetuadas neste Capítulo podemos concluir que: adotando-se a trocas SpV (spins vizinhos) e interações de PV (primeiros vizinhos) os sistemas sob o ponto de vista da relaxação lenta [12] são mais adequados, com um comportamento bem característico em função dos PMC.

Para analisar de forma coesa os resultados bi e tridimensionais exibimos na Figura 3.16 o comportamento da variação do perímetro ao longo dos PMC para sistemas bi tridimensionais. Esta Figura ilustra como os sistemas tridimensionais possuem comportamento mais lento que os sistemas bidimensionais. Não importando se estamos levando em consideração se a magnetização em cada plano é mantida constante ou não, além da magnetização total (que é o nosso

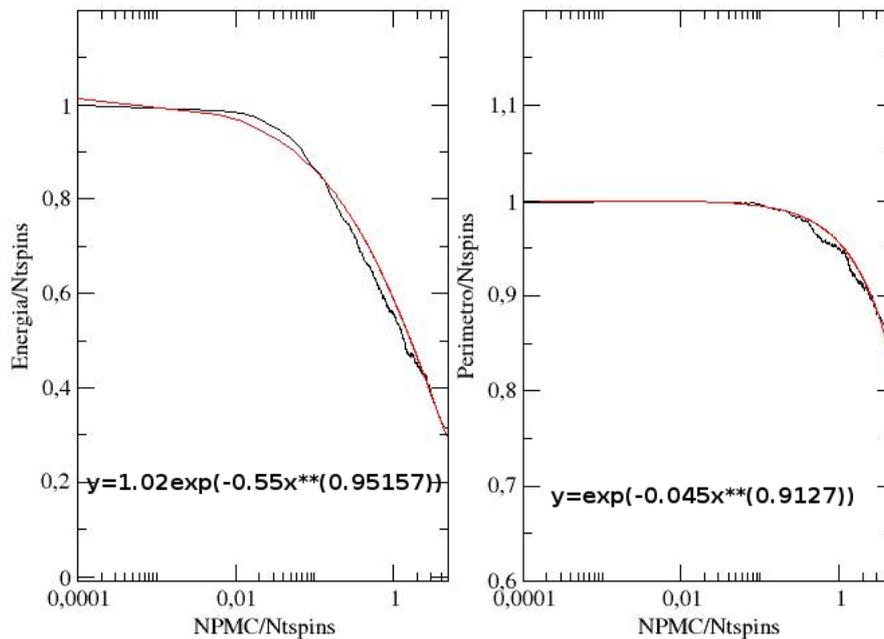


Figura 3.8: Comportamento da energia e do tamanho da fronteira na abordagem SpV, considerando somente interações entre primeiros vizinhos para redes bidimensionais utilizando o processo de "non linear curve fitting". A temperatura do sistema, em unidades de J , é $T = 4.0$.

parâmetro de ordem). Observando as escalas verticais (perímetro relativo) mesmo nas situações mais extremas, troca de spins distantes e interações até segundos vizinhos, percebemos que o caso tridimensional se comporta de forma muito mais lenta que o caso bidimensional.

Devido ao fato dos sistemas apresentarem as mesmas características que um sistema fractal sob o ponto de vista da descrição matemática, são dois os parâmetros físicos que podem ser estudados, conforme apresentado anteriormente, a energia e perímetro (ou tamanho da fronteira), bem como se existe alguma peculiaridade ou particularidade na descrição dos sistemas físicos. Pode-se ainda verificar, quais dos dois parâmetros pode ser melhor como indicador das características do problema, tanto para redes bidimensionais quadradas quanto para redes tridimensionais cúbicas, para isso, várias simulações foram realizadas e através dos resultados gráficos apresentados, faremos através de *non linear curve fitting* a determinação dos valores para as constantes a_0 , a_1 e a_2 . Sendo assim, vamos analisar como estas constantes se comportam através da seguinte metodologia:

- Mapear a relação que existe entre a concentração de spins (relação entre spins *up* e *down*)

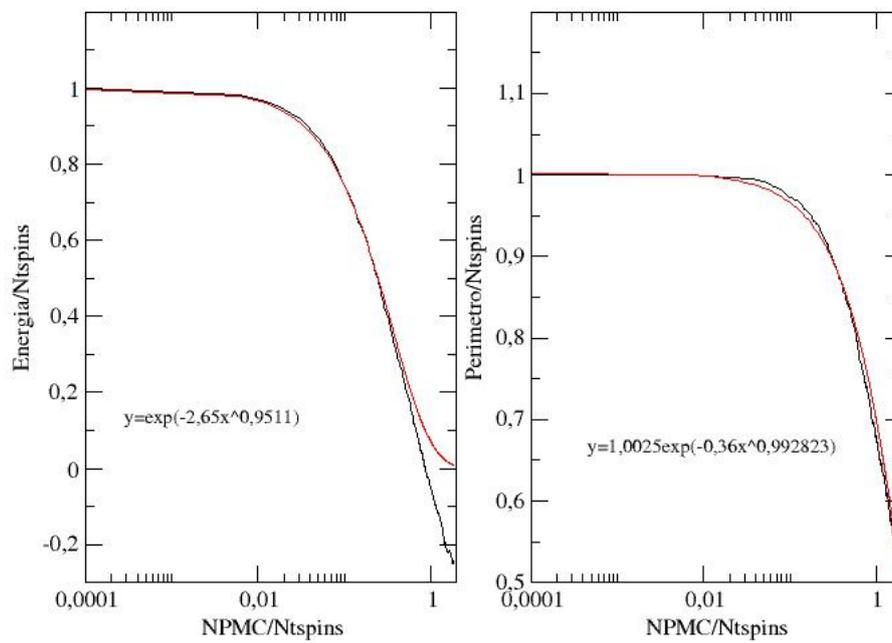


Figura 3.9: Comportamento da energia e do tamanho da fronteira na abordagem SpD, considerando somente interações entre primeiros vizinhos para redes bidimensionais utilizando o processo de "non linear curve fitting". A temperatura do sistema, em unidades de J , é $T = 4.0$.

