

Estudo de paramagnetos (7 pontos)

Nota aos corretores: Para cada item que pede uma medida experimental, caso o aluno colete menos de 10 pontos o item perde 25% do valor original. Além disso, para cada medida experimental que o erro é necessário mas não estimado (em todas os itens exceto o A1 e B da parte 2), aquele item perde 25% do valor original. Essas penalidades podem se somar, tal que a questão passe a valer 50% do valor original caso o aluno não faça ambas.

Parte A - Spins livres (2,0 pontos)

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

Solução 1: Tomando medidas em um cluster 10×10 . Obtemos as 10 medidas a seguir:

n	M_{10}
1	-22
2	14
3	18
4	-6
5	-12
6	-6
7	-8
8	10
9	-6
10	-12

Por se tratar de um experimento estocástico, é esperado que as medidas observadas não sejam necessariamente iguais a zero, mas que hajam valores positivos e negativos, conforme se verifica nos resultados listados acima.

Marking Scheme: +0.25 pontos por coletar os dados, +0.25 pontos por uma discussão correta.

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

Solução 1:

Tomando medidas em um cluster 10×10 . A média de M_{10} é de -3,0 e o desvio padrão é de 3,8. Adotando o desvio padrão da média como estimativa de incerteza da medida temos que

$$M_{10} = -3.0 \pm 3.8. \quad (1)$$

A magnetização por sítio, por sua vez é dada por

$$m = -0,030 \pm 0,038. \quad (2)$$

Verifica-se, portanto, que o valor nulo esperado está dentro do intervalo de confiança estimado.

Marking Scheme: + 1 Pontos por obter m e o erro apropriado.

A.3 Avalie como a incerteza da medida varia com o aumento do tamanho $N \times N$ do sistema estudado. 0,5pt

Solução 1:

A medida que o tamanho do sistema aumenta, ou mais realizações do mesmo são realizadas, obtemos melhores resultados de medidas. Vamos repetir o processo para células 64×64 , cujos resultados são

$$M_{64} = [-36, -152, 14, -38, 14, -38, -102, 80, 46, 60] \quad (3)$$

$$M_{64} = -15 \pm 22. \quad (4)$$

$$m_{64} = -0,004 \pm 0,005. \quad (5)$$

Marking Scheme: +0.25 Pontos caso foi obtido dados para um sistema maior que o prévio (é preciso que a variação de N seja no mínimo 5), +0.25 Pontos caso foi apontado que o erro diminui.

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

B.1 Produza gráficos da magnetização por sítio m em função do campo magnético H 2,5pt
externo aplicado considerando temperatura $t = 2$. Tome pelo menos 10 valores de campo magnético distinto. Realize as medidas para uma rede 15×15 e $skip = 20$.

Considerando uma rede $N = 15 \times 15$, variamos valores de magnetização para 16 valores de H , e em cada valor de H medimos 10 vezes o valor da magnetização do sistema. Para isso inicializamos o sistema com a temperatura e campo apropriado, e rodamos o sistema com $skip = 20$.

Obtemos a seguinte tabela de valores:

H	m	σ_m
-5	-0.97	0.04
-4	-0.95	0.02
-3	-0.92	0.01
-2	-0.74	0.04
-1	-0.48	0.06
0	-0.01	0.08
1	0.45	0.05
2	0.76	0.04
3	0.91	0.02
4	0.97	0.01
5	0.99	0.01

Usando esses valores de magnetização obtemos o gráfico abaixo.

Marking Scheme: +0.75 Pontos por coletar os dados com erros, +0.75 Pontos pelo gráfico, +0.75 Pontos por variar H até os limites superiores e inferiores de $m(H)$ perto de 1, + 0.25 Pontos por variar H negativo.

B.2 Sob que condições o material paramagnético considerado pode ser considerado linear? 0,5pt

Por inspeção, o gráfico é aproximadamente linear para $|H| < 1$.

Marking Scheme: +0.5 Pontos caso a região no gráfico seja aproximadamente linear.

B.3 Determine a susceptibilidade magnética χ a campo nulo, isto é, $H = 0$, e a temperatura $t = 2$. 2,0pt

