

Leia a página de instruções gerais antes de começar este problema.

Introdução Histórica

Dentre os modelos propostos para o estudo de fenômenos magnéticos em materiais, um que tem grande relevância é o chamado Modelo de Ising. Proposto por Wilhelm Lenz em 1920, ele foi completamente resolvido para o caso de uma dimensão por Ernst Ising em 1925. Segundo o modelo, tomada uma coleção discreta de spins em qualquer dimensão e disposta em uma dada geometria, a energia do sistema é descrita pelas interações aos pares entre os spins, que possuem apenas duas orientações possíveis, e pela interação de cada um com um campo magnético externo. Na solução encontrada por Ising, o modelo não previa as transições de fase, quando um ferromagneto passa a se comportar como um paramagneto a partir de uma determinada temperatura crítica, algo que só foi observado em 1944 quando Lars Onsager resolveu o modelo para duas dimensões na ausência de campo magnético. Dessa forma, o modelo pode ser utilizado para estudar o comportamento das propriedades de um material, como a magnetização e a capacidade térmica, próximas da transição de fase. Indo além, pela sua simplicidade e sucesso, o modelo tem sido adaptado para estudar fenômenos caracterizados pela interação de pares gerando efeitos coletivos.

Modelo Ising

Nessa prova experimental exploraremos simulações de um modelo de Ising bidimensional aplicado em uma rede quadrada $N \times N$. Consideraremos nesse modelo um “spin” em cada ponto da rede quadrada, onde neste sistema físico este spin corresponde a um momento magnético que pode ou apontar para cima ou para baixo, tendo valores ou de $+1$ ou -1 respectivamente. Em nosso modelo assumimos que cada spin pode interagir apenas com um campo magnético externo aplicado e spins vizinhos (no caso da rede quadrada, cada spin interage com os 4 spins mais próximos), além da adoção de condições de contorno periódicas, de forma que um spin em uma borda da rede interage com o spin da borda oposta¹.

Já no contexto do comportamento de certos materiais ao estarem submetidos a um campo magnético externo, destacam-se dois grupos, **os paramagnetos e os ferromagnetos**: ambos possuem spins que são orientados no sentido de se alinhar com o campo externo, porém apenas os ferromagnetos conseguem manter essa magnetização mesmo após o campo ter sido retirado. Isso está ligado ao fato de que apenas nos ferromagnetos há interação relevante entre os spins, formando domínios de magnetização, e no Modelo de Ising isso é levado em conta desconsiderando o termo de interação entre vizinhos para o caso de paramagnetos. A temperatura atua no sentido de desalinhar o ordenamento do sistema. Acima da temperatura crítica, um sistema ferromagnético se comporta como um paramagnético.

Sobre o simulador

Um simulador de spins foi desenvolvido pelo comitê acadêmico da OIBF 2021 e está disponível no endereço: https://app.graxaim.org/oibf/2021/page/slsim_r/1?title=. O simulador é executado pelo navegador de internet instalado no computador, smartphone ou tablet. Nessa seção apresentaremos os parâmetros utilizados pelo programa para simulação de paramagnetos e ferromagnetos com uma rede de Ising bidimensional. O nome do programa de simulação é SLSIM (Spin Lattice Simulator, Simulador de redes de spins em inglês) e sua interface é mostrada na Figura 1.

Na interface do simulador, temos os seguintes campos de interesse:

- A) Tipo de sistema. Precisa-se escolher entre a simulação de um paramagneto ou ferromagneto.
- B) Estado inicial. Há três estados iniciais possíveis para a simulação: aleatório (random), todos os spins para cima (up) ou todos os spins para baixo (down).
- C) Tamanho (size). Campo para a escolha do tamanho da rede considerada. É preciso inserir um número inteiro N nesse campo.
- D) Botão de reinicialização (Reinitialize): descarta a última realização do sistema e reinicializa o sistema. Deve ser utilizado sempre que se desejar modificar o tamanho da rede de spins.

¹Válido para as bordas superior/inferior e esquerda/direita.