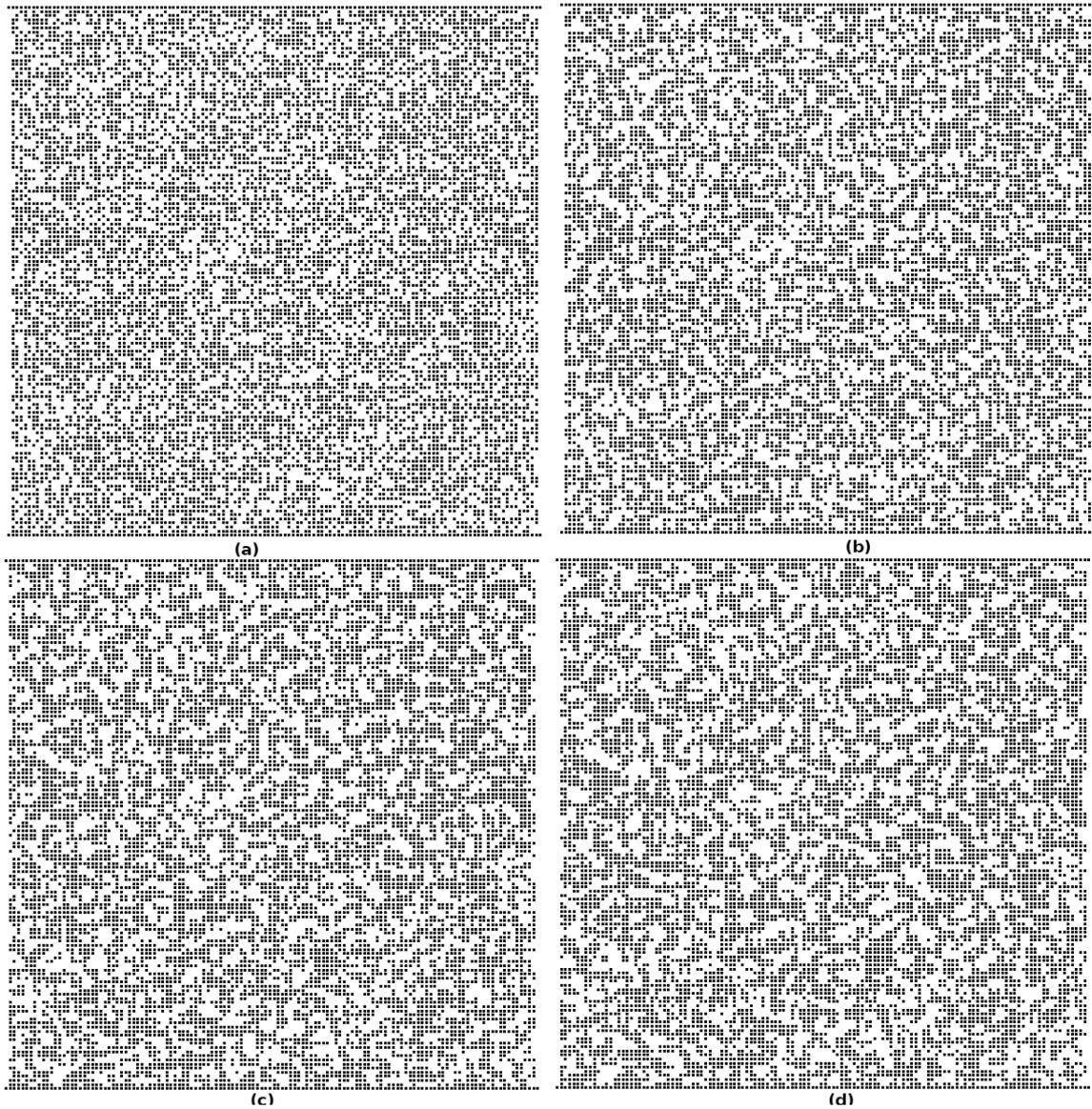


Figura 3.10: Evolução do sistema ao longo de PMC para: (a) configuração inicial, (b) 10000 PMC, (c) 22370 PMC e (d) 32768 PMC, com abordagem SpV e somente interações entre primeiros vizinhos para redes bidimensionais. A temperatura do sistema, em unidades de J , é $T = 4.0$.

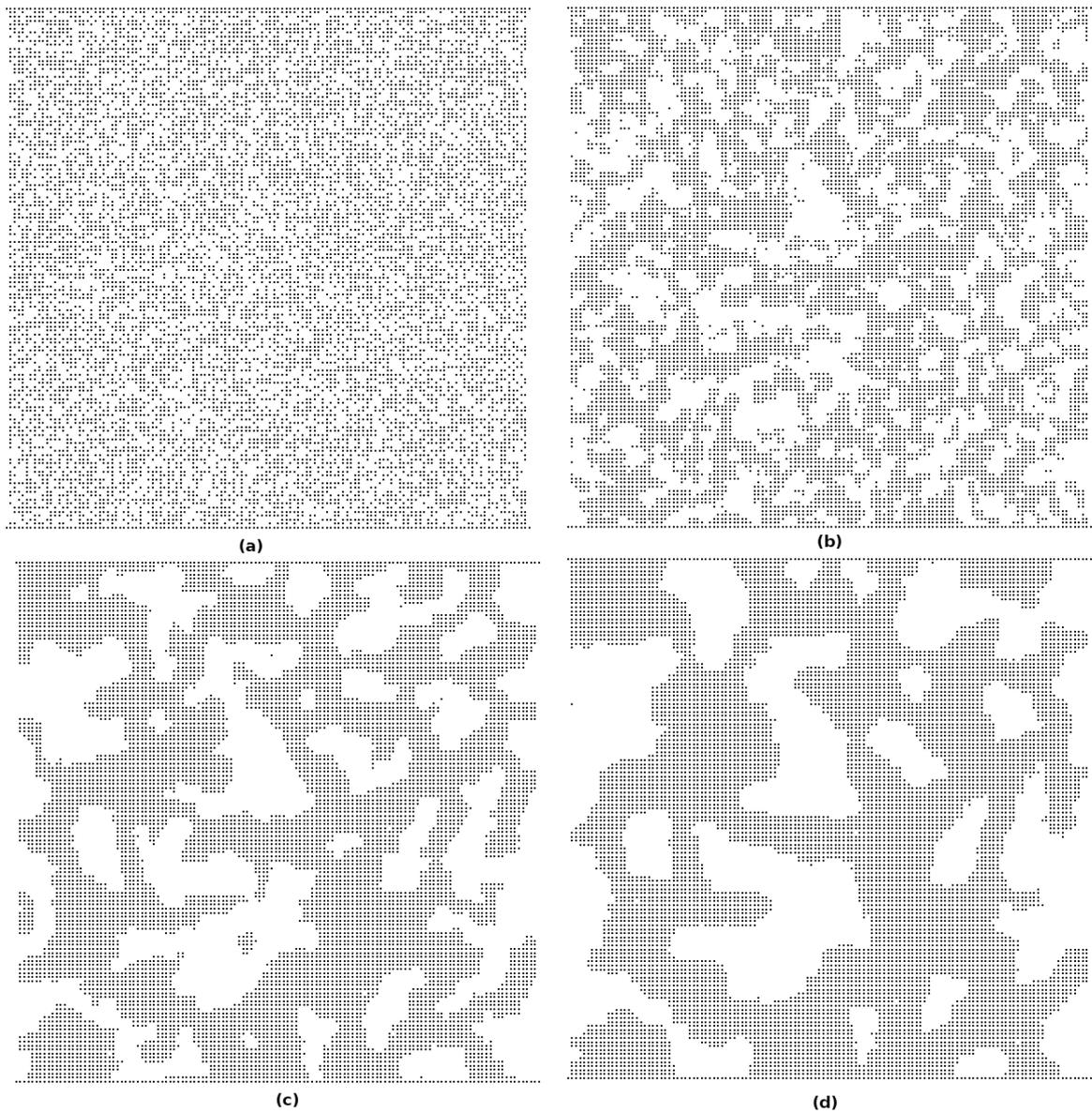


Figura 3.11: Evolução do sistema ao longo de PMC para: (a) configuração inicial, (b) 10000 PMC, (c) 22370 PMC e (d) 32768 PMC, com abordagem SpD e somente interações entre primeiros vizinhos para redes bidimensionais. A temperatura do sistema, em unidades de J , é $T = 4.0$.

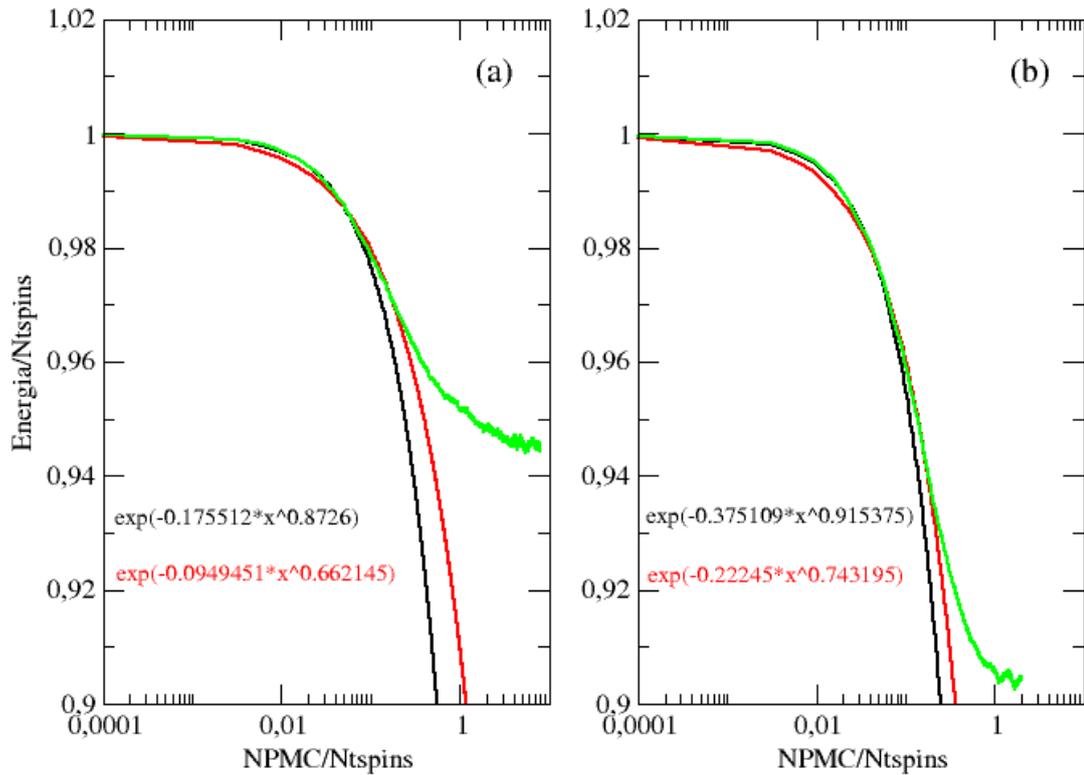


Figura 3.12: Comportamento da energia, com abordagem a) SpV e b) SpD, considerando somente interações entre primeiros vizinhos para redes tridimensionais utilizando "non linear curve fitting". A temperatura do sistema, em unidades de J , é $T = 4.0$.

com os valores de a_2 para sistemas bi e tridimensionais;

- Mapear como a temperatura influencia os valores de a_2 para sistemas bi e tridimensionais.