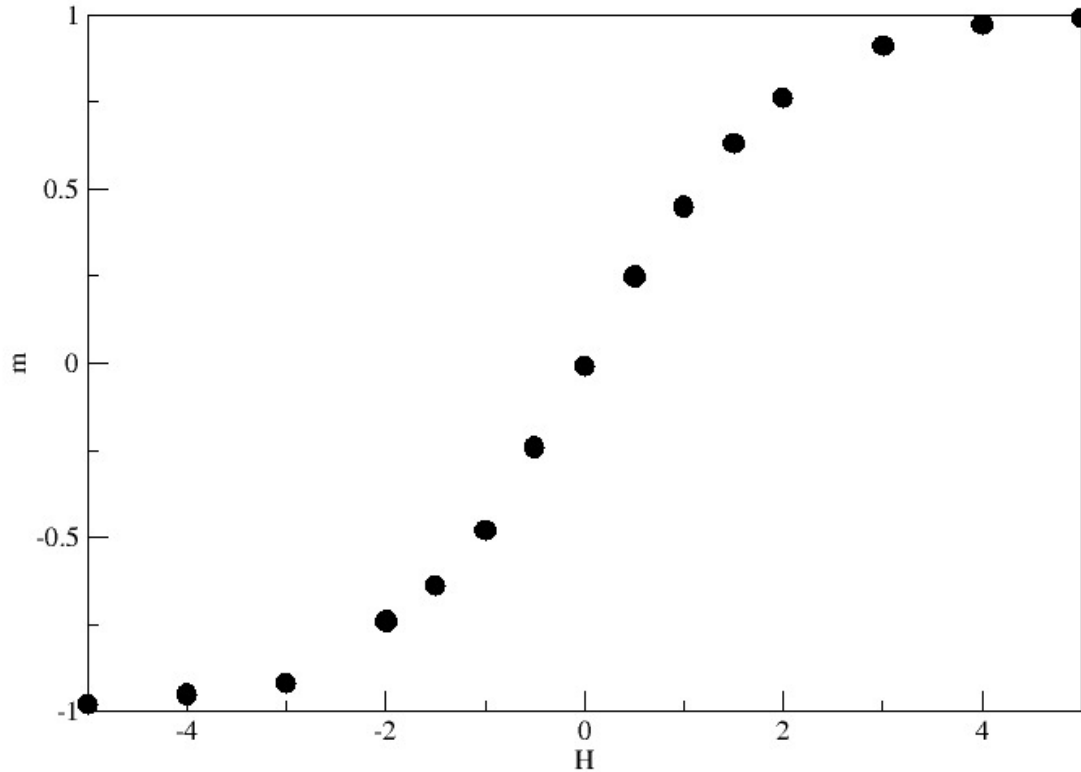


Figura 1: Magnetização por sítio m versus campo magnético H . Valores coletados considerando uma rede 16×16 e 10 medidas por ponto.

Olhando a região linear esboçada anteriormente, pegamos mais pontos nessa região e obtemos uma inclinação 0.470 ± 0.004 . Logo, a susceptibilidade é:

$$\chi_m(0) = (0.470 \pm 0.009) \cdot N^2 \tag{6}$$

Marking Scheme: +0.25 Pontos caso o aluno descreva o procedimento para pegar a susceptibilidade $\chi(H = 0)$, +0.5 Pontos caso o aluno lembrou de multiplicar o coeficiente angular por N^2 . Valores entre $\chi_m(0) = 0.4 - 0.6N^2$ ganham 1 ponto, fora dessa região mas dentro de $0.3 - 0.7N^2$ ganham 0.5 pontos, fora dessa região mas dentro de $0.2 - 0.8N^2$ ganham 0.25, fora disso 0 pontos. +0.25 Pontos caso foi estimado o erro da susceptibilidade.

Estudo de ferromagnetos (13 pontos)

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

- | | |
|---|--------------|
| <p>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 $skip = 10$.</p> | <p>0,5pt</p> |
|---|--------------|

A evolução do sistema no tempo é obtida cada vez que é dado "run" para um certo parâmetro "skip". A ideia

é que o estudante perceba que os valores de magnetização mostrados pelo simulador praticamente não mudam conforme vai dando "run", nas condições de $t = 0, 1$ e campo nulo. Um exemplo de dados obtidos para $N = 16$ e $skip = 10$, em que n é a quantidade de vezes que o comando "run" foi dado, são:

n	m
0	256
1	256
2	256
3	256
4	256
5	256
6	256
7	256
8	254
9	256
10	256

Marking Scheme: +0.25 Pontos por adotar o procedimento correto, isto é, ajustar os parâmetros t e h no simulador e verificar que os valores de magnetização praticamente não mudam conforme se aperta "run", +0.25 Pontos pela apresentação dos valores de magnetização em uma tabela, junto com um parâmetro que represente a evolução temporal do sistema (no caso, sugere-se o n definido na solução).

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

Um exemplo de dados que podem ser obtidos para $N = 16$ e $skip = 1000$:

H	m	σ_m
1.8	0.99	0.01
1.9	0.98	0.01
2.0	0.97	0.02
2.1	0.96	0.01
2.2	0.93	0.03
2.3	0.92	0.03
2.4	0.91	0.02
2.5	0.88	0.03
2.6	0.87	0.03
2.7	0.82	0.05
2.8	0.78	0.05
2.9	0.77	0.07
3.0	0.71	0.05

É importante que o estudante saliente a perda da magnetização da rede conforme a temperatura é elevada, chegando a perder cerca de 30% da magnetização inicial nesse intervalo de temperatura.