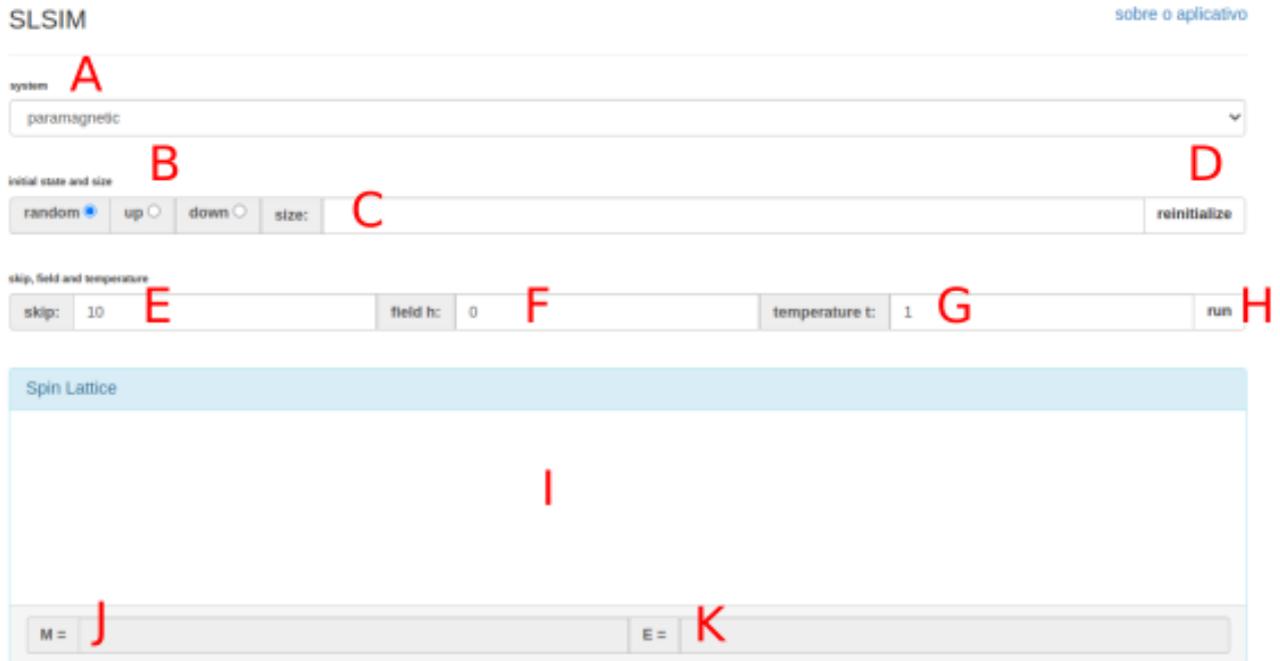


Figura 1: Interface do programa de simulação de redes de spins quadradas.

- E) Campo skip: parâmetro de tempo do sistema. Deve assumir sempre um valor inteiro. Quando o parâmetro skip for igual a S , o simulador realizar SN^2 tentativas de giro de spins. Esse parâmetro evita a necessidade de apertar o botão "run" várias vezes para o sistema se dirigir a estados de equilíbrio.
- F) Field H: parâmetro adimensional que representa a força do campo magnético. Pode assumir números reais positivos e negativos. Valores positivos estão associados a direção para cima.
- G) Temperature t: parâmetro adimensional que representa o efeito da temperatura. Pode assumir números reais maiores que zero.
- H) Botão run: realiza tentativa de mudança de spins na rede cristalina conforme parâmetros configurados na interface. Apertar o botão run com o parâmetro de skip=10 é estatisticamente equivalente a apertar o botão run 10 vezes com a configuração skip=1.
- I) Campo de visualização da última rede de spins simulada. Círculos azuis representam spins para cima e círculos vermelhos, spins para baixo.
- J) Magnetização total da rede simulada. Fornece como um múltiplo do momento magnético de um elétron. É obtida pela subtração do número de spins para cima, N_+ , e o número de spins para baixo, N_- , isto é, $M = N_+ - N_-$.
- K) Energia total calculada a partir da última configuração de spins simulada.

A dimensão da rede quadrada $N \times N$ pode variar desde 1×1 , com $N^2 = 1$ sítio, até 64×64 , com $N^2 = 4096$ sítios. O uso de maiores redes implica em um aumento do custo computacional da simulação realizada. Parâmetros absolutos de magnetização M e energia E variam conforme a dimensão da rede quadrada, entretanto medidas de magnetização por sítio, m , e energia por sítio, e , admitem comparação quando consideramos resultados obtidos por redes de tamanhos distintos.