Um aspecto importante no nosso modelo é que de início nos restringiremos apenas a interações entre primeiros vizinhos onde ($T_c = 2,269 \times \frac{J}{k_B}$), como estamos interessados em determinar a linha limítrofe, tamanho das fronteiras, entre regiões de spins *up* e *down* é necessário ir apenas a primeiros vizinhos, basicamente por causa da teoria de percolação. Outro ponto importante é que de início é empregada condições periódicas de contorno devido ao fato que os nossos sistemas são percolantes.

Outro aspecto importante que não podemos deixar de comentar é o seguinte: é sabido que [80] para o processo tipo Kawasaki as taxas de transição são independentes das configurações de spins e isto significa dizer que é equivalente ao sistema estar em contato com um reservatório

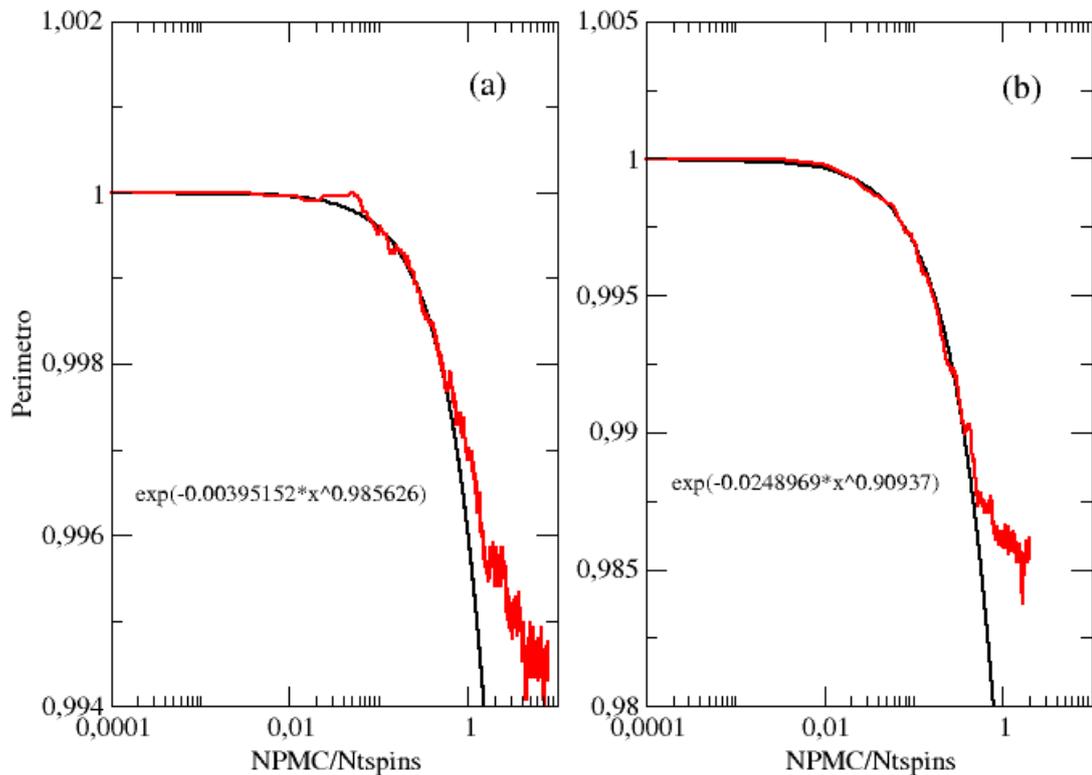


Figura 3.13: Evolução do tamanho da fronteira, com abordagem a) SpV e b) SpD, considerando somente interações entre primeiros vizinhos para redes tridimensionais utilizando "non linear curve fitting". A temperatura do sistema, em unidades de J , é $T = 4.0$.

de calor com temperatura infinita. Aliado ao fato da magnetização ser conservada pelas trocas de dois spins com orientações distintas, o número de microestados acessíveis é muito grande para um dado valor de magnetização. Isso nos levou a perguntar como iríamos varrer estes microestados acessíveis? A resposta foi justamente acoplar um algoritmo de Glauber, já estudado anteriormente, para varrer de forma sistemática e eficientemente os microestados. Neste sentido, a utilização de uma abordagem de temperatura finita para principalmente a determinação da constante a_2 se justifica.

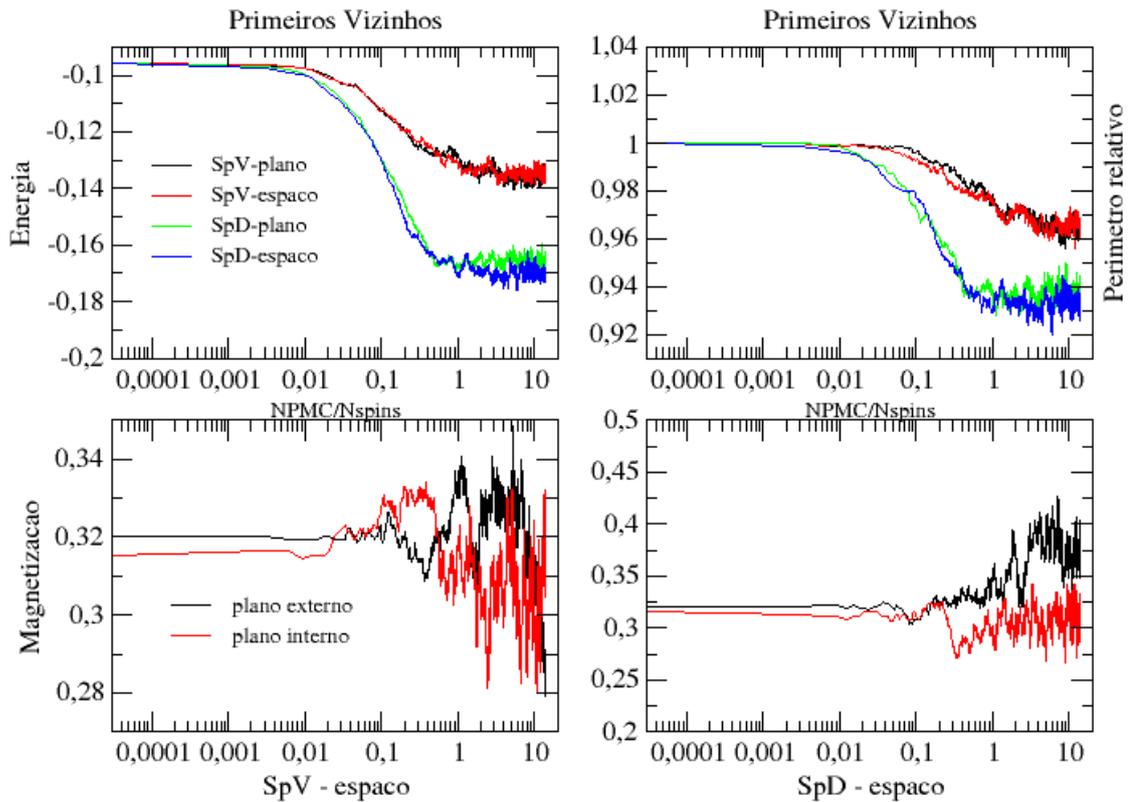


Figura 3.14: Evolução do sistema ao longo de PMC para: na parte superior - o comportamento de energia e perímetro e na parte inferior - o comportamento da magnetização relativa em plano externo e interno da estrutura. Somente interações entre primeiros vizinhos para redes tridimensionais são consideradas. A temperatura do sistema, em unidades de J , é $T = 5.0$.

