

Simulação por Monte Carlo do modelo de campo de fase cristalinoJ. A. P. Ramos*Grupo de Estudo da Matéria Condensada, Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia - UESB, Brazil*

Enzo Granato

Laboratório Associado de Sensores e Materiais, Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE, Brazil

As simulações de sistemas físicos em computadores vem se tornando essencial para o estudo da Física e da Ciência dos Materiais, pois os modelos teóricos dos sistemas presentes na natureza, cada vez mais realistas, são também cada vez mais complexos. Nesse contexto, a simulação pelo método Monte Carlo se apresenta como uma importante ferramenta, dentre os vários métodos estocásticos existentes, pois se trata de um método de "fácil" implementação e que também possibilita o cálculo de diversas grandezas físicas de interesse em um sistema como, por exemplo, o calor específico, a magnetização, a energia total etc. No presente trabalho a simulação numérica pelo método de Monte Carlo é utilizada para estudar transições de fase no modelo de campo de fase cristalino bidimensional. Este modelo foi introduzido recentemente[1] para o estudo de propriedades de sistemas cristalinos através de um campo de fase (densidade) incorporando tanto deformações elásticas como plásticas. O método de Monte Carlo de tempera paralela[2] é utilizado para reduzir o tempo de relaxação de equilíbrio e permitir o estudo da transição de derretimento (melting transition) em presença de flutuações térmicas. Cálculos do fator estrutura em função da temperatura e diagramas de fase são utilizados para determinar o comportamento crítico.

[1] K. R. Elder, M. Katakowski, M. Haataja, and M. Grant, Phys. Rev. Lett. 88, 245701 (2002).

[2] K. Hukushima and K. Nemoto, J. Phys. Soc. Jpn. 65, 1604 (1996).