

Universidade Federal de Sergipe
Núcleo de Pós-Graduação em Física

Dissertação de Mestrado

Propriedades Magnéticas do Modelo de Hubbard Clássico

Por

Adelino dos Santos Filho

Julho de 2012

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SERGIPE
Cidade Universitária “Prof. José Aloísio de Campos”
São Cristóvão – SE – Brasil

Universidade Federal de Sergipe

Propriedades Magnéticas do Modelo de Hubbard Clássico

Adelino dos Santos Filho

*Dissertação submetida ao
Programa de Pós Graduação
em Física da Universidade
Federal de Sergipe como
requisito para a obtenção do
título de mestre em Física*

Professor orientador: Dr. André Maurício Conceição de Souza

São Cristóvão

201

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SERGIPE
Núcleo de Pós-Graduação em Física

*Propriedades magnéticas do modelo de Hubbard
Clássico*

por

Adelino dos Santos Filho

Dissertação de mestrado **APROVADA** em sessão pública no dia dezenove de julho do ano dois mil e doze perante a banca examinadora constituída pelos seguintes professores:



Prof. Dr. André Maurício Conceição de Souza
(DFI-UFS)



Prof. Dr. Francisco Assis Gois de Almeida
(DFI-UFS)



Prof. Dr. Francisco Anacleto Barros Fidélis de Moura
(IF-UFAL)

*Dedico este trabalho à meus
pais Adelino e Cenira, a minha
irmã Aleksandra e aos meus
avós Maria de Lourdes dos
Santos e José Ferreira da cruz
(em memória)*

Agradecimentos

Agradeço a Deus por ter permitido a conclusão dos meus trabalhos do mestrado e por ter me conduzido em mais uma fase importante da minha vida.

Agradeço ao professor André Mauricio Conceição de Souza por ter confiado o seu modelo teórico para a realização do meu trabalho acadêmico o qual me confere o título de mestre em física.

Gostaria de frisar a importante contribuição do professor Francisco Assis Gois de Almeida para a conclusão das minhas atividades acadêmicas no mestrado principalmente na parte computacional do trabalho, e reconhecer o apoio e o companheirismo de sempre dos meus amigos Nilson Santos Ferreira e Marcelo Souza Silva. Aos companheiros Yuri Álisson, Augusto S. Freitas, Héstia Raíssa e Willien Oliveira pelos debates sobre os assuntos acadêmicos os quais foram de grande relevância para mim.

E um agradecimento de forma mais especial aos meus familiares que sempre me incentivaram em todos os momentos, dos mais difíceis aos alegres:

Mãe, muito obrigado mais uma vez, sem a senhora tudo seria mais difícil, sou muito grato pela senhora ter sido a minha primeira professora. Quanto a minha querida irmã o meu muito obrigado por dividir tudo comigo. Você dividiu a sua responsabilidade, a sua garra e o sentimento de compromisso os quais me trouxeram até este momento. E ao meu pai os meus sinceros agradecimentos por ter me educado para ser o homem que sou hoje sempre vigilante para honrar as minhas palavras e compromissos firmados com os meus trabalhos, amigos, familiares e com DEUS.

O meu muito obrigado a todos vocês.

Sumário

Agradecimentos	v
Sumário	vi
Resumo	viii
Abstract	ix
Lista de Figuras	x
Lista de Tabelas	xi
Capítulo 1	1
1 Introdução	1
1.1 O Magnetismo da Matéria	2
1.2 Histórico	2
1.3 Definições Preliminares	4
1.4 Tipos de Magnetismo	5
1.4.1 Diamagnetismo	5
1.4.2 Paramagnetismo	5
1.4.3 Ferromagnetismo	6
1.4.4 Antiferromagnetismo	7
Capítulo 2	9
2 O Modelo de Hubbard Clássico	9
2.1 Introdução	9
2.2 O Hamiltoniano de Hubbard Clássico	9
2.3 Simetria Partícula-Buraco	11
2.4 Relação com o Modelo de Ising	14
2.5 O Modelo de Ising	16
Capítulo 3	17
Solução Analítica do Modelo de Hubbard Clássico na rede Unidimensional	17
3.1 Montagem da Matriz transferência	17
3.2 Modelo de Hubbard Clássico (Solução analítica para a rede unidimensional)	20
Capítulo 4	24
4.1 Transição de Fase	24
4.2 Método de Monte Carlo	25

4.2.1. Algoritmo de Monte Carlo para o Modelo de Hubbard Clássico	26
4.2.2. Algoritmo	26
Capítulo 5	29
Simulação das Redes Quadrada e Cúbica Simples	29
5.1. Parâmetros	29
5.1.1. Obtenção das Propriedades Termodinâmicas	29
5.2. Dependência das Grandezas Termodinâmicas com a Temperatura.....	30
5.3. Expoentes Críticos e Diagrama de Fases	37
6. Conclusões	42
Referências Bibliográficas	43
Apêndice A: Simetria Partícula-Buraco	44
Apêndice B: Relação com o Modelo de Ising.....	47
Apêndice C: Implementação do Algoritmo de Monte Carlo em Fortran 90 no ensemble grande canônico	50

Resumo

No presente trabalho, nós obtivemos as propriedades magnéticas e termodinâmicas do modelo clássico de Hubbard. Este é de mais fácil manipulação que o modelo original de Hubbard, e conserva aspectos fundamentais como a simetria partícula-buraco e de carga. Encontramos a relação entre este modelo e o de Ising. Para as redes quadrada e cúbica simples, as propriedades termodinâmicas e diagramas de fase foram calculadas através do método de Monte Carlo. Apresentamos o comportamento da energia interna, do calor específico e da susceptibilidade magnética como função da temperatura. Para as redes estudadas, o estado fundamental é antiferromagnético. As temperaturas de Néel foram encontradas como função da interação eletrônica no caso de banda meio-cheia. No limite de interação nula ou infinita, encontramos valores que concordam com o modelo de Ising.

Abstract

In this work we obtain the magnetic and thermodynamic properties of the classical Hubbard model. This one is easier to handle than the original Hubbard model, and it maintains fundamental aspects like charge and particle-hole symmetry. We find the relationship between this and the Ising model. For square and simple cubic lattices, the thermodynamic properties and phase diagrams were calculated by Monte Carlo method. We show the behavior of internal energy, specific heat, and magnetic susceptibility as a function of the temperature. For the considered lattices, the ground state is anti-ferromagnetic. The Néel temperatures were found as a function of the electronic interaction in the case of half-filled band. In the limit of vanishing of diverging interaction, our results agree with the Ising model.

Lista de Figuras

Figura 1 - Representação de momentos magnéticos com ordenamento aleatório, inerente a materiais paramagnéticos.	6
Figura 2 - Formação de domínios magnéticos minimizando a energia.	7
Figura 3 - Magnetização em função da temperatura.....	7
Figura 4 - Organização de spins antiparalela característica de materiais antiferromagnéticos.	8
Figura 5– Representação da ocupação eletrônica em sítios de uma rede unidimensional.	10
Figura 6–Calor específico cNk_B em função da temperatura $k_B T t$ para alguns valores de U/t : $U/t=0$, $U/t=1$, $U/t=8$ e $U/t=20$	22
Figura 7–Diagrama de fases de um fluido	24
Figura 8 - Energia interna E/t de uma rede Quadrada ($N = 10002$) em função da temperatura $k_B T/t$ para alguns valores de U/t : $U/t=0$, $U/t=1$, $U/t=8$ e $U/t=20$	30
Figura 9 - Energia interna E/t de uma rede Cúbica Simples ($N = 803$) em função da temperatura $k_B T/t$ para alguns valores de U/t : $U/t=0$, $U/t=1$, $U/t=8$ e $U/t=20$	31
Figura 10 - Calor Específico cNk_B de uma rede Quadrada $N = 10002$ em função da temperatura $k_B T t$ para os seguintes valores de U/t : $U/t=0$, $U/t=1$, $U/t=8$ e $U/t=20$	31
Figura 11 - Calor Específico cNk_B de uma rede Cúbica Simples $N = 803$ em função da temperatura $k_B T t$ para os seguintes valores de U/t : $U/t=0$, $U/t=1$, $U/t=8$ e $U/t=20$	32
Figura 12 - Suscetibilidade Magnética $\chi t N \mu_B^2$ de uma rede Quadrada $N = 10002$ em função da temperatura $k_B T t$ para os seguintes valores de U/t : $U/t=0$, $U/t=1$, $U/t=8$ e $U/t=20$	33
Figura 13 - Suscetibilidade Magnética $\chi t N \mu_B^2$ de uma rede Cúbica Simples $N = 803$ em função da temperatura $k_B T t$ para os seguintes valores de U/t : $U/t=0$, $U/t=1$, $U/t=8$ e $U/t=20$	34
Figura 14 - Inverso da Suscetibilidade $N \mu_B^2 \chi t$ de uma rede Quadrada $N = 10002$ em função da temperatura $k_B T t$ com $U/t=0$	35
Figura 15 - Inverso da Suscetibilidade $N \mu_B^2 \chi t$ de uma rede Cúbica Simples $N = 803$ em função da temperatura $k_B T t$ com $U/t=0$	35
Figura 16 – Diagrama de fase temperatura crítica $k_B T_c/t$ em função da energia coulombiana U/t para rede Quadrada.	39
Figura 17 - Diagrama de fase temperatura crítica $k_B T_c/t$ em função da energia coulombiana U/t para rede Cúbica Simples.	40
Figura 18 – Diagrama de fase temperatura crítica $k_B T_c/t$ em função da energia coulombiana U/t para as redes Quadrada e cúbica Simples.	40

Lista de Tabelas

Tabela 1 - Valores dos picos do calor específico c/NkB e das correspondentes temperaturas kBt da rede Quadrada para alguns valores de U/t	32
Tabela 2 - Valores dos picos do calor específico c/NkB e das correspondentes temperaturas kBt da rede Cúbica Simples para alguns valores de U/t	32
Tabela 3 - Valores de T_N em uma rede Quadrada $N = 10002$ encontrado através dos gráficos do calor específico ($cNkB$) e do inverso da suscetibilidade ($N\mu B^2\chi t$) com $U/t=0$	36
Tabela 4 - Valores de T_N em uma rede Cúbica Simples $N = 803$ encontrado através dos gráficos do calor específico ($cNkB$) e do inverso da suscetibilidade ($N\mu B^2\chi t$) com $U/t=0$	36
Tabela 5 - Valores das propriedades críticas de algumas redes Quadradas para $U/t=0$.	38
Tabela 6 - Valores das propriedades críticas de algumas redes Cúbicas Simples para $U/t=0$	38
Tabela 7 - Valores das temperaturas e expoentes críticos do modelo de Ising em duas e três dimensões.	38

Capítulo 1

1 Introdução

O estudo do magnetismo se configura como uma importante área da física devido ao grande número de aplicações essenciais à vida moderna, tais como a geração de eletricidade em usinas e em automóveis, a informática e o armazenamento de dados. Sua descrição completa ainda se caracteriza como um desafio para os físicos. Essa realidade é materializada com os metais de transição que possuem a camada “d” incompleta. Nestes sistemas, um modelo que tem sido bastante aplicado é o de J. Hubbard [1]. Contudo esse modelo tem solução exata apenas em alguns casos limites. Diante da importância de realizar o estudo das propriedades magnéticas desses materiais, recentemente, foi proposto o modelo de Hubbard Clássico [2] que é de mais fácil aplicação, não perdendo parte das principais propriedades do modelo de Hubbard original.

A proposta do presente trabalho é realizar estudos no novo modelo para obter as grandezas termodinâmicas e magnéticas em redes bi e tridimensional e determinar os diagramas de fase. Além disso, analisar a relação do modelo de Hubbard clássico com o modelo de Ising.

No primeiro capítulo será feita uma abordagem histórica do magnetismo e a apresentação de algumas grandezas e tipos de magnetismo. No segundo capítulo, o novo modelo é introduzido. Mostraremos que ele respeita a simetria partícula-buraco do modelo de Hubbard original [1] e também sua relação com o modelo de Ising. Já no terceiro capítulo é utilizada a técnica da matriz de transferência para fundamentar a solução analítica da rede unidimensional do novo modelo [2]. No capítulo quatro, estudaremos sobre transição de fases e em seguida explicamos em detalhes o algoritmo utilizado na abordagem numérica do novo modelo nos casos das redes bi e tridimensional. O quinto capítulo trata dos resultados. Apresentamos tabelas de expoentes críticos, gráficos das grandezas termodinâmicas e diagramas de fase acompanhados das discussões. Para finalizar, o capítulo seis traz as conclusões do trabalho.

1.1 O Magnetismo da Matéria

Como a proposta do trabalho é a de obter propriedades magnéticas da matéria utilizando um novo modelo teórico, torna-se relevante uma abordagem preliminar de como se deu a evolução do entendimento do magnetismo dos materiais, bem como, das teorias aplicadas para tal fim. A seguir serão feitas algumas considerações respeitando a cronologia do desenvolvimento dos estudos sobre o magnetismo. Isto é feito neste trabalho de forma sucinta, dividida em três partes: histórico, definições preliminares e com a discussão de alguns tipos de magnetismo.

1.2 Histórico

O magnetismo da matéria foi percebido desde a antiguidade. Segundo relatos históricos, os chineses já conheciam o fenômeno por volta de 1100 a.c. e na Grécia antiga foi detectado por volta de 800a.c. na região da Magnésia, por isso o nome “Magnetismo”. O mineral encontrado nessa localidade tinha capacidade de atrair corpos metálicos e foi chamado de magnetita, cuja fórmula química conhecida hoje é Fe_3O_4 .

As primeiras aplicações do magnetismo foram dadas pelos chineses. No início da era cristã, os adivinhos ou místicos chineses usavam a “colher que aponta para o sul”, a qual era confeccionada de magnetita, e em equilíbrio sobre um pino, girava livremente na horizontal. Em qualquer situação o cabo da colher apontava para o sul e era vista como um objeto místico. Como os chineses também conheciam métodos para magnetizar metais, eles desenvolveram a bússola e a partir dos séculos X e XI, começaram a utilizá-la para orientar as navegações [3,4].

A partir do século XIII os estudos sobre o magnetismo de cunho científico foram sendo realizados, principalmente pelos europeus. Em 1269, Pierre de Maricourt realizou experimentos elementares sobre o magnetismo, detectando assim, os pólos magnéticos de um ímã baseando-se na orientação natural da bússola e, os denominando pólo norte e pólo sul [3,4].

William Gilbert, autor da obra “De Magnete” publicada em 1600, acrescentou e rediscutiu o trabalho experimental de Maricourt e de outros. Ele descobriu o processo de imantação por indução e foi o primeiro a sugerir a existência do campo magnético

terrestre. É de fundamental importância frisar que a obra de Gilbert não é baseada apenas em dados científicos, mas, também em explicações filosóficas e até mesmo em superstições [3,4].

O estudo do magnetismo teve uma grande evolução quando foi percebida a estreita relação entre os fenômenos magnéticos e elétricos, pelo físico dinamarquês Hans C. Oersted (1777-1851). Ele foi o primeiro a notar que a agulha de uma bússola sofria uma deflexão quando se encontrava nas proximidades de um condutor percorrido por uma corrente elétrica. Baseando-se nos experimentos de Oersted, Ampère desenvolveu a teoria para a criação de equipamentos eletromagnéticos e descobriu as leis que regem a atração e repulsão das correntes elétricas em fios condutores. Em 1830, Michael Faraday e Joseph Henry, trabalhando de forma independente, descobriram quase simultaneamente a indução eletromagnética. A indução eletromagnética é o fundamento físico do funcionamento do gerador elétrico, do transformador e de outros aparelhos que usamos no dia-a-dia. Já em 1873 ocorreu a grande síntese do eletromagnetismo com o trabalho de Maxwell intitulado: “Treatise on Electricity and Magnetism”. Esse trabalho apresenta as equações de Maxwell que estão para o eletromagnetismo como as equações de Newton estão para a mecânica de baixas velocidades [4].