3.3 CONCENTRAÇÕES E VARIANDO TEMPERATURA:

Ao primeiro contato com esta proposta pode parecer um contrassenso a variação de concentração de spins, pois sempre efetuamos simulações em situações onde a percolação de spins *up* esteja presente. Ainda, a percolação de spins *up* caracteriza situações onde podemos fazer comparações com outras simulações efetuadas anteriormente [12] bem como com experimentos reais [13]. Além disso, poderíamos imaginar também que em baixas concentrações de spins *up*, sistemas que poderíamos considerar rarefeitos, a influência de agente externo (campo externo: as linhas ou planos de spins em nossas simulações) seria de menor importância. Assim, seríamos levados a desconsiderar esta proposta pois ela conspira contra alguns de nossos objetivos

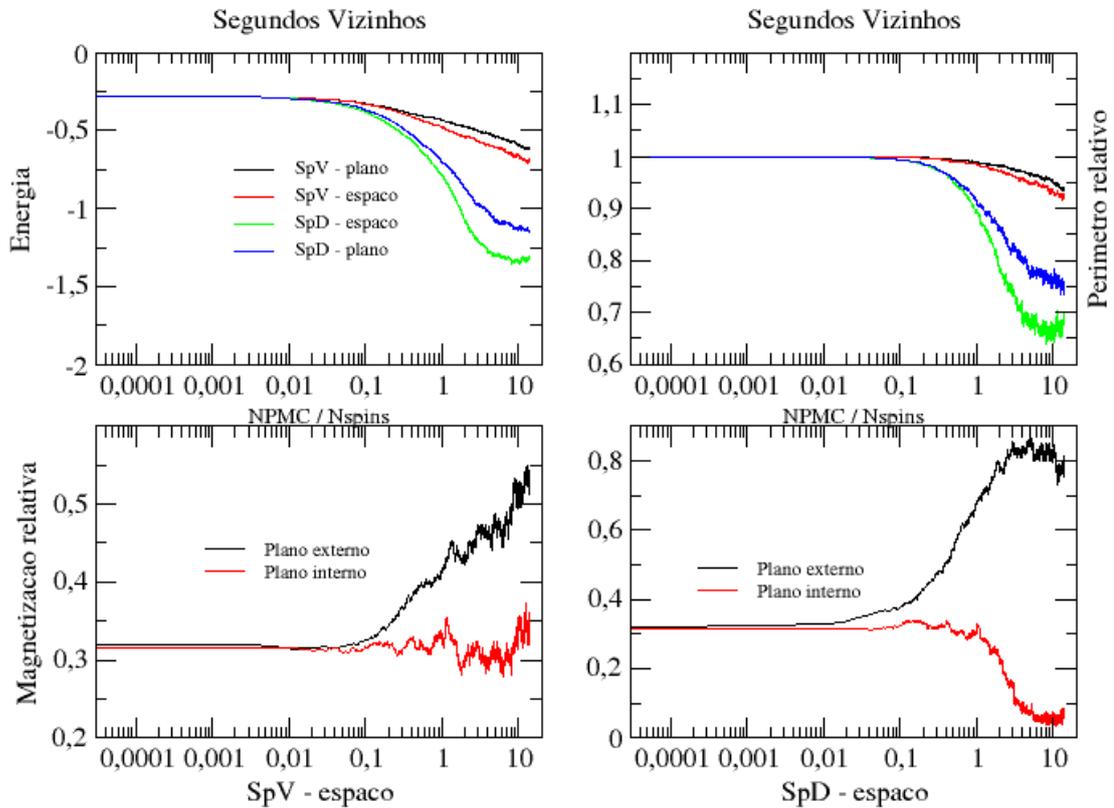


Figura 3.15: Evolução do sistema ao longo de PMC para: na parte superior - o comportamento de energia e perímetro e na parte inferior - o comportamento da magnetização relativa em plano externo e interno da estrutura. Interações até segundos vizinhos para redes tridimensionais são consideradas. A temperatura do sistema, em unidades de J , é $T = 5.0$.

iniciais.

Contudo, aliado ao fato de termos a oportunidade de efetuarmos simulações em diversas situações, bem como tendo o espírito de seguir nossa imaginação/intuição podemos ponderar o seguinte:

- uma comparação simplista nos levaria a imaginar que spins *down* formam o complemento dos spins *up* - assim em qualquer situação de concentração teríamos a ocorrência de percolação;
- um sistema rarefeito de spins *up* e consequente baixa influência de agentes externos - já que as interações são de curto alcance - talvez expresse de forma adequada como é o seu comportamento intrínseco.

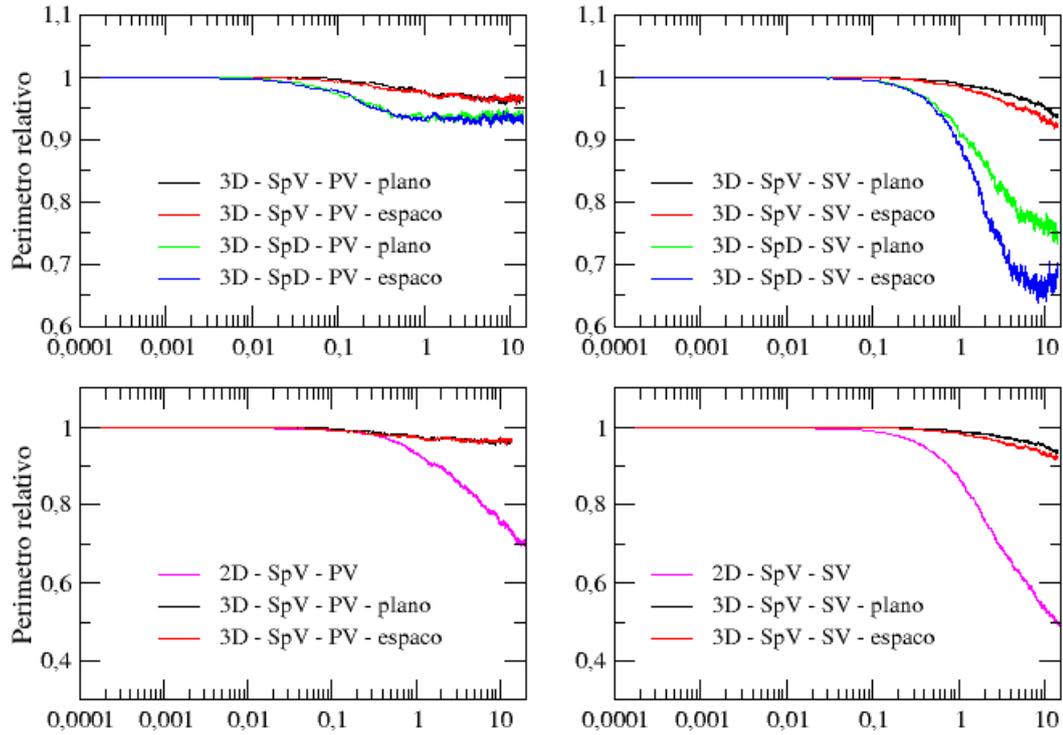


Figura 3.16: Evolução do sistema ao longo de PMC para: na parte superior - o comportamento do perímetro relativo para o caso tridimensional e na parte inferior - o comportamento perímetro relativo para os casos bi e tridimensional. Os gráficos à esquerda estão relacionados a interações até primeiros vizinhos, enquanto os gráficos à direita levam em consideração interações até segundos vizinhos. A temperatura do sistema, em unidades de J , é $T = 5.0$ para todos os comportamentos exibidos.

No processo de simulação é efetuado, como descrito na seção 3.1, para determinados valores de concentração de spins e variando a temperatura entre 0.5 e $4.5 \frac{J}{k_B}$. Com os resultados das simulações apresentados em função do comportamento da energia e do perímetro das estruturas geradas. A partir destes gráficos foram obtidos, via ajuste tipo *non linear curve fitting*, os valores das constantes a_2 para cada simulação e respectivos valores médios para cada grupo.

