

TEORIA DE CAMPO MÉDIO COM CLUSTERS CORRELACIONADOS APLICADA A SISTEMAS QUÂNTICOS

INTRODUÇÃO

Na natureza, uma transição de fase é uma mudança em determinadas grandezas físicas de um sistema. Encontramos exemplos interessantes desse fenômeno nos ferromagnetos, uma classe de materiais que apresentam magnetização espontânea abaixo de uma temperatura crítica (T_c). A modelagem de sistemas compostos por partículas que apresentam momentos magnéticos intrínsecos (spins) tem contribuído para a compreensão dos resultados obtidos experimentalmente com materiais magnéticos. A Teoria de Campo Médio com Clusters Correlacionados (TCMCC), recentemente publicada por Daisuke Yamamoto, considera a matéria dividida em aglomerados (clusters) correlacionados entre si e tem fornecido bons resultados para diferentes estruturas no modelo de Ising (MI) para sistemas clássicos de spins.

OBJETIVO

Neste trabalho analisamos em detalhes a TCMCC, compreendendo quais são os fatores responsáveis pelos bons resultados obtidos com tal teoria quando comparada às suas predecessoras. Para isso, aplicamos a TCMCC a modelos clássicos de spins, reproduzindo os resultados de Yamamoto e estudando a forma com que o método trata o comportamento da matéria.

METODOLOGIA

Após o estudo da TCMCC foram reproduzidos os resultados publicados por Yamamoto, através do desenvolvimento de programas computacionais na linguagem Fortran 90, visando o comportamento da magnetização em função da temperatura em 4 geometrias de rede. Também foram observadas as grandezas suscetibilidade, energia interna e calor específico para a rede quadrada.

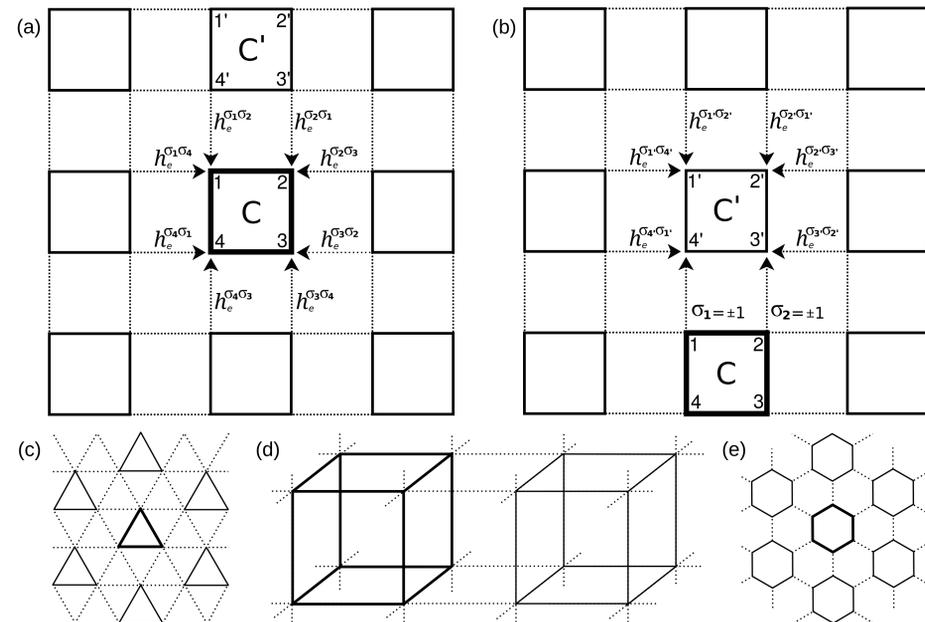


Figura 1 - Diferentes estruturas de rede para as quais foi aplicada a TCMCC: a) rede dividida em clusters quadrados explicitando os campos efetivos sobre o cluster central C; b) rede quadrada explicitando os campos efetivos sobre o cluster C'; c) triangular; d) cúbica; e) hexagonal.

O Hamiltoniano do modelo de Ising na TCMCC, para o cluster C é

$$H_C = -J \sum_{\langle ij \rangle \in C} \sigma_i \sigma_j - \sum_{i \in C} h_e^{\sigma_i} \sigma_i.$$

Os campos provenientes dos clusters vizinhos são obtidos auto-consistentemente. Por exemplo, para a rede quadrada, é necessário resolver os campos efetivos $h_e^{\sigma_i \sigma_j} = J m^{\sigma_i \sigma_j}$, onde

$$m^{\sigma_i \sigma_j} = \begin{cases} m^{++} & (\sigma_i = +1, \sigma_j = +1) \\ m^{+-} & (\sigma_i = +1, \sigma_j = -1) \\ m^{-+} & (\sigma_i = -1, \sigma_j = +1) \\ m^{--} & (\sigma_i = -1, \sigma_j = -1) \end{cases}$$

Foram realizadas simulações, através do método de Monte Carlo (MMC), visando traçar comparativos entre estes resultados e os obtidos com a TCMCC. Nesta linha de trabalho também foi realizado um estudo da Teoria de Campo Médio (TCM) e das soluções exatas do modelo de Ising.