Oberlin Smith, um engenheiro mecânico norte americano, em 1888, foi um dos primeiros a idealizar um processo de gravação magnética. Tal processo consistia em converter sinais sonoros em sinais elétricos utilizando para isso o microfone do telefone (recém inventado) que magnetizava um fio de aço enquanto o mesmo girava de um carretel a outro, realizando assim a gravação em todo o fio [3].

Pierre Curie (1859-1906) trabalhou com experimentos de magnetização em função da temperatura, demonstrando a estreita relação entre essas duas grandezas. Ele constatou que a magnetização diminui com o aumento da temperatura, chegando a zero em uma certa temperatura que é característica de cada material. Essa temperatura foi chamada de **temperatura crítica** ou **temperatura de Curie, (T_c)** [5].

No ano de 1907 a teoria dos domínios magnéticos da matéria (materiais ferromagnéticos) foi proposta por Pierre Weiss. A partir deste momento, até os dias atuais, a ciência conta com ferramentas teóricas oriundas da Mecânica Estatística e Mecânica Quântica para explicar o magnetismo da matéria. E tem sido de fundamental importância o uso de computadores cada vez mais potentes para realizar simulações de

sistemas magnéticos, e na parte experimental, a melhoria dos equipamentos tem sido de grande ajuda na descrição do magnetismo dos materiais.

1.3 Definições Preliminares

As manifestações magnéticas da matéria se dão através de campos, e quando falamos em campos, podemos imaginá-los como sendo uma região do espaço onde atuam forças. No caso do magnetismo, o campo magnético pode ser chamado de indução magnética e existe a seguinte convenção: \vec{B} é chamado de indução magnética e \vec{H} , de campo magnético. Por simplicidade, vamos entender \vec{H} como o campo magnético em meios materiais e \vec{B} como o campo magnético fora dos materiais [5].

A unidade da indução magnética no SI (sistema internacional de unidades) é o tesla, cujo símbolo é **T**. Um tesla (1**T**) corresponde à força de um Newton (1**N**) sobre uma carga de um Coulomb (1**C**) que move-se com uma velocidade de 1ms^{-1} na direção perpendicular a de \vec{B} .

Outro comentário importante que devemos fazer é sobre momento magnético. Na matéria, pode-se encontrar momento magnético no núcleo dos átomos [6,7] momento de dipolo magnético orbital dos elétrons que orbitam um núcleo atômico e momento magnético intrínseco dos elétrons, chamado de Spin.

Para nossos objetivos vamos definir o momento de dipolo magnético orbital (μ). Admitindo um circuito infinitesimal de área $d\mathbf{A}$ através do qual circula uma corrente elétrica \mathbf{I} , podemos definir o momento de dipolo magnético como $\mu = \mathbf{I}d\mathbf{A}$ sendo $d\mathbf{A}$ um elemento orientado de área, definido pelo sentido da corrente. A unidade no SI é o Ampère vezes metro quadrado (Am^2) ou em Joule por tesla (JT^{-1}).

Agora estamos aptos para definir uma outra grandeza muito importante para o nosso trabalho, a magnetização \vec{M} . A magnetização \vec{M} de um corpo é o momento magnético total dividido por seu volume, matematicamente temos: $\vec{M} = n \mu$, sendo (n) o número de momentos magnéticos (μ) por unidade de volume. A unidade de magnetização no SI é dada em Webers por metro quadrado (Wbm^{-2}).

Para concluir as considerações iniciais vamos ver a definição de suscetibilidade magnética. A suscetibilidade magnética χ é definida como a razão entre a magnetização \vec{M} e o campo magnético \vec{H} da seguinte maneira $\chi = M/H$ ou em forma diferencial

$\chi = \partial M / \partial H$. A suscetibilidade χ é adimensional e informa a medida da resposta magnética de um meio sob a ação de um campo magnético \vec{H} .

1.4 Tipos de Magnetismo

Na literatura científica estão registradas muitas formas do magnetismo da matéria [5,6,7]. Sendo assim, vamos comentar algumas formas, tais como o diamagnetismo, ferromagnetismo, paramagnetismo e antiferromagnetismo.

1.4.1 Diamagnetismo

Os materiais diamagnéticos são repelidos quando colocados próximo a um campo magnético. Esse comportamento característico é explicado pela lei de Lenz que diz o seguinte: O fluxo do campo magnético devido a corrente induzida opõe-se à variação no fluxo que causa a corrente induzida [5], ou seja, esses materiais apresentam uma magnetização induzida com direção oposta à do campo indutor, de modo que a suscetibilidade χ desse tipo de material é negativa.

O diamagnetismo ocorre em todos os materiais, mas, geralmente, é um efeito muito mais fraco do que o paramagnetismo, e sendo assim, o diamagnetismo pode ser observado com mais facilidade em materiais não paramagnéticos. Exemplos de materiais diamagnéticos: prata (Ag), chumbo (Pb), bismuto (Bi), a molécula de hidrogênio (H_2), a molécula de água (H_2O), etc.

1.4.2 Paramagnetismo

Nos materiais paramagnéticos o momento de dipolo magnético dos átomos é permanente [5,7]. Estes momentos estão associados com o momento orbital dos elétrons e com o momento magnético de spin. Uma característica dos paramagnetos é que as direções dos seus momentos magnéticos estão distribuídas de forma aleatória, configurando assim, a ausência de um campo resultante macroscópico. Na figura 1 podemos ver um exemplo de configuração de um paramagneto. Mas, quando um material paramagnético se encontra sob a influência de um campo magnético externo, os seus momentos tendem a se alinhar com esse campo e o material evolui para uma

configuração mais organizada no que se referi a direção dos momentos magnéticos, propiciando o surgimento de um campo macroscópico resultante. Essa organização se mantém enquanto o campo estiver presente, se o campo for retirado, os momentos de dipolo voltam à desordem e não existirá mais um campo resultante. Essa reorganização dos momentos de dipolo magnético se dá por fatores energéticos, pois, a energia dos momentos alinhados com o campo externo é menor do que quando os dipolos estão antiparalelos com o campo externo. Essa tendência dos momentos de dipolo alinhar-se com o campo externo pode sofrer redução com o aumento da temperatura que tende a aumentar a desordem. Portanto, a suscetibilidade depende da temperatura $\chi=C/T$ (lei de Curie) sendo C uma constante positiva característica do material paramagnético. Como exemplo de materiais com esse comportamento podemos citar o Alumínio (Al), Magnésio (Mg), sulfato de cobre, etc.

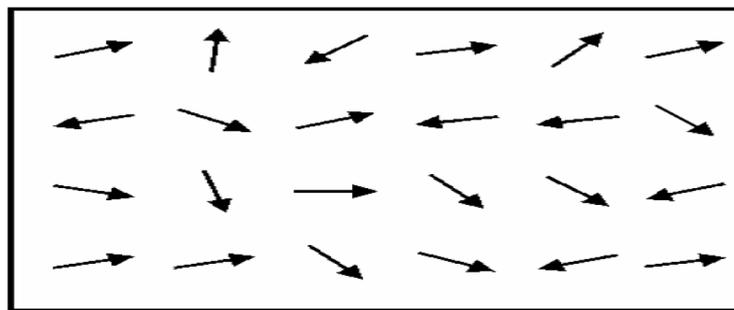


Figura 1 - Representação de momentos magnéticos com ordenamento aleatório, inerente a materiais paramagnéticos.

1.4.3 Ferromagnetismo

Materiais ferromagnéticos também possuem momentos de dipolo magnéticos permanentes [6,7]. A diferença é que neste caso existe uma forte interação entre átomos próximos que mantêm os seus momentos de dipolo alinhados, formando assim, os domínios magnéticos. A figura 2 mostra um exemplo de configuração de um ferromagneto. Este fato propicia a existência de um campo resultante mesmo na ausência de um campo externo, e desta maneira, dizemos que esses materiais exibem uma magnetização espontânea. Mas, essa magnetização sofre influência direta da temperatura, pois, em $T=0K$ a magnetização é máxima, já que, não existe neste caso agitação térmica dos átomos e o ordenamento magnético é o melhor possível. E em

temperaturas iguais ou maiores que T_c a magnetização cai para zero e o material se torna um paramagneto, pois neste caso a temperatura T_c , característica de cada material, indica que a agitação térmica foi o suficiente para desfazer o ordenamento magnético. T_c é a temperatura crítica ou de Curie onde ocorre a transição de uma fase ferromagnética (momento magnético ordenado) para uma fase paramagnética (momentos magnéticos desordenados). A figura 3 apresenta a curva de magnetização típica em função da temperatura. Como exemplos de matérias ferromagnéticas podemos citar o Ferro (Fe), Cobalto (Co), Níquel (Ni), Gadolínio (Gd), etc.

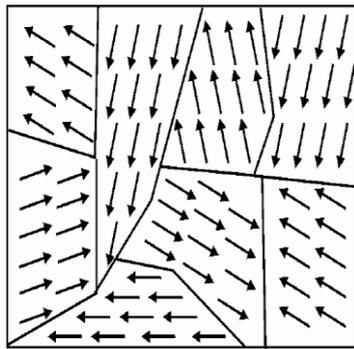


Figura 2 - Formação de domínios magnéticos minimizando a energia.

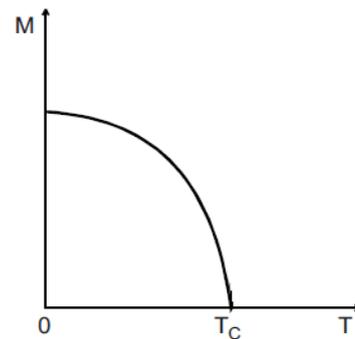


Figura 3 - Magnetização em função da temperatura.

1.4.4 Antiferromagnetismo

Essa classe de materiais possui momento de dipolo magnético permanente. No entanto, eles apresentam campo magnético externo nulo. A razão desse fato é atribuída às interações de troca (exchange) que forçam os momentos magnéticos dos átomos vizinhos a assumirem orientação antiparalela, ou seja, os momentos magnéticos têm a mesma direção, mas, o sentido inverso. Os materiais antiferromagnéticos reais possuem sub-redes com momentos magnéticos iguais e opostos resultando também em uma magnetização total nula [6]. Na figura 4 podemos ver um exemplo da organização antiparalela dos materiais antiferromagnéticos. Essa organização também depende da temperatura, pois, com o aumento da agitação térmica os materiais antiferromagnéticos passam a ser paramagnéticos. A temperatura onde essa transição ocorre é chamada de temperatura de Néel.

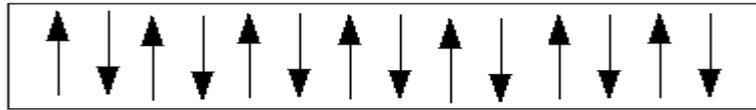


Figura 4 - Organização de spins antiparalela característica de materiais antiferromagnéticos.

A temperatura de Néel pode ser visualizada através dos gráficos do inverso da suscetibilidade magnética em função da temperatura. Como exemplo de materiais antiferromagnéticos podemos citar o Manganês (Mn), Crômio (Cr), etc.

O modelo, foco deste trabalho, tem uma fase inicialmente antiferromagnética nas redes Quadrada e Cúbica Simples. No capítulo 5 serão feitas mais abordagens sobre propriedades termodinâmicas dessa classe de materiais.

Capítulo 2

2 O Modelo de Hubbard Clássico

2.1. Introdução

No estudo da estrutura eletrônica dos sólidos são aplicadas em geral duas linhas teóricas. Uma é o modelo de Heitler-London, que faz uma descrição puramente atômica (elétron localizado) e descreve de forma consistente uma boa parte dos materiais isolantes e os elétrons f dos metais de terras raras. A outra descreve o comportamento dos elétrons itinerantes (modelo de Bloch) que despreza as correlações entre o movimento dos n elétrons, e sendo assim, é aplicada na descrição de bandas de condução de metais [8].

Quando aplicados aos metais de transição, esses modelos citados não oferecem resultados satisfatórios, devido ao comportamento dos elétrons da camada “d” incompleta que apresentam características de elétrons localizados e itinerantes ao mesmo tempo. Diante desse fato, J. Hubbard propôs em 1963 um modelo [1] que descreve de forma satisfatória os dois comportamentos. Esse modelo é muito utilizado não só para os metais de transição como também em qualquer material que apresente correlação entre elétrons em bandas estreitas. No entanto, a solução do modelo original de Hubbard permanece um desafio até os dias atuais. Um reflexo desse fato é que, até hoje, só possui solução exata na rede unidimensional para algumas situações limites. Pensando nesse fato e sabendo da importância de estudar o efeito do termo eletrônico itinerante foi proposto um modelo [2] que pode ser visto como um modelo clássico de Hubbard, e como veremos, uma generalização do modelo de Ising.

2.2. O Hamiltoniano de Hubbard Clássico

Partimos do hamiltoniano de Hubbard [1], que é definido para um orbital por sítio como sendo:

$$H = - \sum_{ij\sigma} t_{ij} C_{i\sigma}^+ C_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (2.1)$$

Em que $C_{i\sigma}^+$ e $C_{i\sigma}$ são, respectivamente, operadores criação e aniquilação para elétrons num sítio i de spin σ , $n_{i\sigma} = C_{i\sigma}^+ C_{i\sigma}$ é o operador número que informa o número de

elétrons com spin σ no sítio i em questão. A soma $-\sum_{ij} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma}$ é usualmente realizada sobre os sítios primeiros vizinhos na rede. Neste caso, a integral de salto ou integral de hopping está representada por $t_{ij} = t$. U é a repulsão coulombiana em um sítio “ i ”.

Portanto, o primeiro termo do hamiltoniano (2.1) expressa o salto dos elétrons entre os sítios primeiros vizinhos. O segundo termo expressa a interação coulombiana entre elétrons em um mesmo sítio, obviamente respeitando o princípio de exclusão de Pauli quanto à ocupação eletrônica no sítio.

Na proposta clássica [2], o modelo de Hubbard tem o seguinte hamiltoniano:

$$H = -\sum_{ij\sigma} t_{ij} n_{i\sigma} (1 - n_{j\sigma}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (2.2).$$

O diferencial que o hamiltoniano (2.2) oferece é que ele considera a energia associada à itinerância do elétron como sendo proporcional ao número total de saltos possíveis dos elétrons na rede. Essa contagem é feita pelo primeiro termo do hamiltoniano (2.2), o parêntese $(1 - n_{j\sigma})$ funciona como um contador de “buracos” nos sítios primeiros vizinhos. O segundo termo tem a mesma função do hamiltoniano (2.1). É importante salientar que o modelo de Hubbard Clássico [2] é um modelo que simula a itinerância de um sistema e o que é levado em consideração são as possibilidades de saltos eletrônicos e não os saltos propriamente ditos. Para explicitar esse mecanismo de contagem, vamos analisar a situação da figura 5:

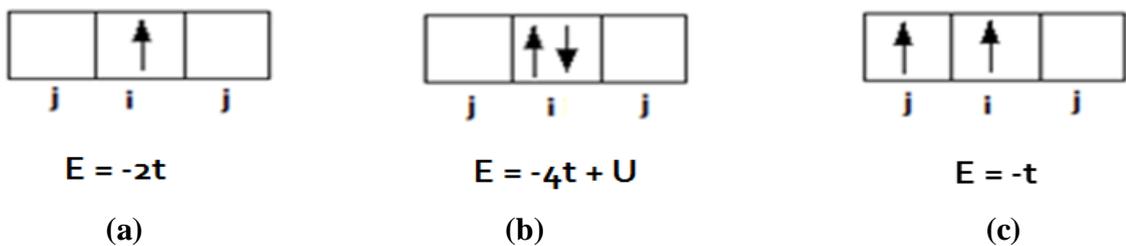


Figura 5– Representação da ocupação eletrônica em sítios de uma rede unidimensional.