A configuração obtida para um mesmo conjunto de parâmetros pode flutuar em torno de um valor médio a medida que realizamos diferentes realizações do sistemas, usando o botão *run*. Esse efeito se deve à natureza estocástica, ou probabilística, das simulações. Para ilustrar esse efeito considere o resultado correspondente à magnetização total M de uma rede 64×64 em função do tempo. Verifique que a magnetização vai variando

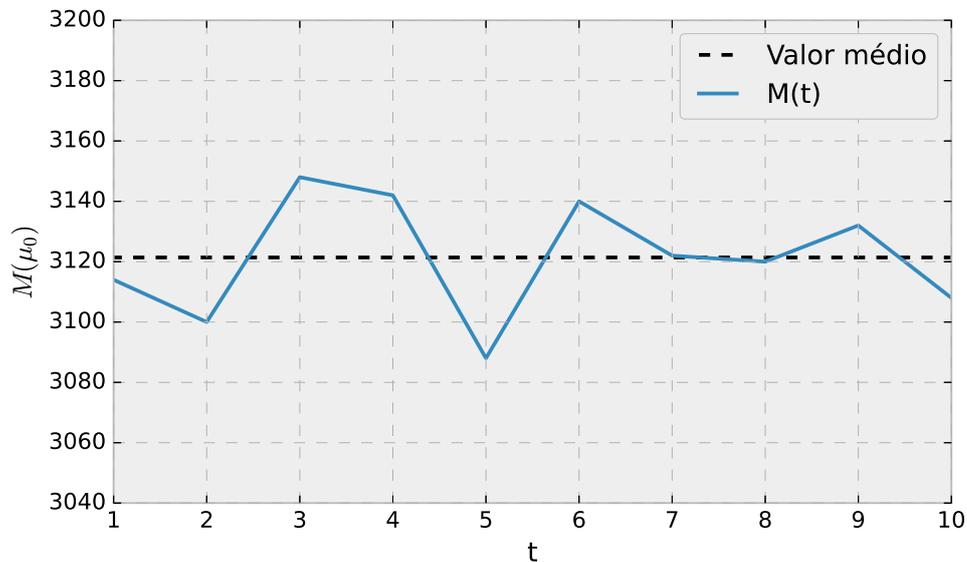


Figura 2: Obtenção de diferentes valores de magnetização para uma rede 64×64 em função do tempo, em azul. O valor médio das 10 realizações do sistema encontra-se representado por uma linha preta tracejada.

estocasticamente em redor de um valor médio. A variação de valores obtidos para diferentes realizações do sistema pode ser utilizado para avaliar a incerteza da medida.

Aviso: Sempre que uma medida for solicitada no experimento, o estudante deve considerar **pelo menos 10 realizações do sistema**. Forneça sua medida **sempre como o valor médio da medida acompanhado do respectivo valor de incerteza estimado**. No restante da prova, todo resultado experimental deverá ser apresentado com uma estimativa do erro dessa medida, exceto nos itens A1 e B da parte 2 onde não é necessária essa análise de erros.

Estudo de paramagnetos (7 pontos)

Parte A - Spins livres (2,0 pontos)

Nessa primeira parte do problema, exploraremos os spins de um paramagneto ideal sob a ausência de campo magnético H . Nessa circunstância, cada spin tem probabilidade de 50% de estar orientado para cima ou para baixo.

A magnetização M é medida como a diferença entre o número de spins orientados para cima, N_+ , e o número de spins orientados para baixo, N_- . Como essa quantidade depende do tamanho do cluster ($N \times N$), investigaremos a magnetização por sítio $m = M/N^2$.

A seguir, sempre que for solicitada a realização de uma medida deve-se fornecer sempre um valor médio acompanhado de respectiva incerteza estimada.

A.1	Obtenha algumas realizações do sistema e anote a magnetização total do sistema M . A magnetização do sistema é sempre nula? Discuta brevemente os resultados observados.	0,5pt
A.2	Realize uma medida de m do paramagneto na ausência de campo magnético, tabele os resultados individuais obtidos e valor médio e incerteza estimada.	1,0pt
A.3	Avalie como a incerteza da medida varia com o aumento do tamanho $N \times N$ do sistema estudado.	0,5pt

Parte B - Determinação da susceptibilidade magnética (5,0 pontos)

Em sistemas lineares, define-se susceptibilidade magnética de um material χ_m^0 segundo a relação

$$\vec{M} = \chi_m^0 \vec{H}. \quad (1)$$

Para materiais reais, nem sempre essa relação linear é observada. Nesses casos podemos definir uma susceptibilidade magnética diferencial $\chi_m(H)$ de um material como

$$\chi_m(H) = \lim_{\Delta H \rightarrow 0} \frac{\Delta M}{\Delta H}, \quad (2)$$

que pode ser interpretada geometricamente pelo coeficiente angular da reta tangente ao gráfico de M (ou m) versus H .