3.3.1 Sistemas bidimensionais

Os resultados encontrados para sistemas bidimensionais são exibidos nas Figuras 3.17, 3.18 e 3.19. No eixo horizontal destas Figuras indicamos os valores das temperaturas e no eixo

vertical valores para as constantes a_2 . Foram feitos três conjuntos de gráficos para facilitar a análise dos resultados. As concentrações foram estabelecidas em valores que variam entre 5 e 50%. Nestas figuras os símbolos circulares e quadrados representam os comportamentos da energia e dos perímetros, respectivamente.

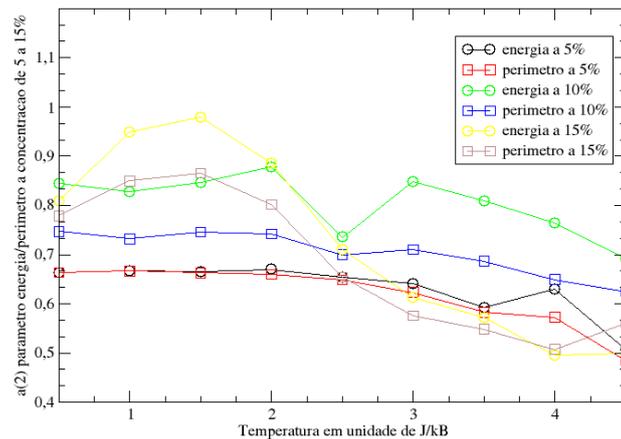


Figura 3.17: Comportamento de a_2 baseados no parâmetro energia e perímetro, para temperaturas diferentes, e concentração correspondente 5 a 15%, com abordagem SpV e somente interações entre primeiros vizinhos para sistemas bidimensionais.

Observando a Figura 3.17 percebemos que, para as concentrações exibidas de 5% a 15%, os sistemas se comportam como possuindo relaxação lenta ($a_2 < 1$). Além disso, com o aumento da temperatura os valores para a_2 possuem a tendência de reduzirem. Concentrações em torno de 10% e 15% exibem um comportamento não tão suave quanto a 5% quando observamos gráficos associados a energia e/ou perímetro. Os gráficos de energia e perímetro estão misturados.

Analisando a Figura 3.18, exibindo concentrações de 20% a 30%, os resultados envolvendo perímetro demonstram que os sistemas possuem relaxação lenta entretanto aqueles provenientes da energia indicam que a concentração de 25% proporciona um comportamento diferenciado. A tendência com a temperatura se mantém ao observado com as concentrações da Figura 3.17, ou seja, com o aumento da temperatura os sistemas possuem a tendência de exibir comportamento de relaxação lenta. Existe uma tendência de descolar os gráficos associados a cada propriedade, somente a curva de energia a 25% se mistura com as dos perímetros.

A Figura 3.19, para concentrações de 35% a 50%, nos informa que com o aumento da temperatura a_2 diminui - mesmo comportamento que as concentrações anteriores. Descolamento entre os gráficos de perímetro e energia.

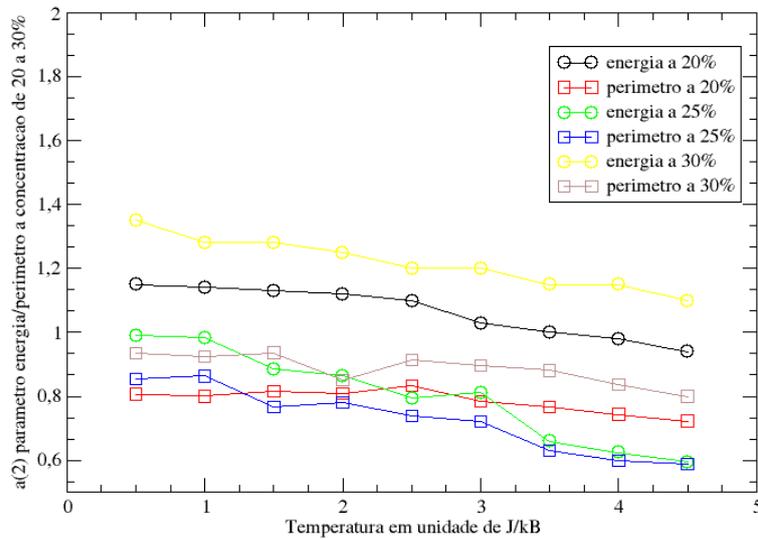


Figura 3.18: Comportamento de a_2 baseados no parâmetros, energia e perímetros, para temperaturas diferentes, e concentração correspondente 20 a 30%, com abordagem SpV e somente interações entre primeiros vizinhos para sistemas bidimensionais.

Na Figura 3.20 condensamos estes resultados lado a lado para uma melhor visualização, para contribuir um pouco mais com a compreensão do comportamento do sistema, as Figuras (3.20 (a) e (b)), onde é possível observar de forma global o comportamento da variável a_2 para a energia e o perímetro em função da temperatura. Assim, pode-se verificar realmente que o tamanho médio da fronteira fornecem valores menores para a constante comparados com aqueles encontrados através da energia. Concentrações correspondentes acima de 35% para energia, o sistema deixa de ser fractal e quando olhamos para o tamanho médio da fronteira, este comportamento só acontece para concentrações acima de 45%.

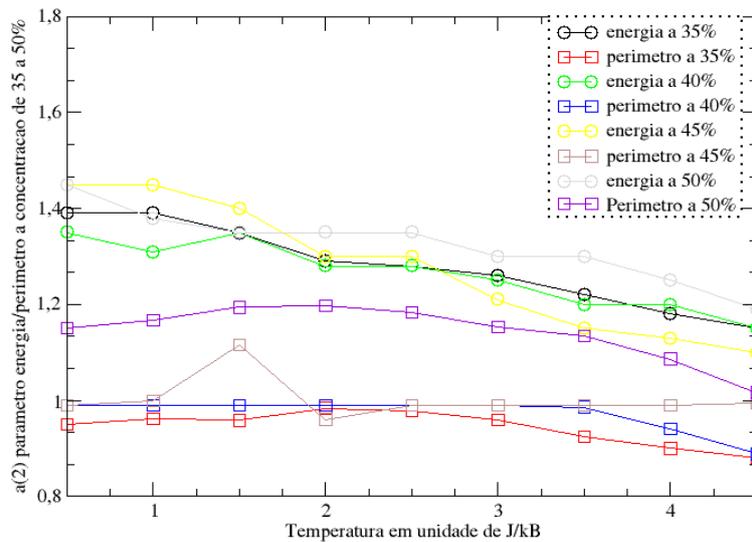
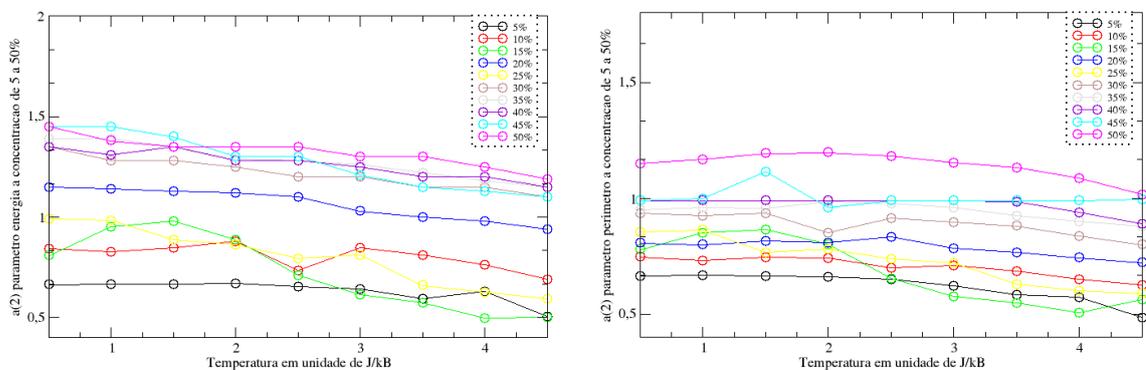


Figura 3.19: Comportamento de a_2 baseado nos parâmetros, energia e perímetros, para temperaturas diferentes, e concentração correspondente 35 a 50%, com abordagem SpV e somente interações entre primeiros vizinhos para sistemas bidimensionais.



(a) Gráficos obtidos a partir da análise das energias do sistema.

(b) Gráficos obtidos a partir da análise dos perímetros do sistema.