Imagine que os quadrados da figura 5 sejam sítios primeiros vizinhos, em (a) o spin no sítio i tem duas possibilidades de salto, já que os sítios vizinhos j estão vazios ($n_{j\sigma}=0$) e substituindo esse valor de $n_{j\sigma}$ para ambas as situações no hamiltoniano (2.2) será fornecido o valor de energia $E = -2t$, perceba que não existe dupla ocupação, logo $U=0$. No caso (b) o sítio i está duplamente ocupado e os sítios j estão vazios ($n_{j\sigma}=0$),

sendo assim cada elétron up (down) possui duas possibilidades de salto e substituindo esses possíveis eventos no hamiltoniano (2.2) fornecem $E = -4t + U$. Já em (c) o elétron no sítio \mathbf{i} só possui uma única alternativa para saltar e neste caso não há também sítio duplamente ocupado ($U=0$), então a energia fica igual a $E = -t$.

O modelo Clássico de Hubbard (2.2) possui as seguintes características: é diagonal como o modelo de Ising, os estados do operador número são autoestado do hamiltoniano, os termos de salto (hopping) e coulombiano comutam e as transformações de simetria do modelo de Hubbard são preservadas tais como transformação partícula-buraco e a simetria de carga $U(1)$. Quanto à obtenção das propriedades termodinâmicas do modelo [2], nesta dissertação é feita via ensemble grande canônico utilizando simulação computacional para redes bi e tridimensional. No caso unidimensional reproduziremos a solução analítica feita em [2], efetuada utilizando a técnica da matriz de transferência.

2.3. Simetria Partícula-Buraco

Por analogia com $(C_{i\sigma}^+, C_{i\sigma})$ vamos definir os operadores $b_{i\sigma}^+$, $b_{i\sigma}$ criação e aniquilação de buracos, respectivamente. E $B_{i\sigma} = b_{i\sigma}^+ b_{i\sigma}$ como sendo o operador número de buracos. Quando falamos de buracos podemos entender como a ausência de elétrons no sítio, veja a relação: $C_{i\sigma} \rightarrow b_{i\sigma}^+$ ao destruir um elétron ($C_{i\sigma}$) cria-se um buraco ($b_{i\sigma}^+$) e $C_{i\sigma}^+ \rightarrow C_{i\sigma}$ ao criar um elétron ($C_{i\sigma}^+$) destrói-se um buraco ($b_{i\sigma}$).

$$\left\{ \begin{array}{l} c_{i\sigma} \quad \rightarrow \quad b_{i\sigma}^+ \\ c_{i\sigma}^+ \quad \rightarrow \quad b_{i\sigma} \\ \text{elétron} \quad \rightarrow \quad \text{buraco} \end{array} \right.$$

Devido à ideia de buraco adotada, ou seja, à ausência de partículas no sítio, a seguinte relação entre os operadores é válida $n_{i\sigma} + B_{i\sigma} = 1$.

Portanto,

$$n_{i\sigma} = 1 - B_{i\sigma} \quad (2.3)$$

ou

$$B_{i\sigma} = 1 - n_{i\sigma} \quad (2.4)$$

Substituindo a relação (2.3) no hamiltoniano (2.2), ficamos com:

$$1^\circ \text{ Termo: } -\sum_{ij\sigma} t_{ij} n_{i\sigma} (1 - n_{j\sigma}) = -\sum_{ij\sigma} t_{ji} B_{j\sigma} (1 - B_{i\sigma})$$

$$2^\circ \text{ Termo: } \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} = U \sum_i B_{i\uparrow} B_{i\downarrow} + U(N_s - N_B)$$

Sendo N_s o número de sítios da rede e N_B o número de buracos, ficamos com:

$$H = -\sum_{ij\sigma} t_{ji} B_{j\sigma} (1 - B_{i\sigma}) + U \sum_i B_{i\uparrow} B_{i\downarrow} + U(N_s - N_B)$$

O hamiltoniano buraco (H_B) é definido por:

$$H_B = -\sum_{ij\sigma} t_{ji} B_{j\sigma} (1 - B_{i\sigma}) + U \sum_i B_{i\uparrow} B_{i\downarrow}$$

Encontramos então a seguinte relação entre o hamiltoniano dos elétrons H e dos buracos H_B .

$$H = H_B + U(N_s - N_B). \quad (2.5)$$

Substituindo (2.3) agora na relação do número de elétrons.

$$N_e = \sum_i (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) \quad (2.6)$$

Encontramos a seguinte relação entre os números de elétron, buraco e de sítio:

$$N_e = \sum_i (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) = 2N_s - N_B. \quad (2.7)$$

Com as relações (2.5) e (2.7) podemos calcular o número médio de elétrons usando a definição de média termodinâmica no ensemble grande canônico.

$$\langle N_e \rangle = \frac{\text{Tr}\{N_e e^{-\beta[H - \mu N_e]}\}}{\text{Tr}\{e^{-\beta[H - \mu N_e]}\}} \quad (2.8)$$

Então, fazendo a substituição das relações (2.5) e (2.7) em (2.8), temos que:

$$\langle N_e \rangle = \frac{\text{Tr}\{(2N_s - N_B)e^{-\beta[H_B + U(N_s - N_B) - \mu(2N_s - N_B)]}\}}{\text{Tr}\{e^{-\beta[H_B + U(N_s - N_B) - \mu(2N_s - N_B)]}\}}$$

$$\langle N_e \rangle = 2N_s - \frac{\text{Tr}\{N_B e^{-\beta[H_B + U(N_s - N_B) - \mu(2N_s - N_B)]}\}}{\text{Tr}\{e^{-\beta[H_B + U(N_s - N_B) - \mu(2N_s - N_B)]}\}}$$

$$\langle N_e \rangle = 2N_s - \frac{\text{Tr}\{N_B e^{-\beta[H_B - N_B(U - \mu)]}\} e^{-\beta(U - 2\mu)N_s}}{\text{Tr}\{e^{-\beta[H_B - N_B(U - \mu)]}\} e^{-\beta(U - 2\mu)N_s}}$$

$$\langle N_e \rangle = 2N_s - \frac{\text{Tr}\{N_B e^{-\beta[H_B - N_B \mu_{Bu}]}\}}{\text{Tr}\{e^{-\beta[H_B - N_B \mu_{Bu}]}\}}.$$

$$\text{sendo } \begin{cases} \mu_{Bu} = U - \mu \\ \langle N_B \rangle = \frac{\text{Tr}\{N_B e^{-\beta[H_B - N_B \mu_{Bu}]}\}}{\text{Tr}\{e^{-\beta[H_B - N_B \mu_{Bu}]}\}} \end{cases}$$

Chegamos em:

$$\langle N_e \rangle = 2N_s - \langle N_B \rangle. \quad (2.9)$$

Portanto, fica claro que as relações para o número médio de elétrons $\langle N_e \rangle$ e para o número médio de buracos $\langle N_B \rangle$ são equivalentes e se tornam iguais no caso da banda meio cheia ($\mu = U/2$), temos:

$$\mu = \mu_{Bu} = U/2 \rightarrow \langle N_e \rangle = \langle N_B \rangle = N_s. \quad (2.10)$$

Essa simetria do modelo de Hubbard Clássico é válida para todos os tipos de rede. O desenvolvimento completo dos cálculos desta seção está no apêndice A.

2.4. Relação com o Modelo de Ising.

Podemos explicitar a relação entre o modelo de Hubbard Clássico com o modelo de Ising através de uma mudança de variável. Nessa mudança vamos introduzir duas variáveis de spin S_i e σ_i sendo ($S_i = \uparrow$ ou \downarrow) e ($\sigma_i = \uparrow$ ou \downarrow). Fazendo:

$$\begin{cases} S_i = 2n_{i\uparrow} - 1 \Rightarrow \begin{cases} -1 \\ 1 \end{cases} \\ \sigma_i = 2n_{i\downarrow} - 1 \Rightarrow \begin{cases} -1 \\ 1 \end{cases} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} n_{i\uparrow} = \frac{1+S_i}{2} \\ n_{i\downarrow} = \frac{1+\sigma_i}{2} \end{cases} \quad (2.11)$$

$$(2.12)$$

Substituindo (2.11) e (2.12) no hamiltoniano (2.2), adicionado do termo do potencial químico $-\mu \sum_i n_{i\sigma}$ e supondo que:

$$t_{ij} = t_{ji} = t .$$

Temos:

$$\begin{aligned} H = & -t \sum_{ij} \left\{ \frac{(1+S_i)}{2} \left[1 - \frac{(1+S_j)}{2} \right] + \frac{(1+\sigma_i)}{2} \left[1 - \frac{(1+\sigma_j)}{2} \right] \right\} \\ & + U \sum_i \frac{(1+S_i)}{2} \cdot \frac{(1+\sigma_i)}{2} - \mu \sum_i \left[\frac{(1+S_i)}{2} + \frac{(1+\sigma_i)}{2} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} H = & -\frac{t}{4} \sum_{ij} \{ (1+S_i) \cdot (1-S_j) + (1+\sigma_i) \cdot (1-\sigma_j) \} \\ & + \frac{U}{4} \sum_i (1+S_i + \sigma_i + S_i\sigma_i) - \frac{\mu}{2} \sum_i [2 + S_i + \sigma_i] \end{aligned}$$

$$H = -\frac{t}{4} \sum_{ij} \{ 2 - S_i S_j - \sigma_i \sigma_j \} + \frac{U}{4} \sum_i (1 + S_i + \sigma_i + S_i \sigma_i) - \frac{\mu}{2} \sum_i (2 + S_i + \sigma_i)$$

$$H = \frac{t}{4} \sum_{ij} (S_i S_j + \sigma_i \sigma_j) + \frac{U}{4} \sum_i S_i \sigma_i + \frac{(U - 2\mu)}{4} \sum_i (S_i + \sigma_i) + \left\{ N_s \left(\frac{U}{4} - \frac{tz}{2} - \mu \right) \right\} \rightarrow \text{Constante}$$

$$\text{Chamando } \begin{cases} h = \frac{U-2\mu}{4} \\ J = \frac{t}{4} \\ L = \frac{U}{4} \end{cases}$$

O hamiltoniano fica:

$$H = J \sum_{ij} (S_i S_j + \sigma_i \sigma_j) + L \sum_i S_i \sigma_i + h \sum_i (S_i + \sigma_i) \quad (2.13)$$

Para o caso meio cheio $\rightarrow U=2\mu \rightarrow h=0$, a relação (2.13) se torna:

$$H = J \sum_{ij} (S_i S_j + \sigma_i \sigma_j) + L \sum_i S_i \sigma_i \quad (2.14)$$

Para $L=0$, (2.14) se torna:

$$H = J \sum_{ij} (S_i S_j + \sigma_i \sigma_j) \quad (2.15)$$

Que corresponde a dois Ising independentes. Já para $L \rightarrow \infty$, temos que $\sigma_i = -S_i$ e encontramos:

$$H = 2J \sum_{ij} S_i S_j \Rightarrow \text{Ising com } J' = 2J \Rightarrow H = J' \sum_{ij} S_i S_j \quad (2.16)$$

As relações (2.15) e (2.16) correspondem ao consagrado modelo de Ising a campo externo nulo, iremos apresentar este modelo na próxima seção com um pouco mais de detalhes. O desenvolvimento completo dos cálculos desta seção está no apêndice B.

2.5. O Modelo de Ising

Na presente seção vamos comentar o modelo de Ising, pois o mesmo serve como um importante parâmetro de comparação com o modelo de Hubbard Clássico, já que existe a estreita relação como mostrado na seção anterior. O modelo de Ising possui o seguinte hamiltoniano:

$$H = -J \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (2.17)$$

No modelo de Ising as variáveis de spin clássica ($\sigma_i = \pm 1$) permitem diferentes interpretações [9,10]. Em (2.17) J representa a energia de Exchange e a soma $J \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j$ é feita sobre os pares de sítios primeiros vizinhos e representa as energias de interação que pode propiciar uma mudança na orientação dos spins. Quando J é positivo o alinhamento paralelo dos spins é favorecido e quando J é negativo o alinhamento antiparalelo é favorecido [10,11]. Já o segundo termo $h \sum_{i=1}^N \sigma_i$ considera a presença do campo externo h . Neste modelo a energia cinética não é contemplada, o que é levado em consideração é a orientação dos spins em cada sítio e a distribuição espacial dos mesmos na rede. O hamiltoniano (2.17) foi utilizado inicialmente para sistemas magnéticos, mas, pode ser utilizado em quaisquer sistemas interagentes de dois estados [11], como exemplo podemos citar ligas binárias e gás de rede.

Capítulo 3

Solução Analítica do Modelo de Hubbard Clássico na rede Unidimensional

3.1. Montagem da Matriz transferência

A ideia principal do método é escrever a função de partição em termos de uma matriz chamada matriz transferência [9,10,11].

Para ilustrar o procedimento de montagem dessa matriz vamos utilizar o modelo de Ising e a função de partição canônica

$$Z_N = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta H} \quad (3.1)$$

Considerando uma rede unidimensional periódica em que $\{\sigma_i\}$ representa todas as possíveis configurações dos spins, podemos assumir $\sigma_{N+1} = \sigma_1$. Substituindo a eq. (2.17) em (3.1), temos:

$$Z_N = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{\beta J \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} + \beta h \sum_i \sigma_i} \quad (3.2)$$

Fazendo $K = \beta J$ e $L = \beta h$ e escrevendo alguns termos das somatórias do expoente, encontramos:

$$Z_N = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{K(\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_4 + \dots) + L(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \dots)} \quad (3.3)$$

Reescrevendo os termos do segundo parêntese do expoente da eq. (3.3) de forma conveniente, podemos escrever:

$$Z_N = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{K(\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_4 + \dots) + L \left[\left(\frac{\sigma_1 + \sigma_1}{2} \right) + \left(\frac{\sigma_2 + \sigma_2}{2} \right) + \left(\frac{\sigma_3 + \sigma_3}{2} \right) + \dots \right]} \quad (3.4)$$

Agora, colocando em evidência os termos no expoente da eq. (3.4), chegamos à forma fatorada:

$$Z_N = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{K(\sigma_1\sigma_2) + \frac{L}{2}(\sigma_1 + \sigma_2)} \cdot e^{K(\sigma_2\sigma_3) + \frac{L}{2}(\sigma_2 + \sigma_3)} \cdot e^{K(\sigma_3\sigma_4) + \frac{L}{2}(\sigma_3 + \sigma_4)} \quad (3.5)$$

De maneira mais compacta, fica:

$$Z_N = \sum_{\{\sigma_i\}} T_{1,2} T_{2,3} T_{3,4} \dots T_{N-1,1} \quad (3.6a)$$

ou

$$Z_N = \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_N} \prod_{i=1}^N T_{i,i+1} \quad (3.6b)$$

Perceba que cada termo do produto está em função apenas de pares de sítios primeiros vizinhos:

$T_{1,2} = e^{k(\sigma_1\sigma_2) + \frac{L}{2}(\sigma_1 + \sigma_2)}$, $T_{2,3} = e^{k(\sigma_2\sigma_3) + \frac{L}{2}(\sigma_2 + \sigma_3)}$, ..., $T_{N-1,1} = e^{k(\sigma_{N-1}\sigma_1) + \frac{L}{2}(\sigma_{N-1} + \sigma_1)}$. De modo geral, temos:

$$T_{i,i+1} = e^{k(\sigma_i\sigma_{i+1}) + \frac{L}{2}(\sigma_i + \sigma_{i+1})} \quad (3.7)$$

As equações. (3.6a)e (3.6b) representam uma matriz produto escrita em termos das componentes da matriz Te o tamanho da matriz depende do número das formas possíveis de ocupação do sítio e das interações consideradas [11]. No caso do modelo de Ising o qual estamos considerando nesta seção, cada sítio pode ser ocupado de duas maneiras diferentes.

$$\sigma_i = \begin{cases} up = \uparrow = |1\rangle \\ down = \downarrow = |-1\rangle \end{cases}$$

Sendo assim, esse modelo fornecerá uma matriz transferência 2x2 que pode ser escrita aplicando os estados de spin em (3.7) da seguinte maneira:

$\langle \sigma_i | T | \sigma_{i+1} \rangle = e^{k(\sigma_i\sigma_{i+1}) + \frac{L}{2}(\sigma_i + \sigma_{i+1})}$ e assim podemos escrever a matriz transferência T, abaixo.

$$T = \begin{pmatrix} \langle 1|T|1\rangle & \langle 1|T|-1\rangle \\ \langle -1|T|1\rangle & \langle -1|T|-1\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{K+L} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K-L} \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

Considerando o traço sobre todos os spin em (3.6a) a função de partição canônica pode ser escrita como:

$$Z_N = \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_2} \sum_{\sigma_3} \cdots \sum_{\sigma_N} \langle \sigma_1|T|\sigma_2\rangle \langle \sigma_2|T|\sigma_3\rangle \langle \sigma_3|T|\sigma_4\rangle \cdots \langle \sigma_N|T|\sigma_1\rangle$$

$$Z_N = \sum_{\sigma_1} \langle \sigma_1|T \sum_{\sigma_2} |\sigma_2\rangle \langle \sigma_2|T \sum_{\sigma_3} |\sigma_3\rangle \langle \sigma_3| \cdots T \sum_{\sigma_N} |\sigma_N\rangle \langle \sigma_N|T|\sigma_1\rangle$$

$$\text{Como } \sum_{\sigma_i} |\sigma_i\rangle \langle \sigma_i| = 1$$

$$Z_N = \sum_{\sigma_1} \langle \sigma_1|T^N|\sigma_1\rangle = \text{tr}(T^N) = \sum_{i=1}^2 \lambda_i^N$$

$$Z_N = \sum_{i=1}^2 \lambda_i^N = \lambda_1^N + \lambda_2^N \quad (3.9)$$

A eq. (3.9) é o traço da matriz T^N representada em termos dos autovalores λ_i de T. Resolvendo a equação matricial:

$$(T - \lambda I) = 0 \quad (3.10)$$

Encontraremos os autovalores λ_i , sendo que I é a matriz identidade. Resolvendo (3.10) encontramos os seguintes valores:

$$\begin{cases} \lambda_1 = e^K \cosh(L) + [e^{2K} \cosh^2(L) - 2 \sin(2K)]^{1/2} \\ \lambda_2 = e^K \cosh(L) - [e^{2K} \cosh^2(L) - 2 \sin(2K)]^{1/2} \end{cases}$$

Sendo $\lambda_1 > \lambda_2$ e lembrando que $\begin{cases} K = \beta J \\ L = \beta h \\ \beta = 1/k_B T \end{cases}$.