B.1	Produza gráficos da magnetização por sítio m em função do campo magnético H externo aplicado considerando temperatura $t = 2$. Tome pelo menos 10 valores de campo magnético distinto. Realize as medidas para uma rede 15×15 e $skip = 20$.	2,5pt
B.2	Sob que condições o material paramagnético considerado pode ser considerado linear?	0,5pt
B.3	Determine a susceptibilidade magnética χ_m^0 a campo nulo, isto é, $H = 0$, e a temperatura $t = 2$.	2,0pt

Estudo de ferromagnetos (13 pontos)

Para modelar um material ferromagnético, precisamos considerar uma interação entre os *spins* próximos. No nosso modelo simplificado, consideraremos interações apenas de primeiros vizinhos, isto é, assumimos que cada *spin* interage apenas com os quatro *spins* vizinhos da rede quadrada, e os respectivos cálculos são feitos pelo simulador.

Parte C - Efeito da temperatura sobre a magnetização do sistema (5,0 pontos)

C.1	Configure a condição inicial com todos os spins para cima e ajuste o parâmetro de temperatura para $t = 0,1$. Evolua o sistema no tempo e verifique que o sistema mantém sua magnetização mesmo a campo magnético H nulo. Anote o procedimento adotado e os dados coletados para a conclusão. Realize as medidas para uma rede 16×16 e $skip = 10$.	0,5pt
C.2	Evolua o sistema no tempo, agora aumentando lentamente a sua temperatura, com campo $h = 0,5$ fixo e todos os spins inicialmente para cima. O material conservará sempre a magnetização permanente observada a $t = 1,8$? Comente o resultado obtido. Realize as medidas para uma rede 16×16 e $skip = 1000$.	1,0pt
C.3	Considere um sistema paramagnético na configuração final do item anterior. Anote o valor da temperatura e meça a magnetização M e energia total E . Realize as medidas para uma rede de mesmo tamanho e skip do item anterior, sob o mesmo campo externo e temperatura.	1,5pt
C.4	Trocando o sistema anterior de paramagnético para ferromagnético, a energia é automaticamente recalculada considerando as interações entre spins vizinhos. Forneça a contribuição das parcelas de energia devido às interações, E_{in} , e devido ao campo externo E_{ext} para a energia total medida no item anterior, fornecendo suas respectivas incertezas.	2,0pt

Parte D - Estudo de histerese magnética (3,0 pontos)

Materiais magnéticos costumam apresentar o fenômeno de histerese magnética. Esse é um fenômeno que explica o motivo pelo qual a magnetização de materiais como o ferro, induzida por meio de fortes campos magnéticos H , persistir mesmo quando esses campos cessam.

Não é possível nesses casos estabelecer uma relação unívoca entre o campo magnético H e a magnetização do material M . O valor instantâneo de magnetização $M(t)$ depende, não apenas do valor instantâneo de $H(t)$, mas também dos valores $H(t')$ para $t' < t$. Um exemplo de curva de histerese obtida experimentalmente é fornecida na figura 3.

O ponto 1 da curva de histerese é relacionado ao estado em que a vasta maioria de spins estão orientados para cima, enquanto o estado 2, corresponde a situação oposta, na qual a grande maioria dos spins estão orientados para baixo.

O comportamento da magnetização $M_{12}(H)$ no caminho de $1 \rightarrow 2$, como se pode observar na figura, não é idêntico ao comportamento da magnetização $M_{21}(H)$ do caminho de $2 \rightarrow 1$. Outros pares de valores (H, M) podem ser obtidos caso dos submetamos o ferromagneto a diferentes campos elétricos variáveis com o tempo $H(t)$.