Figura 3.20: A figura (a) representa o comportamento para a constante a_2 para energia e na figura (b), tem-se o comportamento para a constante a_2 para o perímetro, com temperaturas variando de 0.5 a $4.5 \frac{J}{k_B}$. Com abordagem SpV e somente interações entre primeiros vizinhos para sistemas bidimensionais.

Em suma, a medida que a temperatura (que discrimina a taxa de aceitação) aumenta os sistemas para toda concentração estudada se comporta como possuindo relaxação lenta. Não importando qual propriedade é analisada, energia ou perímetro.

3.3.2 Sistemas tridimensionais

No que se refere a sistemas tridimensionais iremos nos ater ao caso onde a troca de spins ocorre no espaço e envolvendo apenas spins vizinhos (SpV) e interações até primeiros vizinhos (PV). Aqui vamos exibir resultados para o comportamento da constantes a_2 quando mantemos a temperatura constante e variamos a concentração de spins.

A temperatura do sistema foi estabelecida em valores que variam entre 0.5 a $4.5 \frac{J}{k_B}$, sendo que para cada valor de temperatura a concentração variando conforme mencionado acima entre 5 e 50% como pode ser observado nas Figuras 3.21, 3.22 e 3.23 apresentadas abaixo. A Figura 3.21 exibe um comportamento semelhante ao caso bidimensional, ocorre um descolamento entre os valores para a_2 obtidos via análise da variação de energia ou perímetro relativo. Os valores para a_2 obtidos via variação de perímetro relativo ao longo dos PMC são sistematicamente inferiores a aqueles obtidos via variação de energia. Além do fato de a_2 crescer à medida que a concentração de spins aumenta.

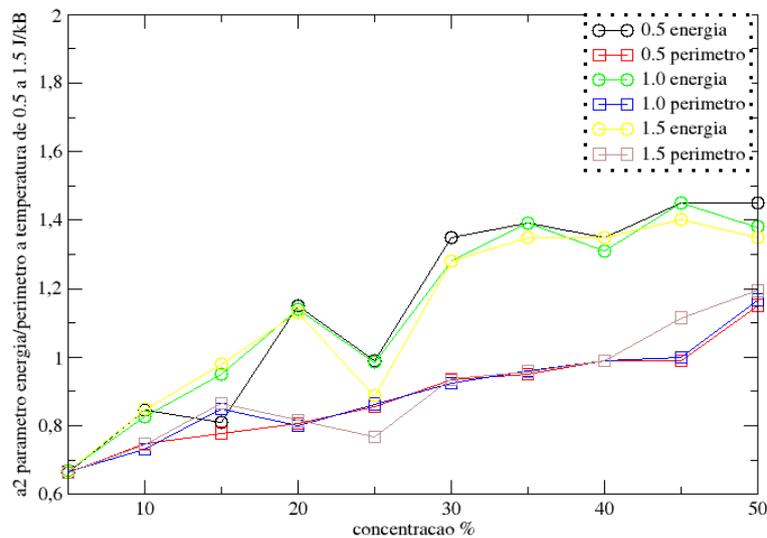


Figura 3.21: Comportamento de a_2 baseados no parâmetro energia e perímetro, para temperaturas entre 0.5 a $1.5 \frac{J}{k_B}$, e concentração correspondente 5 a 50%, com abordagem SpV e somente interações entre primeiros vizinhos.

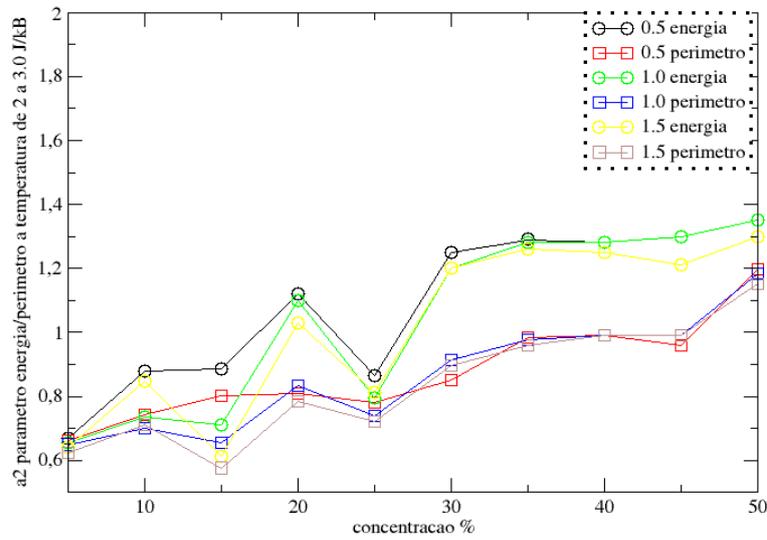


Figura 3.22: Comportamento de a_2 baseados no parâmetro energia e perímetro, para temperaturas entre 2.0 a $3.0 \frac{J}{k_B}$, e concentração correspondente 5 a 50%, com abordagem SpV e somente interações entre primeiros vizinhos.

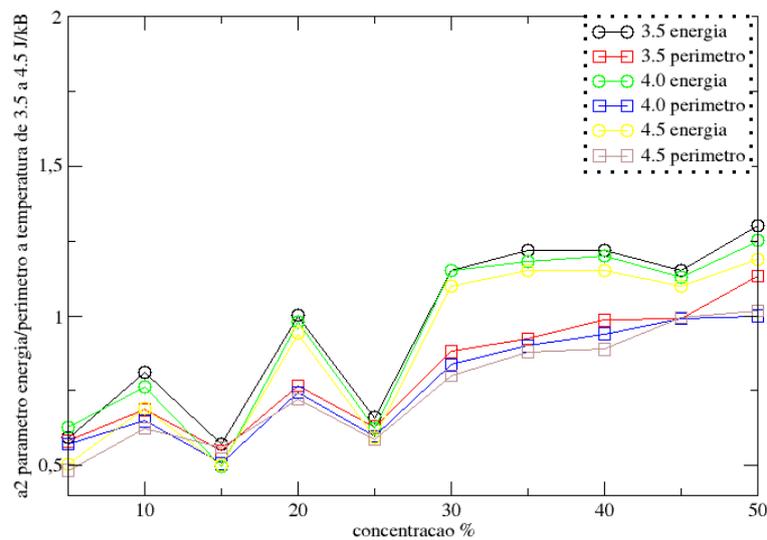


Figura 3.23: Comportamento de a_2 baseados no parâmetro energia e perímetro, para temperaturas entre 3.5 a $4.5 \frac{J}{k_B}$, e concentração correspondente 5 a 50%, com abordagem SpV e somente interações entre primeiros vizinhos.

Quando analisamos as três Figuras 3.21, 3.22 e 3.23 percebemos que os valores para a_2 diminuem à medida que a temperatura do sistema aumenta. Observar a escala vertical e a explicação de cada curva nas legendas à direita de cada Figura. Para que possamos melhorar a nossa compreensão destes resultados, segue abaixo as Figuras 3.24(a) e 3.24(b), onde pode-se observar de forma global o comportamento da variável a_2 para a energia e o perímetro relativos em função da concentração, além de que cada curva é para uma determinada temperatura do sistema.

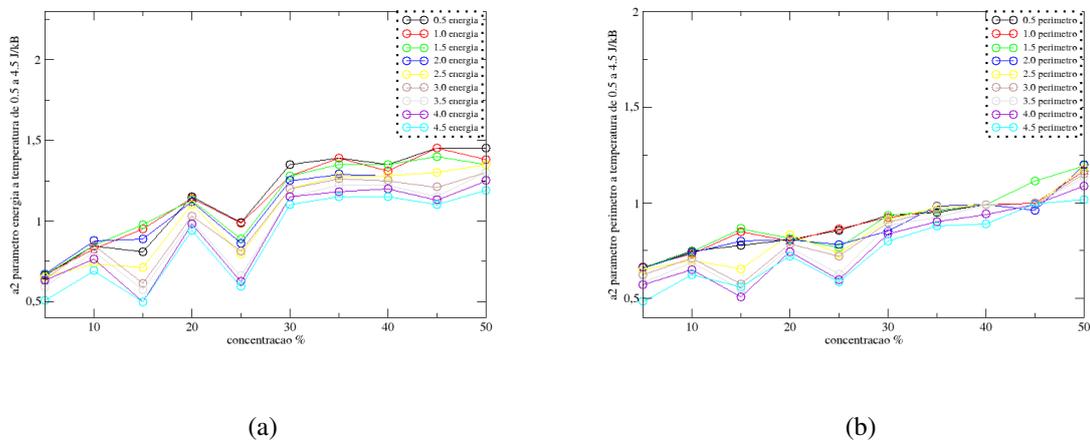


Figura 3.24: Na figura (3.24(a)) tem-se o comportamento geral de a_2 para o parâmetro energia e na figura (3.24(b)), tem-se o comportamento geral de a_2 para o parâmetro perímetro em função da concentração.