Marking Scheme: +0.75 Pontos por coletar os dados (pelo menos 10 valores de t diferentes) com erros, +0.25 Pontos pelo comentário do resultado, destacando a notável perda de magnetização com o aumento da tempe-

ratura.

- | | | |
|------------|---|-------|
| 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 |
|------------|---|-------|

No caso, a temperatura final foi $t = 3$. Trocamos o sistema para o paramagnético e realizando mais 10 medidas de M e E , chega-se nos seguintes valores para $N = 16$ e $skip = 1000$

$$M = (200 \pm 10)$$

$$E = (-100 \pm 5)$$

Marking Scheme: +0.1 Pontos por anotar o valor de temperatura utilizado, +0.7 Pontos por calcular a magnetização com a devida incerteza, +0.7 Pontos por calcular a energia com a devida incerteza.

- | | | |
|------------|--|-------|
| 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 |
|------------|--|-------|

Usando

$$E_{ext} = (-100 \pm 5)$$

Com isso, podemos encontrar E_{in} fazendo $E_{in} = E - E_{ext}$, e medindo a incerteza da energia original $E = -440 \pm 40$, além de $\sigma_{E_{in}} \sim \sigma_E + \sigma_{E_{ext}}$, chegando em:

$$E_{in} = (-340 \pm 45)$$

Marking Scheme: +0.5 Pontos por escrever a fórmula da E_{ext} em função dos parâmetros obtidos do simulador, +0.5 Pontos por obter o valor de E_{ext} com a respectiva incerteza, + 0.5 Pontos por escrever a fórmula de E_{in} a partir de E e E_{ext} , +0.5 Pontos por obter o valor de E_{ext} com a respectiva incerteza.

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

- | | | |
|------------|--|-------|
| 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 |
|------------|--|-------|

Vamos começar a essa temperatura e variar H , obtendo o gráfico abaixo:

Marking Scheme: +1.5 Ponto caso o aluno coletou dados de maneira correta (variando H desde $m = 1$ ate $m = -1$ e ate $m = 1$ de volta), +1 Ponto caso a curva de histerese tem o formato correto, + 0.5 Pontos caso tenha pontos na região onde a magnetização varia subitamente de $m = 1$ para $m = -1$ e vice versa.

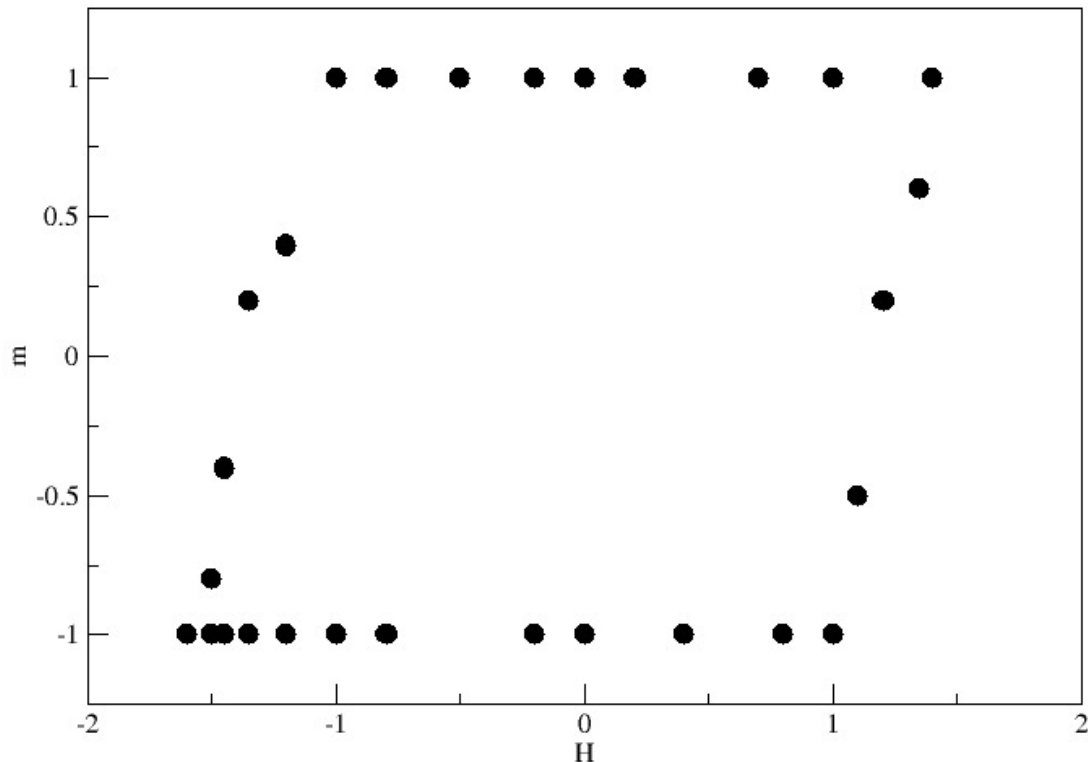


Figura 2: Curva de histerese para $N = 16$, $skip = 1500$

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

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

Basta rodar a simulação para $t = 2$ e $t = 3$. Para $t = 2$ temos quase ordem perfeitamente, no entanto para $t = 3$ temos desordem, já que os spins estão bem distribuídos. Logo, temos $t_{\min} = 2, t_{\max} = 3$.