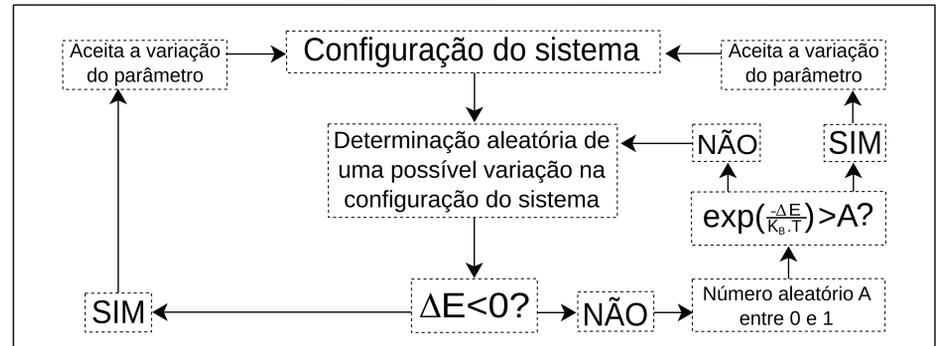


Figura 2 - Fluxograma do algoritmo de Metropolis (método de Monte Carlo).

RESULTADOS

Os resultados publicados por Yamamoto da magnetização (m) em função da temperatura (T) foram reproduzidos para as redes quadrada, hexagonal, triangular e cúbica que são apresentados a seguir. Para a rede quadrada também são apresentados os resultados da simulação de Monte Carlo, da TCM e o exato para a geometria bidimensional.

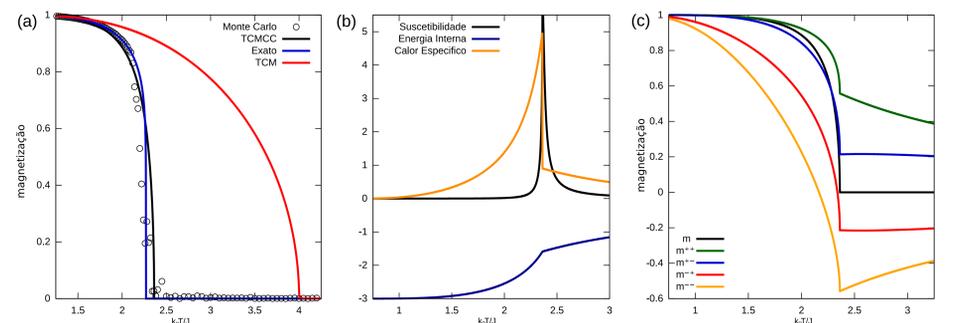


Figura 3 - Magnetização em função da temperatura para rede quadrada: a) A T_c na TCM depende diretamente de z . A solução exata para esta rede apresenta $T_c = 2.269$. A simulação de Monte Carlo demonstra um comportamento semelhante ao da solução exata. A TCMCC apresenta a transição de fase na $T_c = 2.362$; b) suscetibilidade magnética, calor específico e energia interna; c) Os 4 campos médios (m^{++} , m^{+-} , m^{-+} e m^{--}) resolvidos auto-consistentemente e a magnetização (m).

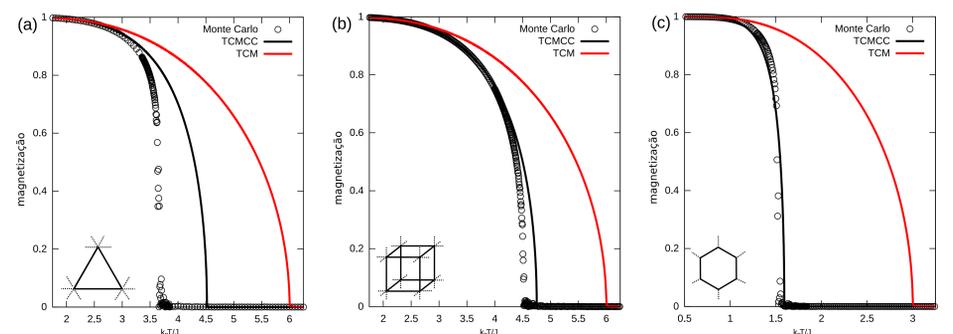


Figura 4 - Resultados da TCMCC para diferentes redes, apresentando melhorias em relação a TCM e proximidade com a simulação através do método de Monte Carlo: a) Na rede triangular ($T_c = 3.641$) a TCMCC apresenta transição de fase em $T_c = 4.519$; b) Para a rede cúbica ($T_c = 4.510$) a TCMCC apresenta transição de fase em $T_c = 4.753$; Na estrutura hexagonal ($T_c = 1.519$) a TCMCC apresenta transição de fase em $T_c = 1.593$.

CONCLUSÕES

A TCMCC permite a obtenção de excelentes resultados para geometrias de rede em duas e três dimensões no MI, portanto, a técnica é muito eficiente no tratamento de sistemas clássicos de spins. O método também foi aplicado para uma rede unidimensional ($z=2$) no MI, não apresentando transição de fase. A independência de z é um dos fatores que qualifica a TCMCC em relação a outros métodos, como a TCM, que depende diretamente de z . A dinâmica dos parâmetros variacionais permite um entendimento mais claro do comportamento das correlações. A simplicidade de aplicação da técnica e o seu baixo custo computacional são fortes indícios de que a TCMCC trará bons resultados se aplicada a sistemas quânticos, sendo este o próximo foco deste projeto.

Kadanoff, L. P., *J. Stat. Phys.* **137** (2009) 777.

Yamamoto, D., *Phys. Rev. B* **79** (2009) 144427.

Newman, M. E. J., e Barkema, G. T., *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Oxford: Clarendon Press, 1999.