Pode-se verificar que o comportamento do sistema não varia linearmente com a temperatura, e que em concentrações específicas como valores em torno de 15% e 25% ocorrem variações para o comportamento de a_2 . Algo semelhante a este comportamento também ocorre com os sistemas bidimensionais como mostrado acima na Figura 3.17, principalmente para valores correspondentes à baixa concentração.

Comparando o comportamento das respostas dos sistemas estudados, os valores apresentados para a constante a_2 da exponencial estendida, tanto para a energia quanto para o perímetro relativos, observa-se que o perímetro apresenta sempre menores valores para a constante a_2 comparados com os valores apresentados para energia. Além disso, uma evolução mais suave tanto com variação de temperatura quanto concentração de spins - tanto para os sistemas bidimensionais e tridimensionais. Um outro fato importante que o sistema informa, é que concentrações acima de 40% o sistema deixa de ter comportamento observado em processos de relaxação lenta e passa a ser governado por uma exponencial simples.

4 DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

Conforme as análises do Capítulo 3, os nossos resultados para a temperatura das redes quadrada, triangular, hexagonal e cúbica simples, confere com resultados provenientes da literatura [84], que por sua vez condizem com as afirmações da Teoria de Landau.

Também encontramos evidências de que o algoritmo de Metrópolis possui um expoente crítico dinâmico maior do que o algoritmo de Wolff, pelos respectivos resultados do calor específico e da suscetibilidade magnética, e pelo cálculo do cumulante de Binder crítico em função do inverso da dimensão linear da rede. Desta forma, o algoritmo de Wolff apresenta-se como uma melhor opção para a análise de redes nas vizinhanças do ponto crítico. Com esta informação nós utilizamos o algoritmo de Wolff para calcular a temperatura crítica de uma rede quadrada com interação entre segundos vizinhos. Assim, reproduzimos o resultado encontrado por Oitmaa [83] para a razão entre a temperatura crítica de uma rede quadrada anisotrópica e uma rede quadrada isotrópica, com a mesma dimensão linear, em função da razão da constante de troca dos segundos vizinhos, J_2 , e entre os primeiros vizinhos, J_1 .

No Capítulo 3 nós analisamos a dinâmica para o modelo de Ising com o parâmetro de ordem conservado. Segundo resultados experimentais de Albuquerque e Gomes [13], e simulação Monte Carlo por Mota e Oliveira [12], este sistema possui uma relação entre a sua exponencial estendida e a dimensão fractal do perímetro dos aglomerados de spins. Neste dois trabalhos o sistema é mantido a uma temperatura constante. Em nossos resultados a rede também possui uma relaxação que obedece à uma exponencial estendida, mas o reservatório em contato com a rede tem a sua temperatura variada, e a dimensão fractal da rede não é definida. O que nos leva à conclusão de que a dimensão fractal de um sistema não precisa ser definida, para que a dinâmica inicial do sistema seja descrita através de uma exponencial estendida.

Com relação a propostas de estender este tipo de abordagem podemos elencar os seguintes pontos que surgiram ao longo do trabalho e que, em nossa avaliação, merecem atenção:

1. Analisar com mais detalhes quais as razões para que ocorram flutuações importantes quando a concentração de spins está próxima so valores de 15% e 25% como eviden-

ciado no Capítulo 3;

2. Introduzir um campo magnético explícito \vec{B} , perpendicular às linhas de spins no caso bidimensional e/ou aos planos de spins no caso tridimensional, que dependente da posição e estudar como este campo externo influencia a constante a_2 ;
3. No caso tridimensional, incluir a dependência espacial na orientação dos spins (s_{ix}, s_{iy}, s_{iz}) e estudar se ocorre relaxação estendida;
4. Estudar o processo de relaxação lenta para outras estruturas;
5. Estudar a aplicação do algoritmos em outros sistemas que não sejam magnéticos, como por exemplo, em poços de petróleo.

REFERÊNCIAS

- [1] Broadbent, S. R. e Hammersley, J. M., Percolation processes I. Cristal end mazes, Proceedings of the Cambridge Philosophical Society 53, 629-641 (1957).
- [2] D. Srauffer and A. Aharony. "*Introduction to Percolation Theory*", Taylor & Francis, 1994.
- [3] J M. Sahimi. "*Application of Percolation Theory*", Taylor & Francis, 1993.
- [4] G. R. Grimmett. "*Percolation*", SPRINGER, 1999.
- [5] A. G. Hunt. "*Percolation Theory for ow in Porous Media*"Springer, 2005.
- [6] SOUZA, D. R.. Transições de fase em modelos estocásticos para descrever epidemias. 2012. Disponível em < <http://www.teses.usp.br/teses/disponiveis/43/43134/tde-26032013-131452/pt-br.php>>. Acesso em 13/03/2015.
- [7] LEBENSZTAYN, E. O modelo de percolação em grafos: Um estudo de condições para transição de fases. 2002. Disponível em <<http://www.teses.usp.br/teses/disponiveis/45/45133/tde-05052013-214912/pt-br.php>>. Acesso em 01/04/2015.
- [8] BARROSO, et al. Modelos de Percolação e Fogos Florestais . 2010. Centro de Física Teórica e computacional. disponível em <<http://cftc.cii.fc.ul.pt/PRISMA/capitulos/capitulo5/modulo6/topico1.php>>. Acesso em 02/04/2015.
- [9] STOVER, C. Oriented Percolation Model . 1999. Disponível em <<http://mathworld.wolfram.com/OrientedPercolationModel.html>>. Acesso em: 04/04/2015.
- [10] T. Tomé, M. J. de Oliveira, Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade (EDUSP, 2001).
- [11] W. G. Wanzeller, A. Cucchieri, T. Mendes, G. Krein, Percolation of Monte Carlo Clusters, Brazilian Journal of Physics, vol. 34, no. 1A, March, 2004.
- [12] P.K. Mota and P.M.C. Oliveira, *Physica A*, **387**, 6095-6104 (2008).
- [13] R. F. Albuquerque, M. A. F. Gomes, *Physica A* 310 (2002) 377.
- [14] Mott, N.F.; Davies, E.A.; *Electronic Processes in Non-crystalline Materials*, 2nd ed. (Oxford University Press, New York, 1979).
- [15] Davies, J.H.; Lee, P.A.; Rice, T.M.; *Phys. Rev. Lett.*, **49**, 758, (1982).
- [16] Pollak, M.; *Philos. MAg. B*, **50**, 265, (1984).