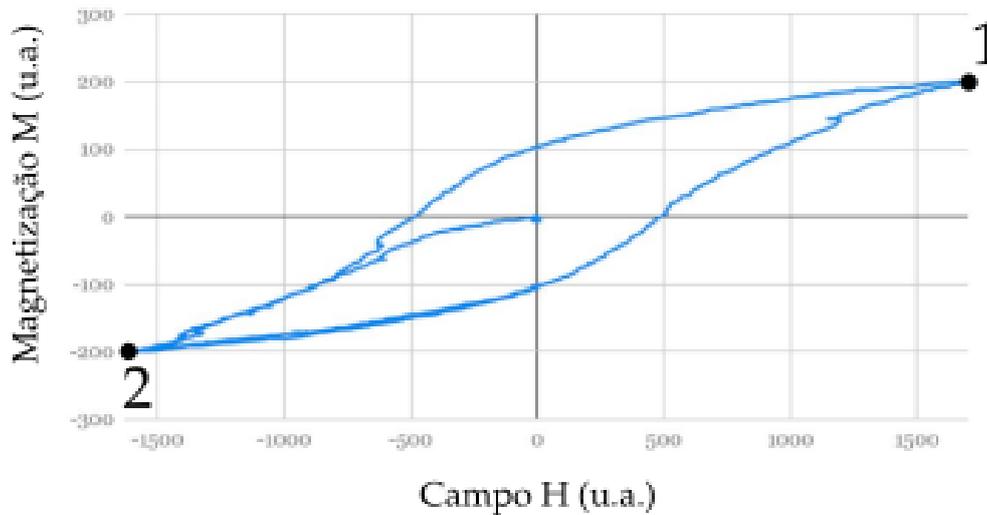


Figura 3: Exemplo de curva de histerese $M(H)$ obtida experimentalmente em laboratório. Os eixos estão são fornecidos em unidades arbitrárias. Os pontos 1 e 2 representam regiões de saturação com maioria dos spins voltados para cima ou para baixo, respectivamente.

D.1 Faça um gráfico m versus H , na qual a curva de histerese $1 \rightarrow 2 \rightarrow 1$ esteja representada. Considere a temperatura $t = 0.5$ e varie o campo magnético conforme julgue razoável. Realize as medidas para uma rede 16×16 e $skip = 1500$. Não se preocupe se sua curva apresentar um perfil retangular, não tão similar à do exemplo. 3,0pt

Parte E - Transições de fase (5,0 pontos)

Nesta parte do problema, iremos investigar o comportamento de transição de fase nesse sistema. Teoricamente, o modelo de Ising que estamos estudando apresenta uma transição de fase de *segunda ordem*, que consiste em uma variação brusca de parâmetros fundamentais do sistema, incluindo magnetização, susceptibilidade e capacidade térmica. No entanto, essa transição perfeitamente brusca é presente apenas em sistemas infinitos e nesse caso, devido ao nosso sistema finito, teremos uma transição de fase mais contínua.

Similarmente a transições de fases mais comuns, como da água para o gelo, essas transições são descritas por uma temperatura crítica t_C , que delimita quando essa transição ocorre. Note que para o caso da água para o gelo em condições normais de pressão $t_C = 0^\circ\text{C}$. Adicionalmente, já pode se esperar uma transição de fase apenas se observando o comportamento do sistema para t pequeno e t grande, já que se percebe que para t pequeno todos os spins estão aproximadamente na mesma direção, enquanto para t grande a direção spins é distribuída razoavelmente uniformemente.

Com isso em mente, vamos encontrar a temperatura crítica para o modelo de Ising. Faremos isso analisando o comportamento da magnetização em função da temperatura t . Para isso, analisaremos o comportamento, à campo externo nulo $H = 0$, e variaremos a temperatura t , medindo a magnetização.

A transição de fase nesse modelo é caracterizada pelo fato de que, para temperaturas menores que t_C , temos *ordem*, onde temos uma grande maioria dos spins na mesma direção, e para temperaturas maiores que t_C temos *desordem*, onde os spins passam a assumir direções mais uniformemente distribuídas. Isso pode ser visto observando ou a figura disposta pela simulação, ou o valor do módulo da magnetização por sítio $|m(t)|$.

Para as simulações nessa questão, utilize $N = 20$ e $skip = 5000$.

E.1 Dada a intuição qualitativa acima de ordem e desordem, obtenha t_{\min} e t_{\max} , tal que $t_{\max} - t_{\min} \leq 1$ e $t_{\min} \leq t_C \leq t_{\max}$. 1,5pt

Dada a região obtida no item acima, vamos analisar o comportamento da magnetização por sítio mais precisamente.

E.2 Construa um gráfico do módulo da magnetização por sítio $|m(t)|$ em função da temperatura na região de t desde t_{\min} até t_{\max} . 2,5pt

Em um sistema infinito, a temperatura crítica t_C pode ser encontrada como sendo o menor valor de temperatura t onde $|m(t)| = 0$. Nesse caso, como pode ser visto no seu gráfico da parte acima, o módulo da magnetização por sítio nunca atinge o valor 0. No entanto, podemos definir a temperatura crítica no sistema finito como sendo a temperatura t onde o gráfico de $|m(t)|$ apresenta uma mudança de concavidade.

E.3 Dada a discussão acima, estime o valor da temperatura crítica t_C . 1.0pt