A importância desse método fica evidente quando é feita a substituição da função de partição Z_N (3.9) escrita em termos dos autovalores da matriz transferência na função da energia livre no limite termodinâmico:

$$f = -K_B T \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln(Z_N) . \quad (3.11)$$

Depois de realizado esse processo grandezas como: entropia, magnetização, energia interna e outras que são relacionadas, são definidas via derivada da equação e (3.11) como segue:

$$U = -\frac{\partial \ln(Z_N)}{\partial \beta} \quad (\text{Energia Interna}), \quad S = -\left(\frac{\partial f}{\partial T}\right)_H \quad (\text{Entropia}), \quad M = -\left(\frac{\partial f}{\partial H}\right)_T$$

(magnetização) e $C = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{1}{k_B T^2} \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} [\ln(\lambda_{m\acute{a}x})]$ (Calor Especifico).

Esse mesmo método será utilizado na próxima seção para obter a solução analítica unidimensional do modelo de Hubbard Clássico.

3.2. Modelo de Hubbard Clássico (Solução analítica para a rede unidimensional)

No caso do modelo clássico para realizar a montagem da matriz transferência é mais indicado o uso da função de partição grande canônico, pois o hamiltoniano (2.2) descreve sistemas itinerantes e sendo assim, o sistema está sujeito a variações no número de partículas.

A grande função de partição é dada por:

$$\Xi = \sum_i e^{-\beta(E_i - \mu N_i)} \quad (3.12)$$

Sendo μ o potencial químico e N_i o número de partículas. Realizando os mesmos passos da seção anterior e levando em consideração a condição de contorno cíclica ($|n_{N+1}\rangle = |n_1\rangle$), temos que a matriz transferência é dada por:

$$T_{i,i+1} = e^{-\beta E_i + \frac{\beta \mu}{2} \sum_{\sigma} (n_{i\sigma} + n_{i+1\sigma})} \quad (3.13)$$

O modelo (2.2) contempla quatro formas de ocupação em um sítio $|n_i\rangle = |n_{i\uparrow}, n_{i\downarrow}\rangle$, ou seja, $|0,0\rangle, |1,0\rangle, |0,1\rangle$ e $|1,1\rangle$. Aplicando estes estados em (3.13) obtemos a matriz transferência 4x4:

$$T = \begin{pmatrix} \langle 00|T|00\rangle & \langle 00|T|10\rangle & \langle 00|T|01\rangle & \langle 00|T|11\rangle \\ \langle 10|T|00\rangle & \langle 10|T|10\rangle & \langle 10|T|01\rangle & \langle 10|T|11\rangle \\ \langle 01|T|00\rangle & \langle 01|T|10\rangle & \langle 01|T|01\rangle & \langle 01|T|11\rangle \\ \langle 11|T|00\rangle & \langle 11|T|10\rangle & \langle 11|T|01\rangle & \langle 11|T|11\rangle \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

Para o caso da banda- meio- cheia $\mu = U/2$

$$T = \begin{pmatrix} 1 & e^{\beta\left(t+\frac{U}{4}\right)} & e^{\beta\left(t+\frac{U}{4}\right)} & e^{2\beta t} \\ e^{\beta\left(t+\frac{U}{4}\right)} & e^{\frac{\beta U}{2}} & e^{\left(2t+\frac{U}{2}\right)} & e^{\beta\left(t+\frac{U}{4}\right)} \\ e^{\beta\left(t+\frac{U}{4}\right)} & e^{\beta\left(2t+\frac{U}{2}\right)} & e^{\frac{\beta U}{2}} & e^{\beta\left(t+\frac{U}{4}\right)} \\ e^{2\beta t} & e^{\beta\left(t+\frac{U}{4}\right)} & e^{\beta\left(t+\frac{U}{4}\right)} & 1 \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

Diagonalizando a matriz, encontramos os autovalores:

$$\lambda_1 = \frac{1}{2} + \frac{e^{\frac{\beta U}{2}}}{2} + \frac{e^{2\beta t}}{2} + \frac{e^{\beta\left(2t+\frac{U}{2}\right)}}{2} + \left(\frac{1}{2} \sqrt{1 + e^{\beta(U+4)} + e^{\beta U} + e^{4t\beta} + 2e^{\beta(U+2t)} + 2e^{2t\beta} - 2e^{\beta\left(2t+\frac{U}{2}\right)} - 2e^{\frac{\beta U}{2}}} \right)$$

$$\lambda_2 = \frac{1}{2} + \frac{e^{\frac{\beta U}{2}}}{2} + \frac{e^{2\beta t}}{2} + \frac{e^{\beta\left(2t+\frac{U}{2}\right)}}{2} + \left(-\frac{1}{2} \sqrt{1 + e^{\beta(U+4)} + e^{\beta U} + e^{4t\beta} + 2e^{\beta(U+2t)} + 2e^{2t\beta} - 2e^{\beta\left(2t+\frac{U}{2}\right)} - 2e^{\frac{\beta U}{2}}} \right)$$

$$\lambda_3 = e^{\frac{\beta U}{2}} - e^{\beta\left(2t+\frac{U}{2}\right)}$$

$$\lambda_4 = 1 - e^{2\beta t}$$

Escrevermos os autovalores de forma a atender $\lambda_1 > \lambda_2 > \lambda_3 > \lambda_4$. A grande função de partição fica:

$$\Xi = \sum_{i=1}^4 \lambda_i^N \quad (3.16)$$

Substituindo na relação da energia livre no limite termodinâmico equação (3.11), temos:

$$f = -k_B T \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln\{\Xi\}$$

$$f = -k_B T \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \left\{ \sum_{i=1}^4 \lambda_i^N \right\}$$

$$f = -k_B T \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln\{\lambda_1^N + \lambda_2^N + \lambda_3^N + \lambda_4^N\}$$

$$f = -k_B T \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \left\{ \lambda_1^N \left(1 + \frac{\lambda_2^N}{\lambda_1^N} + \frac{\lambda_3^N}{\lambda_1^N} + \frac{\lambda_4^N}{\lambda_1^N} \right) \right\}$$

Para $N \rightarrow \infty$, $\left(\frac{\lambda_{2,3,4}}{\lambda_1}\right)^N \rightarrow 0$ então ficamos com:

$$f = -k_B T \ln(\lambda_1) \quad (3.17)$$

Agora, fazendo uso de (3.17) podemos encontrar grandezas termodinâmicas através das suas derivadas para obter informações do sistema fornecidas pelo modelo hamiltoniano Hubbard Clássico.

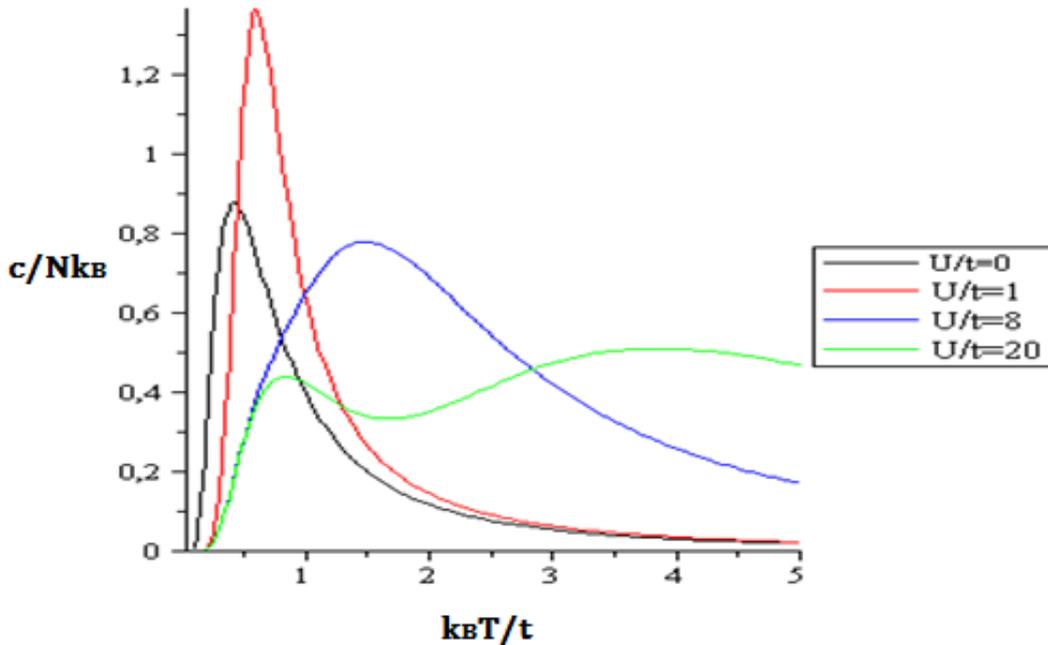


Figura 6—Calor específico $c/N k_B$ em função da temperatura $k_B T/t$ para alguns valores de U/t : $U/t=0$, $U/t=1$, $U/t=8$ e $U/t=20$.

A figura 6 representa os valores da função do calor específico dados por:

$$c = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{1}{k_B T^2} \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} [\ln(\lambda_{m\acute{a}x})]$$

Os valores do calor específico usados para a construção dos gráficos estão num intervalo de temperaturas $0.1 \leq k_B T/t \leq 5.01$ e serve como um exemplo das informações que podem ser colhidas utilizando as funções termodinâmicas obtidas através da técnica da matriz de transferência para o modelo. A discussão da figura 6 está na referência [2].

Capítulo 4

4.1. Transição de Fase

A natureza possui vários sistemas onde ocorrem transições de fase. Como exemplos, podemos citar: fluidos simples, ligas metálicas, materiais magnéticos e outros. A transição de fase é caracterizada por uma singularidade na energia livre ou em uma das suas grandezas derivadas, como o calor específico por exemplo.

Outro aspecto das transições de fase é a mudança em propriedades físicas devido à variação em grandezas termodinâmicas, como a temperatura. É o que ocorre com o sistema da figura 7:

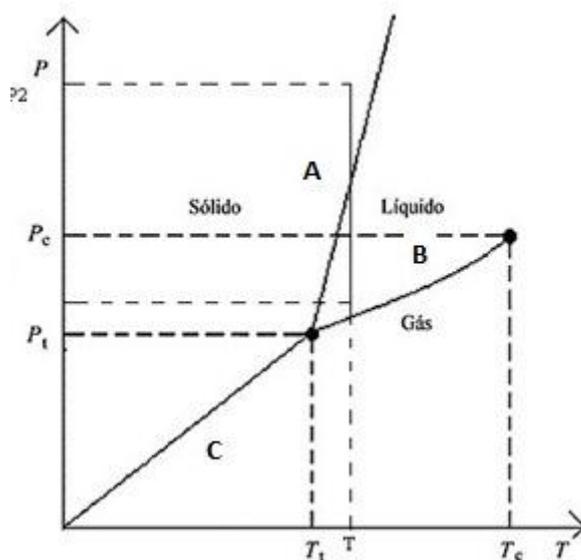


Figura 7–Diagrama de fases de um fluido

O diagrama de fases da figura 7 representa as regiões de transição de estados de um fluido em função da temperatura, a curva **A** recebe o nome de curva de fusão porque delimita os estados sólido e líquido. Já a curva **B** é denominada de curva de vaporização, pois delimita as fases líquida e gasosa, e a curva **C** é chamada de curva de sublimação e delimita as fases sólida e de vapor. No diagrama estão representados dois pontos importantes: o ponto triplo com temperatura T_t e o ponto crítico com temperatura T_c , onde o ponto triplo representa a coexistência dos três estados do fluido e a partir do

ponto crítico a transição entre as fases líquida-gasosa não é mais detectável utilizando a descontinuidade das propriedades macroscópicas.

No ponto crítico, grandezas termodinâmicas como o calor específico apresenta divergência assintótica (picos) caracterizada por um valor denominado de expoente crítico que são universais para a mesma classe de sistemas físicos como os fluidos simples que possuem o mesmo expoente crítico [11].

No capítulo 5 utilizaremos os dados oriundos da simulação computacional e calcularemos os expoentes críticos do modelo de Hubbard Clássico para o calor específico em redes bi e tri dimensional comparando-os com os valores do modelo de Ising.

4.2. Método de Monte Carlo

Os recursos de simulação computacional são de extrema importância para as pesquisas científicas, pois se caracterizam como uma ferramenta poderosa na investigação de vários sistemas complexos. Uma técnica numérica de grande relevância é o Método de Monte Carlo, onde a ideia fundamental é a de escolher uma sequência de configurações aleatórias sendo que cada elemento da sequência depende exclusivamente da probabilidade de ocorrência da configuração imediatamente anterior [9].

No Método de Monte Carlo existe um algoritmo de uso frequente chamado de algoritmo de Metropolis [12]. Esse algoritmo tem as seguintes condições de probabilidade para as configurações \mathbf{y} e \mathbf{y}' .

$$w(\mathbf{y} \rightarrow \mathbf{y}') = \begin{cases} \frac{1}{\tau} e^{-\beta\Delta E}, & \Delta E > 0 \\ \frac{1}{\tau}, & \Delta E \leq 0 \end{cases} \quad (4.1)$$

Sendo \mathbf{y} a configuração inicial do sistema em questão e \mathbf{y}' a configuração final e $w(\mathbf{y} \rightarrow \mathbf{y}')$ é a probabilidade de transição entre as configurações \mathbf{y} e \mathbf{y}' . Em geral τ assume o valor 1 (um).

Uma característica interessante do Método de Monte Carlo é justamente esse tratamento probabilístico $w(\mathbf{y} \rightarrow \mathbf{y}')$ que ele propõe, resultando em dados que posteriormente fundamenta uma descrição estatística dos sistemas analisados.

4.2.1. Algoritmo de Monte Carlo para o Modelo de Hubbard Clássico

Nesta seção transcrevemos com algumas modificações o algoritmo da referência [13], pois este foi adaptado para o nosso trabalho.