Caso queira, podemos ser ainda mais precisos na nossa delimitação, notando que para $t = 2.7$ já vemos a situação de desordem, então podemos deixar $t_{\max} = 2.7$.

Marking Scheme: +1.5 Ponto caso os valores de t_{\min}, t_{\max} sejam espaçados por 1 e incluem a região de temperatura desde 2.2 - 2.6.

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

Obtemos a tabela e gráfico abaixo. Vale notar que a região onde a curva muda de concavidade é perto de 2.35-2.40.

t	m	σ_m
2.00	0.9105	0.049
2.05	0.8900	0.049
2.1	0.8575	0.057
2.5	0.8550	0.045
2.2	0.775	0.087
2.25	0.735	0.147
2.3	0.5955	0.194
2.35	0.4630	0.320
2.4	0.3925	0.185
2.45	0.2770	0.234
2.5	0.1945	0.145
3.0	0.1470	0.092
4.0	0.0665	0.049

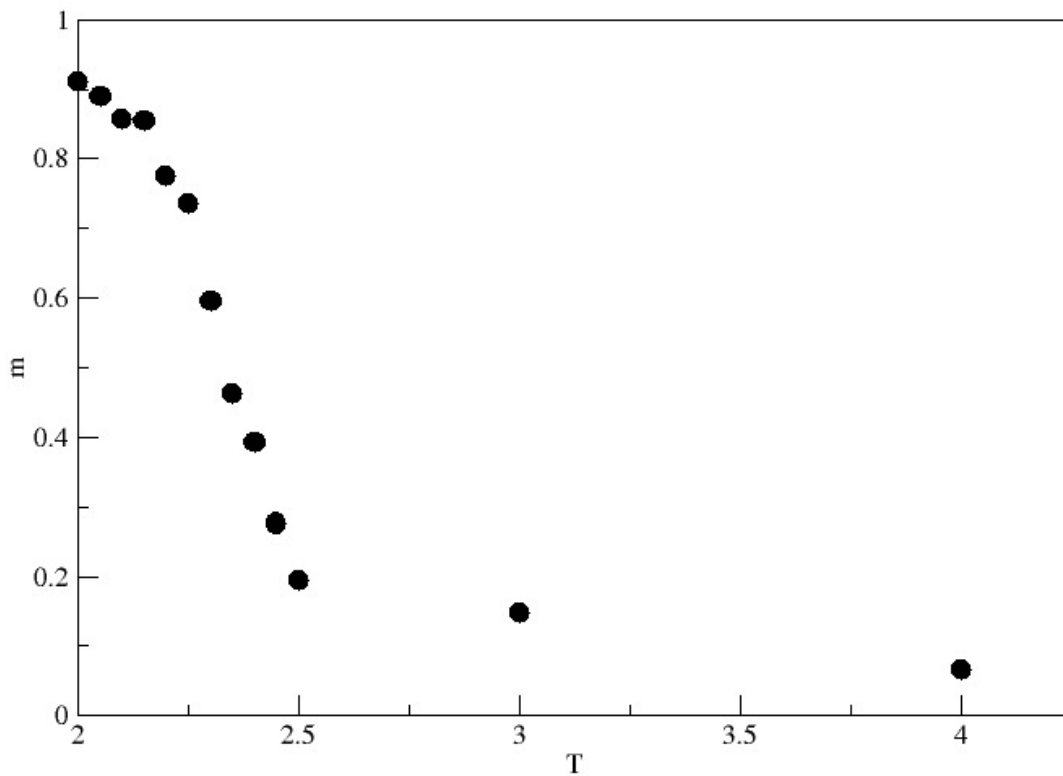


Figura 3: Curva de $|m(t)|$ para $N = 20$, $skip = 5000$

Marking Scheme: + 1 Ponto por coletar os dados na região estipulada, +1.5 Ponto pelo formato correto.

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

1pt

Por inspeção, a curva muda de concavidade perto de $t = 2.35$.

Marking Scheme: +0.5 pontos se consistente com o gráfico do aluno, +0.5 pontos se a temperatura crítica obtida esta entre 2.2 e 2.6