- [17] Adkins, C.J.; Benjamin, J.D.; Thomas, J.M.D.; Gardner, J.W.; McGeown, A.J.; Jour. Phys. C, **17**, 4633, (1984).
- [18] Bielejec, E.; Wu, W.; Phys. Rev. Lett., **87**, 256601, (2001).
- [19] Grenet, T.; Eur. Phys. J. B, **32**, 275, (2003).
- [20] Martinez-Arizala, G.; Christiansen, C.; Grupp, D.E.; Markovic, N.; Mack, A.M.; Goldman, A.M.; Phys. Rev. B, **57**, R670, (1998).
- [21] Ben-Chorin, M.; Ovadyahu, Z.; Pollak, M.; Phys. Rev. B, **48**, 15025 (1993).
- [22] Monroe, D.; Gossard, A.C.; English, J.H.; Golding, B.; Haemmerle, W.H.; Kastner, M.A.; Phys. Rev. Lett., **59**, 1148, (1987).
- [23] Borini, S.; Boarino, L.; Amato, G.; Phys. Rev. B, **75**, 165205, (2007).
- [24] Munder, H.; Berger, M.G.; Frohnhoff, S.; Thonissen, M.; Luth, H.; Jour. Lumin., **57**, 5, (1993).
- [25] Ben-Chorin, M.; *Properties of Porous Silicon* (INSPEC, London, 1997), pp 165-175.
- [26] Grosman, A.; Ortega, C.; *Properties of Porous Silicon* (INSPEC, London, 1997), pp 328-335.
- [27] Brus, L.E.; Appl. Phys. A, **53**, 465, (1991).
- [28] Efros, A.L.; Rosen, M.; Annu. Rev. Mater. Sci., **30**, 475, (2000).
- [29] El-Sayed, M.A.; Acc. Chem. Res. **37**, 326, (2004).
- [30] Nozik, A.J.; Annu. Rev. Phys. Chem, **52**, 193, (2001).
- [31] Klimov, V.; J. Phys. Chem. B, **104**, 6112 (2000).
- [32] Klimov, V.; Charge Carrier Dynamics and Optical Gain in Nanocrystal Quantum Dots: From Fundamental Photophysics to Quantum Dot Lasing. In *Semiconductor and Metal Nanocrystals*; Klimov, V.; Marcel Dekker: New York, 2004. pp 159-214.
- [33] Bockelmann, U.; Bastard, G.; Phys. Rev. B, **42**, 8947, (1990).
- [34] Klimov, V.; McBranch, D.W.; Phys. Rev. Lett., **80**, 4028 (1998).
- [35] Pandey, A.; Guyot-Sionnest, P.; Science, **322**, 929, (2008).
- [36] Efros, A.L.; Kharchenko, V.A.; Rosen, M.; Solid State Commun., **93**, 281, (1995).
- [37] Eang, L.-W.; Califano, M.; Zunger, A.; Franceschetti, A.; Phys. Rev. Lett., **91**, 056404, (2003).
- [38] Cooney, R.R.; Sewall, S.L.; Dias, E.A.; Sagar, D.M.; Anderson, K.E.H.; Kambhampati, P.; Phys. Rev. Lett., **98**, 177403, (2007).
- [39] Cooney, R.R.; Sewall, S.L.; Anderson, K.E.H.; Dias, E.A.; Sagar, D.M.; Kambhampati, P.; Phys. Rev. B, **75**, 245311, (2007).

- [40] Schroeter, D.F.; Griffiths, D.J.; Sercel, P.C.; Phys. Rev. B, **54**, 1486, (1996).
- [41] Sercel, P.C.; Phys. Rev. B, **51**, 14532, (1995).
- [42] Guyot-Sionnest, P.; Wehrenberg, B.; Yu D.; Jour. Chem. Phys., **123**, 074709, (2005).
- [43] Mueller, M.L.; Yan, X.; Dragnea, B.; Li, L.-S.; Nano Lett., **11**, 56, (2011).
- [44] Yan, X.; Cui, X.; Li, B.; Li, L.-S., Nano Lett., **10**, 1869, (2010).
- [45] Yan, X.; Cui, X.; Li, L.-S., Jour. Am. Chem. Soc., **132**, 5944, (2010).
- [46] Li, L.-S.; Yan, X.; Jour. Phys. Chem. Lett., **1**, 2572, (2010).
- [47] Geim, A.K.; Science, **324**, 1530, (2009).
- [48] Bridgewater, J.; Particle technology. Chem. Eng. Sci, **50**, 4081, (1995).
- [49] Jaeger, H.; Nagel, S.; Behringer, R.; Granular solids, liquids and gases. Rev. Mod. Phys., **68**, 1259 (1996).
- [50] Shinbrot, T.; Muzzio, F.; Nonequilibrium patterns in granular mixing and segregation. Phys. Today, **53**, 25, (2000).
- [51] Ottino, J.; Khakar, D.; Mixing and segregation of granular materials. Ann. Rev. Fluid Mech., **32**, 55, (2000).
- [52] Shinbrot, T.; Muzzio, F.J.; Noise to order. Nature, **410**, 251, (2001).
- [53] Coniglio, A.A.; Hermann, H.J.; Nicodemi, M. (eds), *Unifying Concepts in Granular Media and Glasses* (Elsevier, Amsterdam, 2004).
- [54] Richard, P.; Nicodemi, M.; Delannay, R.; Ribi re, P.; Bideau, D.; Nature Materials, **4**, 121 (2005).
- [55] Ben-Chorin, M.; Ovadyahu, Z.; Pollak, M.; Phys. Rev. B, **48**, 15025 (1993).
- [56] Grenet, T.; Delahaye, J.; Sabra, M.; Gay, F.; Eur. Phys. J. B, **56**, 183 (2007).
- [57] Ovadyahu, Z.; Phys. Rev. B, **73**, 214204 (2006).
- [58] Yu, C.C.; Phys. Rev. Lett., **82**, 4074 (1999).
- [59] Vaknin, A.; Ovadyahu, Z.; Pollak, M.; Phys. Rev. B, **65**, 134208 (2002).
- [60] Burin, A.L.; Shklovskii, B.I.; Kozub, V.I.; Galperin, Y.M.; Vinokur, V.; Phys. Rev. B, **74**, 075205 (2006).
- [61] Vaknin, A.S.; Ovadyahu, Z.; Pollak, M.; Phys. Rev. B, **61**, 4633 (2000).
- [62] Burin, A.L.; Kozub, V.I.; Galperin, Y.M.; Vinokur, V.; J. Phys.: Condens. Matter, **20**, 244135 (2008).
- [63] Agrinskaya, N.V.; Kozubov, V.I.; Shamsur, D.V.; Shumilin, A.V. e Galperin, Y.M.; J. Phys.: Condens. Matter, **22**, 405301 (2010).

- [64] N. Metropolis, A. Rosenbluth, A. Teller, E. Teller, J. Chem Phys. **21**, 1087 (1953).
- [65] M. E. J. Newman, G. T. Barkema, Monte Carlo Methods in Statistical Physics (Oxford University Press, 1999).
- [66] D. Chandler, Introduction to Modern Statistical Mechanics (Oxford University Press, 1987).
- [67] F. Reif, Fundamentals of Statistical and Thermal Physics (McGraw-Hill, 1965).
- [68] U. Wolff, Collective Monte Carlo updating for spin systems, Phys. Rev. Lett. **62** (361), 1989.
- [69] Roy J. Glauber, J. Math. Phys. **4**, 294 (1963).
- [70] Kawasaki K., *Phys. Rev.*, **145**, 224 (1965).
- [71] S. R. A. Salinas, Introdução à Física Estatística (EDUSP, 1997).
- [72] W. Greiner, L. Neise, H. Stöcker, Thermodynamics and Statistical Physics (Springer, 1997).
- [73] M. P. Nightingale, H. W. J. Blöte, Phys. Rev. Lett. **76**, 4548 (1996).
- [74] M. P. Nightingale, H. W. J. Blöte, Phys. Rev. B **62**, 1089-1101 (2000).
- [75] J. Hoshen, R. Kopelman, Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labelling technique and critical concentration algorithm, Phys. Rev. B **14** 3438 (1976).
- [76] P. W. Kasteleyn, C. M. Fortuin. Phase Transitions in Lattice Systems with Random Local Properties, J. Phys. Soc. Jpn. Suppl. 26s, 11, 1969.
- [77] A. Coniglio. W. Klein, J. Phys. A **13**, 2775 (1980).
- [78] R. H. Swendsen, J. S. Wang, Nonuniversal Critical Dynamics in Monte Carlo Simulations, Phys. Rev. Lett. **58** (86), 1987.
- [79] Stauffer D., *Introduction to Percolation Theory*, Taylor & Francis, London.
- [80] B.C.S.Grandi and W. Figueiredo, *Phys. Rev. E*, **53**, 5484, (1996).
- [81] S.N. Maganov and D.H. Reneker, *Annu. Rev. Mater. Sci.*, **27**, 175, (1997).
- [82] P.H.J. Kouwer, M. Koepf, V.A.A. Le Sage, M. Jaspers, A.M. van Buul, Z.H. Eksteen-Akeroyd,
- [83] J. Oitmaa, J. Phys. A: Math. Gen. **14**, 1159 (1981). T. Woltinge, E. Schwartz, H.J. Kitto, R. Hoogenboom, S.J. Picken, R.J.M. Nolte, E. Mendes and A.E. Rowan, *Nature*, **493**, 651, (2013).
- [84] Michael E. Fisher, The renormalization group in the theory of critical behavior, Rev. Mod. Phys., Vol. 46, No. 4, 1974.

ANEXO A – ARTIGO PUBLICADO