As dificuldades em encontrar soluções analíticas em redes bi e tri dimensional para o modelo de Hubbard Clássico nos levaram a utilizar métodos computacionais. O seguinte algoritmo contempla quatro formas de ocupação eletrônica num sítio, ou seja, $|0,0\rangle$, $|1,0\rangle$, $|0,1\rangle$ e $|1,1\rangle$ em que 0 representa um sítio vazio. O 1 na primeira posição representa um elétron de spin “up” e o 1 na segunda posição um sítio ocupado por um elétron de spin “down”. Devido as quatro formas de ocupação, ficam evidentes as possibilidades de variação no número de partículas do sistema, sendo assim, o algoritmo utiliza o ensemble grande canônico.

O peso de Boltzmann $\exp[-(\Delta E - \mu\Delta N)/T]$ depende da variação da energia ΔE e da variação do número de partículas ΔN . O potencial químico (μ) desempenha uma função de controle do número médio de partículas na simulação.

A simulação oferece algumas limitações, pois a função de grande partição não pode ser calculada já que, trata-se de um processo estocástico que não considera todos os possíveis estados do sistema, e isso implica na impossibilidade de calcular grandezas que dependam diretamente da função de grande partição como o grande potencial.

O Monte Carlo que utilizamos pode ser aplicado a modelos que têm hamiltonianos diagonais e é neste sentido que dizemos que o modelo é clássico.

4.2.2. Algoritmo

O seguinte algoritmo de Monte Carlo foi utilizado para calcular algumas propriedades termodinâmicas em redes quadrada e cúbica simples utilizando o modelo de Hubbard Clássico. Reescrevendo o hamiltoniano (2.2) para as redes mencionadas acima, temos, por exemplo, para a rede quadrada.

$$H = \sum_{i=1}^{L_1} \sum_{j=1}^{L_2} H_{i,j} \quad (4.2)$$

$$H = -t n_{i,j,\sigma} [(1 - n_{i+1,j,\sigma}) + (1 - n_{i,j+1,\sigma})] + U [n_{i,j\uparrow} n_{i,j\downarrow}] \quad (4.3)$$

No algoritmo consideramos $k_B = 1$ e que o número aleatório escolhido é regularmente distribuído entre $[0,1]$. Assim, podemos escrever a sequência:

Início

1) Leia os dados de entrada.

- ✓ Número de sítios em cada direção L_1, L_2 (rede quadrada);
- ✓ Interação Coulombiana U ;
- ✓ Potencial Químico μ ;
- ✓ Temperatura T ;
- ✓ Total de passos de Monte Carlo PMCT;
- ✓ Passos de Monte Carlo descartados PMCD (tempo de relaxação).

2) Crie um array No (i,j) rede quadrada, representando a ocupação dos sítios (i, j) , onde o valor -1 ($+1$), indicará um sítio magnético com elétron de spin down (up) e 2 (0) representa um sítio não-magnético com dois (nenhum) elétrons. Faça $No \leftarrow 0$ para todos seus elementos (sítios vazios) .

3) Comece a distribuir os férmions nos sítios, de forma que se obtenha a menor energia interna possível para o sistema (estado fundamental). O estado fundamental é escolhido inicialmente, pois estatisticamente ele é relevante em qualquer temperatura (maior peso de Boltzmann). A princípio, impomos que o número de férmions seja igual ao número de sítios $N=L$, mas esse valor será muito modificado a cada passo de Monte Carlo PMC, convergindo em sua média corretamente no final da simulação, devido ao valor do potencial químico.

4) Calcule a energia interna do sistema E pelo hamiltoniano (4.3) para rede quadrada. Use a condição de contorno periódicas.

5) Crie variáveis Soma E e Soma N fazendo-as receber zero. Elas serão úteis para os somatórios de E e N ao final de cada PMC. Se for necessário calcular outras grandezas termodinâmicas, crie outras variáveis com o mesmo intuito.

6) Comece o primeiro PMC ← 1.

7) Evolução de Metropolis: escolha um sítio (i, j) rede quadrada. Mudando aleatoriamente o valor de No (i, j) ou No (i, j l) para um dos outros 2 valores possíveis. Calcule a variação energética $\Delta E - \mu\Delta N$. Se ela for menor ou igual a zero, a mudança é aceita, pois é espontânea. Mas, se essa variação for maior que zero, a probabilidade de aceitação dessa mudança é o peso de Boltzmann $w = \exp[-(\Delta E - \mu\Delta N)/T]$. Se rand, o novo estado é aceito, caso contrário o estado anterior é restaurado, desfazendo a mudança. Se a mudança foi aceita, atualize o valor das grandezas do sistema fazendo $E \leftarrow E + \Delta E$ e $N \leftarrow N + \Delta N$.

8) Repita o processo 7 até passar sem repetições por todos os sítios do array No (ou até mais vezes se desejar).

9) Se $PMC > PMCD$ então adicione as grandezas aos seus respectivos somatórios fazendo $SomaE \leftarrow SomaE + E$ e $SomaN \leftarrow SomaN + N$.

10) Fim do atual PMC. Se $PMC < PMCT$, faça $PMC \leftarrow PMC + 1$ e retorne ao procedimento 7.

11) Calcule as médias aritméticas de Monte Carlo das grandezas termodinâmicas dividindo as somas pelas suas quantidades de termos $\langle E \rangle_{MC} \leftarrow Soma E / (PMCT - PMCD)$ e $\langle N \rangle_{MC} \leftarrow Soma N / (PMCT - PMCD)$. Perceba pelos procedimentos 9 e 10 que as somas possuem $PMCT - PMCD$ termos.

FIM

O mesmo procedimento foi adotado para o caso da rede cúbica simples.

Capítulo 5

Simulação das Redes Quadrada e Cúbica Simples

5.1. Parâmetros

Com o algoritmo detalhado na seção 4.2.1, foi feita a simulação do modelo Clássico de Hubbard para a rede quadrada com as seguintes quantidades de sítios: $N=100 \times 100$, $N=200 \times 200$, $N=500 \times 500$ e $N=1000 \times 1000$. Utilizamos para cada tamanho de rede os seguintes valores para a interação coulombiana $0 \leq U/t \leq 20$.

Para o caso da rede cúbica simples o novo modelo foi simulado para os tamanhos de rede no intervalo $25^3 \leq N \leq 30^3$ e também para $N=40^3$, $N=60^3$, $N=70^3$ e $N=80^3$ com os mesmos valores de U/t usados na rede quadrada. O objetivo de simular redes com diferentes tamanhos é determinar a sua influencia na obtenção das grandezas termodinâmicas. Nos dois tipos de rede as simulações tiveram condições de contorno cíclicas (anel) para o caso da banda meio-cheia $\mu = \frac{U}{2} \rightarrow d=1$ (sendo d a densidade eletrônica). Em cada simulação foram usados 10000 passos de Monte Carlo (MC) e desprezados os 4000 primeiros passos. Em simulações de Monte Carlo existe essa necessidade de descartar alguns passos, pois esses correspondem a valores que refletem as escolhas das configurações iniciais para o sistema e que provavelmente fornecerá dados longe das médias da grandeza considerada na simulação.

5.1.1. Obtenção das Propriedades Termodinâmicas

Na simulação foram obtidas a suscetibilidade magnética, calor específico, energia interna e magnetização. A magnetização e a energia interna são determinadas em cada estado do sistema de forma direta pelo algoritmo da seção 4.2.1 calculando as suas médias de Monte Carlo como $m = \frac{\langle M \rangle_{MC}}{N}$. O calor específico pode ser encontrado via derivada numérica da energia interna em relação a temperatura, mas no caso meio-cheio o potencial químico $\mu = \frac{U}{2}$ é constante em termos da temperatura, logo o seguinte cálculo pode ser feito para o calor específico:

$$c = \frac{1}{N} \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}. \quad (5.1)$$

A suscetibilidade magnética a campo nulo é dada por:

$$\chi = \frac{1}{N} \left. \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial h} \right|_{h \rightarrow 0}$$

$$\chi = \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial h} \frac{T_r \{ M e^{-\beta(H - \mu N - hM)} \}}{T_r \{ e^{-\beta(H - \mu N - hM)} \}}. \quad (5.2)$$

5.2. Dependência das Grandezas Termodinâmicas com a Temperatura

A seguir, serão mostrados alguns gráficos das grandezas termodinâmicas obtidos da simulação, juntamente com as discussões a respeito do comportamento das mesmas com a variação da temperatura. Os gráficos indicam a existência de uma transição de fase antiferro-paramagneto.

Inicialmente as figuras 8 e 9 mostram o comportamento da energia interna com a mudança da temperatura, respectivamente, para os casos da rede quadrada e cúbica simples.

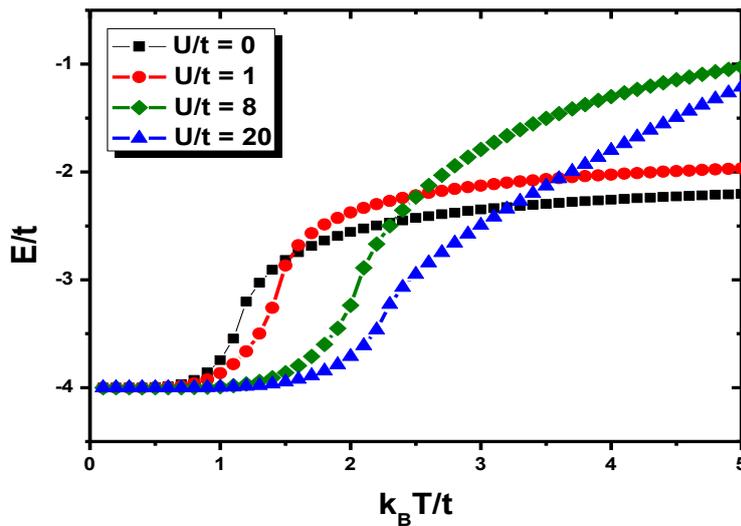


Figura 8 - Energia interna E/t de uma rede Quadrada ($N = 1000^2$) em função da temperatura $k_B T/t$ para alguns valores de U/t : $U/t=0$, $U/t=1$, $U/t=8$ e $U/t=20$.

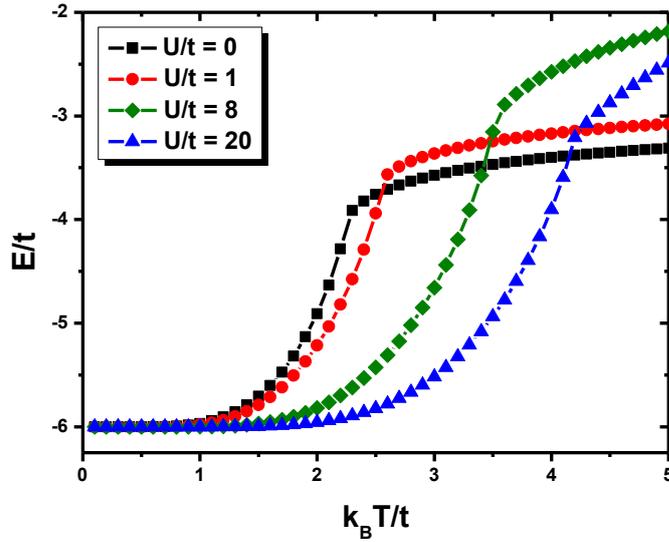


Figura 9 - Energia interna E/t de uma rede Cúbica Simples ($N = 80^3$) em função da temperatura $k_B T/t$ para alguns valores de U/t : $U/t=0$, $U/t=1$, $U/t=8$ e $U/t=20$.

Ao analisar os gráficos da energia interna, em ambos os casos, é possível perceber a mudança de concavidade das curvas evidenciando uma transição de fase em certos valores de temperatura T_N (Temperatura de Néel) que aumenta de valor à medida que U/t cresce. Podemos perceber também que a mudança de concavidade é mais suave no caso da rede quadrada para os mesmos valores de U/t explicitando a influência da dimensionalidade da rede no cálculo dessa grandeza termodinâmica.

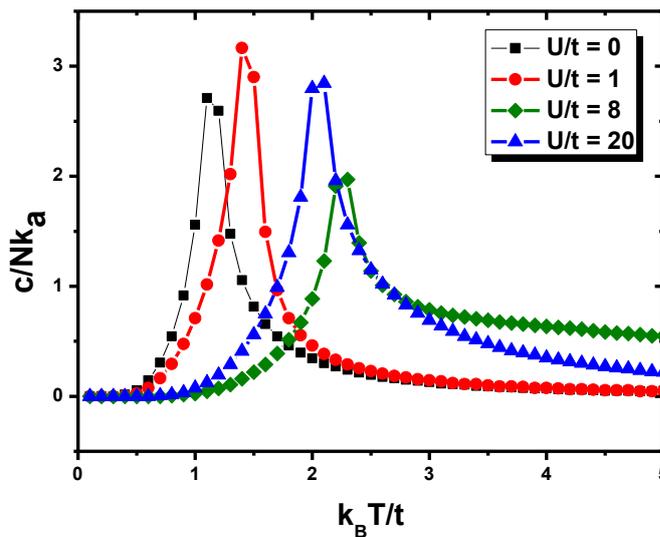


Figura 10 - Calor Específico c/Nk_B de uma rede Quadrada ($N = 1000^2$) em função da temperatura $k_B T/t$ para os seguintes valores de U/t : $U/t=0$, $U/t=1$, $U/t=8$ e $U/t=20$.

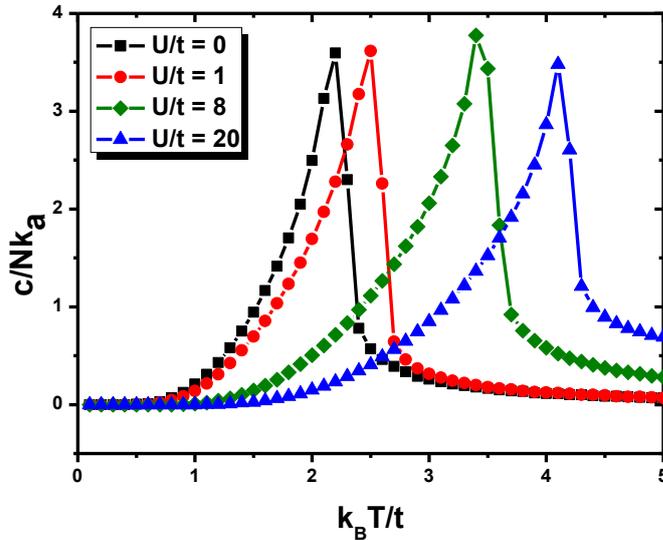


Figura 11 - Calor Específico c/Nk_B de uma rede Cúbica Simples ($N = 80^3$) em função da temperatura $k_B T/t$ para os seguintes valores de U/t : $U/t=0$, $U/t=1$, $U/t=8$ e $U/t=20$.

Nas figura 10 e figura 11 estão representados o calor específico c/Nk_B das redes quadrada e cúbica simples, respectivamente, em função da temperatura $k_B T/t$. Veja os valores que seguem nas tabelas extraídas das figuras 10 e 11:

Tabela 1 - Valores dos picos do calor específico c/Nk_B e das correspondentes temperaturas $k_B T/t$ da rede Quadrada para alguns valores de U/t .

Rede Quadrada	$U/t=1$	$U/t=8$	$U/t=20$
c/Nk_B	3.165	2.80	1.91
$k_B T/t$	1.4	2.0	2.2

Tabela 2 - Valores dos picos do calor específico c/Nk_B e das correspondentes temperaturas $k_B T/t$ da rede Cúbica Simples para alguns valores de U/t .

Rede Cúbica Simples	$U/t=1$	$U/t=8$	$U/t=20$
c/Nk_B	3.615	3.775	3.480
$k_B T/t$	2.5	3.4	4.1

No caso unidimensional [2] o gráfico do calor específico, figura 6, tem o pico máximo ($c/Nk_B = 1.38$ em $k_B T/t = 0.6$) para $U/t=0.7$ e a partir daí os picos começam a decrescer. E em altas temperaturas com $U/t \rightarrow \infty$, o pico corresponde ao valor exato do calor específico do modelo de Ising que é $c/Nk_B = 0.44$ em uma dimensão. Os dados simulados são diferentes pois temos transições de fases e os picos são gerados porque estamos simulando redes finitas. No limite termodinâmico teríamos divergências. As curvas apresentadas na figura 10 e na figura 11 delineiam o caminho que valida a abordagem feita na seção 2.4 onde é demonstrado que quando $L \rightarrow \infty$ o modelo de Hubbard Clássico torna-se o modelo de Ising tendo $J' = 2J$.

Os picos nos gráficos do calor específico (região onde está T_N) nas duas redes abordadas colocam em evidência a transição de fase que o sistema sofre, indo da fase inicial antiferro para uma fase paramagnética.

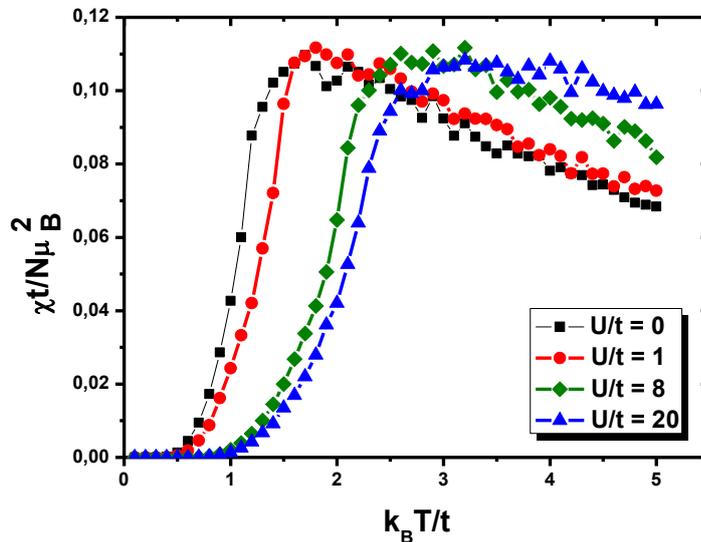


Figura 12 - Suscetibilidade Magnética ($\chi t/N\mu_B^2$) de uma rede Quadrada ($N = 1000^2$) em função da temperatura ($k_B T/t$) para os seguintes valores de U/t : $U/t=0$, $U/t=1$, $U/t=8$ e $U/t=20$.

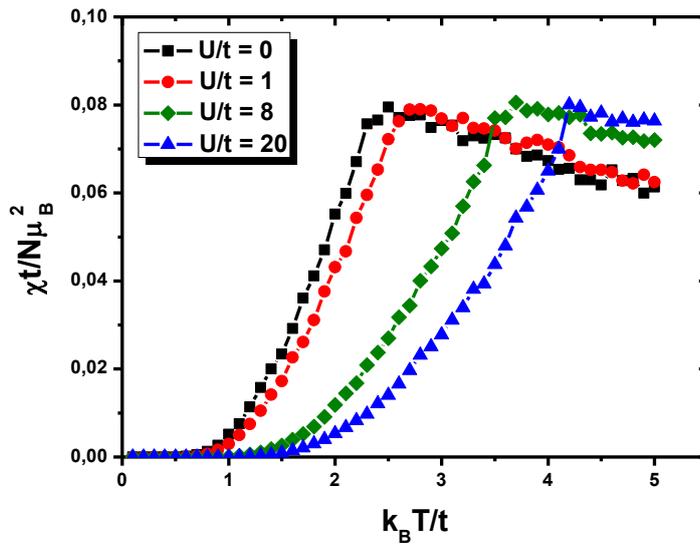


Figura 13 - Suscetibilidade Magnética ($\chi t/N\mu_B^2$) de uma rede Cúbica Simples ($N = 80^3$) em função da temperatura ($k_B T/t$) para os seguintes valores de U/t : $U/t=0$, $U/t=1$, $U/t=8$ e $U/t=20$.

Podemos verificar na figura 12 e na figura 13 a suscetibilidade magnética das redes quadrada e cúbica Simples respectivamente. O comportamento dos gráficos contendo os dados oriundos da simulação concorda com as características das substâncias antiferromagnéticas, ou seja, os valores da suscetibilidade em ambos os casos não tendem para o infinito na temperatura crítica como ocorre nos materiais ferromagnéticos, ao invés disso, apresentam os picos na região onde se deve encontrar a temperatura de Néel T_N (é a temperatura crítica correspondente aos materiais antiferromagnéticos).

Nos gráficos da suscetibilidade figura 12 (rede quadrada) e figura 13 (rede cúbica) simples podemos verificar a dependência dos picos com os valores de U/t e com a dimensão das redes.

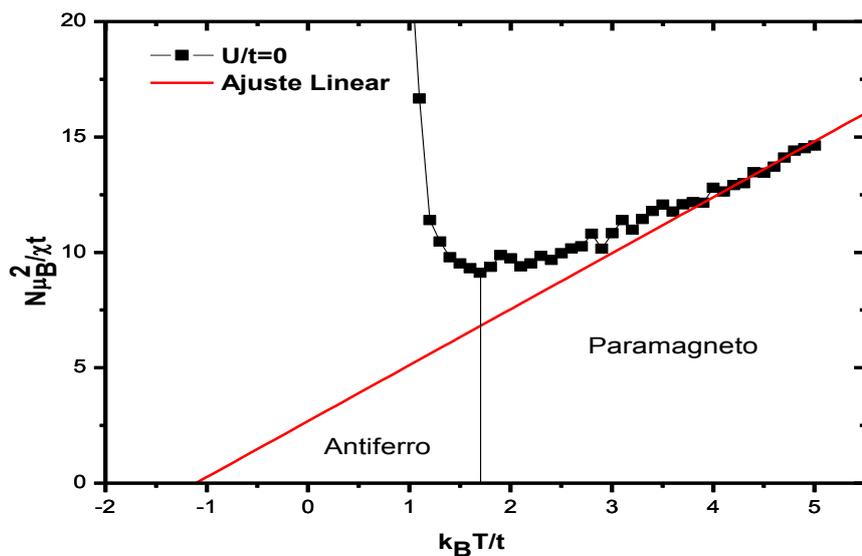


Figura 14 - Inverso da Suscetibilidade ($N\mu_B^2/\chi t$) de uma rede Quadrada ($N = 1000^2$) em função da temperatura ($k_B T/t$) com $U/t=0$.

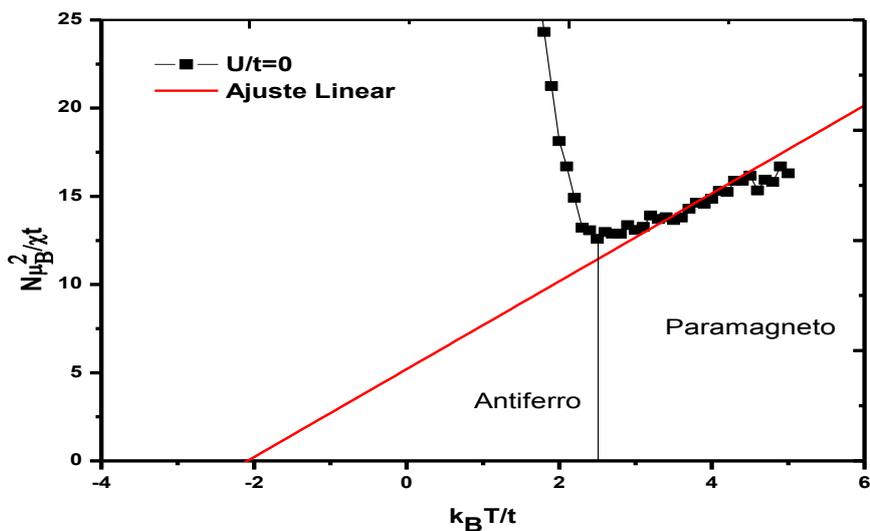


Figura 15 - Inverso da Suscetibilidade ($N\mu_B^2/\chi t$) de uma rede Cúbica Simples ($N = 80^3$) em função da temperatura ($k_B T/t$) com $U/t=0$.

A figura 14 e a figura 15 representam, respectivamente, a dependência do inverso da suscetibilidade magnética com a temperatura para as redes quadrada e cúbica Simples. Esses gráficos explicitam o comportamento linear do inverso da suscetibilidade magnética de materiais antiferromagnéticos para altas temperaturas, acima da temperatura de Néel T_N caracterizando assim, a transição da fase antiferromagnética para a paramagnética. O ponto no qual a curva do inverso da suscetibilidade intercepta o eixo das temperaturas indicará o valor da temperatura de

transição T_N do sistema. Os valores encontrados para a temperatura crítica através dos ajustes das curvas do calor específico, estão de bom acordo com os valores encontrados para o inverso da suscetibilidade em ambas as redes, tabela 3 e tabela 4:

Tabela 3 - Valores de T_N em uma rede Quadrada ($N = 1000^2$) encontrado através dos gráficos do calor específico (c/Nk_B) e do inverso da suscetibilidade ($N\mu_B^2/\chi t$) com

U/t=0.

$N = 1000^2$	T_N
c/Nk_B	1.148442
$N\mu_B^2/\chi t$	1.108860

Tabela 4 - Valores de T_N em uma rede Cúbica Simples ($N = 80^3$) encontrado através dos gráficos do calor específico (c/Nk_B) e do inverso da suscetibilidade ($N\mu_B^2/\chi t$)

com U/t=0.

$N = 80^3$	T_N
c/Nk_B	2.263122
$N\mu_B^2/\chi t$	2.086677

Não se fez necessário tecer comentários sobre os dados encontrados da magnetização total das redes via simulação, pois a magnetização é nula tanto na fase antiferromagnética como na fase paramagnética.

5.3. Expoentes Críticos e Diagrama de Fases

A partir dos resultados analisados na seção anterior que mostram a ocorrência da transição de fase antiferromagnética para paramagnética, passa a existir a necessidade de realizar estudos das propriedades críticas da transição de fase sofrida.

A teoria de fenômenos críticos [9,11] utiliza funções com dependência térmica das grandezas termodinâmicas para valores próximos à temperatura de transição que neste caso é a temperatura de Néel (T_N). Fazendo uso dessas funções realizamos ajustes das curvas do calor específico numericamente para os nossos resultados. Para tanto, utilizamos as seguintes funções para o calor específico a campo nulo na região próxima a T_N :

$$C = A \left(1 - \frac{T}{T_N}\right)^\alpha \quad \text{para } T < T_N \quad (5.3)$$

$$C = A' \left(\frac{T}{T_N} - 1\right)^{\alpha'} \quad \text{para } T > T_N \quad (5.4)$$

Sendo

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha, \alpha' \text{ os expoentes críticos} \\ A, A', T_N, T'_N \text{ constantes} \\ T \text{ variável num intervalo próximo a } T_N \end{array} \right. \quad (5.5)$$

Como os resultados da simulação na região próxima a T_N apresentaram uma grande flutuação para diferentes valores de U/t e da dimensão das redes, procedemos da seguinte forma para melhorar a confiança nos valores dos parâmetros (5.5) fornecidos pelos fits nas duas redes abordadas pelo presente trabalho.

1º Passo – Para efetivar o ajuste numérico das curvas do calor específico, coletamos diretamente do gráfico o valor da temperatura correspondente ao pico (o provável valor de T_N) e fornecemos valores aleatórios convenientes para (A, A', α e α') e substituímos nas relações (5.3) para $T < T_N$ e (5.4) para $T > T_N$ no intervalo de temperaturas T sempre bem próximas a T_N . E os fits eram realizados até fornecer os melhores valores possíveis de A, A', T_N, T'_N, α e α' a partir de cada configuração inicial.

2º Passo – Foram considerados como melhores valores para T_N a média ($\overline{T_N}$) dos valores das temperaturas críticas encontradas para $T > T_N$ e $T < T_N$ em cada caso como se segue $\overline{T_N} = \frac{T_N + T'_N}{2}$. Esse valor $\overline{T_N}$, agora é introduzido como uma constante nas relações (5.3) e (5.4) e feitos novos fits para os mesmos intervalos de temperatura com o objetivo de melhorar agora os valores de A , A' , α e α' que inicialmente foram inseridos de forma aleatória.

Realizamos esses passos para alguns valores de U/t : $U/t=0$, $U/t=1$, $U/t=8$ e $U/t=20$ com diferentes tamanhos das redes estudadas, obtivemos os valores dos expoentes críticos e das temperaturas de transição T_N para cada caso. As tabela 5 e tabela 6 mostram os valores das temperaturas (T_N) e expoentes críticos para alguns casos mais relevantes das redes estudadas. A tabela 7 mostra os respectivos valores para o modelo de Ising.

Tabela 5 - Valores das propriedades críticas de algumas redes Quadradas para $U/t=0$.

N	$\overline{T_N}$	α para $T < T_N$	α' para $T > T_N$
100^2	1.141983	0.395452 ± 0.012302	0.365149 ± 0.021196
200^2	1.127731	0.311071 ± 0.019010	0.401350 ± 0.028764
500^2	1.152384	0.532539 ± 0.012745	0.237469 ± 0.013416
1000^2	1.148442	0.487986 ± 0.010640	0.202455 ± 0.014525

Tabela 6 - Valores das propriedades críticas de algumas redes Cúbicas Simples para $U/t=0$.

N	$\overline{T_N}$	α para $T < T_N$	α' para $T > T_N$
40^3	2.246623	0.161816 ± 0.009613	1.267805 ± 0.082084
50^3	2.264210	0.297575 ± 0.005048	0.296171 ± 0.011551
60^3	2.276976	0.363509 ± 0.008478	0.206962 ± 0.015594
80^3	2.263122	0.280443 ± 0.056352	0.319130 ± 0.014867

Tabela 7 - Valores das temperaturas e expoentes críticos do modelo de Ising em duas e três dimensões.

Modelo de Ising	T_c	α
Ising 2D	2.2691	0 (log)
Ising 3D	4.5116	1/8

Comparando os dados apresentados nas tabela 5 e tabela 6 provenientes da simulação do modelo Clássico de Hubbard com os dados da tabela 7 que trás os respectivos valores da literatura para o modelo de Ising vemos que os valores estão em desacordo. O esperado era que os valores das propriedades críticas gerados na simulação do novo modelo concordassem com os da tabela 7, já que os dois modelos, o de Ising e o de Hubbard Clássico, possuem uma estreita relação como foi discutido no capítulo 2. Atribuímos esse fato aos procedimentos utilizados para determinar os expoentes críticos, citados nos passos 1 e 2 acima, que como sabemos são de grande dificuldade em função de fortes flutuações numéricas. Um estudo mais aprofundado será necessário para a obtenção de expoentes críticos confiáveis.

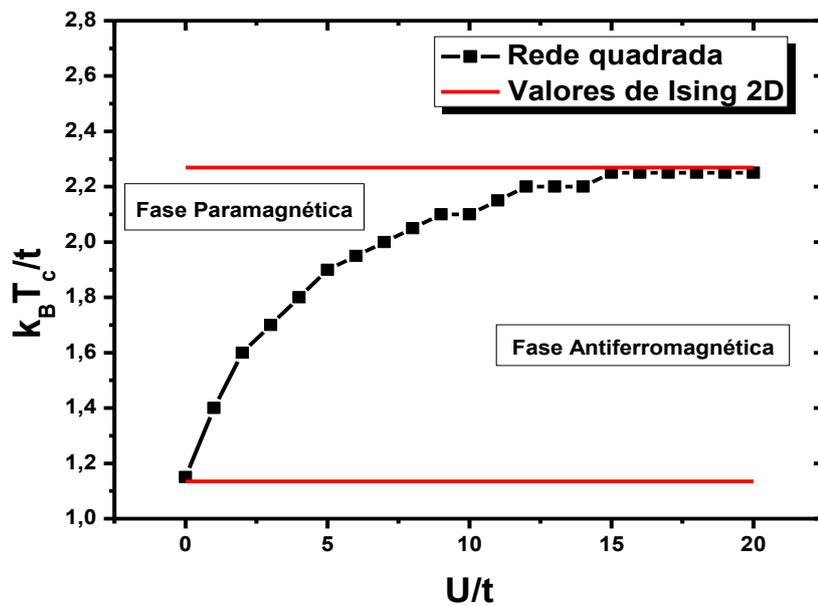


Figura 16 – Diagrama de fase temperatura crítica $k_B T_c / t$ em função da energia coulombiana U/t para rede Quadrada.

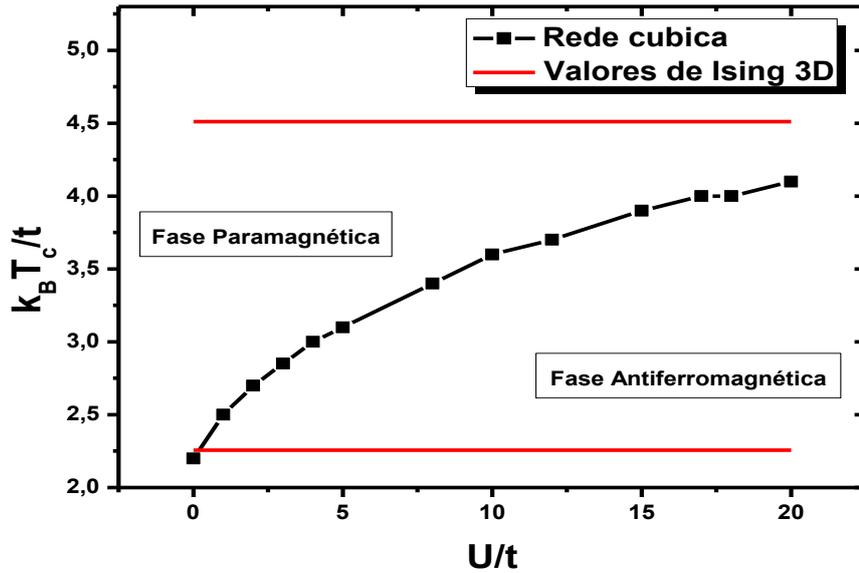


Figura 17 - Diagrama de fase temperatura crítica $k_B T_c / t$ em função da energia coulombiana U/t para rede Cúbica Simples.

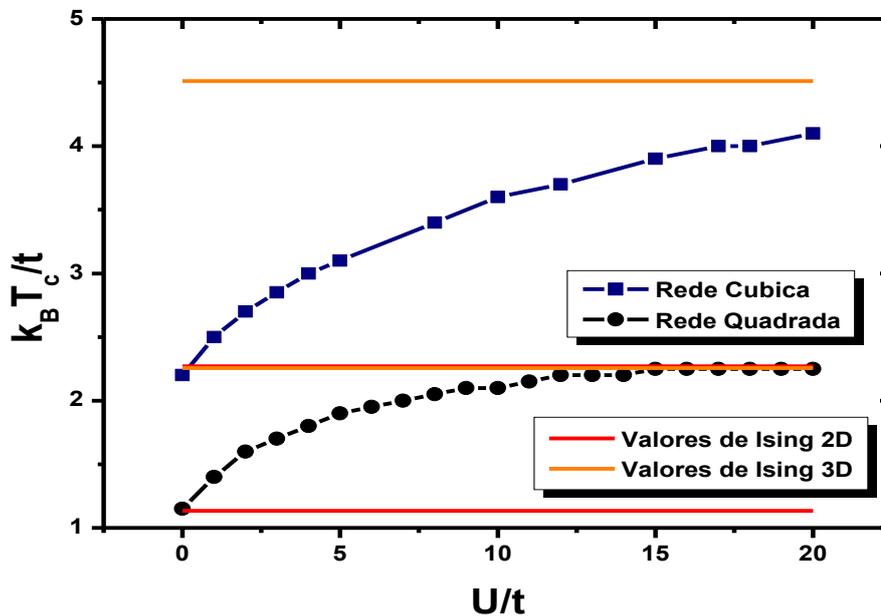


Figura 18 – Diagrama de fase temperatura crítica $k_B T_c / t$ em função da energia coulombiana U/t para as redes Quadrada e cúbica Simples.

Diferentemente dos expoentes críticos as figuras de transição de fase 16 e 17 estão totalmente de acordo com o esperado. Ambos os diagramas de fase confirmam a transição da fase antiferromagnética para uma fase paramagnética.

Eles também demonstram que nos limites $U/t = 0$ e $U/t \rightarrow \infty$ o modelo de Hubbard Clássico tende para as mesmas temperaturas de transição do modelo de Ising, tanto na rede quadrada, figura 16, quanto na rede cúbica, figura 17. Esse comportamento pode ser visto através da aproximação dos pontos da simulação para as linhas vermelhas horizontais que correspondem aos valores das temperaturas críticas do modelo de Ising que no caso bidimensional vale $k_B T_c/t = 2.2691$ e no caso tridimensional $k_B T_c/t = 4.5116$.

A figura 18 faz um comparativo dos diagramas de fase das redes quadrada e cúbica simples, mostrando que a temperatura de transição também sofre a influência da dimensionalidade da rede, as linhas horizontais amarela (caso 3D) e vermelha (caso 2D) representam os valores do T_c de Ising nas respectivas dimensões.

6. Conclusões

Fizemos um estudo das propriedades magnéticas do modelo de Hubbard clássico. Demonstramos que a nova proposta conserva a simetria partícula-buraco do modelo original de Hubbard e encontramos sua relação com o modelo de Ising.

Através do método de Monte Carlo, definido no ensemble grande canônico, encontramos que na banda meio-cheia, tanto no caso da rede quadrada como no caso da rede cúbica Simples o modelo tem estado fundamental ($k_B T/t = 0$) antiferromagnético para $U > 0$. Ocorre uma transição para uma fase paramagnética em ambas as redes analisadas numa temperatura finita, que tende para os valores de temperatura das transição de fase do modelo de Ising nos limites de $U/t=0$ e $U/t \rightarrow \infty$. Essa tendência ficou clara com os diagramas de fases $(k_B T_c/t) X (U/t)$ que além de mostrar a dependência do T_c com U/t mostra também a dependência com a dimensão da rede estudada.

No caso dos expoentes críticos nossos resultados tiveram forte flutuação numérica, o que nos impossibilitou de fazer conclusões. Este estudo pode ser indicado como perspectiva de trabalho futuro.

Do ponto de vista de aplicações, como o novo modelo de Hubbard Clássico, para o caso meio-cheio, tem como casos limites o modelo de Ising, o mesmo pode ser aplicado em todos os casos onde o modelo de Ising é usado. Fica ainda como desafio encontrar novos sistemas para a sua aplicação, tais como alguns materiais com elétrons itinerantes.

Referências Bibliográficas

- [1] HUBBARD, J. Proc. Royal Soc. London, Ser A 276 283 (1963).
- [2] SOUZA, A.M.C., Physica A 375 221 (2007).
- [3] SANTOS, P.C.L. Propriedades Magnéticas do modelo de Hubbard com Saltos Eletrônicos de Longo Alcance. 22/10/2004. 91 folhas Dissertação (Mestrado)-UFS. São Cristóvão, 2004.
- [4] NUSSENZVEIG, H.M. Curso de Física Básica Eletromagnetismo 1ª ed. São Paulo: Edgard Blucher, 2001.
- [5] GUIMARÃES, A. P. Magnetismo e Ressonância Magnética em Sólidos. São Paulo: edusp, 2009.
- [6] KITTEL, C. Introdução à Física do Estado Sólido. Rio de Janeiro: LTC, 2006.
- [7] EISBERG, R. & RESNICK, R. Física Quântica Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas. Rio de Janeiro: Elsevier, 1979.
- [8] GOMES, R. F. & MACEDO, C. A. Scientia Plena, vol.1, Num.1 (2005).
- [9] SALINAS, S. R. A. Introdução à Física Estatística. São Paulo: edusp, 2008.
- [10] REICHL, L.E. A Modern Course in Statistical Physics. New York: Wiley-Interscience, 1998.
- [11] YEOMANS, J. Statistical mechanics of Phase Transition. Oxford: University Press, 1992.
- [12] METROPOLIS, N. The Beginning of the Monte Carlo. Los Alamos Science, special issue, n.15, P. 125-130, 1987.
- [13] ALMEIDA, F.A.G. Magnetismo Localizado com Distribuição Heterogênea de Elétrons na Rede 03/03/2006. 53 folhas Dissertação (Mestrado)-UFS. São Cristóvão, 2006.

Apêndice A: Simetria Partícula-Buraco

Esse apêndice tem por objetivo explicitar que o novo modelo respeita a simetria partícula-buraco do modelo original de Hubbard. Para isso serão feitas algumas definições iniciais.

Os operadores $b_{i\sigma}^+$ e $b_{i\sigma}$ são respectivamente os operadores criação e aniquilação de buracos, $B_{i\sigma} = b_{i\sigma}^+ b_{i\sigma}$ é o operador número de buracos. Lembrando que $C_{i\sigma}^+$ e $C_{i\sigma}$ são os operadores criação e aniquilação de elétrons respectivamente e que $n_{i\sigma} = C_{i\sigma}^+ C_{i\sigma}$ é o operador número de elétrons.

Um sítio só pode estar ocupado ($n_{i\sigma}$) ou vazio ($B_{i\sigma}$), sendo assim a seguinte relação é válida:

$$n_{i\sigma} + B_{i\sigma} = 1 \rightarrow n_{i\sigma} = 1 - B_{i\sigma} \text{ (A.1).}$$

Substituindo (A.1) no hamiltoniano $H = -\sum_{ij\sigma} t_{ij} n_{i\sigma} (1 - n_{j\sigma}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$ (2.2), encontraremos:

Para o 1º termo de (2.2), temos:

Sendo $t_{ij} = t_{ji} = t$

$$\begin{aligned} -t \sum_{ij\sigma} n_{i\sigma} (1 - n_{j\sigma}) &= -t \sum_{ij\sigma} \{(1 - B_{i\sigma}) [1 - (1 - B_{j\sigma})]\} \\ &= -t \sum_{ij\sigma} \{1 - B_{i\sigma} - (1 - B_{i\sigma})(1 - B_{j\sigma})\} \\ &= -t \sum_{ij\sigma} \{1 - B_{i\sigma} - 1 + B_{j\sigma} + B_{i\sigma} - B_{i\sigma} B_{j\sigma}\} \\ &= -t \sum_{ij\sigma} B_{j\sigma} (1 - B_{i\sigma}) \\ &= -t \sum_{ij\sigma} B_{j\sigma} (1 - B_{i\sigma}) \text{ (A.2).} \end{aligned}$$

Para o 2º termo do hamiltoniano (2.2), temos:

$$\begin{aligned} U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} &= U \sum_i (1 - B_{i\uparrow})(1 - B_{i\downarrow}) \\ &= U \sum_i (1 - B_{i\downarrow} - B_{i\uparrow} + B_{i\uparrow} B_{i\downarrow}) \\ &= U [\sum_i 1 - \sum_i (B_{i\uparrow} + B_{i\downarrow}) + \sum_i B_{i\uparrow} B_{i\downarrow}] \end{aligned}$$

Sendo $\sum_i 1 = N_s$ o número de sítios e $\sum_i (B_{i\uparrow} + B_{i\downarrow}) = N_B$, o número de buracos, ficamos com:

$$U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} = U \sum_i^N B_{i\uparrow} B_{i\downarrow} + U(N_s + N_B) \quad (\text{A.3}).$$

Substituindo (A.2) e (A.3) no hamiltoniano (2.2) encontramos que:

$$H = -t \sum_{ij\sigma} B_{j\sigma} (1 - B_{i\sigma}) + U \sum_i B_{i\uparrow} B_{i\downarrow} + U(N_s - N_B)$$

Perceba que os dois primeiros termos da equação acima correspondem ao hamiltoniano de buracos: $H_B = -t \sum_{ij\sigma} B_{j\sigma} (1 - B_{i\sigma}) + U \sum_i B_{i\uparrow} B_{i\downarrow}$.

Então podemos escrever a relação entre os hamiltonianos, como segue:

$$H = H_B + U(N_s - N_B) \quad (\text{A.4})$$

A equação (A.4) relaciona os hamiltonianos dos elétrons \mathbf{H} e dos buracos \mathbf{H}_B .

Agora fazendo a substituição de (A.1) na relação do número de elétrons:

$$\begin{aligned} N_e &= \sum_i (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) \\ N_e &= \sum_i [(1 - B_{i\uparrow}) + (1 - B_{i\downarrow})] \\ N_e &= \sum_i [2 - B_{i\uparrow} - B_{i\downarrow}] \\ N_e &= 2 \sum_i 1 - \sum_i (B_{i\uparrow} + B_{i\downarrow}) \\ N_e &= 2N_s - N_B \quad (\text{A.5}). \end{aligned}$$

Com (A.4) e (A.5) podemos relacionar o número médio de elétrons, buracos e de sítios utilizando para isso a definição de média termodinâmica no ensemble grande canônico, como segue:

$$\langle N_e \rangle = \frac{\text{Tr}\{N_e e^{-\beta(H - \mu N_e)}\}}{\text{Tr}\{e^{-\beta(H - \mu N_e)}\}} \quad (\text{A.6})$$

$$\langle N_e \rangle = \frac{\text{Tr}\{(2N_s - N_B)e^{-\beta[H_B + U(N_s - N_B) - \mu(2N_s - N_B)]}\}}{\text{Tr}\{e^{-\beta[H_B + U(N_s - N_B) - \mu(2N_s - N_B)]}\}}$$

$$\langle N_e \rangle = 2N_s - \frac{\text{Tr}\{N_B e^{-\beta[H_B + U(N_s - N_B) - \mu(2N_s - N_B)]}\}}{\text{Tr}\{e^{-\beta[H_B + U(N_s - N_B) - \mu(2N_s - N_B)]}\}}$$

$$\langle N_e \rangle = 2N_s - \frac{\text{Tr}\{N_B e^{-\beta[H_B - N_B(U - \mu)]}\} e^{-\beta(U - 2\mu)N_s}}{\text{Tr}\{e^{-\beta[H_B - N_B(U - \mu)]}\} e^{-\beta(U - 2\mu)N_s}}$$

$$\langle N_e \rangle = 2N_s - \frac{\text{Tr}\{N_B e^{-\beta[H_B - N_B \mu_{Bu}]}\}}{\text{Tr}\{e^{-\beta[H_B - N_B \mu_{Bu}]}\}}$$

$$\text{Sendo } \begin{cases} \mu_{Bu} = U - \mu & \text{(A.7)} \\ \langle N_B \rangle = \frac{\text{Tr}\{N_B e^{-\beta[H_B - N_B \mu_{Bu}]}\}}{\text{Tr}\{e^{-\beta[H_B - N_B \mu_{Bu}]}\}} & \text{(A.8)} \end{cases}$$

Obtemos

$$\langle N_e \rangle = 2N_s - \langle N_B \rangle$$

Perceba que as relações (A.6) e (A.8) são equivalentes e se tornam iguais no caso da banda meio-cheia:

$$\mu = \mu_B = \frac{U}{2} \rightarrow \langle N_e \rangle = \langle N_B \rangle = N_s$$

A simetria partícula-buraco do modelo de Hubbard Clássico é válida para qualquer rede.

Apêndice B: Relação com o Modelo de Ising.

Neste apêndice, será mostrado em mais detalhes os cálculos da seção 2.4, que evidenciam a relação entre os modelos de Hubbard Clássico e de Ising. Essa relação entre os modelos também já foi confirmada pelo tratamento dos dados da simulação para os casos limites da interação coulombiana $U/t=0$ e $U/t \rightarrow \infty$.

Portanto, temos que o hamiltoniano (2.2) adicionado o termo de potencial químico fica:

$$H = -t \sum_{ij\sigma} n_{i\sigma} (1 - n_{j\sigma}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_i n_{i\sigma} \quad (\mathbf{B.1})$$

Fazendo uma mudança de variável usando duas variáveis de spins (S_i, σ_i) , sendo que:

$$\begin{cases} S_i = \uparrow \text{ ou } \downarrow \\ \sigma_i = \uparrow \text{ ou } \downarrow \end{cases}$$

Temos:

$$\begin{cases} S_i = 2n_{i\uparrow} - 1 \Rightarrow \begin{cases} 1 \\ -1 \end{cases} \\ \sigma_i = 2n_{i\downarrow} - 1 \Rightarrow \begin{cases} 1 \\ -1 \end{cases} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} n_{i\uparrow} = \frac{1 + S_i}{2} \\ n_{i\downarrow} = \frac{1 + \sigma_i}{2} \end{cases} \quad \begin{matrix} (\mathbf{B.2a}) \\ (\mathbf{B.2b}) \end{matrix}$$

Substituindo **(B.2 a)** e **(B.2 b)** em **(B.1)**, ficamos:

$$H = -t \sum_{ij} \left\{ \frac{(1 + S_i)}{2} \left[1 - \frac{(1 + S_j)}{2} \right] + \frac{(1 + \sigma_i)}{2} \left[1 - \frac{(1 + \sigma_j)}{2} \right] \right\} \\ + U \sum_i \frac{(1 + S_i)}{2} \frac{(1 + \sigma_i)}{2} - \mu \sum_i \left[\frac{(1 + S_i)}{2} + \frac{(1 + \sigma_i)}{2} \right]$$

$$H = -\frac{t}{4} \sum_{ij} \{ (1 + S_i)(1 - S_j) + (1 + \sigma_i)(1 - \sigma_j) \} \\ + \frac{U}{4} \sum_i (1 + \sigma_i + S_i + S_i \sigma_i) - \frac{\mu}{2} \sum_i [2 + S_i + \sigma_i]$$

$$H = -\frac{t}{4} \sum_{ij} \{1 - S_j + S_i - S_i S_j + 1 - \sigma_j + \sigma_i - \sigma_i \sigma_j\} \\ + \frac{U}{4} \sum_i (1 + \sigma_i + S_i + S_i \sigma_i) - \frac{\mu}{2} \sum_i [2 + S_i + \sigma_i]$$

$$H = -\frac{t}{4} \sum_{ij} \{2 - S_i S_j - \sigma_i \sigma_j\} \\ + \frac{U}{4} \sum_i (1 + \sigma_i + S_i + S_i \sigma_i) - \frac{\mu}{2} \sum_i (2 + S_i + \sigma_i)$$

$$H = -\frac{t}{4} \sum_{ij} 2 + \frac{t}{4} \sum_{ij} (S_i S_j + \sigma_i \sigma_j) + \frac{U}{4} \sum_i 1 + \frac{U}{4} \sum_i (\sigma_i + S_i) \\ + \frac{U}{4} \sum_i S_i \sigma_i - \frac{\mu}{2} \sum_i 2 - \frac{\mu}{2} \sum_i (S_i + \sigma_i)$$

Sendo

$$\sum_{ij} 2 = 2 \sum_i \sum_{j \text{ 1º vizinhos}} 1 = 2N_s z, \quad \left(\sum_i 1 = N_s = \text{número de sítios} \right)$$

$$H = \frac{t}{4} \sum_{ij} (S_i S_j + \sigma_i \sigma_j) + \frac{U}{4} \sum_i S_i \sigma_i + \frac{(U - 2\mu)}{4} \sum_i (S_i + \sigma_i) + \\ + N_s \left(\frac{U}{4} - \frac{t \cdot z}{2} - \mu \right) \rightarrow C. t. e$$

Chamando $\begin{cases} h = \frac{U-2\mu}{4} \\ J = \frac{t}{4} \\ L = \frac{U}{4} \end{cases}$ e desconsiderando o termo constante (c.t.e) chegamos em:

$$H = J \sum_{ij} (S_i S_j + \sigma_i \sigma_j) + L \sum_i S_i \sigma_i + h \sum_i (S_i + \sigma_i) \quad (\mathbf{B.3})$$

No caso meio-cheio $\rightarrow U = 2\mu \rightarrow h = 0$, a relação **(B.3)** se torna:

$$H = J \sum_{ij} (S_i S_j + \sigma_i \sigma_j) + L \sum_i S_i \sigma_i \quad (\mathbf{B.4})$$

Para $L=0$ a relação **(B.4)** se transforma em:

$$H = J \sum_{ij} (S_i S_j + \sigma_i \sigma_j)$$

$$H = J \sum_{ij} S_i S_j + J \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (\mathbf{B.5})$$

A relação **(B.5)** é o correspondente a dois modelos de Ising independentes.

Para L tendendo ao infinito ($L \rightarrow \infty$) é necessário que os spins na relação **(B.4)** sejam opostos ($\sigma_i = -S_i$), para minimizar a energia do sistema. Logo, aplicando essa condição em **(B.4)**, temos:

$$H = J \sum_{ij} [S_i S_j + (-S_i)(-S_j)]$$

$$H = J \sum_{ij} [S_i S_j + S_i S_j]$$

$$H = 2J \sum_{ij} S_i S_j \rightarrow \text{Ising com } J' = 2J$$

$$H = J' \sum_{ij} S_i S_j \quad (\mathbf{B.6})$$

Sendo **(B.6)** igual ao modelo de Ising a campo nulo.

Apêndice C: Implementação do Algoritmo de Monte Carlo em Fortran 90 no ensemble grande canônico

Caso 2D

```
SUBROUTINE PRINCIPAL(L,U,T1,T2,DT,MCST,MCSD)
IMPLICIT NONE
DOUBLE PRECISION
E,DELTA E,U,MI,RANF,T,EM,E2M,C,NM,ENM,MM,M2M,X,DM,D,T1,T2,DT,C1M
INTEGER
I,I1,I2,N,M,L(2),L2,DELTAN,NO(L(1),L(2)),DELTAM,DELTAD,MCS,NEWNO, &
SN,IA1,IA2,ID1,ID2,MCSL,MCST,MCSD,C1,DELTAC1
INTEGER TEMPO1, TEMPO2, TEMPO3
EXTERNAL RANF,SN
CALL SYSTEM_CLOCK(I1)

I1 = (I1**0.5)*COS(FLOAT(I1))
I1 = IABS(I1)
CALL RANSET(I1)
MI = U/2 !MEIO-CHEIO
L2 = L(1)*L(2)
!CONFIGURAÇÃO INICIAL ANTI-FERRO
DO I1 = 1, L(1)
  DO I2 = 1, L(2)
    NO(I1,I2) = 2*MOD(I1+I2,2)-1 !1 (up para impar) OU -1 (down para par) - REDE
    QUADRADA ANTI-FERRO
  END DO
END DO
N = L2
M = 0
E = -4*N !H0
D = 0
C1 = -4*L2 !CORRELAÇÃO SPIN-SPIN ENTRE PRIMEIROS VIZINHOS
!-----
```

```

OPEN(1,FILE='SAIDA1.DAT')
CALL SYSTEM_CLOCK(TEMPO1)
DO T = T1,T2,DT
CALL SYSTEM_CLOCK(TEMPO2)
EM = 0
  E2M = 0
  NM = 0
  ENM = 0
  MM = 0
M2M = 0
DM = 0
C1M = 0
DO MCS = 1, MCST
DO I1 = 1, L(1)
DO I2 = 1, L(2)
NEWNO = INT(3*RANF())
IF(NEWNO==NO(I1,I2)) NEWNO = -1
DELTAN = IABS(NEWNO)-IABS(NO(I1,I2))
DELTAM = SN(NEWNO) - SN(NO(I1,I2))
DELTAD = NEWNO/2-NO(I1,I2)/2
!COND. CONTORNO PERIODICA
!-----
IA1 = I1 - 1
IF(I1==1) IA1 = L(1)
ID1 = I1 + 1
IF(I1==L(1)) ID1 = 1
IA2 = I2 - 1
IF(I2==1) IA2 = L(2)
ID2 = I2 + 1
IF(I2==L(2)) ID2 = 1
!-----
DELTAC1=DELTAM*(SN(NO(IA1,I2))+SN(NO(ID1,I2))+SN(NO(I1,IA2))+SN(NO(
I1,ID2))) !variação da função de correlação spin-spin de 1ºs vizinhos

```

```

DELTAE = DELTAD*U + DELTAC1 +
DELTAN*(IABS(NO(IA1,I2))+IABS(NO(ID1,I2))+IABS(NO(I1,IA2))+IABS(NO(I1,I
D2))-4)
IF ((DELTAE-MI*DELTAN)>=0)THEN
IF (DEXP(-(DELTAE-MI*DELTAN)/T)>RANF())THEN
N = N + DELTAN
E = E + DELTAE
M = M + DELTAM
D = D + DELTAD
C1 = C1 + DELTAC1
NO (I1,I2) = NEWNO
END IF
ELSE
N = N + DELTAN
E = E + DELTAE
M = M + DELTAM
D = D + DELTAD
C1 = C1 + DELTAC1
NO (I1,I2) = NEWNO
END IF
END DO !I2
END DO !I1
IF(MCS>MCSD)THEN
NM = NM + N
EM = EM + E
E2M = E2M + E*E
ENM = ENM + E*N
MM = MM + M
M2M = M2M + M*M
DM = DM + D
C1M = C1M + C1
END IF
END DO !MCS
MCSL = MCST-MCSD

```

```

NM = NM/MCSL
EM = EM/MCSL
E2M = E2M/MCSL
ENM = ENM/MCSL
C = ((E2M - EM**2) - MI*(ENM - EM*L2))/(T*T*L2)
ENM = ENM/MCSL
MM = MM/MCSL
M2M = M2M/MCSL
X = (M2M-MM**2)/T
DM = DM/MCSL
C1M = C1M/MCSL
CALL SYSTEM_CLOCK (TEMPO3)
WRITE (1,10) T,NM/L2,EM/L2,C,DABS(MM)/L2,X/L2,C1M/L2
PRINT*, T, NM/L2, FLOAT (TEMPO3-TEMPO2)/10000, 's'
END DO !IT

10 FORMAT (7(E11.4,2X))

CLOSE (1)

PRINT*, FLOAT (TEMPO3-TEMPO1)/10000, 's'

RETURN
END
INTEGER FUNCTION SN (I)
IMPLICIT NONE
INTEGER I
SN = I - 2*(I/2)
RETURN
END

```

Caso 3D

```
SUBROUTINE PRINCIPAL(L,U,T1,T2,DT,MCST,MCSD)
IMPLICIT NONE
DOUBLE PRECISION
E,DELTA E,U,MI,RANF,T,EM,E2M,C,NM,ENM,MM,M2M,X,DM,D,T1,T2,DT,C1M
INTEGER
I,I1,I2,I3,N,M,L(3),L3,DELTAN,NO(L(1),L(2),L(3)),DELTAM,DELTAD,MCS,NEW
NO, &
SN,IA1,IA2,IA3,ID1,ID2,ID3,MCSL,MCST,MCSD,C1,DELTAC1
INTEGER TEMPO1, TEMPO2, TEMPO3,IT,NT
EXTERNAL RANF,SN

CALL SYSTEM_CLOCK(I1)
I1 = (I1**0.5)*COS(FLOAT(I1))
I1 = IABS(I1)
CALL RANSET(I1)

MI = U/2 !MEIO-CHEIO
L3 = L(1)*L(2)*L(3)

!CONFIGURAÇÃO INICIAL ANTI-FERRO
DO I1 = 1, L(1)
DO I2 = 1, L(2)
DO I3 = 1, L(3)
NO(I1,I2,I3) = 2*MOD(I1+I2+I3,2)-1 !1 (up para impar) OU -1 (down para par) -
REDE QUADRADA ANTI-FERRO
END DO
END DO
END DO
N = L3
M = 0
E = -6*N !H0
```

```

D = 0
C1 = -4*L3 !CORRELAÇÃO SPIN-SPIN ENTRE PRIMEIROS VIZINHOS
!-----

OPEN(1,FILE='SAIDA1.DAT')

CALL SYSTEM_CLOCK(TEMPO1)

T = T1
DO WHILE(T<T2+DT/2)
!NT = (T2-T1)/DT+1
!DO IT = 1,NT
! T = T1+(IT-1)*DT
CALL SYSTEM_CLOCK(TEMPO2)
EM = 0
E2M = 0
NM = 0
ENM = 0
MM = 0
M2M = 0
DM = 0
C1M = 0
DO MCS = 1, MCST
DO I1 = 1, L(1)
DO I2 = 1, L(2)
DO I3 = 1, L(3)
NEWNO = INT(3*RANF())
IF(NEWNO==NO(I1,I2,I3)) NEWNO = -1
DELTAN = IABS(NEWNO)-IABS(NO(I1,I2,I3))
DELTAM = SN(NEWNO) - SN(NO(I1,I2,I3))
DELTAD = NEWNO/2-NO(I1,I2,I3)/2
!COND. CONTORNO PERIODICA
!-----

```

```

IA1 = I1 - 1
IF(I1==1) IA1 = L(1)
ID1 = I1 + 1
IF(I1==L(1)) ID1 = 1
IA2 = I2 - 1
IF(I2==1) IA2 = L(2)
ID2 = I2 + 1
IF(I2==L(2)) ID2 = 1
IA3 = I3 - 1
IF(I3==1) IA3 = L(3)
ID3 = I3 + 1
IF(I3==L(3)) ID3 = 1

```

```

DELTAC1=DELTAM*(SN(NO(IA1,I2,I3))+SN(NO(ID1,I2,I3))+SN(NO(I1,IA2,I3))+
SN(NO(I1,ID2,I3))+SN(NO(I1,I2,IA3)))+ &
SN(NO(I1,I2,ID3))) !variação da função de correlação spin-spin de 1°s vizinhos
DELTAE = DELTAD*U + DELTAC1 +
&DELTAN*(IABS(NO(IA1,I2,I3))+IABS(NO(ID1,I2,I3))+IABS(NO(I1,IA2,I3))+ &
IABS(NO(I1,ID2,I3))+IABS(NO(I1,I2,IA3))+IABS(NO(I1,I2,ID3)))-6)
IF((DELTAE-MI*DELTAN)>=0)THEN
IF(DEXP(-(DELTAE-MI*DELTAN)/T)>RANF())THEN
N = N + DELTAN
E = E + DELTAE
M = M + DELTAM
D = D + DELTAD
C1 = C1 + DELTAC1
NO(I1,I2,I3) = NEWNO
END IF
ELSE
N = N + DELTAN
E = E + DELTAE
M = M + DELTAM

```

```

D = D + DELTAD
C1 = C1 + DELTAC1
NO(I1,I2,I3) = NEWNO
END IF
END DO !I2
END DO !I1
END DO
IF(MCS>MCSD)THEN
NM = NM + N
EM = EM + E
E2M = E2M + E*E
ENM = ENM + E*N
MM = MM + M
M2M = M2M + M*M
DM = DM + D
C1M = C1M + C1
END IF
END DO !MCS

MCSL = MCST-MCSD
NM = NM/MCSL
EM = EM/MCSL
E2M = E2M/MCSL
ENM = ENM/MCSL
C = ((E2M - EM**2) - MI*(ENM - EM*L3))/(T*T*L3)
ENM = ENM/MCSL
MM = MM/MCSL
M2M = M2M/MCSL
X = (M2M-MM**2)/T
DM = DM/MCSL
C1M = C1M/MCSL
CALL SYSTEM_CLOCK(TEMPO3)
WRITE(1,10) T,NM/L3,EM/L3,C,DABS(MM)/L3,X/L3,C1M/L3
PRINT*, T, NM/L3, FLOAT(TEMPO3-TEMPO2)/10000, 's'

```

```
T = T + DT
END DO !IT
10 FORMAT (7(E11.4,2X))
CLOSE(1)
PRINT*, FLOAT(TEMPO3-TEMPO1)/10000, 's'
RETURN
END
INTEGER FUNCTION SN(I)
IMPLICIT NONE
INTEGER I
SN = I - 2*(I/2)
END RETURN
```